БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКАЯ КОНДЕНСАЦИЯ ВАКАНСИОНОВ

Г. А. ВАРДАНЯН

Квантовая природа неидеальных решеточных систем с большой амплитудой нулевых колебаний существенным образом сказывается на характере энергетического спектра [1, 2]. Относительно большие амплитуды нулевых колебаний приводят к конечному перекрытию волновых функций соседних частиц — появляются квазичастицы (дефектоны, вакансии, примесионы и т. д.), характеризующиеся своим квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$.

Вообще говоря, для детального исследования закона дисперсии квазичастиц необходимо знать вид потенциальных ям, в которых находятся атомы. Эффективная потенциальная яма отдельного атома не только не является параболой, но даже может иметь отрицательную кривизну в центре. Кривизна потенциала определяется самосогласованным образом, что и позволяет ввести понятие о фононах. Поляризация фононного спектра обуславливает существование вакансионных.

В большинстве случаев ширина энергетической зоны $\Delta\varepsilon$ вакансионных мала по сравнению с характерной энергией взаимодействия атомов в кристалле [3, 4]. Малость $\Delta\varepsilon$ обуславливает большую величину радиуса взаимодействия вакансионных R (так как $U(R) \sim \Delta\varepsilon$, то $R > a$).

Используя гамильтониан такой системы

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum U_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad (1)$$

запишем уравнение движения для оператора уничтожения вакансии

$$i \dot{\hat{a}}_{\mathbf{k}} = [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{j, p, q} \langle kj | U | pq \rangle \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_p \hat{a}_q. \quad (2)$$

Введем новые квазичастичные операторы $\hat{b}_{\mathbf{k}}$, которые при $\mathbf{k} = 0$ описывают возбуждения в конденсате,

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_0 \delta_{\mathbf{k}0}, \quad (3)$$

где n_0 — амплитуда конденсата (c -число, не зависящее от времени для однородной системы).

Тогда для оператора $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ имеем следующее уравнение движения:

$$\begin{aligned} i \dot{\hat{b}}_{\mathbf{k}} = & [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \hat{b}_{\mathbf{k}} - \mu n_0 \delta_{\mathbf{k}0} + \langle \mathbf{k}, 0 | U | 0, 0 \rangle n_0^3 + \\ & + \sum_{j, p, q} \langle \mathbf{k}, j | U | p, q \rangle \hat{b}_j^{\dagger} \hat{b}_p \hat{b}_q + n_0 \delta_{j0} \hat{b}_p \hat{b}_q + 2 n_0 \delta_p \hat{b}_j \hat{b}_q + \\ & + n_0^2 \delta_{p0} \delta_{q0} \hat{b}_j^{\dagger} + 2 n_0^2 \delta_{j0} \delta_{q0} \hat{b}_q. \end{aligned}$$

Линеаризуем это уравнение, заменяя каждую пару этих операторов через их среднее значение по большому каноническому ансамблю:

$$i \dot{b}_k = [-\mu + \langle 00|U|00\rangle n_0^2 + f_0 + g_0] n_0 \delta_{k0} + U_k \hat{b}_k + \Delta_k \hat{b}_{-k}^+, \quad (4)$$

где U_k — одночастичная энергия,

$$U_k = \varepsilon(k) - \mu + 2 \langle k0|U|0k\rangle n_0^2 + f_k, \quad (5)$$

$$f_k = 2 \sum_p \langle kp|U|pk\rangle \langle \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \rangle.$$

Двухчастичный потенциал Δ_k определяется так

$$\Delta_k = \langle k, -k|U|0, 0\rangle n_0^2 + g_k, \quad (6)$$

где первый член описывает переход пары частиц из конденсата в состояние k и $-k$, а второй член,

$$g_k = \sum_p \langle k, -k|U|p, -p\rangle \langle b_{-p} b_p \rangle, \quad (7)$$

описывает переход пары частиц из состояния с импульсом p и $-p$ и с амплитудой $\langle b_p b_{-p} \rangle$ в состояние k и $-k$.

Из уравнения (4) следует, что

$$[-\mu + \langle 00|U|00\rangle n_0^2 + f_0 + g_0] n_0 = 0, \quad h_0 \neq 0.$$

Следовательно, химический потенциал есть

$$\mu = \langle 00|U|00\rangle n_0^2 + f_0 + g_0. \quad (8)$$

Уравнение $\mu=0$ определяет температуру фазового перехода T_c .

Аналогично уравнению (4) для оператора рождения вакансион имеем

$$i \dot{b}_{-k}^+ = [-\mu + \langle 00|U|00\rangle n_0^2 + f_0 + g_0] n_0 \delta_{k0} + U_k \hat{b}_{-k}^+ + \Delta_k \hat{b}_k. \quad (9)$$

Таким образом, из (4) и (9) с учетом уравнения (8) имеем

$$\ddot{b}_k + \Gamma \dot{b}_k = 0, \quad (10)$$

$$\dot{b}_k(t) = b_k e^{-i\Gamma_k t},$$

где

$$\Gamma_k^2 = \Delta_k^2 - U_k^2. \quad (11)$$

При не слишком высоких давлениях длина волны вакансион в твердом гелии при всех температурах значительно превосходит межатомное расстояние, благодаря чему вакансионы находятся при не слишком высоких температурах вблизи дна зоны, где их спектр квадратичен по ε_k^0 , а скорость движения мала. В этом случае для больших k из выражения (11) получаем

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_k^0 + N_0 U(k),$$

что выглядит как спектр частиц.

Скорость звука в этом случае определяется соотношением

$$C = \left(\frac{N_0 U(0)}{m^*} \right)^{1/2}, \quad U(0) > 0,$$

где N_0 — число вакансион в основном состоянии, m^* — эффективная масса, связанная с шириной зоны, $\hbar/\sqrt{\Delta\varepsilon} \sim a\sqrt{M}$, a — межатомное расстояние.

Ереванский государственный
университет

Поступила 20.III.1976

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, И. М. Лифшиц. ЖЭТФ, 56, 2059 (1969).
2. И. М. Лифшиц. ДАН СССР, 58, 80 (1974).
3. А. Ф. Андреев, А. Э. Мейерович. ЖЭТФ, 67, 1559 (1974).
4. J. H. Hetherington. ФНТ, 1, 613 (1975).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, М., 1964.

ՎԱԿԱՆՍԻՈՆՆԵՐԻ ԲՈՉԵ-ԷՅՆՇՏԵՅՆՅԱՆ ԿՈՆԴԵՆՍԱՑԻԱՆ

Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Դիտարկված է բողե-վականսիոնների համակարգը բվանտային բյուրեղում: Ստացված են վականսիոնի շարժման հավասարումները, մածուցիկության գործակիցը դիտարկվող համակարգի նորմալ մասի համար: Կառուցված է շարժվող կոնդենսատով համակարգի էներգետիկ սպեկտրը:

THE BOZE—EINSTEIN CONDENSATION OF THE VACANCIONS

G. A. VARDANYAN

The possibility of the condensation of vacancies in the $k = p_0$ state in a quantum crystal is considered. The equation of motion of these quasiparticles is obtained.