

УДК 530.145

ФИЗИКА

Академик Н. М. Лифшиц, Г. А. Варданян

Квантовая теория неидеальных решеточных систем

(Представлено 2/XI 1973)

Дефекты обычно рассматривают классически как локализованные объекты, лишь изредка передвигающиеся из одного положения в другое. Ясно, однако, что при достаточно низких температурах, из-за эффекта квантового туннелирования дефекты (или примеси) превращаются в возбуждения, практически свободно движущиеся через кристалл. Согласно квантовой механике, в таком случае возможные состояния дефекта классифицируются по значениям квазиимпульса $\vec{k}$. С каждым типом дефекта связана, таким образом, ветвь возбуждений—дефектонов. На характер движения дефектонов существенным образом сказываются возможные столкновения их друг с другом, из-за наличия сильного отталкивания, характеризующее их непроницаемость в одном узле решеточного пространства:

$$U_{R,R_1} = \begin{cases} V & R_1 = R_2 \\ 0 & R_1 \neq R_2 \end{cases}$$

Поскольку этот потенциал взаимодействия удовлетворяет условию локальности (¹), то оказывается возможным сформулировать и точно решить задачу рассеяния квазичастиц, методом, развитым в теории о локальных вырожденных возмущениях (²⁻⁵).

В настоящей работе будет получено выражение для амплитуды рассеяния, которое обладает интересными особенностями из-за дискретности пространства (§ 1) и оно будет применено при вычислении энергетического спектра неидеального решеточного Бозе-газа дефектонов в (^{6,7}) (§ 2).

1. *Рассеяние частиц в дискретном пространстве.* Пусть две частицы с импульсами $\vec{k}_1$ и $\vec{k}_2$ и энергиями $\epsilon(\vec{k}_1)$ и $\epsilon(\vec{k}_2)$ рассеиваются через непроницаемый потенциал взаимодействия:

$$U_{R,R_1} = \begin{cases} V & R_1 = R_2 \\ 0 & R_1 \neq R_2 \end{cases} \quad (1)$$

где R_1 и R_2 — дискретные радиусы — векторы пространства.

Уравнение, описывающее такой процесс рассеяния, будет:

$$\sum_{R'} A_{R, -R'} \varphi(R', R_2) + \sum_{R'} A_{R' - R} \varphi(R_1, R') + V \varphi_{R, R_1} \varphi(R_1, R_2) = z \varphi(R_1, R_2). \quad (2)$$

Очевидно, что потенциал взаимодействия (1) удовлетворяет условию вырожденности ⁽²⁾, в результате чего после несложных вычислений, получим:

$$\varphi_{p, q, q'}(R_1, R_2) = \varphi_{p, q}^0(R_1, R_2) + \tau V \int \frac{\exp(i\vec{x} \cdot \vec{R}) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - z}, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{p, q}^0(R_1, R_2) &= \exp[ip(R_1 + R_2)] \exp(iqR); \quad R = R_2 - R_1 \\ p &= k_1 + k_2; \quad q = k_2 - k_1, \quad q' = q_2 - q_1; \\ z &= E + i0; \quad E = \varepsilon(p - q'/2) + \varepsilon(p + q'/2), \end{aligned} \quad (4)$$

а величина τ определяется из граничного условия на волновую функцию:

$$\varphi_{p, q, q'} = \frac{1}{1 + V \int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - z}} \quad (5)$$

следовательно, при $V \rightarrow \infty$

$$(\tau V)^{-1} = \int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - z}. \quad (6)$$

Окончательно для волновой функции имеем:

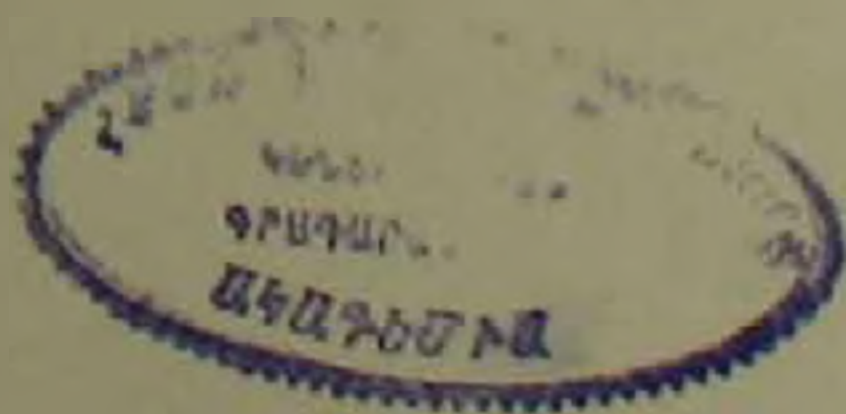
$$\begin{aligned} \varphi_{p, q, q'}(R_1, R_2) &= \varphi_{p, q}^0(R_1, R_2) + \left[\int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - z} \right]^{-1} \cdot \\ &\cdot \int \frac{\exp(i\vec{x} \cdot \vec{R}) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - z}. \end{aligned} \quad (7)$$

Рассмотрим поведение входящего в это выражение интеграла:

$$I_{q, E} = \int \frac{\exp(i\vec{x} \cdot \vec{R}) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - \varepsilon(p - q'/2) - \varepsilon(p + q'/2)} \quad (8)$$

при больших R ⁽³⁾.

Легко убедиться, что асимптотическое выражение для I будет:



$$I = \frac{\exp(i\mathbf{z}, \mathbf{R})}{R} \frac{1}{|\nabla \varepsilon(\mathbf{x}, -\mathbf{q}) + \nabla \varepsilon(\mathbf{x}, +\mathbf{q})| \sqrt{K}}, \quad (9)$$

где K — гаусова кривизна поверхности в точке $\mathbf{x}$, которая дается уравнениями:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{x}, -\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}, +\mathbf{q}) &= \varepsilon; \\ |n, |\nabla \varepsilon(\mathbf{x}, -\mathbf{q}) + \nabla \varepsilon(\mathbf{x}, +\mathbf{q})|| &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Из (7) и (9) асимптотическое поведение волновой функции будет:

$$\varphi(R_1, R_2) = e^{i\rho(R_1+R_2)} \left[e^{iqR} + \sum f_0(p, q, q') \frac{e^{i\mathbf{z}, \mathbf{R}}}{R} \right], \quad (11)$$

где

$$f_0(p, q, q') = \frac{\left| \int \frac{d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{q}'/2) - \varepsilon(\mathbf{p}+\mathbf{q}'/2)} \right|}{|\nabla \varepsilon(\mathbf{x}, -\mathbf{q}) + \nabla \varepsilon(\mathbf{x}, +\mathbf{q})| \sqrt{K}}, \quad (12)$$

является амплитудой рассеяния.

Теперь рассмотрим случай, когда одновременно с бесконечно большим отталкиванием существует и маленькое притяжение, т. е. потенциал взаимодействия имеет вид:

$$U_{R,R_1} = \begin{cases} V_{\infty} & R_1 = R_2 \\ -v_{R,R_1} & R_1 \neq R_2. \end{cases} \quad (13)$$

Уравнение (2) с потенциалом (13) решаем методом, развитым в работе (3), получаем:

$$\begin{aligned} \varphi_{p,q,q'}(R_1, R_2) &= \varphi_{p,q}^0(R_1, R_2) + \varepsilon V \int \frac{\exp(i\mathbf{z}, \mathbf{R}) d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - z} - \\ &- \int \frac{c(\mathbf{x}) d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - z} \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\varepsilon_{p,q,q'} = \frac{1}{1 + V \int \frac{d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - E}} - \frac{\int \frac{c(\mathbf{x}) d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - z}}{1 + V \int \frac{d^3x}{\varepsilon(\mathbf{x}-\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{x}+\mathbf{q}) - z}} \quad (15)$$

Следовательно:

$$(\varepsilon V_{\vec{x}, \vec{q}})^{-1} = \frac{1 - \int \frac{c(\vec{x}) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}}{\int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}} \quad (16)$$

Для асимптотической волновой функции в этом случае имеем:

$$\begin{aligned} \varphi(R_1, R_2) = e^{ip(R_1 + R_2)} & \left[e^{iqR} + \int \frac{1 - \int \frac{c(\vec{x}) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}}{\int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}} \times \right. \\ & \left. \times \sum \frac{\exp(i\vec{x}, R)}{R / |\nabla \varepsilon(\vec{x}, -\vec{q}) + \nabla \varepsilon(\vec{x}, +\vec{q})| \sqrt{K}} - \sum \frac{\exp(i\vec{x}, R) \cdot c(\vec{x},)}{R / |\nabla \varepsilon(\vec{x}, -\vec{q}) + \nabla \varepsilon(\vec{x}, +\vec{q})| \sqrt{K}} \right] \quad (17) \end{aligned}$$

Итак, амплитуда рассеяния в этом случае будет:

$$\begin{aligned} f.(\vec{p}, \vec{q}, \vec{q}') = & \frac{1 - \int \frac{c(\vec{x}, \vec{p} - \vec{q}'/2, \vec{p} + \vec{q}'/2) d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}}{\int \frac{d^3x}{\varepsilon(\vec{x} - \vec{q}) + \varepsilon(\vec{x} + \vec{q}) - E}} \cdot \frac{|\nabla \varepsilon(\vec{x}, -\vec{q}) + \nabla \varepsilon(\vec{x}, +\vec{q})| \sqrt{K}}{|\nabla \varepsilon(\vec{x}, -\vec{q}) + \nabla \varepsilon(\vec{x}, +\vec{q})| \sqrt{K}} \\ & - \frac{c(\vec{x}, \vec{p} - \vec{q}'/2, \vec{p} + \vec{q}'/2)}{|\nabla \varepsilon(\vec{x}, -\vec{q}) + \nabla \varepsilon(\vec{x}, +\vec{q})| \sqrt{K}} \quad (18) \end{aligned}$$

Отметим, что для малых потенциалов притяжения коэффициент c будет:

$$c(\vec{x}, \vec{p}, \vec{q}) = \sum_{R_1, R_2} \exp[i(\vec{x} + \vec{q}/2)(R_1 - R_2)] v_{R, R_1} \exp(iqR) \exp[ip(R_1 + R_2)]. \quad (19)$$

В дальнейшем будем использовать разные асимптотики функций (12) и (18).

2. Решеточный неидеальный Бозе газ. На характер энергетического спектра Бозе квазичастиц существенным образом сказываются их столкновения друг с другом, вследствие чего возникают: движущийся Бозе конденсат и над ним—элементарные возбуждения. Движение Бозе конденсата, скорость которого не выпадает, поскольку в данном случае не играет роли принцип относительности Галилея, приводит к тому, что в системе квазичастиц существуют две системы отсчета, связанные, соответственно с решеткой и конденсатом.

Построим энергетический спектр Бозе квазичастиц с движущимся со скоростью $\vec{v}$ конденсатом ($\vec{v}$ —соответствует квазимпульсу $\rho_0(\nabla \varepsilon(\vec{k})|_{\vec{k}=\vec{p}_0=\vec{v}})$).

Гамильтониан N квазичастиц, взаимодействующих через потенциал (13) имеет вид:

$$H = \sum_{R, R'} A_{R, R'} \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_{R'} + \sum_{R, R'} U_{R, R'} \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_{R'} \hat{a}_R \hat{a}_{R'}, \quad (20)$$

где $\hat{a}_R^\dagger$ и $\hat{a}_R$ — операторы рождения и уничтожения Бозе квазичастиц в точке R .

$$A_R = \sum_k \varepsilon(k) \exp(i k R), \quad (21)$$

а величина $U_{R, R'}$ дается соотношением:

$$U_{\frac{p-q}{2}, \frac{p+q}{2}} = \sum_{R, R'} U_{R, R'} \varphi(R, R'), \quad (22)$$

которое при малых концентрациях (изменение импульса при столкновении — малая величина) с учетом (17) будет:

$$U(p_0) = \left[1 - \frac{1}{2} \int \frac{c(x) d^3x}{\varepsilon(x - p_0) + \varepsilon(x + p_0) - 2\varepsilon(p_0)} \right] \left[\frac{1}{2} \int \frac{d^3x}{\varepsilon(x - p_0) + \varepsilon(x + p_0) - 2\varepsilon(p_0)} \right]^{-1} \quad (23)$$

Из (20) и (23) после соответствующих преобразований ⁽⁸⁾ окончательно имеем:

$$H = E_0 + \sum_p \varepsilon'(p) \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p, \quad (24)$$

где E_0 — энергия основного состояния:

$$E_0 = N_{p_0}^2 \frac{c^2(p_0)}{2} - U(p_0) N_{p_0} \left[\left(2 - \frac{1}{U(p_0)} \right) \varepsilon_0 \right] + \varepsilon_0; \quad \varepsilon_0 = \sum_k \varepsilon(k) \quad (25)$$

$\hat{b}_p^\dagger$ и $\hat{b}_p$ — новые операторы рождения и уничтожения Бозе квазичастиц, c — скорость звука:

$$c(p_0) = \sqrt{2U(p_0) N_{p_0} / v} \quad (26)$$

а $\varepsilon'(p, p_0)$ — новый закон дисперсии:

$$\varepsilon'(p, p_0) = \left\{ \frac{1}{2} |\varepsilon(p - p_0) + \varepsilon(p + p_0) - 2\varepsilon(p_0)|^2 + c^2(p_0) |\varepsilon(p - p_0) + \varepsilon(p + p_0) - 2\varepsilon(p_0)| \right\}^{1/2}. \quad (27)$$

Ոչ իդեալական ցանցային սիստեմների բնութային տեսությունը

Դիտարկված է դիսկրետ տարածության մեջ կամայական դիսպերսիոն օրենքով նկարագրված մասնիկների ցրումը վանդալական անվերջ մեծ լույսի լյուսենցիայի և թույլ ձգողականության առկայության դեպքում:

Ստացված է Բոզե մասնիկների էներգետիկ սպեկտրը:

ЛИТЕРАТУРА — ԴՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

- ¹ *И. М. Лифшиц, ЖЭТФ, 12, 156 (1942).* ² *И. М. Лифшиц, ЖЭТФ, 17, 1017 (1947).* ³ *И. М. Лифшиц, ЖЭТФ, 18, 293 (1948).* ⁴ *И. М. Лифшиц, Nuovo cimento suppl. 3, 716 (1956).* ⁵ *И. М. Лифшиц, УМН, 7, 170 (1952).* ⁶ *А. Ф. Андреев, И. М. Лифшиц, ЖЭТФ, 56, 2057 (1969).* ⁷ *R. A. Guyer, Journal of Low Temp. Phys. 8, 427 (1972).* ⁸ *Л. Д. Ландау, И. М. Лифшиц, Статистическая физика, М, 1964.*