

ФЕРМИ-КОНДЕНСАТНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В РАЗРЕЖЕННОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

В.А.Ходель, В.Р.Шагинян¹⁾

*Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова
123182, Москва*

*1) Институт ядерной физики им. Б.П.Константина РАН
188350, Гатчина, Ленинградская обл.*

Поступила в редакцию 17 декабря 1991 г.

Приведены аргументы в пользу того, что в электронном газе в районе $r_s \approx 10 - 15$ происходит фазовый переход, связанный с образованием фермионного конденсата.

Со времени работ Ландау^{1,2} в теории ферми-жидкости широко используется тот факт, что энергия E_0 основного состояния ферми-системы является функционалом ее квазичастичного распределения $n(p)$. В однородных системах со слабым взаимодействием выбор распределения - фермиевской ступеньки $n_F(p) = \theta(p - p_F)$ - диктуется принципом Паули. Она устойчива, пока для любой вариации $\delta n(p)$ выполняется условие:

$$\delta E_0 = \Sigma(\epsilon(p; n_F(p)) - \mu)\delta n(p) > 0, \quad (1)$$

$(\epsilon(p))$ - энергия квазичастицы, $\mu = \epsilon(p_f)$). Если же при изменении константы связи g или плотности системы функция $s(p) = 2M \frac{\epsilon(p) - \epsilon(p_F)}{p^2 - p_F^2}$ меняет знак в какой-то точке p_c , то распределение $n_F(p)$ перестраивается^{3,4}. Отметим, что если $s(p)$, впервые обращается в нуль при $p = p_F$, то т.к. $s(p_F) = M/p_F (\frac{\partial \epsilon}{\partial p})_{p_F} = M/M^*$, в точке перехода: $M^* = \infty$ и $(\frac{\partial s}{\partial p})_{p_F} = 0$. Традиционно считается, что новое квазичастичное распределение $n(p)$ - тоже ферми-сфера, но в пространстве новых одночастичных энергий $\tilde{\epsilon}$: $\tilde{n}_F(p) = \theta(\tilde{\epsilon}(p; \tilde{n}_F(p)) - \mu)$. Но существует и иная возможность, рассматривавшаяся в^{3,4}, а затем и в⁵. Суть ее в терминах современного обществоведения сводится к следующему: навязываемое принципом Паули тоталитарное решение $\tilde{n}_F(p)$ не дает минимума E_0 за точкой фазового перехода. Если $E_0(n_F)$ понижается при появлении хотя бы одной пары частица-дырка, то новое квазичастичное распределение $n(p)$ находится путем демократических выборов из условия минимума:

$$\mu = \delta E / \delta n(p), \quad p_i < p < p_f. \quad (2)$$

Вне интервала (p_i, p_f) решение остается старым: $n(p) = n_F(p)$. При этом границы области нового распределения сами определяются из (2). В^{3,4} это было подтверждено на ряде модельных примеров. Этот фазовый переход назван авторами фермионной конденсацией, ибо реализация (2) означает появление плато в спектре одночастичных возбуждений и резкого пика в плотности состояний системы, что характерно для бозе-жидкости ниже точки конденсатного перехода.

В каких системах и при каких условиях возможен этот фазовый переход? Это можно установить, исследуя известное тождество теории¹:

$$\frac{\partial \epsilon(p)}{\partial p} = \frac{p}{M} + \int \mathcal{F}(p, p_1, \vartheta) \frac{\partial n(p_1)}{\partial p_1} p_1^2 dp_1 \cos \vartheta d\Omega / 4\pi^3. \quad (3)$$

Отсюда, в частности, видно, что $s(p = p_F)$ меняет знак там, где первая гармоника $b_1^0 = \mathcal{F}_1 \frac{p_F M}{\pi^2}$ положительна и равна 3 (здесь стоит M , а не M^*). Столь большое положительное значение b_1^0 возможно лишь в системах с сильным эффективным отталкиванием: в плотных средах с отталкивательным кором или в кулоновском газе низкой плотности. Отметим, что в жидким ${}^3\text{He}$, одной из наиболее плотных ферми-систем, $b_1^0 \approx 2$.

В этой работе в рамках подхода, развитого в ⁶⁻⁹ будет вычислен квазичастичный спектр $\epsilon(p; n_F)$ однородного электронного газа в модели Жоле и показано, что ферми-конденсатный фазовый переход в нем происходит в районе $a_s \sim 2$ ($a = e^2/v_F^2$). Энергия $\epsilon(p; n_F) = \delta E_0 / \delta p^2(p)$ находится в результате вариации энергии $E_0 = \tau + W$, где τ - кинетическая энергия ферми-газа, $(\delta \tau / \delta n(\vec{p})) = \epsilon_p^0 = p^2/2M$, а энергия взаимодействия W выражается через функцию линейного отклика системы $\chi(q)$ формулой ¹⁰:

$$W = \frac{1}{2} \rho^2 V(0) - \frac{1}{2} \int \int \int V(q) (\chi(q) + 2\pi \delta(q_0)) d\tau dq_0 dg_1 / 2\pi g_1, \quad (4)$$

Здесь $d\tau = d^3p / (2\pi)^3$; $q = (\vec{q}, q_0)$. $V(\vec{q})$ - потенциал взаимодействия частиц. Интеграл по q_0 берется вдоль мнимой оси от $-i\infty$ до $+i\infty$. Функции отклика: точная $\chi(q)$ и $\chi_0(q)$ невзаимодействующих частиц - связаны через эффективный потенциал взаимодействия частиц $R(q) = \delta^3 W / \delta \rho(a) \delta \rho(-q)$ формулой:

$$\chi(q) = \chi_0(q) \phi(q) = \chi_0(q) (1 - R(q) \chi_0(q))^{-1}. \quad (5)$$

В теории Ландау постулируется, что минимум E_0 всегда достигается в угловой точке n_F функционального пространства $[n]$ и тогда

$$\chi_0(q) = 2 \int \frac{n(\vec{p}) - n(\vec{p} + \vec{q}) d^4 p}{\epsilon_{\vec{p}}^0 - \epsilon_{\vec{p} + \vec{q}}^0 + \omega(2\pi)^4 i}, \quad (6)$$

где $n(p) = \theta(p - p_F)$. Из определения R вместе с (4) и (5) получается замкнутое функциональное уравнение для R :

$$R(k) = V(k) - \frac{1 \delta^2}{2 \delta \rho(\vec{k}) \delta \rho(-\vec{k})} \int \int \int V(q) \chi(q) d\tau dq_0 dg_1 / 2\pi g_1. \quad (7)$$

Его можно решать, используя в качестве нулевого локального приближение ⁶⁻⁹, в котором производная $\delta F(k) / \delta \rho(q)$ оператора F заменяется частной $\partial F(k - q) / \partial \rho$. Точность этого приближения достаточно велика: монте-карловские результаты расчета энергий модельных систем воспроизводятся им в пределах в 3 - 5%.

Вернемся к расчету спектра $\epsilon(p, n_F(p))$. Варьируя (4), находим:

$$\epsilon(p) = \epsilon_{\vec{p}}^0 - \frac{1}{2} \int \int \int V(\vec{q}) \left(\phi(q) \frac{\delta \chi_0(q)}{\delta n(\vec{p})} \phi(q) + \chi(q) \frac{\delta R(q)}{\delta n(\vec{p})} \chi(q) \right) d\tau dq_0 dg_1 / 2\pi g_1. \quad (8)$$

Для $M(\vec{p}, k) = \delta R(k) / \delta n(\vec{p}) = \delta^3 W / \delta \rho(k) \delta \rho(-k) \delta n(\vec{p})$ из (7) получается функциональное уравнение ^{8,9}, которое тоже можно решать на основе локального приближения: $M^0(\vec{p}, k) = \partial^2 \epsilon(\vec{p} - \vec{k}) / \partial \rho^2$, совпадающего при $k = \infty$ с точной формулой: $M(\vec{p}, 0) = \partial^2 \epsilon(\vec{p}) / \partial \rho^2$. Прямой расчет $\delta \chi_0(q) / \delta n(\vec{p})$ дает ¹¹:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \chi_0(q)}{\partial n(\vec{p})} = (1 - n_F(\vec{p} - \vec{q})) \theta(\omega_{pq}) + n_F(\vec{p} - \vec{q}) \theta(-\omega_{pq}) + \frac{\epsilon_{\vec{p}}^0 - \epsilon_{\vec{p} - \vec{q}}^0}{(\epsilon_{\vec{p}}^0 - \epsilon_{\vec{p} - \vec{q}}^0)^2 - q_0^2}. \quad (9)$$

Здесь $\omega_{pq} = \epsilon_p^0 - \epsilon_{p-q}^0$. Как показывают численные расчеты ⁶, при $r_s < 20$ амплитуда $R(g, q = 2p_F t)$ оказывается линейной функцией g :

$$R(t, g) = \pi g \left(1/t^2 - \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{t} \ln \left| \frac{1+t}{1-t} \right| + t^2 \ln(1-t^{-2}) \right) \right), \quad (10)$$

что позволяет отынтегрировать часть членов (8) по g аналитически. Воспользовавшись результатами работы ¹¹ перепишем теперь (8) так

$$\epsilon(p) = \epsilon_p^0 + \epsilon_{RPA}^{(1)}(p) + \epsilon_{RPA}^{(2)}(p) + \epsilon_{RPA}^{(3)}(p) + \delta\epsilon_{corr}(p), \quad (11)$$

где $\delta\epsilon_{corr}(p)$ дается последним слагаемым (8), а

$$\begin{aligned} \epsilon_{RPA}^{(1)}(p) &= - \int_{1 < p} V(\vec{p} - \vec{l}) d\tau_l \\ \epsilon_{RPA}^{(2)}(p) &= - \int_{1 > p} V(\vec{p} - \vec{l}) \phi(\vec{p} - \vec{l}, \omega_{pl}) n_F(\vec{l}) d\tau_1 + \int_{1 < p} V(\vec{p} - \vec{l}) \phi(\vec{p} - \vec{l}, \omega_{pl}) (1 - n_F(\vec{l})) d\tau_l \\ \epsilon_{RPA}^{(3)}(p) &= - \int \int \int V(\vec{q}) (\phi(q) - 1) \frac{\epsilon_p^0 - \epsilon_{p-q}^0}{(\epsilon_p^0 - \epsilon_{p-q}^0)^2 + w^2} d\tau d\omega / 2\pi \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $w = iq_0$. Единственное отличие (12) от формул Гелл - Манна - Галицкого ^{11,12} в том, что эффективный потенциал R , входящий в ϕ , помимо V содержит и обменный вклад (см. (10)).

Можно оценить α_c , почти не прибегая к громоздким машинным расчетам, если записать $\chi_0 = p_F M \tilde{\chi}_0 / \pi^2$, а для $\tilde{\chi}_0$ использовать интерполяционную формулу $\tilde{\chi}_0(z, t) \simeq (1 + 3z^2 + 3t^2)^{-1}$, где $z = wM/q_F$. Ее отличие от точной $\tilde{\chi}_0$ сосредоточено в районе $z \simeq t \leq 1$ и составляет не более 25 - 30%. Мы увидим, что $\alpha_c \simeq 2$, а при таких α вклад $\delta\epsilon_{corr}$, оцененный в рамках локального приближения, не превышает 10 - 15%. Расчет остальных слагаемых (12) показывает, что с ростом α спектр $\epsilon(p)$ деформируется таким образом, что $s(p)$ впервые меняет знак у поверхности Ферми. Из (12) следует, что

$$s^{(3)}(p_F) = -\frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left(\frac{t+1}{(t+1)^2 + z^2} + \frac{t+1}{(t-1)^2 + z^2} - \frac{1}{2} \ln \frac{(t+1)^2 + z^2}{(t-1)^2 + z^2} \right) (\phi - 1) dt dz.$$

После подстановки сюда ϕ и χ_0 и аналитического интегрирования по z остается численно взять однократный интеграл. В итоге находим:

$$\begin{aligned} s^{(1)}(p_F, \alpha) &= -\alpha \\ s^{(2)}(p_F, \alpha) &= \alpha \int_0^1 \frac{(1-2t^2)}{t} \phi(t, 0) dt \\ s^{(3)}(p_F, \alpha) &= -\frac{\alpha}{3} \int \left(\ln \frac{(t+1) + (t^2 + 1/3 + f/3)^{1/2}}{|t-1| + (t^2 + 1/3 + f/3)^{1/2}} \right) - \frac{1}{t+1 + (t^2 + 1/3 + f/3)^{1/2}} + \\ &+ \frac{\text{sgn}(1-t)}{|t-1| + (t^2 + 1/3 + f/3)^{1/2}} \frac{f(t) dt}{(t^2 + 1/3 + f/3)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Вычисления показывают, что член $s^{(3)}$, как и $s^{(1)}$, растет с α почти линейно, а $s^{(2)}$ уже при $\alpha \simeq 1$ выбывает из игры. Мы получаем $s(p_F, 1) = 0,4$, $s(p_F, 2) = -0,001$, $s(p_F, 3) = -0,2$, т.е. $s(p_F, \alpha)$ меняет знак при $\alpha_c = 2$ - в районе $r_s \simeq 12$.

С учетом погрешностей расчета это значение может измениться процентов на 30. Следует также иметь ввиду, что и величина $s(0, \alpha)$ тоже быстро падает с ростом α . Поэтому нельзя исключить того, что за точкой перехода может подвергнуться перестройке и длинноволновая часть распределения $n_F(p)$.

Как описывать систему за точкой фазового перехода? Почти все написанные выше формулы нуждаются теперь в уточнении из-за многократного вырождения одночастичных уровней конденсата. Фактически, как и в теории бозе-жидкости¹⁵, мы имеем дело с двумя подсистемами: одна из которых конденсат - вырождена. Когда в канале частица-частица доминирует эффективное притяжение, волновая функция конденсата имеет простую структуру, и задача решается известными методами теории сверхпроводимости³. Но если когерентности в парных корреляциях нет, ситуация оказывается намного сложнее. Тогда обобщая теорему Хоенберга - Кона можно показать, что за точкой перехода E_0 становится функционалом двух плотностей: обычной ρ и конденсатной $k = \sum n_\lambda \varphi_\lambda(r) \cdot \varphi_\lambda^*(r)$, причем числа заполнения n_λ находятся из условия минимума (2).

Формула (4) применима теперь только для вклада надконденсатных частиц, для учета вклада конденсатных нужно использовать методы теории вырожденных систем, разработанные в ядерной физике. Вырождение снижается за счет корреляционных эффектов, что ведет к уширению δ -образного пика в плотности состояний системы. Эти корреляционные вклады, вообще говоря, различны для конденсатных и надконденсатных частиц, и поэтому в спектре одночастичных возбуждений появляется щель. Более подробно эти вопросы будут рассмотрены в отдельной работе. Здесь мы только отметим, что полигоном для изучения рассматриваемых явлений могли бы стать электроны на поверхности жидкого гелия, плотность которых можно менять в довольно широких пределах.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность Б.И.Барцу, В.Г.Ваксу, А.М.Дюгаеву, Н.Е.Зейну, Н.В.Прокофьеву и С.В.Толоконникову за плодотворное обсуждение работы. Авторы благодарны также проф. Ф.Нозьеzu за присылку препринта своей работы до ее опубликования.

-
1. Л.Д.Ландау, ЖЭТФ 30, 1058. (1956).
 2. Л.Д.Ландау, ЖЭТФ 32, 97. (1958).
 3. В.А.Ходель, В.Р.Шагинян, Письма в ЖЭТФ, 51, 488. (1989).
 4. V.A.Khodel and V.R.Shaginyan, Preprint IAE-5261/9, 1990.
 5. P.Nozieres, Preprint.
 6. V.R.Shaginyan, Sol. St. Comm. 55, 9 (1985).
 7. V.A.Khodel and V.R.Shaginyan, Nucl. Phys. A, 500, 242. (1989).
 8. В.А.Ходель, В.Р.Шагинян, ЯФ 49, 52 (1989)
 9. В.А.Ходель, В.Р.Шагинян, ЭЧАЯ 22, 436 (1991).
 10. Д.Пайнс, Ф.Нозьеz, Теория квантовых жидкостей, М.: Мир, 1967.
 11. В.М.Галицкий, Избранные труды, М.: Наука, 1983, с.134.
 12. M.Gell-Mann, Phys. Rev. 106, 369 (1957).
 13. D.Seperley, G.V.Chester and M.H.Kalos, Phys. Rev. B, 16, 3081. (1981).
 14. С.А.Артамонов, С.Г.Оглоблин, В.Р.Шагинян, ЯФ 46, 1651. (1987).
 15. С.Т.Белев, ЖЭТФ 34, 417 (1958).