

Глава 18

Введение в теорию Ферми-жидкости. Часть 1

Оглавление

18 Введение в теорию Ферми-жидкости. Часть 1	1
18.1 Введение. Количественная характеристика меж- электронного взаимодействия.	4
18.1.1 Фазовые переходы, теорема Кона-Латтинджера	9
18.1.2 Методология подхода к многочастичной задаче	12
18.1.3 Понятие квазичастиц	13
18.1.4 Концепция Ферми-жидкости. Нейтраль- ная система	17
18.1.5 Квазичастицы. Элементарные возбужде- ния в Ферми-газе	18
18.1.6 Взаимодействующая ферми-жидкость. . .	23
18.1.7 Время жизни возбуждений	25
18.2 Энергия квазичастиц	26
18.3 Взаимодействие между квазичастицами. Теория Ландау	29
18.3.1 Разложение свободной энергии	29
18.3.2 Локальная энергия квазичастиц	32
18.3.3 Равновесное распределение квазичастиц при конечной температуре	35
18.4 Часть 2	37
18.5 Равновесные свойства	38

18.5.1	Теплоемкость	38
18.5.2	Термодинамическая плотность состояний	39
18.5.3	Сжимаемость и скорость звука	39
18.5.4	Распределение локального равновесия . .	45
18.5.5	Поток квазичастиц и их эффективная масса	46
18.5.6	Спиновая восприимчивость	55
18.5.7	Энергия основного состояния. Численные результаты.	57
18.5.8	Энергия основного состояния для 2D систем	59

18.1 Введение. Количественная характеристика межэлектронного взаимодействия.

До сих пор мы негласно рассматривали электроны как невзаимодействующие частицы - т.е. газ. Казалось бы это - довольно неестественное и необоснованное предположение, и непонятно почему оно хорошо работает в нормальных 3D металлах и системах пониженной размерности при большой плотности электронов. Действительно, ведь электроны имеют одинаковый заряд и между ними действуют сильнейшие силы кулоновского отталкивания. Однако, эти классические силы отталкивания компенсируются противоположными силами со стороны ионов кристаллической решетки. Ведь в целом система электронов и ионов - электронейтральна и электроны из куска металла никуда не выпрыгивают. Мы предполагали, что ионные остовы и электроны в среднем образуют почти электронейтральную среду, в которой движется пробный электрон.

Насколько справедливо подобное приближение? При доста-

18.1. Введение. Количественная характеристика межэлектронного взаимодействия. 5

точно низких температурах параметром, характеризующим кинетическое поведение электронов, является фермиевская энергия ε_F . Чтобы можно было пренебречь взаимодействием между электронами, нужно, чтобы кинетическая энергия электронов существенно превышала энергию взаимодействия на характерном расстоянии между частицами. Легко догадаться, что при кулоновском взаимодействии между частицами это случится в области больших концентраций электронов. Для двумерной системы, например, условие слабого взаимодействия выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} n &= (\pi k_F^2) \frac{2}{(2\pi)^2} = k_F^2 / 2\pi; & \varepsilon_F &= \hbar^2 k_F^2 / 2m = \pi n \hbar^2 / m; \\ & & \varepsilon_F &\gg E_{ee} = e^2 n^{1/2} / \kappa \end{aligned} \quad (18.1)$$

Безразмерное отношение E_{ee}/ε_F обозначается $r_s \propto 1/\sqrt{n}$ и численно характеризует силу межэлектронного взаимодействия. Заметим, что r_s равен отношению радиуса Вигнера-Зейтца $[(\pi n)^{-1/2}$ в двумерном случае] к боровскому радиусу $a_B = \kappa\hbar/(2\pi m e^2)$. Сразу нужно подчеркнуть, что присутствующая в (18.1) эффективная масса есть просто зонная масса $m = m_b$, никак не затронутая взаимодействием (как обычно, эффекты взаимодействия описываются в терминах затравочных “голых” параметров, не одетых взаимодействием).

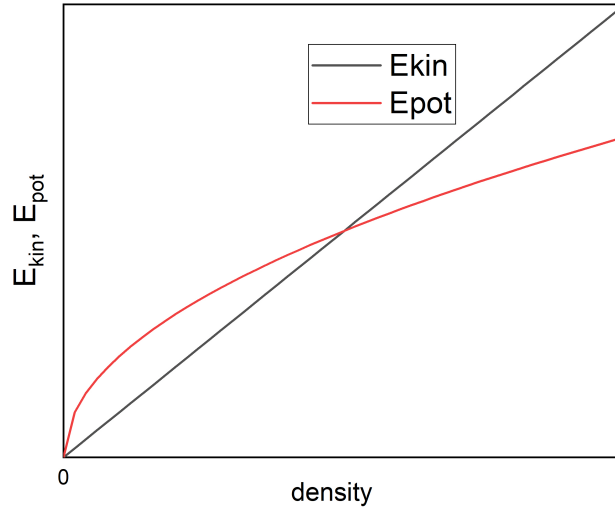


Рис. 18.1: Зависимость потенциальной и кинетической энергии электронов в двумерной системе от концентрации

Рис. 18.1 иллюстрирует изменение кинетической и потенциальной энергии в двумерной системе с концентрацией носителей. При увеличении концентрации кинетическая энергия растет линейно, т.е. быстрее, чем потенциальная энергия взаимодействия. Т. о., пренебrecь взаимодействием, можно при высокой плотности $r_s \ll 1$, $n \gg 10^{12}\text{cm}^{-2}$. Однако, такое

18.1. Введение. Количественная характеристика межэлектронного взаимодействия.7

условие реализовать не просто! Например, в двумерной системе электронов в Si практически невозможно сделать r_s меньше чем 1.8: при такой высокой концентрации электронов $n_s = 2 \times 10^{12} \text{см}^{-2}$ в удерживающей электроны треугольной потенциальной яме открывается второй уровень размерного квантования и система перестает быть двумерной.

Другой фактор, ограничивающий концентрацию электронов в 2D системе с затвором - это превышение электрическим полем затвора пробивного значения в затворном диэлектрике. Например, в кремниевых МДП структурах пробивное напряжение слоя затворного диэлектрика SiO_2 составляет примерно 1кВ/мкм или 200В на реальной толщине слоя окисла 0.2мкм. Конечно, если специально озадачиться реализацией двумерной системы с $r_s < 1$, то нужно взять другой полупроводник с малой эффективной массой носителей, например электроны в InSb (зонная масса $m^* = 0.013m_e$). В этом случае кинетическая энергия $\hbar k_F^2 / (2m^*)$ будет в 15 раз больше чем в Si при той же концентрации.

В противоположном пределе $r_s \gg 1$ современных двумерных электронных системах в полупроводниковых структурах сравнительно легко достигаются значения $r_s = 10$ (в Si-MOS), а в самых совершенных структурах с дырочными слоями в GaAs/AlGaAs - $r_s > 50$! Такая же ситуация и в нормальных 3D металлах, где r_s попадает в интервал от двух до десяти, точнее от 1.8 до 5.6. Другими словами, используемые обычно модели электронного газа в металлах не имеют, в сущности, области применения, а взаимодействие между электронами должно играть решающую роль в кинетических эффектах. Почему же до сих пор мы этого не замечали? Возможно ли радикальное проявление взаимодействия в эксперименте?

Теории пока удалось успешно освоить только две области на оси r_s – область высоких электронных плотностей $r_s \ll 1$ и область больших $r_s \gg 1$. Первому случаю отвечает парамагнитная Ферми-жидкость. Разложением по малому параметру r_s можно получать ферми-жидкостные поправки к параметрам свободных невзаимодействующих электронов. Во втором случае взаимодействие столь велико, что однородное пространственное распределение заряда и спина становится неустойчивым. В зависимости от типа взаимодействия и его численных параметров, неустойчивость возникает в зарядовом или спиновом канале взаимодействия.

В первом случае теряется пространственная однородность и электроны образуют периодическую структуру, например, вигнеровский кристалл или волна зарядовой плотности. Во втором случае возникает спонтанное намагничивание (поляризация электронных спинов), которое происходит по сценарию Стонера или Блоха. Возможно также возникновение пространственной модуляции спиновой поляризации - волна спиновой плотности. Эти красивые эффекты будут рассмотрены в последующих лекциях. В частности, интересен вопрос о том, каково спиновое устройство электронного (вигнеровского) кристалла. Однако, в этой области экстремально сильных взаимодействий наиболее надежные ответы получаются из численных расчетов, которые мы также опишем позже.

Эффекты взаимодействия и возникающие состояния электронной жидкости различны в системах различной размерности. Для начала (а это будет последующий десяток лекций) будут рассмотрены эффекты взаимодействия в 3D и 2D системах.

18.1.1 Фазовые переходы, теорема Кона-Латтинджера

При приближении температуры к нулю всякая система стремится к основному состоянию. В случае, если основное состояние не вырождено, к нулю стремится и энтропия системы, т.е. система упорядочивается. Этот процесс может идти различными путями. Например, в системе без взаимодействия между частицами системы, соединенной с внешним резервуаром, каждая их частиц занимает наинизший возможный уровень. Рассмотрим, для иллюстрации, двухуровневую систему частиц с разностью энергий для иллюстрации, мы имеем дело с двухуровневой системой частиц с разностью энергий между уровнями Δ . (Двухуровневые молекулы или “туннельные” состояния для локализованных электронов). Будем отсчитывать энергию от нижнего уровня. Тогда энергия системы равна

$$E = n \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/kT} + 1} = \frac{n\Delta}{e^{(\Delta - \varepsilon_F)/kT}}$$

Число электронов на верхнем уровне должно совпадать с числом пустых мест на нижнем уровне. Отсюда следует $\varepsilon_F = \Delta/2$. Теперь можно найти теплоемкость $= dE/dT$

$$C = 2nk \frac{(\Delta/2kT)^2 \exp(\Delta/2kT)}{[\exp(\Delta/2kT) + 1]^2}$$

В теплоемкости образуется плавный пик - аномалия Шоттки, свидетельствующий о возникновении упорядочения в системе.

Во взаимодействующей системе упорядочение может происходить совершенно иначе, с помощью фазового перехода. Детектировать переход можно, как и в приведенном примере, по особенностям теплоемкости или других производных свободной энергии. Обычные (“классические” или термодина-

мические) фазовые переходы обусловлены тепловыми флуктуациями. Квантовые фазовые переходы не имеют отношения к тепловым флуктуациям и происходят при $T = 0$. Движущей силой здесь является конкуренция между энергией взаимодействия и квантовыми флуктуациями.

В 1956 году Коном и Латтинджером была сформулирована следующая теорема [4]:

Система слабо взаимодействующих фермионов независимо от вида взаимодействия не может оставаться в состоянии нормальной жидкости вплоть до абсолютного нуля температур. Более интересной для студентов Центра является другая формулировка этой же теоремы: “многочастичная система фермионов слабо взаимодействующих короткодействующими силами станет сверхтекучей, даже если взаимодействие является отталкивающим”.

Для систем пониженной размерности (1D и 2D) удалось получить ряд точных результатов, интересных как иллюстрация к различию между системой упорядоченной и системой, претерпевающей фазовый переход. Утверждается, в частности, что в одномерной системе с конечным радиусом взаимодействия между частицами дальний порядок существовать не может. (Об этом подробно написано напр., в книгах и обзорах Покровского, Сирина и др. [5, 6]). Последнее не означает, что в такой системе по мере понижения температуры невозможно качественное изменение физических свойств, т.е. фазовый переход. В ней могут возникнуть такие состояния как жидкость Латтинжера, маргинальная Ферми-жидкость или, наконец, произойти пространственное расслоение на различные фазы.

Похожая ситуация и для 2D систем: например, тогда как

идеальный вигнеровский кристалл (WC) не может существовать в неограниченном 2D пространстве, на коротких масштабах, возможно образование доменов электронного кристалла. Это становится понятным если в рассмотрение еще добавить беспорядок, который пиннингует электронный кристалл в реальной 2D системе и создает щель в спектре его фононов при малых волновых числах (т.е. повышает жесткость WC). Тогда вокруг каждой примеси возникает домен кристалла конечного размера.

Кроме рассмотренных выше термодинамических фазовых переходов (детектируемых по особенностям теплоемкости или других производных полной энергии) могут быть реализованы переходы между различными фазами при нулевой температуре. Такие фазовые переходы, в отличие от термодинамических, не связаны с тепловыми флуктуациями. Единственная возможность изменить состояние системы при $T = 0$ это квантовые флуктуации.

Для осуществления квантового фазового перехода необходимо непрерывно менять свойства системы с помощью изменения какого-либо параметра (r_s , например). Таким образом, в области r_s , превышающих значения, типичные для нормальных металлов, но меньших, чем необходимые для вигнеровской кристаллизации, мы можем ожидать появления как термодинамических, так и квантовых фазовых переходов. Ситуация еще более осложняется в присутствии беспорядка. Наличие потенциального рельефа, приводящее в области больших электронных плотностей только к рассеянию, при малых плотностях способно локализовать электроны или вызвать расщепление на различные фазы и, тем самым, ввести новые границы на фазовой диаграмме низкоразмерной системы.

В этой лекции, для примера, излагаются лишь результаты нескольких различных подходов к проблеме описания взаимодействующих систем. Сам аппарат, в наиболее простых версиях и более подробное описание различных приближений будут рассмотрены позже, или дана отсылка на более теоретические книги. После этого будут рассматриваться экспериментальные результаты измерений эффектов межэлектронного взаимодействия.

18.1.2 Методология подхода к многочастичной задаче

Рассмотрим систему, составленную из большого числа частиц. Вопрос, который мы должны решить, состоит в предсказании поведения этой системы, зная, как ведут себя отдельные частицы. Естественно, что система невзаимодействующих частиц особых трудностей не представляет. В ней каждая из частиц ведет себя так, будто остальные частицы влияют на ее движение исключительно через акты рассеяния. Фактически, мы имеем дело в этом случае не с одной задачей многих тел, а с многими задачами одного тела в пространстве, хаотически заполненном рассеивающими центрами.

Проблемы возникают после включения взаимодействия между телами. Движение частиц перестает быть независимым. (Оговорим специально, что в системе невзаимодействующих фермионов движение отдельных частиц также не было независимым, поскольку благодаря неразличимости частиц волновая функция системы была антисимметризована по всем частицам и в системе имелись кинематические корреляции. Тем не менее, для исследования свойств системы невзаимодействующих фермионов было достаточно знания одночастичной задачи.)

В многочастичной задаче необходимо учитывать влияние каждой из частиц на поведение всех остальных. Задача многих тел состоит в изучении влияния взаимодействия между частицами на поведение составленной из них системы. Один из наиболее удачных методов решения многочастичных задач состоит в каноническом преобразовании переменных таким образом, чтобы член, описывающий взаимодействие упростился, стал малым или исчез бы вовсе. Взаимодействие между частицами системы является “слабым”, если оно приводит к небольшому возмущению решения для невзаимодействующей системы и его можно учесть в конечном порядке обычной теории возмущений. В противном случае, взаимодействие будет “сильным”.

Однако, даже с классификацией сильного и слабого взаимодействия не все так просто. Даже слабое притяжение между электронами, приводящее к возникновению сверхпроводимости следует по предложенной схеме отнести к разряду “сильных” взаимодействий. К сожалению, сильным является и кулоновское взаимодействие между электронами. Попытка вычислить по теории возмущений энергию основного состояния системы электронов, взаимодействующих по Кулону, дает следующий результат:

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \infty + \infty + \dots$$

Бесконечности возникают во всех порядках теории возмущений, выше первого!

18.1.3 Понятие квазичастиц

Для большинства систем многих тел, тем не менее, удастся перейти от системы сильно взаимодействующих исходных ча-

стиц к совокупности почти независимых возбуждений над основным состоянием. Эти возбуждения очень похожи на реальные частицы и называются квазичастицами. Таким образом, основная идея данного подхода состоит в том, что при низких температурах взаимодействующая система может быть представлена в виде газа не- или слабо-взаимодействующих возбуждений = квазичастиц.

Напомним, для ясности, что если речь идет об электронах в металле, то уже исходные электроны не являются истинными частицами – в них вложено взаимодействие с решеткой. У них не настоящий импульс и сложная анизотропная зависимость (описываемая при постоянной энергии ферми-поверхностью). Сейчас мы обсуждаем квазичастицы “следующего поколения”, которые возникают из исходных зонных квазичастиц в результате взаимодействия между самими квазичастицами.

Рассмотрим какое-либо состояние идеальной системы невзаимодействующих фермионов. Будем медленно “адиабатически” включать взаимодействие между частицами. В итоге, после включения, мы получим одно из собственных состояний системы с взаимодействием. Не ясно, все ли собственные состояния системы с взаимодействием могут быть получены таким образом. Например, в сверхпроводниках с помощью указанной процедуры не может быть получено основное состояние. Будем говорить, что система взаимодействующих фермионов является “нормальной”, если с помощью указанной процедуры могут быть получены все ее состояния из собственных состояний системы невзаимодействующих частиц.

Теперь добавим к идеальной системе частицу с импульсом \mathbf{p} . После добавления новой частицы будем включать взаимодействие. Получаем возбужденное состояние системы взаимо-

действующих частиц с импульсом \mathbf{p} . (Импульс, естественно, сохраняется при включении взаимодействия.) Когда взаимодействие включено полностью, частица будет двигаться вместе с тем возмущением, которое она внесла в окружающие фермионы. “Одетую” частицу мы и будем называть квазичастицей в неидеальной системе. Наша ферми система теперь может быть рассмотрена как ферми-вакуум, в который попадают все частицы, соответствующие основному состоянию, плюс одна квазичастица на фоне вакуума.

С помощью той же самой процедуры можно получить и пустое место с импульсом \mathbf{p} в системе взаимодействующих частиц. Основная проблема заключается в том, что так ввести квазичастицы можно только вблизи ферми-уровня: взаимодействие должно быть включено медленно, а у частиц конечное время жизни (расходящееся при $\varepsilon = \varepsilon_F$). Частицы в облаке находятся в виртуальных состояниях. При столкновениях между рассматриваемой частицей и частицами ферми-вакуума энергия, как правило, не сохраняется. Однако, несмотря на виртуальность и, следовательно, конечное время жизни каждой из частиц облака, само оно представляет собой абсолютно реальный объект.

Изложенные выше соображения помогают понять логику построения теории ферми жидкости Ландау. Действительно, представим себе, что преобразование, приводящее к введению небольшого количества квазичастиц на фоне ферми-вакуума нам не известно, но, в принципе, возможно. Возбуждения взаимодействуют только между собой (взаимодействие с вакуумом уже учтено самим введением квазичастиц), что и приводит к “жидкостному” поведению. Мы можем рассматривать систему квазичастиц феноменологически, вводя некоторые неизвест-

ные параметры, которые могут быть найдены из эксперимента.

Строго говоря, из-за конечности времени жизни, квазичастицы определены только вблизи ферми-поверхности, а их импульс близок к p_F . Тем не менее, поскольку свойства ферми-вакуума никак не будут в дальнейшем использованы, мы можем себе представить, что и вакуум составлен из тех же квазичастиц. Другими словами, мы, следуя Ландау, можем положить, что

полное число квазичастиц в системе равно числу исходных частиц.

В основном состоянии заполнены все квантовые состояния с импульсами, меньше фермиевского, который в случае трех измерений связан с числом частиц в системе обычным соотношением

$$k_F = (3\pi^2 N/\Omega)^{1/3},$$

где N/Ω - плотность частиц.

Ландау предложил, что в этой ситуации основное состояние ферми-газа будет адиабатически трансформироваться в основное состояние взаимодействующей системы.

Согласно принципу исключения Паули, основное состояние Ψ_0 Ферми-газа состоит из фермионов, занимающих все импульсные состояния, соответствующие импульсу $p < p_F$, при этом все состояния с более высоким импульсом остаются незанятыми. При включении взаимодействия спин, заряд и импульс фермионов, соответствующие занятым состояниям, остаются неизменными, однако их динамические свойства, такие как их масса, магнитный момент и т.д., перенормируются на новые значения. Таким образом, существует взаимно однозначное соответствие между элементарными возбуждениями

системы Ферми газа и системы Ферми жидкости. В контексте Ферми-жидкостей эти возбуждения называются “квазичастицами”.

18.1.4 Концепция Ферми-жидкости. Нейтральная система

В основе теории Ландау лежит предположение о том, что спектр возбуждений ферми-жидкости строится также как спектр возбуждений идеального ферми-газа. Возбужденное состояние может быть построено путем переноса одной из частиц из-под ферми-уровня наружу. При каждом таком переносе возникает возбуждение над ферми уровнем и “дырка” под ним. Энергию таких возбуждений удобно отсчитывать от ферми-уровня: энергию электронов вверх, энергию дырок – вниз.

Рассмотрим невзаимодействующий газ фермионов (Ферми-газ). Вероятность того, что одна частица имеет энергию ε_n описывается формулой

$$f(\varepsilon_n) = \frac{1}{1 + \exp[(\varepsilon_n - \mu_0)/kT]}, \quad (18.2)$$

В предельном случае $T \rightarrow 0$ это распределение $f(\varepsilon)$ переходит в ступенчатую функцию Ферми-Дирака, которая скачком изменяется от 1 до 0 при некотором значении энергии $\varepsilon = \mu_0$. Переход от классического распределения Больцмана к функции Ферми-Дирака происходит при температуре $kT_F = \mu_0$, которая называется температурой вырождения. Вырождение и взаимодействие происходят одновременно, так что при низких температурах мы имеем дело с вырожденной взаимодействующей Ферми-жидкостью.

Мы вначале рассмотрим системы из нейтральных, т.е. незаряженных частиц. На сегодняшний день единственная известная нейтральная Ферми-жидкость - это ${}^3\text{He}$.

18.1.5 Квазичастицы. Элементарные возбуждения в Ферми-газе

Многочастичная волновая функция

Пусть у нас есть система из N невзаимодействующих фермионов в объеме Ω . У каждой частицы есть импульс \mathbf{p} и проекция спина $\sigma = \pm 1/2$. Нормированная волновая функция есть плоская волна

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad (18.3)$$

Многочастичная волновая функция системы в целом может быть составлена из антисимметричного произведения функций таких плоских волн, которые помещают один электрон в каждое из m состояний $0 \leq |m| \leq N - 1$. Очевидно, число таких состояний равно N .

Напомним как это делается в физике (например при нахождении фононного спектра), вначале на примере двух частиц

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1(\mathbf{r}_2) & \psi_2(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \quad (18.4)$$

Здесь $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ - координаты двух частиц. Множитель $\frac{1}{\sqrt{2}}$ - это коэффициент нормировки. Такая волновая функция антисимметрична. Более того она становится нулевой, если любые две волновые функции одинаковы. Следствием этого является принцип запрета Паули. Для N идентичных частиц строим детерминант Слэтера из N линейно независимых одночастичных

волновых функций $\psi_i(\mathbf{r})$. Антисимметричная волновая функция будет иметь вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1(\mathbf{r}_2) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(\mathbf{r}_N) & \psi_2(\mathbf{r}_N) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \quad (18.5)$$

Функция распределения

Состояния полной системы можно характеризовать функцией распределения $n_{\mathbf{p},\sigma}$:

$n_{\mathbf{p},\sigma} = 0$ если состояние (\mathbf{p}, σ) свободно,

$n_{\mathbf{p},\sigma} = 1$, если состояние занято. Далее, для простоты опустим спиновый индекс.

Частица с импульсом \mathbf{p} имеет кин.энергию $p^2/(2m)$. В отсутствии взаимодействий энергии частиц складываются и полная энергия системы

$$E = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},\sigma} \frac{p^2}{2m}. \quad (18.6)$$

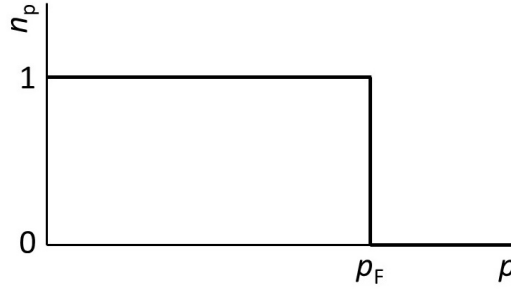


Рис. 18.2: Распределение квазичастиц в Ферми системе в основном состоянии.

В основном состоянии системы заполнены N одночастичных состояний с наименьшей энергией. Функция распределения показана на рисунке 18.6. Фермиевский импульс определяется условием

$$\frac{N}{\Omega} = 2 \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{(2\pi)^3} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{p_F}{\hbar} \right)^3 \quad (18.7)$$

В основном состоянии все одночастичные состояния внутри сферы S_F радиусом p_F заполнены, а снаружи сферы S_F - свободны.

Добавим в систему еще одну частицу. Для того, чтобы получить новое основное состояние нужно ее поместить при наименьшей возможной энергии, т.е. в состояние на Ферми-поверхности S_F . Т.о., химический потенциал, определяемый как изменение энергии основного состояния системы при добавлении одной частицы, равен

$$\mu = E_0(N + 1) - E_0(N) = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \frac{p_F^2}{2m} \quad (18.8)$$

Химический потенциал равен энергии частицы на ферми поверхности.

Это справедливо не только для свободного газа, но и при наличии межчастичных взаимодействий.

Возбужденное состояние

Возбужденное состояние лучше отсчитывать от основного состояния, а не скажем от ∞ . Его можно получить путем переноса некоторого количества частиц изнутри сферы наружу. Вне ферми сферы возникают частицы, а внутри сферы возникает равное количество дырок. Частицы и дырки являются элементарными возбуждениями. Степень возбуждения определяется отклонением функции распределения от основного состояния.

$$\delta n_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}}^0$$

Частице с импульсом $p' > p_F$ отвечает $\delta n_{\mathbf{p}} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$, а дырке с импульсом $p' < p_F$ отвечает $\delta n_{\mathbf{p}} = -\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$.

При отсутствии взаимодействий в системе энергия возбуждений равна

$$E - E_0 = \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \delta n_{\mathbf{p}} \quad (18.9)$$

При $T \ll T_F$ величина $\delta n_{\mathbf{p}}$ имеет порядок 1 только в узкой окрестности S_F , а при больших отклонениях от сферы пренебрежимо мала.

В изолированной системе полное число реальных частиц сохраняется, поэтому число возбужденных квазичастиц и дырок равны. С этого момента мне надоело говорить о “возбуждениях = квазичастицах”, т.к. других и не будет: называем их далее просто “частицы” и “дырки”. Неудобство вызывает то, что число этих “частиц” N не является постоянным. Действительно, система квазичастиц находится в контакте с резервуаром

частиц (Ферми-сферой). Удобнее характеризовать систему не числом частиц, а химпотенциалом μ , а вместо полной энергии E - свободной энергией F .

При $T = 0$ свободная энергия $F = E - \mu N$. Из формулы (18.9) следует что свободная энергия для возбуждений

$$F - F_0 = E - E_0 - \mu(N - N_0) = \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) \delta n_{\mathbf{p}} \quad (18.10)$$

Когда число частиц сохраняется, т.е. $\sum_p \delta n_{\mathbf{p}} = 0$, то последнее выражение сводится к (18.9). Систему квазичастиц будем считать подключенной к резервуару так, что задан уровень химического потенциала μ . Величину μ мы всегда можем найти в конце вычислений, приравняв число квазичастиц числу исходных частиц. Из выражения (18.10) также следует, что свободная энергия одного возбуждения с импульсом \mathbf{p} вне сферы ферми равна $p^2/2m - \mu$. Для возбуждения внутри сферы ферми (дырки) $\delta n_{\mathbf{p}} = -1$ и свободная энергия возбуждения дырки равна $\mu - p^2/2m$.

Поскольку химпотенциал μ возбуждения равен $p_F^2/2m$ на ферми-поверхности, то свободная энергия элементарного возбуждения с импульсом \mathbf{p} (НЕ ПУТАТЬ со свободной энергией частицы!) всегда положительна и может быть записана как

$$\boxed{|p^2/2m - \mu|}.$$

Q: что было бы если свободная энергия была бы отрицательной?

18.1.6 Взаимодействующая ферми-жидкость.

Определение квазичастиц и дырок

До сих пор были возбуждения в невзаимодействующем газе. В статфизике Ландау (часть II) для описания ферми-жидкости вводится мат. аппарат функций Грина и вычисляются поправки по теории возмущений для системы многих частиц. Вместо этого, мы подойдем к проблеме проще и будем устанавливать соответствие между свойствами невзаимодействующего идеального газа и взаимодействующей реальной ферми жидкости.

Начнем адиабатически медленно включать взаимодействие. Собственные состояния идеального газа перейдут в собственные состояния реальной жидкости. Вообще говоря, могло бы так получиться что не все собственные состояния взаимодействующей системы при этом будут получены (например, сверхпроводящее состояние не может быть получено). Мы должны предположить, что реальное основное состояние взаимодействующей системы *может быть получено* адиабатическим путем из идеальной системы с функцией распределения $n_{\mathbf{p}}^0$.

Это фактически есть определение “нормальной” системы фермионов. Для изотропной идеальной системы $n_{\mathbf{p}}^0$ сферически симметрично. Сферическая симметрия не искажается при включении взаимодействий между частицами.

Для реальных кристаллов поверхность ферми анизотропна, поэтому при включении взаимодействий она будет анизотропно деформироваться. Это усложнение не принципиально и его можно учесть, введя анизотропное состояние идеальной системы как некоторое начальное возбужденное состояние.

Добавим теперь частицу с импульсом \mathbf{p} к идеальной си-

стеме с идеальным распределением $n_{\mathbf{p}}^0$ и снова адиабатически медленно включим взаимодействие между частицами. Мы создадим элементарное возбужденное состояние с импульсом \mathbf{p} реальной жидкости. Когда взаимодействие увеличивается, то можно представить себе, что эта новая “голая” частица начнет оказывать воздействие на окружающие ее частицы. Взаимодействие увеличивается медленно, так что новая система из $N + 1$ частиц все время находится в равновесии.

Когда мы полностью включим взаимодействие, то окажется, что наша новая частица движется вместе с тем возмущением, которое возникло вследствие взаимодействия. В терминах теории поля это называется, что частица “одета” собственнoэнергетическим облаком. Такую “одетую” частицу мы будем считать совершенно независимой частицей и называть ее “квазичастицей”. Т.о., возбужденное состояние взаимодействующей системы соответствует реальному основному состоянию плюс квазичастица с импульсом \mathbf{p} .

Пусть S_F - ферми-поверхность системы в невозмущенном состоянии с распределением $n_{\mathbf{p}}^0$, из которого будем строить реальное основное состояние (т.е. для взаимодействующей системы). В силу принципа Паули квазичастичные состояния могут возникать только с импульсом \mathbf{p} лежащим вне S_F .

Используя ту же процедуру адиабатического включения взаимодействия мы можем определить квазидырку с импульсом \mathbf{p} лежащим внутри S_F . То же самой можно сделать и для более высоколежащих возбужденных конфигураций с несколькими квазичастицами и квазидырками. Таким путем квазичастицы и квазидырки появляются как элементарные возбуждения в реальной (т.е. взаимодействующей) системе. В результате наших рассуждений мы установили взаимно однозначное

соответствие между собственными состояниями идеальной и реальной систем.

Рассмотрим собственное состояние идеальной системы, описываемое функцией распределения $n_{\mathbf{p}}$ для “голых” частиц. Адиабатически включив взаимодействие мы получим собственное состояние реальной системы, которому можно приписать ту же функцию распределения $n_{\mathbf{p}}$. В этой взаимодействующей системе $n_{\mathbf{p}}$ описывает распределение квазичастиц. Степень возбуждения системы описывается отклонением $\delta n_{\mathbf{p}}$ от функции распределения основного состояния:

$$\delta n_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}}^0. \quad (18.11)$$

18.1.7 Время жизни возбуждений

Поговорим о реальности существования квазичастиц - каково их время жизни?

Понятно, что квазичастицы могут рассеиваться только в окрестности ферми-сферы в пояске шириной Δp , причем количество квазичастиц пропорционально ширине пояска Δp и количество свободных для рассеяния мест пропорционально Δp . Поэтому вероятность рассеяния $\propto (\Delta p)^2 \propto T^2$, а среднее время жизни квазичастиц $\propto T^{-2}$. Квантовая неопределенность энергии $\hbar/\tau \propto T^2$. Энергия же квазичастиц пропорциональна T . Таким образом, при понижении температуры квазичастицы становятся все более определенными квантовыми объектами и их время жизни стремится к ∞ . Но нужно сказать и иначе: для того, чтобы теория была хорошо определена, квазичастицы нужно вводить только в самой близкой окрестности ферми-поверхности.

При низких температурах существенны только низкоэнер-

гетические возбужденные состояния, вблизи S_F . В этих условиях затухание квазичастиц несущественно и наше описание имеет смысл. Подчеркнем еще раз, что физсмысл имеет $\delta n_{\mathbf{p}}$, а не $n_{\mathbf{p}}$. Поэтому теория формулируется в терминах отклонения от равновесия (т.е. от основного состояния) $\delta n_{\mathbf{p}}$.

18.2 Энергия квазичастиц

Для идеальной системы мы писали линейную связь между энергией данного состояния и соответствующей функцией распределения. При учете взаимодействия связь между E и $n_{\mathbf{p}}$ становится более сложной. Запишем ее как **функционал** $E[n_{\mathbf{p}}]$, вид которого в общем случае найти невозможно. Однако если функция распределения $n_{\mathbf{p}}$ близка к функции распределения основного состояния $n_{\mathbf{p}}^0$, то этот функционал можно разложить в ряд Тэйлора. Считая отклонение $\delta n_{\mathbf{p}}$ малым получим

$$E[n_{\mathbf{p}}] = E_0 + \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}} + O(\delta n_{\mathbf{p}}^2). \quad (18.12)$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ - первая функциональная производная от E . Если $\delta n_{\mathbf{p}}$ описывает состояние с одной дополнительной квазичастицей имеющей импульс \mathbf{p} , то энергия состояния равна $E_0 + \varepsilon_{\mathbf{p}}$; видно что $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ имеет смысл энергии квазичастицы.

Если состояние имеет несколько возбужденных квазичастиц, то как следует из (18.12), его энергия будет адитивна с точностью до членов порядка $(\delta n_{\mathbf{p}})^2$. Предположим, что энергия изменяется непрерывно по импульсу вблизи $p = p_F$ (это ограничивает класс рассматриваемых систем такими нормальными “системами”, не имеющих сингулярности на уровне ферми). На ферми поверхности, по определению $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ является

постоянной (равной ε_F).

Q: почему? Что будет, если не постоянна?

Так как основное состояние системы из $N + 1$ частиц получается добавлением квазичастицы на поверхность ферми, то ε_F есть просто химпотенциал $\mu = \partial E_0 / \partial N$ при $T = 0$.

Для построения описания свойств ферми-жидкости нам нужно только $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ вблизи S_F , где можно использовать разложение в ряд. Градиент $\varepsilon_{\mathbf{p}}$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \nabla_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \quad (18.13)$$

имеет смысл групповой скорости квазичастицы. Позже будет показано, что это есть групповая скорость волнового пакета, соответствующего квазичастице. В отсутствии магнитного поля и для системы с центром инверсии $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ и $\mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ не зависят от спина. Для изотропной системы энергия $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ зависит только от модуля p ; обозначим ее ε_p . Ну а вектор скорости $\mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ тогда параллелен вектору импульса \mathbf{p} . На ферми-поверхности

$$v_{p_F} = \frac{p_F}{m^*} \quad (18.14)$$

Следуя Ландау, определим эффективную массу квазичастицы m^* как отношение ее импульса к групповой скорости. NB: Данное выше определение совершенно не совпадает с определением массы для движения независимых частиц в периодической решетке: там $1/m$ определяется как вторая производная энергии $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ по p .

При таком определении энергии квазичастиц, мы понимаем, что их спектр $\varepsilon(p)$, отсчитываемый от поверхности ферми, который, казалось бы, должен быть квадратичным по p , на самом деле является линейным (см. Рис. 18.3). Это происходит просто потому, что $p/m = v_F$ является почти константой при малых изменениях $p - p_F \ll p_F$.

Необходимо ввести плотность состояний $\nu(\varepsilon)$ для квазичастиц, имеющих энергию $\mu + \varepsilon$,

$$\nu(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu - \varepsilon) \quad (18.15)$$

При низких температурах все физические свойства зависят от плотности состояний на ферми-поверхности $\nu(0)$.

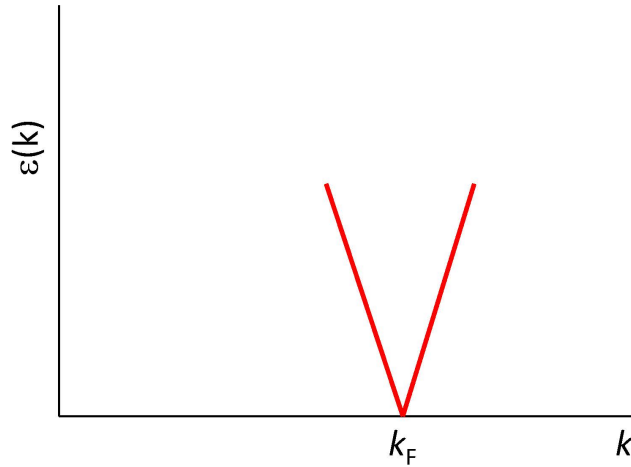


Рис. 18.3: Спектр возбуждений в ферми жидкости.

Проведенные выше рассуждения показывают сходство между *свободными частицами* в ферми газе и *квазичастицами* в ферми-жидкости. И те и другие обладают в импульсном пространстве одинаковым распределением, ограниченным при $T = 0$ строго определенной ферми-поверхностью. И те и другие подчиняются статистике Ферми-Дирака. Главное отличие - это зависимость энергии и скорости *квазичастиц* от взаимодействия с окружением. Это отличие приводит к ряду таких наблюдаемых свойств квазичастиц, которые отсутствуют у реальных частиц.

18.3 Взаимодействие между квазичастицами. Теория Ландау

18.3.1 Разложение свободной энергии

Перейдем теперь непосредственно к ферми-жидкости Ландау. Будем рассматривать квазиклассическую систему частиц с короткодействующим взаимодействием между ними. Свободная энергия системы $F = E - \mu N$ запишется через внутреннюю энергию E и число частиц N (см формулу (18.10)). Свободная энергия возбуждения отсчитываемая от основного состояния описывается формулой

$$F - F_0 = E - E_0 - \mu(N - N_0), \quad (18.16)$$

где N_0 - число частиц в основном состоянии.

Разложим свободную энергию по степеням $\delta n_{\mathbf{p}}$ (здесь и далее мы не будем делать различий между волновым числом электрона k и его импульсом p). На первый взгляд кажется, что в низжайшем порядке разложение должно иметь вид

$$F - F_0 = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) \delta n_{\mathbf{p}}. \quad (18.17)$$

Легко убедиться в том, что этот член является квадратичным по отклонению от равновесия. Действительно, обозначив отклонение от равновесия символом δ , получим $\delta n_p \propto \delta$ и $(\varepsilon_p - \mu) \propto \delta$. Следовательно в разложении должны быть учтены и другие члены второго порядка малости:

$$F - F_0 = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) \delta n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}'} + O(\delta^3) \quad (18.18)$$

Второй член является ядром теории Ландау. Его нет в теории Зоммерфельда.

Смысл этого выражения - разложение $F - F_0$ по степеням относительного числа возбужденных квазичастиц

$$\alpha = \frac{\sum_{\mathbf{p}} |\delta n_{\mathbf{p}}|}{N}, \quad (18.19)$$

Для применимости теории Ландау α должно быть мало.

Функция $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ является второй вариационной производной от E (или F) по $n_{\mathbf{p}}$, значит

$$f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = f_{\mathbf{p}'\mathbf{p}} \quad (18.20)$$

$f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ имеет порядок малости $1/\Omega$. Действительно, $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ представляет собой энергию взаимодействия квазичастиц с импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' , а вероятность того, что частицы взаимодействуют между собой имеет порядок a^3/Ω , где a -радиус взаимодействия.

Мы рассматриваем только такие “нормальные” системы, у которых нет разрывов на ферми-поверхности и $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ непрерывна на ферми-поверхности (т.е. при p и p' близких к p_F), поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать только значение этой функции на ферми-поверхности, где $\varepsilon_p = \varepsilon_{p'} = \mu$. В действительности, выражения 18.18) и (18.20) должны содержать еще и проекцию спина. В отсутствии магнитного поля, из инвариантности энергии по отношению к обращению времени, следует:

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} = f_{-\mathbf{p}-\sigma, -\mathbf{p}'-\sigma'} \quad (18.21)$$

Ферми поверхность обычно сама инвариантна относительно инверсии $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$. Следовательно,

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} = f_{\mathbf{p}-\sigma, \mathbf{p}'-\sigma'} \quad (18.22)$$

Мы обнаружили, что f зависит только от относительной ориентации спинов частиц и, следовательно, имеет две компонен-

ты, соответствующие параллельной и антипараллельной ориентациям.

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\uparrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s + f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a \\ f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\uparrow\downarrow} &= f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s - f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a. \end{aligned} \quad (18.23)$$

Здесь введены симметричная по спину $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^s$ и антисимметричная $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$ части взаимодействия квазичастиц. Заметим, что $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$ связан с обменной энергией $2f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^a$. Далее, для изотропной системы функции $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{s,a}$ зависят только от угла ξ между импульсами \mathbf{p} и \mathbf{p}' . Их можно разложить в ряд по полиномам Лежандра:

$$f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{s,a} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{s,a} P_l(\cos \xi) \quad (18.24)$$

Функция $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{s,a}$ полностью определяется набором коэффициентов f_l^s и f_l^a . Обычно коэффициенты $f_l^{s,a}$ приводят к безразмерному виду, умножив их на плотность состояний квазичастиц на уровне ферми:

$$\nu(0) f_l^{s,a} = \frac{\Omega m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} f_l^{s,a} = F_l^{s,a} \quad (18.25)$$

Величина безразмерных параметров $F_l^{s,a}$ дает представление о силе межчастичных взаимодействий. Так, например, $F_0^a \rightarrow -1$ означает потерю устойчивости и спиновую (ферромагнитную) поляризацию системы. Для практической иллюстрации приведем пример многоэлектронного атома Pd, рассматривая его как многочастичную ферми-систему. Для нее значение F_0^a близко к -1 и хотя в чистом Pd оно еще недостаточно для спонтанной поляризации атомов, добавление Pd в сплавы зачастую приводит к ферромагнетизму.

18.3.2 Локальная энергия квазичастиц

Для решения многих вопросов, например, для рассмотрения транспорта в системе взаимодействующих частиц, удобно пользоваться величинами, учитывающими наличие возбуждений. В этом параграфе мы введем пару таких величин.

Зададим некоторое распределение квазичастиц $\delta n_{\mathbf{p}'}$ и добавим в систему еще одну квазичастицу с импульсом \mathbf{p} . В результате этого действия, в соответствие с (18.18) свободная энергия вырастет на

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \mu = \varepsilon_p - \mu + \sum'_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'} \quad (18.26)$$

Это есть свободная энергия добавленной частицы, а $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}}$ - локальная энергия квазичастиц. Здесь штрих у знака суммы означает, что суммировать нужно по всем импульсам, за исключением \mathbf{p} .

Если импульс \mathbf{p} близок к поверхности ферми, то оба члена в (18.26) имеют один порядок величины. Т.о., вследствие наличия взаимодействия данной квазичастицы с остальными возбужденными квазичастицами ее свободная энергия зависит от состояния системы. Этот эффект отсутствует в невзаимодействующих системах и обусловлен квадратичным членом в (18.18).

Для выяснения физ. смысла $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}}$ предположим, что система слабо неоднородна. Отклонения от равновесия можно характеризовать *зависящим от координат* распределением квазичастиц $\delta n_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r})$. В результате $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}}$ окажется зависящей от координат \mathbf{r} . Тогда ее можно рассматривать как докальную энергию, *зависящую от неоднородности окружающей среды*. Градиент

$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}}$ по координате

$$\nabla_{\mathbf{r}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} = \nabla_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'} \right] \quad (18.27)$$

представляет собой среднюю силу, с которой среда действует на квазичастицу \mathbf{p} . Отсюда понятно, что динамика отдельной квазичастицы определяется ее локальной энергией.

Аналогично введем локальную функцию распределения

$$\tilde{n}_{\mathbf{p}}^0 = n^0(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \mu), \quad (18.28)$$

где $n^0(x)$ - обычная ступенчатая функция распределения Ферми-Дирака. Ясно, что для слабонеоднородной системы \tilde{n}^0 - соответствует локальному равновесному распределению квазичастиц, аналогично тому как $n_{\mathbf{p}}^0 = n^0(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)$ описывает действительно равновесие в однородной системе. (Напомним, что истинное равновесное распределение рассчитывается как распределение, которое может быть реализовано максимальным числом способов при фиксированной температуре).

Определим также распределение истинного равновесия (т.е., распределение в отсутствие возбуждений), как $n^0(\varepsilon_p - \mu)$.

Отклонения от локального равновесия и отклонения от истинного равновесия

Отклонения от локального равновесия и отклонение от истинного равновесия связаны между собой.

Отклонения от состояния локального равновесия характеризуются разностью

$$\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}} - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^0 \equiv n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}}^0 + n_{\mathbf{p}}^0 - \tilde{n}_{\mathbf{p}}^0 = n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}}^0 - \left(\frac{\partial n_{\mathbf{p}}^0}{\partial \varepsilon_p} \right) (\tilde{\varepsilon}_p - \varepsilon_p). \quad (18.29)$$

Сравнивая определения $\delta n_{\mathbf{p}}$ и $\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}}$ заключаем:

$$\delta n_{\mathbf{p}} = \delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} + \frac{\partial n_{\mathbf{p}}^0(\varepsilon_p - \mu)}{\partial \varepsilon_p} (\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{p}} - \varepsilon_p). \quad (18.30)$$

Используя формулу (18.26) перепишем

$$\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} = \delta n_{\mathbf{p}} - \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p} \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}'}. \quad (18.31)$$

Как правило, $\delta n_{\mathbf{p}}$ всегда содержит множитель $\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p}$. При $T = 0$ имеем

$$\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p} = -\delta(\varepsilon_p - \mu), \quad (18.32)$$

поэтому δn и $\delta \tilde{n}$ **отличны от нуля только на ферми-поверхности.**

Для изотропной системы при $T = 0$ связь между δn_p и $\delta \tilde{n}_p$ заметно упрощается. Разобьем δn_p и $\delta \tilde{n}_p$ на две части - симметричную и антисимметричную по спинам:

$$\delta n_{\mathbf{p},\pm} = \delta n_{\mathbf{p}}^s \pm \delta n_{\mathbf{p}}^a \quad (18.33)$$

и аналогично представим $\delta \tilde{n}_p$.

Разложим далее эти величины в ряды по нормированным сферическим функциям

$$\delta n_{\mathbf{p}}^s = \sum_{lm} \delta(\varepsilon_p - \mu) \delta n_{lm}^s Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (18.34)$$

где (θ, φ) - полярные углы для вектора \mathbf{p} . Подставляя эти разложения для $\delta n_{\mathbf{p}}^s$ и $\delta \tilde{n}_{\mathbf{p}}^s$ в формулу (18.31) и используя разложение (18.24) для $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$, а также теорему сложения сферических функций получаем

$$\begin{aligned}\delta\tilde{n}_{lm}^s &= \left(1 + \frac{F_l^s}{2l+1}\right) \delta n_{lm}^s, \\ \delta\tilde{n}_{lm}^a &= \left(1 + \frac{F_l^a}{2l+1}\right) \delta n_{lm}^a,\end{aligned}\quad (18.35)$$

где коэффициенты F_l^s и F_l^a даются формулой (18.25). Видно, что переход от $\delta n_{\mathbf{p}}$ к $\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}}$ делается просто.

Величина $\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}}$ весьма полезна и упрощает вывод формул для многих свойств (по сравнению с $\delta n_{\mathbf{p}}$).

18.3.3 Равновесное распределение квазичастиц при конечной температуре

Рассмотрим систему при температуре T с химическим потенциалом μ . Последний можно определить как адиабатическую производную

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_S. \quad (18.36)$$

Из элементарной термодинамики получаем:

Задание: вывести к след лекции

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T - T \left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_T. \quad (18.37)$$

При очень низкой температуре второй член в (18.37) пренебрежимо мал по сравнению с первым и хим потенциал становится равным изотермической производной E по N , которая легко вычисляется.

Чтобы найти равновесное распределение квазичастиц $n^0(T, \mu)$ используем стандартную процедуру. Возьмем некоторое распределение $n_{\mathbf{p}}$, затем подсчитаем, каким числом способов W

квазичастицы могут быть распределены по различным занятым состояниям. Затем выберем то распределение $n_{\mathbf{p}}$, для которого при заданной полной свободной энергии число W максимально. При этом получаем

$$n_{\mathbf{p}}^0(T, \mu) = \frac{1}{1 + \exp[(\tilde{\varepsilon}_p - \mu)/kT]}, \quad (18.38)$$

где $\tilde{\varepsilon}_p$ - локальная энергия квазичастиц, соответствующая распределению $n_{\mathbf{p}}^0(T, \mu)$. Зная W_{max} можем получить энтропию $S = k \ln W_{max}$.

Локальная энергия $\tilde{\varepsilon}_p$ описывается соотношением (18.26), где $\delta n_{\mathbf{p}}$ определяется равенством

$$\delta n_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}}^0(T, \mu) - n_{\mathbf{p}}^0(0, \mu) \quad (18.39)$$

При очень низких температурах интеграл $\int \delta n_{\mathbf{p}} p^2 dp$ имеет порядок T^2 для любого направления в импульсном пространстве. Энергия взаимодействия между возбужденными квазичастицами имеет тот же порядок величины, поэтому ею можно пренебречь по сравнению с разностью $(\varepsilon_p - \mu)$, имеющей порядок T . Следовательно, в низкотемпературном пределе мы можем заменить $\tilde{\varepsilon}_p$ на ε_p в равновесном распределении (18.38). Кроме того, видно, что число частиц при постоянном μ (или химпотенциал при постоянном N) остается неизменным с точностью до членов порядка T^2 .

Тепловое движение возбуждает квазичастицы только на расстоянии не более kT от ферми-поверхности. Доля возбужденных квазичастиц равна kT/μ . Последняя величина - является малым малым параметром разложение в (18.18). Пренебрегая членами порядка $(\delta n)^3$ мы допускаем ошибку порядка $(kT/\mu)^3$. Из-за этой неопределенности бессмысленно вычислять температурную зависимость любой величины с более вы-

сокой точностью. Мы оставляем только главные члены по T , нулевого или первого порядка.

18.4 Часть 2

В предыдущей лекции были изложены основы теории ферми-жидкости Ландау. Она дает идеологию, с помощью которой перенормировка различных свойств взаимодействующей системы выражается через различные константы ферми-жидкостного взаимодействия. Однако, нас интересует не только идеология, а практическая возможность - как находить перенормированные свойства в зависимости от параметра взаимодействия r_s . Для этого разработаны много подходов:

- вычисления по теории возмущений техникой гриновских функций,
- вычисления методом ренорм-группы как обобщение теории возмущений,
- вычисления в приближении Хартри и Хартри-Фока,
- вычисления методом функционала плотности.

Это все - вычисления в рамках различных модельных приближений. Более честный способ - вычисления методом квантового Монте-Карло. Они крайне трудоемки и используются в полной мере редко; чаще всего их однажды полученные результаты далее аналитически аппрокимируются и используются в различных модельных приближенных вычислениях.

Ну и, наконец, помимо самих численных значений перенормированных параметров нам важно знать их зависимости от температуры и магнитного поля.

18.5 Равновесные свойства

18.5.1 Теплоемкость

Рассмотрим теплоемкость

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_N \quad (18.40)$$

Нетрудно привести к более удобной форме

Задание: вывести к след лекции

$$C_V = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_\mu \quad (18.41)$$

Запишем свободную энергию в виде (18.18), где $\delta n_{\mathbf{p}}$ определяется выражением (18.39). Приведем (18.18) здесь еще раз:

$$F - F_0 = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) \delta n_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}'} + O(\delta^3)$$

Интеграл от $\delta n_{\mathbf{p}}$ стремится к нулю как T^2 , поэтому энергия взаимодействия в этом выражении (18.18) имеет порядок T^4 , т.е. пренебрежимо мала по сравнению с главным членом, имеющим порядок T^2 . Следовательно, “тепловая” свободная энергия $[F(T) - F_0]$ описывается выражением того же типа, что и для невзаимодействующей системы.

$$F(T) - F_0 = \frac{\pi^2}{6} \nu(0) (kT)^2, \quad (18.42)$$

где плотность состояний $\nu(0)$ определяется обычным соотношением (18.15). Для изотропной 3D системы

$$\nu(0) = \frac{\Omega m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} \quad (18.43)$$

Отсюда находим теплоемкость

$$C_v = \frac{m^* p_F}{3\hbar^3} k^2 T. \quad (18.44)$$

Видно, что

(i) по наклону температурной зависимости теплоемкости можно определить эффективную массу квазичастиц,

Физический смысл линейной зависимости $C_v(T)$ для невзаимодействующей ферми-системы очень прост - энергия квазичастицы пропорциональна T , число квазичастиц пропорционально T , поэтому полная энергия пропорциональна T^2 , а ее производная C_v пропорциональна T . Для взаимодействующих квазичастиц, мы нашли, что

(ii) на теплоемкость не влияет взаимодействие между квазичастицами. Но в ней возникла новая масса квазичастиц m^* !

18.5.2 Термодинамическая плотность состояний

Пусть $E_0(\Omega)$ - энергия основного состояния, рассматриваемая как функция объема Ω . Определим давление как

$$P = - \left(\frac{\partial E_0}{\partial \Omega} \right). \quad (18.45)$$

Сжимаемость κ определим как

$$\frac{1}{\kappa} = -\Omega \frac{\partial P}{\partial \Omega} \quad (18.46)$$

18.5.3 Сжимаемость и скорость звука

Если система однородна, т.е. ее плотность частиц $\rho = N/\Omega$ постоянна, то энергия как аддитивная величина пропорцио-

нальна объему

$$E = \Omega f(\rho), \quad (18.47)$$

где f - некоторая функция, зависящая от системы, а сжимаемость

$$\frac{1}{\kappa} = \rho^2 f''(\rho). \quad (18.48)$$

Свяжем сжимаемость с химпотенциалом $\mu = \partial E_0 / \partial N$:

Задание: вывести

$$\frac{1}{\kappa} = N \rho \left(\frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{\Omega}. \quad (18.49)$$

Видно, что сжимаемость ферми-системы и термодинамическая плотность состояний пропорциональны друг другу.

Сжимаемость связана со скоростью звука

$$s^2 = \frac{1}{\kappa m \rho} = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N} \quad (18.50)$$

Нам осталось определить обратную термодинамическую плотность состояний через параметры фермижидкости.

Сперва сделаем это быстро и на качественном уровне. С этой целью обратим внимание на то, что локальная энергия частиц на ферми-уровне равна значению химического потенциала и равновесное распределение квазичастиц с увеличенным на $d\mu$ химическим потенциалом имеет вид $n^0(\tilde{\varepsilon}_p - \mu - d\mu)$. Отклонение от локального равновесия $n^0(\varepsilon_p - \mu)$ равно $\delta \tilde{n}_p = -d\mu(\partial n^0 / \partial \varepsilon_p)$. Если обе добавки к функции распределения изотропны, как в случае всестороннего сжатия, то связь между $\delta \tilde{n}_p$ и δn_p задана уравнением

$$\delta n_p = \delta \tilde{n}_p (1 + F_0^s)^{-1}$$

Термодинамическая плотность состояний на уровне Ферми равна

$$(\partial N / \partial \mu) = \nu (1 + F_0^s)^{-1}.$$

В нее входит эффективная масса квазичастиц.

Закончим со скоростью звука

Для скорости звука в 3D-системе из (18.50) получаем

$$s^2 = \left(\frac{p_F^2}{3m m^*} \right) (1 + F_0^s)$$

По мере исчезновения взаимодействия $F_0^s \rightarrow 0$ скорость звука s приближается к $v_F / \sqrt{3}$.

Теперь вычислим термодинамическую DOS и скорость звука более подробно

Вычислим теперь $\partial N / \partial \mu$. Для этого изменим μ на малую величину $d\mu$. Ферми поверхность слегка увеличится. ПФ предполагаем инверсионно симметрична. Произвольная точка А на ПФ сместится по нормали на величину

$$dp_F = \left(\frac{\partial p_F}{\partial \mu} \right) d\mu \quad (18.51)$$

и перейдет в точку В (Рис. 18.6). На новой ПФ энергия квазичастиц равна $\mu + d\mu$. Положение точки В должно быть таким, чтобы выполнялось

$$\varepsilon_B(\mu + d\mu) - \varepsilon_A(\mu) = d\mu \quad (18.52)$$

Что происходит при этом расширении ПФ:

1) Во-первых, при переходе от А к В изменяется импульс, что

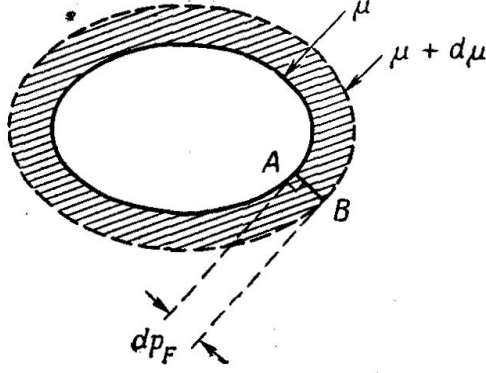


Рис. 18.4: Изменение ферми-поверхности при увеличении химического потенциала от значения μ до $\mu + d\mu$.

приводит к изменению энергии $v_p dp_F$.

2) Во-вторых, увеличение μ на величину $d\mu$ соответствует появлению новых квазичастиц в заштрихованной области на рисунке 18.6. При этом ε_p возрастает на величину, равную энергии взаимодействия с этими новыми добавочными квазичастицами.

Пусть δn_p - изменение функции распределения, связанное со смещением ПФ. Величина δn_p равна +1 в заштрихованной области на Рис. 18.6 и нулю вне ее. Объединяя оба вклада в равенстве (18.52) получаем

$$v_p dp_F + \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'} = d\mu \quad (18.53)$$

Так как $f_{pp'}$ - гладкая функция от \mathbf{p} и \mathbf{p}' , то мы можем заменить здесь δn_p нормированной δ - функцией. Нормировку легко найти, т.к. при $T = 0$

$$\delta n_p = -\frac{dn^0}{d\varepsilon_p} \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p} dp_F = \delta(\varepsilon_p - \mu) v_p dp_F \quad (18.54)$$

Подставляя это в (18.53) и деля на $d\mu$ получаем

$$v_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial p_F}{\partial \mu} \right) + \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial p'_F}{\partial \mu} \right) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}'} - \mu) = 1$$

Это интегральное, в принципе, определяет производную $\partial p_F / \partial \mu$ и следовательно, изменение ПФ при изменении μ . Чтобы получить $\partial N / \partial \mu$ заметим, что

$$dN = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) v_{\mathbf{p}} dp_F \quad (18.55)$$

Скорость звука определяется соотношением

$$\frac{N}{ms^2} = \frac{\partial N}{\partial \mu} = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) v_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial p_F}{\partial \mu} \right). \quad (18.56)$$

Для изотропной системы производная ($\partial p_F / \partial \mu$) не зависит от направления. В этом случае в вышеприведенное интегральное уравнение вклад вносит только тот член разложения функции $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$, который не зависит от спина и отвечает $l = 0$. Используя определение (18.25), находим

$$v_{\mathbf{p}} \left(\frac{\partial p_F}{\partial \mu} \right) = \frac{1}{1 + F_0^s} \quad (18.57)$$

Подставляя это выражение в (18.56) получаем окончательно

$$\frac{N}{ms^2} = \frac{\partial N}{\partial \mu} = \frac{\nu(0)}{1 + F_0^s} \quad (18.58)$$

Последнее соотношение отличается от обычного для независимых частиц (однако, с массой m^*) множителем $(1 + F_0^s)^{-1}$.

Результат (18.58) можно более компактно получить, если воспользоваться понятием локальной энергии квазичастиц: локальная энергия квазичастиц на ПФ всегда равна химическому потенциалу μ . Когда μ увеличивается на величину $d\mu$, то

локальная ферми-энергия увеличивается на ту же величину. Новое распределение запишем в виде $n^0(\tilde{\varepsilon}_p - \mu - d\mu)$. Отклонение от локального равновесия равно

$$\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}} = -d\mu \left(\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p} \right). \quad (18.59)$$

Для изотропной системы отклонение $\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}}$ изотропно. Используя формулу (18.35) получаем

$$\delta n_{\mathbf{p}} = \frac{\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}}}{1 + F_0^s} = -\frac{\partial n^0 / \partial \varepsilon_p}{1 + F_0^s} d\mu \quad (18.60)$$

Отсюда следуют соотношения (18.57) и (18.58).

Вернемся теперь к (18.58). Заменяя $\nu(0)$ ее значением (18.43) находим скорость звука

$$s^2 = \left(\frac{p_F^2}{3mm^*} \right) (1 + F_0^s) \quad (18.61)$$

Так как величину m^* можно определить из теплоемкости или амплитуды квантовых осцилляций, то измерение s позволяет вычислить F_0^s . В пределе слабых взаимодействий $F_0^s \rightarrow 0$.

Зависимость от координаты и от времени

Определим величину $n_{\mathbf{p}}$ как функцию распределения для единичного объема $\Omega = 1$ около точки \mathbf{r} . Локальная энергия квазичастиц будет функцией координат и времени. Вначале добавим временную зависимость в функцию распределения.

$$n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = n_{\mathbf{p}}(0) + \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (18.62)$$

Предполагаем, что отклонение $\delta n_{\mathbf{p}}$ от основного состояния мало.

Полная энергия $E(n(\mathbf{r}, t))$ представляет собой функционал $E[n(\mathbf{r}, t)]$ от функции распределения. Если отклонение мало то напишем разложение в ряд:

$$E = E_0 + \sum_p \int d^3r \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \delta n_p(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' f(\mathbf{p}\mathbf{r}, \mathbf{p}'\mathbf{r}') \delta n_p(\mathbf{r}) \delta n_{p'}(\mathbf{r}') + \dots \quad (18.63)$$

Если система инвариантна относительно пространственных переносов, то $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{p})$, а $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \mathbf{p}'\mathbf{r}')$ может зависеть только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Рассмотрим короткодействующие взаимодействия, порядка атомных размеров (как, например, в He3). Если возмущение медленно меняется в пространстве и времени, то δn_p можно считать постоянной на расстояниях порядка радиуса взаимодействия и в (18.63) считать отклонение $\delta n_{p'}(\mathbf{r}') = \delta n_p(\mathbf{r})$. При этом выражение для энергии упрощается

$$E = E_0 + \int d^3\mathbf{r} \delta E(\mathbf{r}) \\ E(\mathbf{r}) = \sum_p \varepsilon_p \delta n_p(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \delta n_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) \quad (18.64)$$

Видно, что избыточная энергия (энергия взаимодействия)

$$f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = \int d^3\mathbf{r}' f(\mathbf{p}\mathbf{r}, \mathbf{p}'\mathbf{r}') \quad (18.65)$$

является локальной функцией δn_p . Во всех точках связь между ними постоянна, как для однородной системы. Это, конечно является следствием использованного предположения о малом радиусе взаимодействия.

18.5.4 Распределение локального равновесия

Определим распределение локального равновесия как

$$\tilde{n}^0 = n^0(\tilde{\varepsilon}_p - \mu), \quad (18.66)$$

где n^0 - функция фермиевского распределения основного состояния.

Возмущение электронного распределения может быть разложено по сферическим функциям (возмущение существует только вблизи ферми-поверхности):

$$\delta n_p = \sum_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \phi) \delta n_{l,m} \quad (18.67)$$

18.5.5 Поток квазичастиц и их эффективная масса

Как мы знаем, существуют различные определения эффективной массы квазичастиц. В случае ферми-жидкости Ландау эффективная масса должна быть задана через параметры, определенные на ферми-поверхности. Следуя Ландау, определим эффективную массу квазичастицы как отношение ее импульса к групповой скорости

$$m^* = \frac{p}{v} \quad (18.68)$$

Нахождение плотности потока частиц

По определению, поток *частиц* в момент времени t и в точке \mathbf{r} равен $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \mathbf{p}_i/m$, где \mathbf{p}_i – импульс i -той частицы, а m – ее голая масса: $\mathbf{J} = \mathbf{P}/m$. Здесь \mathbf{P} – суммарный импульс частиц.

Рассматриваем \mathbf{J} как оператор полного потока частиц. Если система инвариантна к любой трансляции, то полный импульс системы \mathbf{P} является хорошим квантовым числом.

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{P}}{m} \quad (18.69)$$

Как его вычислить? Казалось бы

$$\mathbf{J} = \sum_p \mathbf{v}_p \delta n_p \quad (18.70)$$

Однако, это неправильно (см. далее)!

Воспользуемся уравнением непрерывности, которое связывает поток с плотностью частиц ρ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0 \quad (18.71)$$

Это просто закон сохранения числа частиц. Флуктуации плотности

$$\delta \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \quad (18.72)$$

Я хочу записать выразить $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ через распределение $\delta n_p(\mathbf{r}, t)$, так, чтобы уравнение (18.71) выполнялось при любых изменениях $\delta n_{\mathbf{p}}$ в пространстве. Для этой цели напомним кин. уравнение в отсутствие внешних сил

$$\frac{\partial \delta n_{\mathbf{p}}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{r}} \delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} = I(\delta n_{\mathbf{p}}) \quad (18.73)$$

Просуммируем (18.73) по всем p . Вклад интеграла столкновений обнуляется, т.к. общее число частиц сохраняется при столкновениях. Тогда получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta \rho + \nabla_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} = 0 \quad (18.74)$$

Сравнивая (18.71) и (18.74) приходим к искомой связи для плотности потока

$$\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \delta \tilde{n}_{\mathbf{p}} \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \quad (18.75)$$

Т.о. наше наивное предположение (18.70) неправильно: δn_p заменяется на отклонение от локального равновесия $\delta \tilde{n}_p$. Полезно выразить \mathbf{J} и \mathbf{j}_p через отклонение от обычного распределения δn_p . Поставим в (18.75) выражение (18.31) для $\delta \tilde{n}_p$

$$\mathbf{J} = \sum_{\mathbf{p}} \delta n_{\mathbf{p}} \mathbf{j}_p, \quad (18.76)$$

где

$$\mathbf{j}_p = \mathbf{v}_p - \sum_p' f_{pp'} \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{p'}} \mathbf{v}_{p'} \quad (18.77)$$

Итак, \mathbf{j}_p играет роль потока, переносимого квазичастицей \mathbf{p} . **NB: поток \mathbf{j}_p для взаимодействующей частицы отличается от скорости $\mathbf{v}_{p'}$!**

Это происходит потому, что кагда к системе добавляется квазичастица \mathbf{p} , появляется одна дополнительная частица с групповой скоростью \mathbf{v}_p ; соответствующий вклад в поток есть \mathbf{v}_p . Но из-за взаимодействия частиц эта движущаяся квазичастица увлекает за собой часть своего окружения, создавая дополнительный поток. Поэтому \mathbf{j}_p отличается от \mathbf{v}_p . Разность $(\mathbf{j}_p - \mathbf{v}_p)$ можно назвать “потоком увлечения”. Это справедливо для таких квазичастиц, которые можно представить в виде плоских волн. Для локализованных квазичастиц это будет иначе.

Поток частиц в трансляционно-инвариантной системе

Для упрощения рассмотрения мы предположим что система остается инвариантной при любой трансляции. Это предположение не повлияет на результат, но сокращает формулы.

Оператор полного потока

$$\mathbf{J} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m}, \quad (18.78)$$

где p_i - импульсы частицы, m - ее голая масса. Если система инвариантна относительно трансляций, то ее полный импульс \mathbf{P} является хорошим квантовым числом.

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{P}}{m}. \quad (18.79)$$

Рассмотрим возбужденное состояние с одной квазичастицей с импульсом \mathbf{p} , которая создает поток. По аналогии с (18.79)

$$\mathbf{j}_p = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (18.80)$$

В трансляционно-инвариантной системе \mathbf{j}_p имеет такую же величину и направление как и в отсутствие взаимодействия. (Заметим, что для анизотропных металлов с кристаллической решеткой последнее соотношение не применимо). В этом частном случае, для трансляционно-инвариантной взаимодействующей системы поток \mathbf{j}_p имеет такую же величину и направление как и в отсутствие взаимодействия.

Мысленный эксперимент: перенос одной квазичастицы

Выражение (18.77) настолько важно, что мы его выведем дважды, разными способами.

(1) Запишем полный ток как среднее от оператора потока.

$$\mathbf{J} = \langle \varphi | \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m} | \varphi \rangle.$$

Теперь рассмотрим что произойдет, если вся ПФ вместе с возбужденными квазичастицами сместится на постоянный

вектор \mathbf{q} . Такое смещение эквивалентно переходу к системе координат, движущейся с постоянной скоростью $(-\mathbf{q}/m)$. В этой движущейся системе координат взаимодействие между КЧ останется неизменным, а оператор кинетической энергии увеличится на величину

$$\sum_i \left\{ \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}_i}{m} + \frac{\mathbf{q}^2}{2m} \right\}.$$

Предположим, что смещение \mathbf{q} мало и найдем по теории возмущений поправку первого порядка к энергии E

$$\delta E = \langle \varphi | \sum_i \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{p}_i}{m} | \varphi \rangle + \mathcal{O}(q^2) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{J} + \mathcal{O}(q^2)$$

Видно, что вектор потока \mathbf{J} является первой производной от энергии по \mathbf{q} , так что для его компонент

$$J_\alpha = \frac{dE}{dq_\alpha} \quad (18.81)$$

Здесь написана полная производная, чтобы подчеркнуть, что производная соответствует смещению *всей системы*. В основном состоянии $|\varphi_0\rangle$ по соображениям симметрии поток равен нулю, поэтому $dE_0/dq_\alpha = 0$.

(2) Теперь рассмотрим возбужденное состояние $|\varphi_{\mathbf{p}}\rangle$ системы, содержащее одну возбужденную КЧ \mathbf{p} . Как следует из (18.81) соответствующий поток можно записать в виде

$$j_{p,\alpha} = \frac{d\varepsilon_p}{dq_\alpha}. \quad (18.82)$$

Другими словами, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}_p$ представляет собой изменение ε_p при смещении КЧ и всей ПФ на величину \mathbf{q} .

Рассмотрим вначале смещение КЧ с импульсом \mathbf{p} считая, что ПФ остается на месте. Энергия ε_p изменится на величину $\mathbf{q} \cdot \nabla \varepsilon_p = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_p$. Ну а вклад в поток точно равен \mathbf{v}_p , как и должно быть в отсутствие взаимодействия.

Теперь сместим ПФ на вектор \mathbf{q} ; это приведет к изменению функции распределения $\delta n_{p'}$. Вследствие взаимодействия квазичастицы \mathbf{p} с остальными КЧ появится дополнительное изменение энергии.

$$\delta E = \mathbf{q} \cdot \mathbf{j}_p = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_p + \sum_{p'} f_{pp'} \delta n_{p'} \quad (18.83)$$

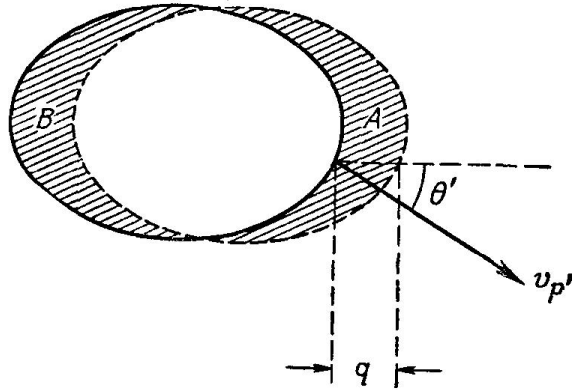


Рис. 18.5: К вычислению потока квазичастиц. При смещении ПФ на величину q в заштрихованной области A появляются квазичастицы, а в заштрихованной области B отражаются дырки

Отсюда видно, что поток увлечения ($\mathbf{j}_p - \mathbf{v}_p$) возникает из-за взаимодействия КЧ со средой. Рассмотрим графическую иллюстрацию этого на Рис. 18.5. Исходная ПФ (сплошной контур) смещается на величину \mathbf{q} . Смещению ПФ приводит к появлению в заштрихованной области A квазичастиц, а в заштрихованной области B - квазидырок. Соответствующее от-

клонение функции распределения

$$\delta n_{\mathbf{p}'} = -\mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{p}'} n_{\mathbf{p}'}^0 = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \right) \quad (18.84)$$

Подставляя (18.84) в (18.83) мы снова получаем выражение (18.77) для $(\mathbf{j}_{\mathbf{p}} - \mathbf{v}_{\mathbf{p}})$.

Сравнивая (18.77) с (18.80) видим, что для трансляционно-инвариантной системы имеется равенство

$$\mathbf{j}_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \right) \mathbf{v}_{\mathbf{p}'} \quad (18.85)$$

Это соотношением (18.85) является условием, налагаемым на $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ требованием Галлилеевой инвариантности систем координат (сохранение отрезка времени и отрезка длины). В изотропной системе, напр. ³Не как $\mathbf{j}_{\mathbf{p}}$, так $\mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ и параллельны вектору \mathbf{p} и соотношение (18.85) содержит только симметричную по спине компоненту $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$, отвечающую $l = 1$. Используя теорему млодения сферических функции¹ получаем из (18.85)

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1^s}{3} \quad (18.86)$$

NB:

мы существенно использовали случай трансляционно-инвариантной системы и протяженные состояния квазичастиц в виде плоских волн.

Если же КЧ не является плоской волной, а является локализованной, то *голая локализованная КЧ не является собственным состоянием системы*. Необходимо окружить ее облаком других КЧ. С движением облака связан перенос частиц.

Вследствие этого свойств одетой КЧ отличны от свойств голлой КЧ. Различие между скоростью КЧ и ее вкладом в поток показывает как это различие связано с сохранением частиц.

=====

Еще раз: Мысленный эксперимент по переносу одной квазичастицы

Рассуждения выше были крайне важны, но довольно многословны. Повторим их еще раз на другом языке.

Рассмотрим систему, в которой ферми-поверхность смещена на \mathbf{q} и в которой имеется одна возбужденная квазичастица с импульсом $(\mathbf{p} + \mathbf{q})$ (см. Рис. 18.6). Предполагается $q \ll p \sim p_F$.

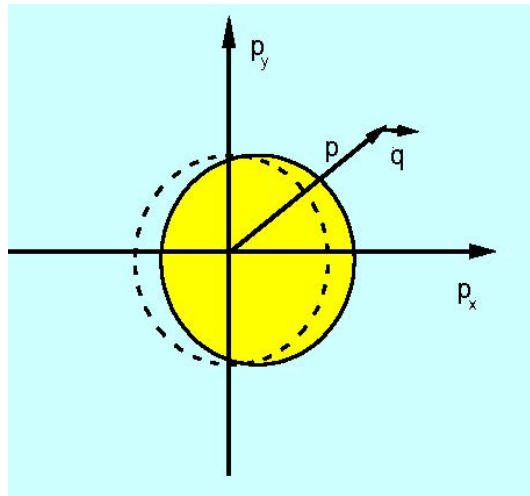


Рис. 18.6: Поток квазичастиц в Ферми системе.

Смещение ПФ будет устранено, если мы перейдем в систему, движущуюся со скоростью \mathbf{q}/m . В движущейся системе координат взаимодействие нашей частицы с избыточным импульсом и остальными частицами системы не меняется, а ее

кинетическая энергия изменится на величину:

$$\delta E = (\mathbf{p} + \mathbf{q})^2/2m - \mathbf{p}^2/2m = \mathbf{q}\mathbf{p}/m + \mathbf{q}^2/2m = \mathbf{q}\mathbf{j} + O(q^2) \quad (18.87)$$

Т.о.

$$j_\alpha = \frac{\partial E}{\partial q_\alpha}.$$

Здесь δE – разность энергий частицы в покоящейся системе координат (в которой импульс частицы равен \mathbf{p}) и в движущейся (с импульсом $\mathbf{p} + \mathbf{q}$). В соответствии с нашими рассуждениями, эта разность может быть найдена в терминах квази-частиц. С этой целью мы вначале увеличим импульс квазичастицы на \mathbf{q} (что даст вклад в энергию $\mathbf{q}\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon_p$, а потом сдвинем ферми-поверхность.

$$\begin{aligned} \delta E &= \mathbf{q}\nabla_{\mathbf{p}}\varepsilon_p + \sum_{\mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\delta n_{\mathbf{p}'} \\ \delta n_{\mathbf{p}'} &= -\mathbf{q}\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \\ \mathbf{j}_{\mathbf{p}} &= \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}| \cos \theta f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \left(\frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{p}'}} \right) \quad (18.88) \end{aligned}$$

Суммирование по \mathbf{p}' в (18.88) заменим интегрированием, имея в виду, что $(\partial n^0/\partial \varepsilon_p) = -\delta(\varepsilon_F - \varepsilon_p)$. Кроме того, при интегрировании по углам от $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ останется симметричный член с $l = 1$ пропорциональный $\cos \theta$. Интегрируя по углам с учетом $\mathbf{v}_F = \mathbf{p}_F/m^*$ получим снова то же самое что и (18.86)

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1^s}{3} \quad (18.89)$$

Как мы видели, эффективная масса квазичастиц изменена за счет того, что поток, который несет квазичастица, склады-

вается из двух частей: собственного потока и потока увлечения. Плотность потока частиц и плотность потока квазичастиц совпадают (в заряженных системах заряды частицы и квазичастицы одинаковы и одинаковы переносимые ими токи).

18.5.6 Спиновая восприимчивость

Поместим ферми-жидкость в постоянное и однородное магнитное поле H и вычислим парамагнитный спиновый момент. Частица со спином $s = \pm 1/2$ обладает энергией $-g\mu_B s H$, где g – фактор Ланде затравочных частиц, $\mu_B = e\hbar/2mc$ – магнетон Бора, s – проекция спина. Двум разным проекциям спина теперь соответствуют различные значения химического потенциала ($\mu \pm g\mu_B H/2$), что нехорошо, т.к. равновесие нарушается. Чтобы восстановить равенство химического потенциала двух подсистем частиц (с положительной и отрицательной проекциями спина на направление магнитного поля), ферми-поверхности изменяются: одна из них разбухает, а другая уменьшается в диаметре. Так как химический потенциал равен локальной энергии квазичастиц на ферми-поверхности, то равновесное распределение в присутствии магнитного поля имеет вид:

$$n_{ps}(H) = n^0(\tilde{\epsilon}_p - \mu - g\mu_B s H), \quad (18.90)$$

что может быть формально переписано для каждой из проекций спина, как распределение со сдвинутым значением химического потенциала:

$$n_{ps}(H) = n^0(\tilde{\epsilon}_p - \mu - \delta\mu), \quad (18.91)$$

Повторяя рассуждение, использованное при выводе (18.59), получим отклонение

$$\delta\tilde{n}_{ps} = -\delta\mu(\partial n^0/\partial\epsilon_p) = -g\mu_B s H(\partial n^0/\partial\epsilon_p). \quad (18.92)$$

Полная намагниченность равна

$$M = \sum_{p,s} g\mu_B s \delta n_{\mathbf{p},s}. \quad (18.93)$$

Следовательно, нам нужно перейти от $\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}s}$ к $\delta n_{\mathbf{p}s}$. Заметим, что для изотропной системы $\delta\tilde{n}_{\mathbf{p},s}$ изотропно в \mathbf{p} -пространстве и антисимметрично по спину. Возмущение электронного распределения может быть разложено по сферическим функциям (мы помним, что возмущение существует только вблизи ферми-поверхности):

$$\delta n_p = \sum_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \delta n_{l,m}. \quad (18.94)$$

Используя (18.35) получим:

$$\delta n_{\mathbf{p}s} = \frac{\delta\tilde{n}_{\mathbf{p}s}}{1 + F_0^a} = -\frac{g\mu_B s H}{1 + F_0^a} \frac{\partial n^0}{\partial \varepsilon_p}. \quad (18.95)$$

Теперь вычислим M . Положив $g = 2$ находим

$$M = \mu_B^2 \frac{\nu(0)}{1 + F_0^a} H. \quad (18.96)$$

Для спиновой восприимчивости получаем

$$\chi_P = \frac{M}{\Omega H} = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\mu_B^2}{1 + F_0^a} \quad (18.97)$$

Видно, что в выражении для спиновой восприимчивости появилось обменное взаимодействие F_0^a . Имея экспериментальные значения по теплоемкости или T -зависимости амплитуды квантовых осцилляций (т.е. эффективной массе) и восприимчивости, можно определить отдельно константу F_0^a . Ясно, что соотношение (18.97) имеет смысл пока

$$F_0^a > -1 \quad (18.98)$$

18.5.7 Энергия основного состояния. Численные результаты.

В рамках теории Ландау мы нашли перенормировки сжимаемости, термодинамической плотности состояний, теплоемкости, скорости 1го звука и магнитной восприимчивости при $T \rightarrow 0$ в терминах сферических гармоник взаимодействия $F_l^{s,a}$. Для того, чтобы найти эти гармоники в терминах параметров, контролируемых экспериментально - r_s, n - нужно использовать другие теории: разложение в ряд по теории возмущений, приближение случайных фаз (RPA), ренорм-группа, приближение Хартри, Хартри-Фока, DFT, квантовое Монте-Карло. Для экспериментаторов также важно изменение перенормированных параметров с температурой. все это невозможно рассмотреть в Лекциях ввиду огромного объема, но основные подходы и результаты будут рассмотрены в дальнейшем.

Корреляционная энергия

Корреляции во взаимном расположении электронов с параллельными спинами, описываются обменной энергией. Вклад этого типа корреляции в энергию системы можно учесть с помощью теории возмущения в её первом приближении (результат Хартри-Фока). Кроме того, существует корреляция электронов с противоположно направленными спинами вследствие кулоновского отталкивания между ними, она обуславливает свой вклад в энергию системы - т. н. корреляционная энергия. Этот квантовый эффект можно приписать существованию в системе “корреляционной дырки” (корреляционного разрежения).

Корреляционную энергию нельзя учесть в рамках обычной

теории возмущений: второе приближение для энергии электронного газа приводит к логарифмически расходящимся выражениям, т. к. влияние кулоновского взаимодействия вследствие его дальнего действия нельзя считать малым. Расходимость остаётся и в более высоких приближениях. Для вычисления второго и высших приближений для энергии электронного газа, т. е. для вычисления корреляционной энергии, необходимо пользоваться более сложной формой теории возмущений.

Корреляционная энергия электронного газа, согласно Вигнеру (E. Wigner, 1938), определяется формулой

$$E_c = E - \varepsilon_F - E_{ex}$$

где E_F - средняя кинетическая энергия электронного газа при $\mu = 0$, рассчитанная на один электрон в первом приближении теории возмущений:

$$\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m = \hbar^2 \pi (k_F^2 / 2\pi) / m = n \hbar^2 / m \pi \propto 1/r_s^2$$

В 3D металлах r_s лежит в диапазоне 1.8 - 5.6.

$$\varepsilon_F = \frac{3 (\hbar k_F)^2}{5 \cdot 2m} = \frac{2.21}{r_s^2} \text{Ry}$$

$$E_{ex} = \frac{3}{4\pi} e^2 k_F^2 = \frac{-0.916}{r_s} \text{Ry}$$

Для случая малой плотности электронного газа Вигнер принял, что электроны образуют в пространстве решётку, и получил следующее разложение для корреляционной энергии:

$$E_c = \frac{U_1}{r_s} + \frac{U_2}{r_s^{3/2}} + \frac{U_3}{r_s^2} + \dots$$

где $U_1 = 0.88 \text{Ry}$.

Для малых плотностей вычисления были проделаны Гелл-Маном, Нозьером, Пайнсом, Бомом в 1950х годах:

$$E_c = \frac{2}{\pi^2} (1 - \ln 2) \ln r_s + C + D r_s \ln r_s + E r_s + \dots$$

18.5.8 Энергия основного состояния для 2D систем

Свойства основного состояния двумерного электронного газа были изучены в различных приближениях, таких как прибли-

жение случайной фазы (RPA), суммирование лестничных диаграмм и т.д. несколькими авторами. В частности, первые вариационные расчеты методом Монте-Карло (VMC) были выполнены Сеперле (1978) для определения энергии коррелированных волновых функций. В 1989 году Танатар и Сеперли улучшили точность своих вычислений (VMC). Расчеты методом Монте-Карло (FN-GFMC) свойств основного состояния двумерного чистого электронного газа были проведены в работе [8] в диапазоне плотности $1 < r_s < 100$; к 2022г. Эта статья собрала около 800 цитирований! Расчеты [8] предсказывают вигнеровскую кристаллизацию при плотности $r_s = 37.5$. Из этих расчетов также следует, что электронная система находится в нормальном (парамагнитном) жидком состоянии ниже плотности перехода, однако полностью поляризованное состояние очень близко по энергии. Энергия основного состояния системы взаимодействующих электронов в жидкой фазе как функция параметра плотности r_s и степени поляризации ζ может быть записана в виде

$$E(r_s, \zeta) = E_{\text{HF}}(r_s, \zeta) + E_c(r_s, \zeta), \quad (18.99)$$

где энергия в приближении Хартри-Фока состоит из члена кинетической энергии и обменной энергии,

$$E_{\text{HF}}(r_s, \zeta) = \frac{1 + \zeta^2}{r_s^2} + \frac{4\sqrt{2}}{3\pi r_s} [(1 + \zeta)^{3/2} + (1 - \zeta)^{3/2}]. \quad (18.100)$$

Результаты вычислений корреляционной энергии были аппроксимированы

$$E_c(r_s, \zeta) = a_0 \frac{1 + a_1 x}{1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3}, \quad (18.101)$$

где $x = (r_s)^{1/2}$, параметры $a_i(\zeta)$ в этой аппроксимации Падэ определялись из подгонки к MC результатам. Эта форма

зависит от r_s как $\propto a + br_s$ в пределе $r_s \rightarrow 0$, а в пределе больших $r_s \rightarrow \infty$

$$E \propto \frac{a}{r_s} + \frac{b}{r_s^{3/2}} + \frac{c}{r_s^2} + \dots \quad (18.102)$$

Энергия в кристаллической фазе [7]

$$E(r_s) = \frac{c_1}{r_s} + \frac{c_{3/2}}{r_s^{3/2}} + \frac{c_2}{r_s^2} + \dots, \quad (18.103)$$

где гармонические коэффициенты были вычислены Bonsall и Maradudin в 1977г $c_1 \approx -2.21$, $c_{3/2} \approx 1.63$. Из аппроксимации результатов МС в широком диапазоне r_s , Tanatar и Ceperley нашли $c_{3/2} = 1.628$.

Из графика видно, что электронная система кристаллизуется при плотности $r_s = 37 \pm 5$, и этот переход происходит между нормальной жидкой фазой и кристаллом. Перехода от нормальной жидкой (парамагнитной) фазы к поляризованной жидкой (ферромагнитной) фазе нет, поскольку кристаллизация по Вигнеру происходит примерно при той же плотности. Обратите внимание, однако, что все фазы имеют приблизительно равные энергии при $r_s = 40$.

Bonsall и Maradudin [9] вычислили энергии основного состояния E идеального 2D электронного кристалла для 5 различных решеток Браве. Было обнаружено, что гексагональная решетка обладает наименьшей энергией, примерно на 0,6 % ниже, чем для квадратной решетки. Интересно, что для пиннингованного вигнеровского кристалла было показано, что квадратная решетка имеет наименьшую энергию, меньшую, чем у гексагональной.

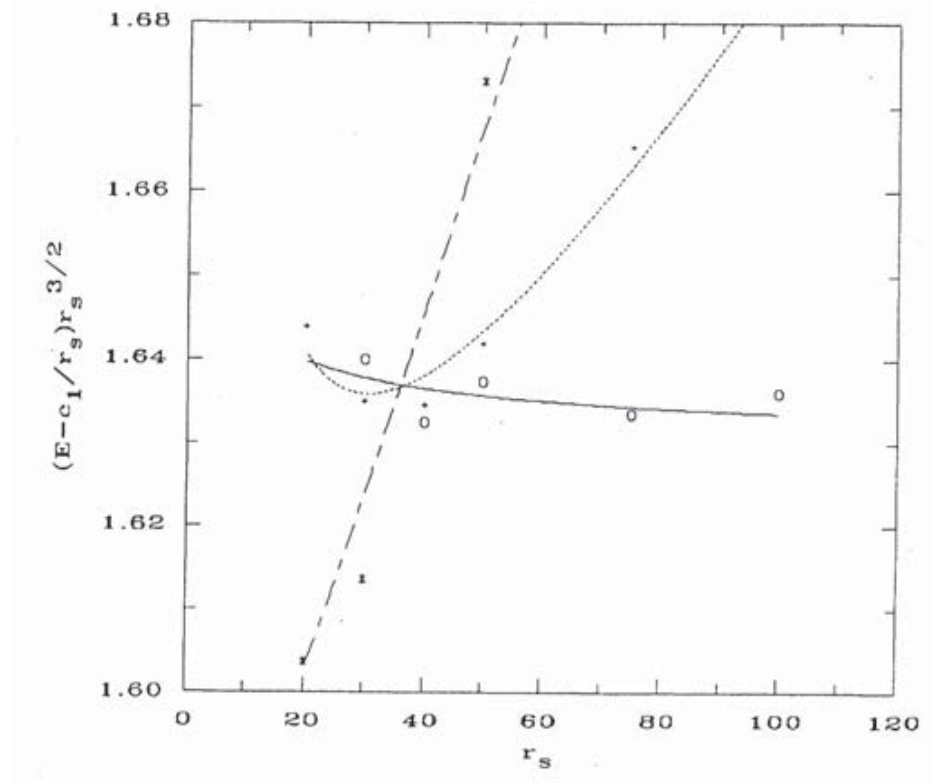


Рис. 18.7: Энергия основного состояния, $E(r_s, \zeta)$ электронного газа в нормальном (штрихи), в полностью спин-поляризованной жидкости (точки), и в кристаллической фазе (сплошная линия) в зависимости от r_s . c_1 - константа Маделунга. Результаты Монте-Карло (точки) с их ошибками: o, кристалл; * - нормальная жидкость; +- поляризованная жидкость. Кривые аппроксимируют точки согласно формулам приведенным выше 18.101, 18.103.

Литература

- [1] Д. Пайнз, Ф. Нозьер, Теория квантовых жидкостей, М., Мир, 1967
- [2] А.А. Абрикосов, Основы теории металлов, М., Наука, 1987
- [3] G.S. Uhrig, Correlated Fermionic Systems: Fermi Liquid and Luttinger Liquid, Tohoku University, Sendai, Japan (2004)
- [4] W. Kohn, J. Luttinger, Phys. Rev. Lett., **15**, 524 (1956)
- [5] Силин В.П. ЖЭТФ 33, 495 (1957).
- [6] И. Ф. Люксютов, А.Г. Наумовец, В.Л. Покровский, “Двумерные кристаллы”, Киев, Наукова Думка, 1988
- [7] D. Serperley, Phys. Rev. B 18, 3126 (1978).
- [8] V. Tanatar and D. M. Serperley, Phys. Rev. B**39**, 5005 (1989).
- [9] L. Bonsall and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B 15, 1959 (1977).