

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ ФЕРМИ-СИСТЕМ

М.В.Зверев, В.А.Ходель, М.Балдо⁺

Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия

⁺ *Istituto Nazionale di Fisica Nucleare*
95129 Catania, Italy

Поступила в редакцию 19 июня 2000 г.

Анализируются фазовые переходы в однородных ферми-системах с отталкивательными силами между частицами, обусловленные перестройкой квазичастичного заполнения $n(p)$. Найдено, что в переменных: плотность ρ , безразмерная константа связи η , фазовая диаграмма сильно коррелированной ферми-системы для довольно широкого класса взаимодействий напоминает слоеный пирог. Его верхняя часть "начинена" фермионным конденсатом, нижняя – нормальной ферми-жидкостью. Они отделены друг от друга узкой прослойкой – фазой Лифшица, характеризуемой многосвязной поверхностью Ферми.

PACS: 71.27.+a

Перестройка одночастичных степеней свободы при температуре $T = 0$ в сильно коррелированных ферми-системах в рамках подхода Ландау, трактующего энергию системы E как функционал квазичастичного распределения $n(p)$, изучается много лет [1–3]. Сейчас уже ясно, что привычное нам ландауское основное состояние однородной ферми-жидкости с квазичастичным заполнением $n_F(p) = \theta(p_F - p)$ сохраняется лишь до тех пор, пока константа взаимодействия g (мы в этой статье рассматриваем лишь отталкивательные силы) не превысит порогового значения g_c , за которым нарушается необходимое условие его устойчивости

$$\delta E(n(p)) = \int \xi(p) \delta n(p) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} > 0, \quad (1)$$

требующее положительности изменения полной энергии E при любой допустимой вариации распределения n_F . Здесь $\xi(p)$ – энергия квазичастицы, отсчитанная от химического потенциала μ .

Вначале речь шла о перестройке сферы Ферми с появлением так называемых пузырьков Лифшица – "айсбергов" (областей в импульсном пространстве с квазичастичным заполнением $n(p) = 1$), отделенных от "материка" $n(p) = 1$ и друг от друга узкими "проливами", в которых $n(p) = 0$. А несколько лет тому назад в [4–6] были найдены нетривиальные, гладкие у поверхности Ферми решения вариационного уравнения

$$\delta F(n(p))/\delta n(p) = 0, \quad p_i < p < p_f, \quad (2)$$

где $F = E - \mu N$. Поскольку $\delta F/\delta n(p)$ есть нечто иное как $\xi(p)$, это уравнение навязывает отсутствие дисперсии в спектре одночастичных возбуждений в интервале $[p_i, p_f]$ у поверхности Ферми. Совокупность квазичастиц с импульсами в этом интервале называется фермионным конденсатом (ФК). Величины p_i, p_f , которые задают его границы, сами определяются вариационным условием (2). Что-то похожее на ФК

действительно наблюдается в спектрах сильно коррелированных электронных систем экзотических сверхпроводников [7], и это стимулирует интерес к фазовой диаграмме сильно коррелированных систем. В данной статье мы анализируем общие свойства этой диаграммы в переменных: плотность ρ , безразмерная константа связи $\eta = g/g_c$. Эти переменные удобны тем, что в них нормальная ферми-жидкость заполняет полосу $0 < \eta < 1$. Цель статьи – выяснить, какую часть квадранта ($\rho > 0, \eta > 1$) оккупирует фаза Лифшица с многосвязной поверхностью Ферми, а где “правит бал” ФК.

Начнем с того, что реальный функционал энергии $E(n(\mathbf{p}))$ в сильно коррелированных системах устроен весьма сложно и вряд ли может быть найден точно. Поэтому для анализа их свойств во многих подходах, например в методе Гинзбурга – Ландау, используются эффективные функционалы. Такой подход главенствует и в проблеме фермионной конденсации. Как правило, исследуются функционалы вида

$$E(n(\mathbf{p})) = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 n(\mathbf{p}) + \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} V(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) n(\mathbf{p}_1) n(\mathbf{p}_2), \quad (3)$$

в которых первый член есть, как обычно, кинетическая энергия невзаимодействующих частиц, а $\varepsilon_{\mathbf{p}}^0 = p^2/2M$, где M – масса частицы, а второе слагаемое с положительной эффективной константой связи g фактически имитирует сумму фоковского и корреляционного вкладов в полную энергию системы. Тогда уравнение минимума (2) приобретает вид

$$\phi(p) = g \int V(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) n(\mathbf{p}_1) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}, \quad p_i < p < p_f, \quad (4)$$

где $\phi(p) = \mu - \varepsilon_p^0$. Заметим, что если p рассматривать как координату, а $n(p)$ – как плотность ρ , то (4) становится уравнением равновесия системы частиц с потенциалом взаимодействия $V(r)$ во внешнем электрическом (или гравитационном) поле.

Уравнение (4), интегральное уравнение Фредгольма первого рода, представляет собой пример обратной задачи, встречающейся в разных областях физики. Важная особенность многих обратных задач – присутствие дополнительных ограничений. Так в проблемах равновесия нас интересуют решения (4), подчиняющиеся требованию неотрицательности в области своего определения. А в задаче о фермионной конденсации добавляется еще и требование $n(p) \leq 1$. В этих условиях к решению (4) должны быть добавлены граничные “точки” n_B (в нашем случае пузырьковые решения), обеспечивающие локальный минимум $E(n)$ на границах функционального пространства.

На пути решения любой обратной задачи есть “подводный камень”, борьбе с которым посвящены десятки обзорных статей и книг (см., например, [8–10]). Дело в том, что при естественном требовании непрерывности ядра V и его частной производной $\partial V/\partial p$ (только такие потенциалы мы будем рассматривать) решение уравнения (4) оказывается неустойчивым по отношению к малым возмущениям ([9], стр.12). Эта неустойчивость, из-за которой обратные задачи получили название некорректных, проявляется уже при попытке решить (4) приближенно, построив обратную матрицу V^{-1} на дискретной решетке. С уменьшением шага решетки в решении быстро нарастают “шумы”, и в итоге оно хаотически осциллирует, кардинально меняясь даже

при малой вариации шага или любых входных параметров. Подобного рода проблемы возникают и тогда, когда решение ищется на определенном классе полиномов. С ростом их числа амплитуда осцилляций тоже растет.

Однако подобная неустойчивость, никак, кстати, не связанная с принципом Паули, не дает оснований “похоронить” уравнение (4), а с ним вместе и фермионную конденсацию, и объявить, как это сделано в [11], что для аналитических V при $\eta > 1$ существует лишь одна фаза – пузырьковая. Во-первых, если игнорировать принцип Паули, то никаких пузырьковых решений проблемы минимума (3) просто не существует, а гладкие (то есть ФК) есть. Во-вторых, мы ведь ищем минимум функционала энергии (3), и даже если в строгом классическом смысле решения у (4) нет, нередко можно найти гладкие функции $0 < n_0(p) < 1$, которые, будучи подставлены в правую часть (4), хотя и воспроизводят левую приближенно, но энергия $E(n_0)$, вычисленная для этих функций, оказывается ниже энергии $E(n_B)$ любого пузырькового решения. Ситуация здесь та же, что и с непрерывной на отрезке $[-1, 1]$ и всюду, кроме точки $x = 0$, положительной функцией $f(x) = x^2(2 + \sin(1/x^2))$. Решения уравнения минимума $f'(x) = 0$ не существует в точке $x = 0$, но минимум $f(x)$ лежит, тем не менее, в начале координат. Таким образом, даже в простой задаче с одной переменной не стоит “молиться” на уравнение минимума – иногда к цели ведет прямое сравнение значений исследуемой функции в “подозрительных” точках.

Что касается минимума функционалов, то тут необходимость сравнивать сами энергии разных фаз еще более актуальна. Такое сравнение, в частности, показывает, что при малых $(g - g_c)$ (то есть в области, примыкающей к точке неустойчивости нормальной ферми-жидкости) минимум (3) достигается чаще всего на однопузырьковых решениях, причем с ростом $\eta = g/g_c$ число пузырьков растет. Типичный пример – система с модельным взаимодействием $V(q) = g/(q^2 + \kappa^2)$. Критическая константа g_B , при которой рождается первый пузырек, вычисляется из обращения групповой скорости v_F в нуль или, что то же самое, из обращения эффективной массы M^* в бесконечность. Стандартная формула для M^* [12] дает: $\alpha_B = g_c M / (4\pi^2 p_F) = 1 / \ln(p_F / \kappa)$. По мере увеличения η каждый новый пузырек рождается при прохождении критического значения $\eta_c^{(n)}$, при котором нарушается необходимое условие устойчивости решения с данным числом n пузырьков. Так, для безразмерного параметра $a = \kappa / p_F = 0.07$ в [13] найдено: $\eta^{(1)} \simeq 1.09$, $\eta^{(2)} \simeq 1.16$, $\eta^{(3)} \simeq 1.2$.

А вот в системе с потенциалом взаимодействия $V(q) = g/\sqrt{q^2 + \kappa^2}$ ситуация иная: однопузырьковое решение, которое можно найти, минимизируя (3) с учетом сохранения числа частиц, как это сделано в [11], не обеспечивает минимума энергии даже тогда, когда превышение η над единицей совсем мало. Действительно, используем в качестве отправной точки известное ферми-конденсатное решение, существующее для $\kappa = 0$ при $\eta > 1$ [6]:

$$n_{FC}(p) = \nu_0 \theta(p_f - p), \quad (5)$$

где $p_F = \xi^{1/3} p_{FC}$, $\nu_0 = 1/\xi$, а $\xi = Mg/(6\pi^2)$. Энергия ФК

$$\frac{E_{FC}}{N} = \frac{9}{10} \frac{p_F^2}{M} \xi^{2/3} \quad (6)$$

лежит ниже и энергии нормальной ферми-жидкости:

$$\frac{E_n}{N} = \frac{3}{10} \frac{p_F^2}{M} (1 + 2\xi), \quad (7)$$

и энергии решения с пузырьком:

$$\frac{E_B}{N} = \frac{3}{10Mp_F^3} (1 + 2\xi)(p_1^5 - p_2^5 + p_3^5) - \frac{3\xi}{2Mp_F^3} (p_2^3 - p_1^3)(p_3^2 - p_2^2), \quad (8)$$

где p_1, p_2, p_3 – границы пузырькового решения. Абсолютная величина выигрыша в энергии, имеющая порядок $10^{-4}E_n$, невелика. Однако для проблемы гораздо важнее относительное расщепление $r_0 = |(E_B - E_{FC})/(E_n - E_{FC})|$. Оно имеет совсем другой порядок величины. Так, для $\eta = 1.05$ расчет дает

$$p_1/p_F = 0.636, \quad p_2/p_F = 0.657, \quad p_3/p_F = 1.009, \quad r_0 = 0.22. \quad (9)$$

Этот двадцатидвухпроцентный зазор не ликвидируется и при ненулевых значениях параметра $\kappa < \kappa_c$, когда все производные $\partial^n V / \partial p^n$ становятся конечными. Действительно,

$$\frac{\partial E}{\partial \kappa} \simeq -\frac{g\kappa}{2} \iint \frac{d^3p d^3p_1}{(2\pi)^6} \frac{n(p) n(p_1)}{((p-p_1)^2 + \kappa^2)^{3/2}}. \quad (10)$$

При получении этой формулы мы не дифференцировали положение границ $p_i(\alpha)$ пузырька или ФК, ибо этот вклад, будучи пропорционален разности $(\varepsilon(p_i) - \mu)$, обращается в нуль.

При малых κ старший член (10) может быть найден интегрированием по частям – вначале по углу между \mathbf{p} и \mathbf{p}' , что дает

$$\frac{\partial E}{\partial \kappa} \sim -g\kappa \iint \frac{p dp p_1 dp_1 n(p) n(p_1)}{\sqrt{(p-p_1)^2 + \kappa^2}},$$

а затем по разности $(p-p_1)$. В итоге мы получаем $r(\kappa) = r_0 - \lambda\kappa^2 \ln(1/\kappa)$, где

$$\lambda \sim \int \left(n_B^2(p) - n_{FC}^2(p) \right) p^2 dp. \quad (11)$$

Поскольку $\lambda \sim (1 - \nu_0) \sim (\eta - 1)$, то существует значительная область κ , в которой решение с $n(p) \neq 0, 1$ лежит по энергии ниже однопузырькового. Этот качественный вывод согласуется с результатами прямого расчета, который для ненулевых значений κ , как и для $\kappa = 0$, может быть проделан аналитически. Мы не будем приводить здесь громоздких формул. Скажем лишь, что для безразмерной константы $\eta = 1.05$ однопузырьковое решение неустойчиво вплоть до $\kappa \sim 0.3p_F$. Более того, до $\kappa \sim 0.03p_F$ однопузырьковое решение не удовлетворяет необходимому условию устойчивости (1) ни для каких допустимых вариаций $n(p)$, когда p лежит в интервале от нуля до $p_{\max} > p_3$. Означает ли это, что для таких значений κ однопузырьковое решение полностью перестраивается и образуется фермионный конденсат, или же перестройка сводится к появлению многосвязного решения, количество пузырьков в котором зависит от параметра κ , мы выясним в следующей работе. Пока же отметим, что и для аналитических потенциалов V даже недалеко от прямой $\eta = 1$ минимум энергетического функционала (3) может реализоваться не на однопузырьковых решениях.

Обратимся теперь к достаточно большим значениям η , при которых гладкое решение (4) всюду удовлетворяет физическим ограничениям $0 < n(p) < 1$, и обсудим прежде всего важный технический вопрос: а как их находить? Для поиска гладких

решений были изобретены разнообразные методы, так или иначе связанные с введением добавочных стабилизирующих функционалов, подавляющих “шумы” и, следовательно, сглаживающих получаемое решение. За подробностями обоснования этих методов мы отсылаем читателя к книгам [9, 10]. Для нас важен вывод: можно построить приближенное гладкое решение $n_0(p)$ (иногда его называют квазирешением) воспроизводящее левую часть (4) с заданной наперед точностью, и это квазирешение единственно ([9], глава II).

Один из стабилизирующих функционалов, нередко применяемый для задач равновесия, строится следующим образом. Запишем $n = |\Psi|^2$ и, заменив для наглядности p на r , добавим в плотность энергии (3) “кинетический член” $|\nabla\Psi(r)|^2/2B$. Теперь уравнение минимума (4) превращается в уравнение Шредингера для волновой функции системы взаимодействующих бозонов, движущихся во внешнем электрическом поле в пространстве между двумя сферами, радиусы которых должны еще быть найдены. Решение любого уравнения Шредингера единственно и непрерывно. А стало быть, единственно и непрерывно и соответствующее распределение плотности $\rho(r)$, причем при достаточно больших B оно практически не зависит от величины B [9].

Еще один способ регуляризации, часто даже более удобный в приложениях, связан с введением в (3) добавочного локального взаимодействия между частицами вида $Un^2(p)/2$, аналогичного взаимодействию частиц в модели Нозьера [5]. Уравнение минимума (4) принимает тогда вид

$$\phi(p) = Un(p) + g \int V(p-p_1) n(p_1) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}, \quad p_i < p < p_f. \quad (12)$$

Такое уравнение уже можно решать даже на решетке ([9], стр.152). В качестве иллюстрации на рис.1 приведено несколько гладких решений модельной системы с взаимодействием $V(q) = g/(q^2 + \kappa^2)$ с тем же значением $\kappa = 0.07p_F$, что и в расчетах [13]. Расчет выполнен для сглаживающего потенциала с $U/\epsilon_F^0 = 10^{-3}$. Как видно из рис.1, гладкое решение уравнения (12) существует при всех значениях η . Однако удовлетворяет оно принципу Паули, только начиная с $\eta_{FC} \simeq 1.52$. Таким образом, в рассматриваемой системе достаточно увеличить константу взаимодействия всего в полтора раза по сравнению с той, при которой появляется первый пузырек Лифшица, и все частицы оказываются уже в ФК.

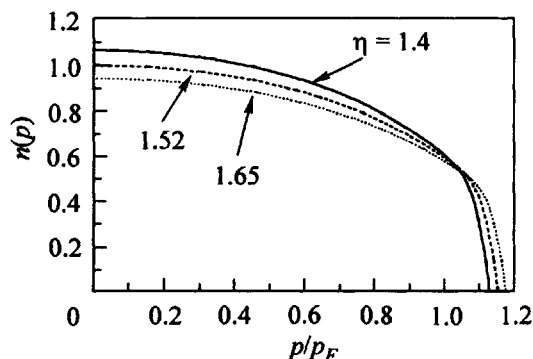


Рис.1. Квазичастичные заполнения $n(p)$ в модели с взаимодействием $V(q) = g/(q^2 + \kappa^2)$, рассчитанные при $\kappa/p_F = 0.07$ и разных значениях безразмерной константы $\eta = g/g_c$

То, что с ростом η принцип Паули перестает играть роль, можно подтвердить простым вариационным расчетом. Будем характеризовать распределение $n(p)$ дву-

мя параметрами: амплитудой ν и шириной p_f . Для потенциала $V(q) = g/(q^2 + \kappa^2)$ с $\kappa/p_F \ll 1$ оценки кинетической τ и потенциальной w энергий, отнесенных к одной частице, дают: $\tau \sim \nu p_f^5 / M \rho \sim p_f^2 / M$, $w \sim g \rho / p_f^2$. Здесь было учтено, что ν и p_f связаны нормировочным условием $\nu p_f^3 \sim \rho$, и пренебрежено членами, пропорциональными κ/p_F . Таким образом, минимизировать нужно функцию

$$E(p_f)/N \sim p_f^2/M + g\rho/p_f^2, \quad (13)$$

и в результате мы находим: $p_f \sim (g\rho)^{1/4}$, $\nu \sim g^{-3/4}\rho^{1/4}$. Отсюда вытекает, что: а) в пределе сильной связи $g \rightarrow \infty$ числа заполнения квазичастиц малы, и в этом плане сильно коррелированная ферми-система ведет себя как классическая, несмотря на то, что спектр ее возбуждений, будучи полностью вырожденным, далек от привычного; б) безразмерная критическая константа α_{FC} для перехода всех частиц в ФК меняется как $\rho^{1/3}$, что позволяет в этой модели установить грубую зависимость $\eta_{FC} = \alpha_{FC}/\alpha_B$ от плотности: $\eta_{FC}(\rho) \sim |\ln \rho|$. Качество этого заключения иллюстрирует рис.2, где фазовая диаграмма изображена в переменных $\ln \rho, \eta$.

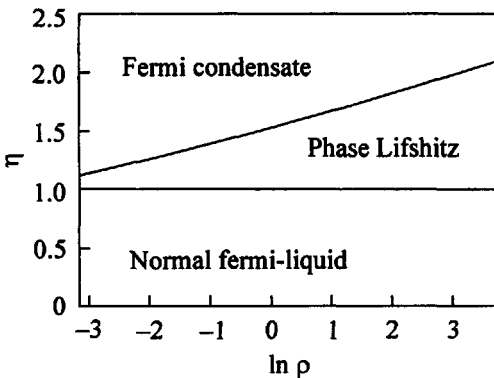


Рис.2. Фазовая диаграмма в модели с взаимодействием $V(q) = g/(q^2 + \kappa^2)$ в переменных $\ln \rho, \eta$

Отметим, что большим плотностям отвечают малые значения отношения κ/p_F . В этом пределе в интеграле (3) работает склон потенциала V , где он убывает либо степенным образом, либо экспоненциально. Вычисляя кинетическую и потенциальную энергии тем же путем, что и при получении (13), нетрудно убедиться, что в обоих случаях с ростом g амплитуда ν квазичастичного распределения падает, и, начиная с критического значения η_{FC} , принцип Паули ни на что не влияет – все квазичастицы оказываются в ФК. Таким образом, при больших плотностях для достаточно широкого класса взаимодействий верхняя часть квадранта (ρ, η) принадлежит ФК.

Рассматривая найденные численно гладкие решения (4) в этой части плоскости (ρ, η) , стоит еще раз подчеркнуть, что для любого из них соотношение $\xi(p) = 0$ ни при каких η точно не выполняется. Поэтому, увеличивая в каждой точке его амплитуду или уменьшая ее, то есть добавляя “шумы”, в соответствии с (1), можно уменьшить полную энергию. Однако для другого численного решения, полученного, скажем, с другим регуляризатором или с тем же, но в несколько иной расчетной схеме, гладкие компоненты будут близки друг к другу, а вот системы “шумов”, понижающих энергию, – кардинально различны. Отсюда, кстати, ясно, что при $\eta > \eta_{FC}$ решения с конечным числом пузырьков просто неадекватны проблеме. Физический смысл в этих условиях имеют только гладкие решения, а “шумы” в реальной постановке

задачи всегда снижаются либо конечной температурой и флуктуациями входящих в дело величин, либо в результате спаривательного или какого-то иного фазового перехода, обязательно сопровождающего фермионную конденсацию.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 00-15-96590), NSF (Grant # 9900713) и McDonnell Center for Space Sciences. Авторы благодарны Н.Е.Зейну, С.В.Толоконникову, В.Н.Эфросу и В.Р.Шагиняну за обсуждение затронутых в работе вопросов. ВАК благодарит Washington University (Saint Louis, USA) и проф. J.W.Clark за теплый прием. МВЗ признателен за гостеприимство INFN (Sezione di Catania, Italia).

-
1. И.М.Лифшиц, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960).
 2. M.de Llano and J.P.Vary, *Phys. Rev* **C19**, 1083 (1979).
 3. M.de Llano, A.Plantino, and J.G.Zabolitsky, *Phys. Rev.* **C20**, 2418 (1979).
 4. В.А.Ходель, В.Р.Шагинян, *Письма в ЖЭТФ* **51**, 488 (1990).
 5. P.Nozières, *J. Phys. France* **I2**, 443 (1992).
 6. V.A.Khodel, V.R.Shaginyan, and V.V.Khodel, *Phys. Rep.* **249**, 1 (1994).
 7. Z.-X.Shen and D.S.Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).
 8. С.Г.Михлин, *Вариационные методы в математической физике*, ГИТТЛ, Москва, 1957.
 9. А.Н.Тихонов, В.Я.Арсенин, *Методы решения некорректных задач*, Наука, Москва, 1974.
 10. W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vettering, and B.P.Flannery, *Numerical recipes in C*, Cambridge University Press, 1988.
 11. С.А.Артамонов, Ю.Г.Погорелов, В.Р.Шагинян, *Письма в ЖЭТФ*, **68**, 897 (1998).
 12. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва, 1962.
 13. М.В.Зверев, М.Балдо, *ЖЭТФ* **120**, 1200 (1998).