Глава 5
ИДЕАЛЬНЫЙ ФЕРМИ-ГАЗ

5.1. Электроны на ферми-поверхности

В этой главе собраны некоторые задачи, касающиеся свойств идеального ферми-газа. Строго говоря, все они могли бы быть решены без применения диаграмм. (Идеальный газ — вещь простая!) Однако, поскольку ферми-газ нас интересует, в основном, как возможность опробовать диаграммную технику, мы не будем использовать другие методы расчета.

Помимо этого, следует сказать, что в задачах с взаимодействием, которые будут рассмотрены в следующих главах, вычисления во многом опираются на более простые вычисления для идеального газа. Оказывается, что в диаграммах с взаимодействием можно выделить так называемые элементарные блоки. Выражения, соответствующие этим блокам, по своему виду такие же, как и для идеального газа. Например, поляризационный оператор, возникающий в теории электрон-фононного взаимодействия и в теории ферми-жидкости, по своим свойствам оказывается близок к восприимчивости идеального газа (см. задачи 24, 31, 44–46).

Остановимся на важном свойстве симметрии ферми-газа. Речь идет о так называемой *электронно-дырочной симметрии на ферми-поверхности*, имеющей место при энергии электронно-дырочных возбуждений малой по сравнению с энергией Ферми. Как правило, интересные длинноволновые и низкочастотные эффекты в ферми-газе и ферми-жидкости связаны с возбуждениями вблизи уровня Ферми. Поэтому логично при вычислении таких величин выделять этот вклад заранее. Для этого пользуются следующим техническим приемом. Во всех диаграммах пренебрегают зависимостью плотности состояний $\nu(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми от энергии $\varepsilon = \xi(p)$, и полагают $\nu(\varepsilon) = \nu_0 = p_0 m/(2\pi^2\hbar^3)$. При этом интегралы по импульсам преобразуются следующим образом:

$$\int \ldots \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \to \frac{\nu_0}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{|\mathbf{n}|=1} \ldots d\mathbf{n}\, d\xi, \tag{5.1}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ — единичный вектор. На жаргоне это называется «переход от интегрирования по p к интегрированию по ξ». Метод интегрирования по ξ обязан своей популярностью обеспечиваемой им точной

симметрии между частицами и дырками с произвольной достаточно малой энергией (см. задачу 25), и, помимо этого, тому обстоятельству, что интегрировать по ξ обычно легче (см. задачи 23, 24).

Следует отметить, что электронно-дырочная симметрия является приближенной. Однако поправки, нарушающие эту симметрию, оказываются важны, только если в задаче существенны состояния, далекие от уровня Ферми. Возможность перейти при рассмотрении какого-либо графика к интегрированию по ξ означает, что изучаемый эффект «сидит на ферми-поверхности». В задачах этого и следующих разделов интегрирование по ξ окажется весьма полезным.

5.1.1. Формула Кубо. В этом пункте мы рассмотрим задачу о нахождении динамической восприимчивости, описывающей какой–либо линейный отклик системы на переменное внешнее поле. С практической точки зрения, вопрос о восприимчивости представляет существенный интерес, поскольку большинство величин, измеряемых экспериментально, имеют характер линейных откликов (см. гл. 11). Стандартный метод работы с восприимчивостью использует запаздывающие и опережающие гриновские функции (см. формулу (5.10)), а также, в более сложных случаях, — мацубаровскую температурную технику и аналитическое продолжение с мнимых дискретных частот на действительные вещественные (см. формулу (7.28)). Но если система невзаимодействующая, можно поступить проще.

Восприимчивость величины A по отношению к величине B, дается так называемой формулой Кубо

$$\chi(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \langle\, [\widehat{A}(t), \widehat{B}(0)]\,\rangle\, e^{i\omega t}\, dt, \tag{5.2}$$

вывод которой приведен, например, в [5], § 126. Чтобы найти среднее коммутатора в (5.2) по основному состоянию системы невзаимодействующих частиц, запишем операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \widehat{A}(t) &= \sum_{m\,k} A_{mk}\psi_m^+\psi_k e^{-i(E_k-E_m)t}, \\ \widehat{B}(t) &= \sum_{m\,k} B_{mk}\psi_m^+\psi_k e^{-i(E_k-E_m)t}. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Теперь подставим эти выражения в коммутатор $\langle\, [\widehat{A}(t), \widehat{B}(0)]\,\rangle$, и раскроем среднее по теореме Вика. Результат выглядит так:

$$\chi(\omega) = \sum_{m\,k} A_{mk} B_{km} \frac{n(E_m) - n(E_k)}{E_k - E_m - \omega - i\delta}. \tag{5.4}$$

Это выражение[1]) справедливо как для ферми-, так и для бозе-статистики. Если собственные функции и матричные элементы A_{mk}, B_{mk} известны, выражение (5.4) позволяет найти восприимчивость[2]). В случаях же, когда собственные функции неизвестны, формула (5.4) не особенно полезна. Для таких более сложных случаев полезно иметь выражение восприимчивости непосредственно через функции Грина. Как известно, причинные функции Грина

$$G^c(x, x') = -i\langle \mathrm{T}\, \psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')\rangle, \tag{5.5}$$

введенные в (2.8), полностью описывают основное состояние системы и дают все *статические* свойства[3]). Однако оказывается, что изучать динамику с помощью этих функций нельзя (см. решение задачи 24 б). Чтобы преобразовать выражение (5.4) к форме, содержащей гриновские функции, нужно использовать *запаздывающие и опережающие* функции Грина.

Напомним определение запаздывающей и опережающей функций $G^R(t,t')$ и $G^A(t,t')$. Эти функции связаны с причинной функцией Грина так:

$$G^c(t,t') = \begin{cases} G^R(t,t'), & t > t', \\ G^A(t,t'), & t < t'. \end{cases} \tag{5.6}$$

В частотном представлении $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$ имеют простой смысл: они дают разложение G^c на функции частоты, регулярные, соответственно, в верхней или в нижней полуплоскости. Например, в случае фермионов

$$G^{R(A)}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) \pm i\delta} \tag{5.7}$$

соответствуют вкладам частиц и дырок в причинную функцию Грина:

$$G^c(\varepsilon, \mathbf{p}) = (1 - n(\mathbf{p}))G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) + n(\mathbf{p})G^A(\varepsilon, \mathbf{p}) = \\ = \frac{1 - n(\mathbf{p})}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n(\mathbf{p})}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) - i\delta}, \tag{5.8}$$

где $n(\mathbf{p}) = \theta(\mathbf{p}_0 - |\mathbf{p}|)$ — фермиевская функция распределения.

---

[1]) Здесь мы будем считать температуру равной нулю. Отметим, однако, что вычисление по формуле Кубо всегда легко распространить на конечные температуры. При $T > 0$ усреднение в (5.2) берется по равновесному термодинамическому состоянию, и при взятии среднего по теореме Вика возникают зависящие от температуры числа заполнения состояний частиц. Например, для фермионов в (5.4) следует положить $n(E) = 1/(e^{E/T} + 1)$.

[2]) Например, для идеального ферми-газа собственные функции — плоские волны, а матричные элементы операторов — просто их фурье-компоненты, так что нахождение любого линейного отклика с помощью (5.4) — по существу, тривиально (см. задачи 24, 25).

[3]) Например, распределение плотности, спина, статическую поляризуемость (задачи 7, 8, 14, 23)

Чтобы выразить восприимчивость через $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$, представим энергетический знаменатель в (5.4) в виде интеграла по вспомогательной переменной:

$$\frac{1}{E_k - E_m - \omega - i\delta} = \frac{1}{2\pi i}\int \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \omega - E_k - i\delta)(\varepsilon - E_m + i\delta)} = \\ = \frac{1}{2\pi i}\int G^A_k(\varepsilon + \omega) G^R_m(\varepsilon)\, d\varepsilon, \tag{5.9}$$

где $G^A_k(\varepsilon + \omega)$ и $G^R_m(\varepsilon)$ — запаздывающая и опережающая функции, взятые в диагональном представлении. Подставляя это выражение в (5.4), получаем выражение для восприимчивости:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i}\int \mathrm{Tr}\left(\left[\widehat{G}^A(\varepsilon + \omega)\widehat{B},\ \widehat{G}^R(\varepsilon)\widehat{A}\right] \widehat{\rho} \right) d\varepsilon. \tag{5.10}$$

Здесь $\widehat{\rho}$ — матрица плотности системы (в диагональном представлении $\widehat{\rho}_{mk} = n(E_m)\delta_{mk}$); выражение в квадратных скобках представляет собой коммутатор операторов $\widehat{G}^A(\varepsilon + \omega)\widehat{B}$ и $\widehat{G}^R(\varepsilon)\widehat{A}$.

Основное преимущество выражения (5.10) по сравнению с (5.4) в том, что оно верно в произвольном базисе и, значит, может быть использовано даже если собственные функции неизвестны. Наиболее важный пример такой ситуации представляют задачи о проводимости и диффузии фермионов в случайном потенциале, которые мы рассмотрим в гл. 9.

В случайном потенциале собственные функции меняются от одной реализации потенциала к другой, в то время как интерес представляют величины, усредненные по случайному потенциалу. Мы увидим, что усреднять функции Грина и их произведения оказывается гораздо удобнее, чем действовать «в лоб», используя (5.4).

Литература: Основное состояние и корреляционная функция идеального ферми-газа рассмотрены в [3], § 9.1–9.3 без использования вторичного квантования. Интересно сравнить этот подход с более стандартным изложением — см. [5], § 53, 55 – 58, а также [6], § 1 и [1], § 2. Определение и свойства функции Грина идеального ферми–газа обсуждаются в [6], § 9, 10. Обобщенная восприимчивость и формула Кубо рассмотрены в [5], § 123, 126. С применениями идеального ферми-газа в теории многоэлектронного атома можно ознакомиться по [2], § 70, а с применениями в теории металлов — по [3], гл. IX и [6], § 61.

5.2. Задачи 22–27

Задача 22. (*Функция Грина в координатном представлении.*) Найдите функцию Грина $G(\varepsilon, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|p_0 \gg 1$ двумя способами: сначала, интегрируя по ξ от $-\infty$ до $+\infty$, а затем точно, интегрируя по d^3p. Сравните результаты.

Задача 23. (*Эффект Рудермана–Киттеля.*) В ферми-газе находится локализованный спин $\mathbf{S}$, взаимодействующий с локальной спиновой плотностью электронов:

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int} = J S^i \widehat{\sigma}^i(\mathbf{r}=0), \tag{5.11}$$

где $\widehat{\sigma}^i(\mathbf{r}) = \psi^+_\alpha(\mathbf{r})\sigma^i_{\alpha\beta}\psi_\beta(\mathbf{r})$.

Найдите распределение поляризации спина электронов $\sigma^i(\mathbf{r}) = \langle\widehat{\sigma}^i(\mathbf{r})\rangle$ на больших расстояниях от спина $\mathbf{S}$: $|\mathbf{r}|p_0 \gg 1$. Покажите, что поляризация осциллирует, как функция координат, и определите период осцилляции[4]. Считайте взаимодействие J малым.

Задача 24. **а.** Коррелятор плотность-плотность ферми-газа $\langle \mathrm{T}\widehat{n}(\mathbf{r},t)\widehat{n}(\mathbf{r}',t')\rangle$ дается следующей диаграммой:

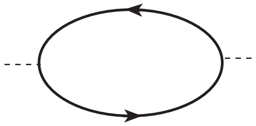

Рис. 5.1

Найдите этот коррелятор в частотно-импульсном представлении при малых $\omega \ll E_F$, $|\mathbf{k}| \ll p_0$.

б. (*Динамическая спиновая восприимчивость.*) Найдите парамагнитный вклад в магнитную восприимчивость $\chi(\omega,k)$ электронного газа при $T=0$, т. е. отклик спиновой поляризации в ответ на приложенное переменное магнитное поле. Считайте, что $|\omega| \ll E_F$, $|k| \ll p_0$. Проверьте, что в пределе $\omega/k \to 0$, $k \to 0$, получается восприимчивость Паули $\chi = 2\mu_B^2\nu_0$, где $\nu_0 = p_0 m/(2\pi^2\hbar^3)$ — плотность состояний на уровне Ферми.

Задача 25. (*Отклик плотность-плотность при D=1.*) Рассмотрим *одномерный* ферми-газ во внешнем переменном поле,

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t) = -\int \varphi(x,t)\,\widehat{n}(x,t)\,dx. \tag{5.12}$$

Рассмотрим линейный отклик плотности $\widehat{n}(x,t)$ на поле $\varphi(x,t)$. Его можно записать так:

$$\langle\widehat{n}(x,t)\rangle = \int\limits_{t'<t}\int Q(x-x',t-t')\,\varphi(x',t')\,dx'\,dt', \tag{5.13}$$

или, в фурье-представлении, $\langle\widehat{n}_{k,\omega}\rangle = Q(k,\omega)\,\varphi_{k,\omega}$. Функцию отклика $Q(k,\omega)$ можно определить, пользуясь формулой Кубо, как в задаче 24б, с заменой операторов плотности спина на операторы плотности числа частиц.

Найдите $Q(k,\omega)$ при малых k и ω, $|k| \ll p_0$, $|\omega| \ll E_F$. Сравните с функцией Грина фононов (4.7).

Задача 26. (*Флуктуации числа фермионов на прямой.*) Для газа бесспиновых ферми-частиц на прямой запишите оператор $\widehat{N}_L$ числа

[4] Эту задачу удобно решать, используя координатное представление для гриновских функций (см. задачу 22).

частиц внутри интервала $0 < x < L$ (см. [5], § 117). Для больших $L \gg p_0^{-1}$ получите формулу

$$\langle\delta N_L^2\rangle = \langle N_L^2\rangle - \langle N_L\rangle^2 = \ln\frac{p_0 L}{\pi^2}. \tag{5.14}$$

Любопытно, что флуктуации (5.14) неэкстенсивны (неаддитивны по длине интервала), в отличие от классических термодинамических флуктуаций. Неэкстенсивность есть проявление квантовых корреляций. При конечной температуре экстенсивность восстанавливается на масштабах, превосходящих тепловую длину: $L \gg L_T = \hbar v_F/T$.

Более трудным оказывается вопрос о нахождении полной статистики распределения числа частиц в конечном интервале. С помощью метода бозонизации, изложенного в гл. 12, можно показать, что это распределение нормальное:

$$P(n) \approx \exp\left(-\frac{(n-a)^2}{2b}\right), \tag{5.15}$$

где $a = \langle N_L\rangle$, $b = \langle\langle N_L^2\rangle\rangle$. Элементарное решение этой задачи авторам неизвестно.

Задача 27*. (*Катастрофа ортогональности.*) В идеальный ферми-газ вносят примесь, на потенциале $U(\mathbf{r})$ которой частицы могут упруго рассеиваться. Оказывается, основное состояние системы при этом полностью изменяется, даже если потенциал $U(\mathbf{r})$ произвольно мал. В случае, когда рассеяние происходит только в s-канале, можно получить следующую оценку для интеграла перекрытия состояний[5]:

$$\langle 0'|0\rangle \approx (p_0 L)^{-\alpha}, \quad \alpha = \delta_0^2/\pi^2, \tag{5.16}$$

где $|0\rangle$ и $|0'\rangle$ — основные состояния ферми-системы до и после внесения примеси, δ_0 — фаза рассеяния в s–канале при $\varepsilon = E_F$, а L — размер системы[6].

Этот удивительный и важный результат был вначале получен элементарными средствами, путем явного выписывания слэтеровского детерминанта и оценки интеграла перекрытия[7]. Попытаемся перевести задачу о перекрытии основных состояний на язык диаграммной техники. Будем включать потенциал примеси плавно от $t=-\infty$ до $t=0$:

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t) = e^{\gamma t}\int U(\mathbf{r})\,\psi^+(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,d^3r. \tag{5.17}$$

Рассмотрим среднее S-матрицы по основному состоянию ферми-газа при $U(\mathbf{r})=0$,

$$K_\gamma = \left\langle \mathrm{T}\exp\left(-i\int\limits_{-\infty}^{0}\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)\,dt\right)\right\rangle. \tag{5.18}$$

[5] Для бесспиновых фермионов показатель степени в (5.16) есть $\alpha = \delta_0^2/(2\pi^2)$.

[6] $L \approx 2\pi N^{1/3}/p_0$, где N — полное число частиц.

[7] *P. W. Anderson*// Phys. Rev. Lett. 1967. V. 18. P. 1049.

При $\gamma \to 0$ величина K_γ стремится к $\langle 0|0'\rangle$. (Почему?)

а. Покажите, что
$$\ln K_\gamma = \sum_{n=1}^{\infty} F_n/n, \tag{5.19}$$
где
$$F_n = (-i)^n \int \ldots \int \langle\!\langle \mathrm{T}\, \widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_1)\ldots \widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_n)\rangle\!\rangle\, dt_n \ldots dt_1, \tag{5.20}$$
причем $\langle\!\langle \ldots \rangle\!\rangle$ означает, что учитываются только связные графики (см. теорему о разложении по связным диаграммам в [1], § 15).

б. Изобразите графически F_1, F_2, F_3. Сколько графиков соответствует каждому F_n? Какие выражения сопоставляются графическим элементам? Катастрофе ортогональности отвечает $K_{\gamma\to 0} \to 0$, т. е.
$$\operatorname{Re} \ln K_\gamma \to -\infty \quad \text{при} \quad \gamma \to 0. \tag{5.21}$$
Покажите, что F_1 дает чисто мнимый вклад, имеющий смысл перенормировки энергии основного состояния, а $\operatorname{Re} F_2 \sim \ln\gamma$. Считая $U(\mathbf{r})$ слабым и используя приближение δ-функции $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, найдите $\operatorname{Re} F_2$ и оцените K_γ, отбросив вклады F_n более высокого порядка.

в. Каким образом, зная K_γ, можно оценить перекрытие основных состояний $\langle 0|0'\rangle$? Покажите, что для этого следует положить γ порядка обратного расстояния между уровнями в системе, соответствующими состояниям с угловым моментом $l = 0$.

В приложениях часто возникает вопрос о катастрофе ортогональности для произвольного потенциала, не обязательно слабого. Как будет показано в гл. 12 (задача 78), и в этом случае можно выразить перекрытие старого и нового основных состояний через фазы рассеяния. Причем если имеется только s-рассеяние, формула (5.16) остается справедливой.

5.3. Решения задач 22–27

22. Найдем функцию Грина, интегрируя по ξ. Начнем с интегрирования по углам:
$$G(\varepsilon, r) = \iint \frac{e^{ipr\cos\theta}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\ \operatorname{sgn}\varepsilon}\, \frac{p^2 dp \sin\theta d\theta}{(2\pi)^2} = \\ = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{\infty} \frac{p\sin pr\, dp}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\ \operatorname{sgn}\varepsilon}, \tag{5.22}$$
где $\xi(p) = p^2/2m - E_F$. Выражаем p через ξ и интегрируем по ξ вычетами, представив синус как разность экспонент:
$$G(\varepsilon, r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(p_0 + \xi/v_F)r}{\varepsilon - \xi + i\delta\ \operatorname{sgn}\varepsilon}\, \frac{p_0 d\xi}{v_F} = \\ = -\frac{m}{2\pi r}\, e^{ir\left(\operatorname{sgn}\varepsilon p_0 + |\varepsilon|/v_F\right)}. \tag{5.23}$$

Найденная функция Грина осциллирует с периодом, равным фермиевской длине волны $\lambda_0 = 2\pi\hbar/p_0$. Из-за эффектов ферми-статистики фаза осцилляций меняет знак на уровне Ферми (при $\varepsilon = 0$).

Теперь выполним точное интегрирование по p. Выражение (5.22) есть четная функция p, поэтому можно распространить интеграл по p на всю вещественную ось и разделить результат пополам:
$$\frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p\sin pr\, dp}{\varepsilon - p^2/2m + E_F + i\delta\ \operatorname{sgn}\varepsilon}. \tag{5.24}$$
Разлагаем это выражение на простейшие дроби и интегрируем:
$$\frac{m}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\varkappa - p} - \frac{1}{\varkappa + p}\right) \sin pr\, dp = -\frac{m}{2\pi r}\, e^{i\operatorname{sgn}\varepsilon\, \varkappa r}, \tag{5.25}$$
где $\varkappa = \sqrt{2m(E_F + \varepsilon + i\delta\operatorname{sgn}\varepsilon)}$. Видим, что интегрирование по ξ дает хорошую точность при энергии ε много меньше фермиевской, $|\varepsilon| \ll E_F$.

23. Запишем спиновую поляризацию $\sigma^i(\mathbf{r}) = \langle \psi_\alpha^+(\mathbf{r})\, \sigma_{\alpha\beta}^i \psi_\beta(\mathbf{r})\rangle$ через точную функцию Грина:
$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -i\operatorname{Tr}(\widehat{\sigma}^i \widehat{G}) = \lim_{\substack{t'\to t+0\\ \mathbf{r}=\mathbf{r}'}} \left(-i\sigma_{\alpha\beta}^i G_{\beta\alpha}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')\right), \tag{5.26}$$
где подразумевается суммирование по спиновым индексам α, β.

Функция Грина G выражается через функцию G_0 ферми-газа в виде ряда, аналогичного ряду (3.11) для амплитуды рассеяния, рассмотренному в гл. 3. При этом оператор
$$\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int} = J \int S^i \delta^{(3)}(\mathbf{r})\, \psi_\alpha^+(\mathbf{r}) \sigma_{\alpha\beta}^i \psi_\beta(\mathbf{r})\ d^3 r \tag{5.27}$$
играет роль потенциала возмущения.

Интересующий нас эффект возникает в первом порядке по J:
$$G_{\alpha\beta}^{(1)}(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = JS^i \sigma_{\alpha\beta}^i G_0(\varepsilon, \mathbf{r}) G_0(\varepsilon, -\mathbf{r}'). \tag{5.28}$$
Подставляем $G_{\alpha\beta}^{(1)}$ в (5.26):
$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -2iJS^i \int G_0^2(\varepsilon, \mathbf{r})\, \frac{d\varepsilon}{2\pi}. \tag{5.29}$$
Воспользуемся результатом (5.23) задачи 22 для $G_0(\varepsilon, r)$ при $p_0 r \gg 1$:
$$\int \frac{d\varepsilon}{2\pi} {G_0}^2(\varepsilon, r) = \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 \int_0^{\infty} \left(e^{2ir(p_0 + \varepsilon/v_F)} + e^{-2ir(p_0 r - \varepsilon/v_F)}\right) \frac{d\varepsilon}{2\pi} = \\ = i\, \frac{mp_0}{(2\pi)^3}\, \frac{\cos(2p_0 r)}{r^3}. \tag{5.30}$$

Получаем затухающие осцилляции с периодом π/p_0:

$$\sigma^i(r) = J\, S^i\, \frac{mp_0}{4\pi^3}\, \frac{\cos(2p_0 r)}{r^3}. \tag{5.31}$$

Точное выражение для плотности спина можно получить, взяв точную функцию Грина (5.25) и проинтегрировав ее квадрат в (5.29) по ε:

$$\sigma^i(r) = J\, S^i\, \frac{2mp_0^4}{\pi^3} \left(\frac{\cos x}{x^3} - \frac{\sin x}{x^4} \right), \tag{5.32}$$

где $x = 2p_0 r$. Видим, что в асимптотике, т. е. на больших расстояниях, результат все более приближается к (5.31), что согласуется с «идеологией» интегрирования по ξ. Кроме того, отметим, что сингулярность точного выражения (5.32) при малых r имеет характер r^{-1}. Таким образом, при взятии интеграла по $d^3 r$ расходимости для полной поляризации не возникает. Выражение (5.31) более сингулярно, но при малых r по самому своему происхождению оно неприменимо, поскольку интегрирование по ξ гарантирует правильность ответа только на больших расстояниях.

24 а. Запишем выражение, соответствующее диаграмме на рис. 5.1:

$$\Pi(\omega, k) = -2i \iint G_0(\varepsilon_+, \mathbf{q}_+) G_0(\varepsilon_-, \mathbf{q}_-)\, \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}\, \frac{d\varepsilon}{2\pi}, \tag{5.33}$$

где $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \omega/2$, $\mathbf{q}_\pm = \mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2$, а множитель 2 возникает при суммировании по спинам. В интеграле (5.33) существенными оказываются $\mathbf{q}_\pm$ вблизи ферми-поверхности, поэтому при $|\mathbf{k}| \ll p_0$ удобно разложить $|\mathbf{q}_\pm|$ так: $|\mathbf{q}_\pm| = q \pm (k/2)\cos\theta$, где θ — угол между векторами $\mathbf{q}$ и $\mathbf{k}$. Тогда функция

$$G_0(\varepsilon_\pm, q_\pm) = \frac{1}{\varepsilon_\pm - \xi_\pm + i\delta \operatorname{sgn} \xi_\pm}, \tag{5.34}$$

где $\xi_\pm(q) = \xi(q_\pm) = \xi(q) \pm (v_F k/2)\cos\theta$. Интегрируем (5.33) по ε, замыкая контур в верхней полуплоскости ω и раскладывая произведение G_0 на простейшие дроби. Интеграл отличен от нуля, если полюсы функций G_0 лежат в разных полуплоскостях:

$$\int \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \omega/2 - \xi_+ + i\delta \operatorname{sgn} \xi_+)\,(\varepsilon + \omega/2 - \xi_- + i\delta \operatorname{sgn} \xi_-)} = \\ = \frac{2\pi i\, [n(\xi_-) - n(\xi_+)]}{\omega - v_F k \cos\theta + i\delta\, (\operatorname{sgn} \xi_+ - \operatorname{sgn} \xi_-)}, \tag{5.35}$$

где $n(\xi)$ — фермиевская функция заполнения. Поскольку k мало, разность $n(\xi_-) - n(\xi_+)$ отлична от нуля в тонком слое вблизи поверхности Ферми. Следовательно, можно проинтегрировать по ξ. В зависимости от знака $\cos\theta$ возможны два случая:

1) $\cos\theta > 0$. Выражение (5.35) отлично от нуля при $|\xi| < (v_F k/2)\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = -1$;

2) $\cos\theta < 0$. Выражение (5.35) отлично от нуля при $|\xi| < -(v_F k/2)\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = 1$.

Итак, остается интеграл по углам:

$$\Pi(\omega, k) = \nu_0 \int_0^\pi \frac{v_F k \cos\theta}{\omega - v_F k \cos\theta + i\delta \operatorname{sgn}\omega} \sin\theta\, d\theta, \tag{5.36}$$

где $\nu_0 = mp_0/(2\pi^2\hbar^3)$ — плотность состояний. Обозначим $x = \cos\theta$ и вычислим

$$\int_{-1}^{1} \frac{x\, dx}{x_0 - x + i\delta \operatorname{sgn} x_0} = A + iB, \tag{5.37}$$

где

$$A = -2 + x_0 \ln\left| \frac{x_0 + 1}{x_0 - 1} \right|, \quad B = \begin{cases} 0 & \text{при } |x_0| > 1, \\ -\pi x_0 & \text{при } 0 < x_0 < 1, \\ \pi x_0 & \text{при } -1 < x_0 < 0. \end{cases} \tag{5.38}$$

Получаем

$$\Pi(\omega,\, k) = -2\nu_0 \left[1 - \frac{\omega}{2kv_F} \ln\left| \frac{kv_F + \omega}{kv_F - \omega} \right| + \frac{\pi i}{2} \frac{|\omega|}{kv_F} \theta\left(1 - \frac{|\omega|}{kv_F} \right) \right]. \tag{5.39}$$

24 б. (*Первое решение.*) Диаграмма для спинового коррелятора отличается от диаграммы на рис. 5.1 лишь незначительно — наличием спиновых операторов в вершинах. Соответствующее аналитическое выражение отличается от (5.33) спиновым множителем $\operatorname{Tr} \sigma^i \sigma^j = 2\delta_{ij}$. Поэтому, на первый взгляд, для отыскания спиновой восприимчивости можно просто воспользоваться результатом решения задачи 24 а.

В том, что это неверно, легче всего убедиться, заметив, что выражение (5.39) для $\Pi(\omega, k)$ как функции частоты ω не обладает аналитическими свойствами восприимчивости, поскольку имеет особенности в полуплоскости $\operatorname{Im}\omega > 0$. Последнее видно уже из выражения (5.35), устроенного так, что в зависимости от знаков ξ_+ и ξ_- полюс по ω может оказаться в верхней полуплоскости, в нижней, или на вещественой оси. Это автоматически приводит к нарушению причинности и в окончательном ответе (5.39).

С формальной точки зрения проблема состоит в том, что в петле на рис. 5.1 были взяты причинные функции Грина. Поэтому по своим аналитическим свойствам петля из причинных гриновских функций соответствует поляризационному оператору, а не восприимчивости, и аналитические свойства оказываются следующими: $\Pi(-\omega) = \Pi(\omega)$, а не $\chi(-\omega^*) = \chi^*(\omega)$. В результате особенности на плоскости комплексного ω оказываются расположенными симметрично относительно $\omega = 0$.

Отметим, что на самом деле восприимчивость и поляризационный оператор можно связать друг с другом с помощью мацубаровской техники, используя мнимые частоты и метод аналитического продолжения (см. задачу 37, гл. 7). При этом выясняется, что надо взять выражение (5.39) для петли на рис. 5.1 при $\omega > 0$ и продолжить в верхнюю полуплоскость комплексного ω, а с нее — на $\omega < 0$. (Так что приведенное выше соображение не совсем уж и неправильное!).

Однако пока мы не будем использовать эту связь, а проделаем прямое вычисление по формуле Кубо. Возьмем в качестве $\widehat{A}(t)$ и $\widehat{B}(t)$ в (5.2) оператор плотности намагниченности:

$$\widehat{s}_z(\mathbf{r},t) = \mu_B\left[\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t) - \widehat{\psi}^+_\downarrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},t)\right]. \qquad (5.40)$$

Раскроем среднее коммутатора в (5.2) по теореме Вика как сумму всевозможных парных средних операторов ψ и ψ^+, и оставим только связные графики:

$$\chi_{\omega,\mathbf{k}} = 2i\,\mu_B^2 \iint e^{i\omega t + i\mathbf{kr}}\left[\langle\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(0,0)\rangle\langle\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}^+_\uparrow(0,0)\rangle - \right.$$
$$\left. - \langle\widehat{\psi}^+_\uparrow(0,0)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\rangle\langle\widehat{\psi}_\uparrow(0,0)\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\rangle\right] dt\, d^3r \qquad (5.41)$$

(двойка учитывает спин). Средние вычисляем непосредственно по определению операторов вторичного квантования[8]:

$$\langle\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}',t')\rangle = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+i\mathbf{p}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\, n(\xi(\mathbf{p})), \qquad (5.42)$$

$$\langle\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r}',t')\rangle = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+i\mathbf{p}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\, [1 - n(\xi(\mathbf{p}))], \qquad (5.43)$$

где $n(\xi)$ — фермиевская функция распределения. Делая преобразование Фурье, получаем для $\chi_{\omega,\mathbf{k}}$ такое выражение:

$$2i\mu_B^2 \int \int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\|\mathbf{q}_-|<p_0}} \left[G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_+)\,G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_-) - G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_+)\,G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_-)\right]\frac{d\varepsilon d^3q}{(2\pi)^4}, \qquad (5.44)$$

где запаздывающая и опережающая гриновские функции есть

$$G^{R,A}(\varepsilon,\,\mathbf{q}) = \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{q}) \pm i\delta}. \qquad (5.45)$$

Интегрирование по ε дает

$$\int G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_+)\,G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_-)\,d\varepsilon = \frac{2\pi i}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta}, \qquad (5.46)$$

где θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{q}$. Вместо (5.35) получаем

$$\chi_{\omega,k} = -\frac{\mu_B^2}{4\pi^3}\int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\|\mathbf{q}_-|<p_0}}\left(\frac{1}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta} - \frac{1}{\omega + v_F k\cos\theta + i\delta}\right)d^3q. \qquad (5.47)$$

[8] Применяя теорему Вика, следует иметь в виду, что среднее в формуле Кубо не T-упорядоченное.

Это выражение имеет ясный смысл: переменное внешнее поле возбуждает электронно-дырочную пару. Электрон имеет импульс $\mathbf{q}_+$, а дырка — $\mathbf{q}_-$. Принцип Паули накладывает ограничение на фазовый объем: $|\mathbf{q}_+| > p_0$, $|\mathbf{q}_-| < p_0$, откуда следует, что $\cos\theta > 0$. Энергия пары есть $\xi(\mathbf{q}_+) - \xi(\mathbf{q}_-) = v_F k\cos\theta$, и поскольку нас интересует предел малых k, энергии электрона и дырки малы. Из приведенного выражения для энергии пары следует, что и электронное, и дырочное состояние отстоят от уровня Ферми не более чем на kv_F. Нас интересуют малые k, поэтому в интеграле по q^2dq можно перейти к интегрированию по ξ:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} n(\xi_-)\,(1 - n(\xi_+))\,d\xi = \begin{cases} v_F k\cos\theta & \text{при } \cos\theta > 0, \\ 0 & \text{при } \cos\theta < 0. \end{cases} \qquad (5.48)$$

Остается интеграл по углам $0 < \theta < \pi/2$. Обратим внимание на то, что замена $\omega + i\delta \to -\omega - i\delta$ эквивалентна замене $\theta \to \pi/2 - \theta$. Поэтому:

$$\chi_{\omega,k} = \mu_B^2\nu_0\int\limits_0^{\pi}\frac{v_F k\,\cos\theta}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta}\sin\theta\,d\theta. \qquad (5.49)$$

Сделаем обычную подстановку $x = \cos\theta$ и вычислим

$$\int\limits_{-1}^{1}\frac{x\,dx}{x_0 - x + i\delta} = -2 + x_0\ln\frac{x_0 + i\delta + 1}{x_0 + i\delta - 1}. \qquad (5.50)$$

Полагая $x_0 = \omega/kv_F$, находим[9]

$$\chi_{\omega,\,k} = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 - \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{kv_F + \omega}{kv_F - \omega}\right| + \frac{\pi i}{2}\,\frac{\omega}{kv_F}\theta\left(1 - \frac{|\omega|}{kv_F}\right)\right). \qquad (5.51)$$

Соответственно, в статическом пределе $\omega/kv_F \to 0$, $k \to 0$, получаем равновесную паулиевскую восприимчивость: $\chi_{\text{пара}} = 2\mu_B^2\nu_0$.

24б. (*Второе решение.*) Можно действовать иначе: сначала найти мнимую часть $\chi_{\omega,k}$, а затем восстановить по ней вещественную, пользуясь аналитическими свойствами восприимчивости. Физически мнимая часть χ описывает диссипацию, т. е. возбуждение переменным полем электронно-дырочных пар. Поэтому, как и в задаче 17, в петле на рис. 5.1 виртуальные состояния электрона и дырки надо брать на массовой поверхности $\varepsilon = \xi(q)$. Формально это соответствует замене

$$G^{A,R}(\varepsilon,\mathbf{q}) \to \pm i\pi\delta\,(\varepsilon - \xi(\mathbf{q})) \qquad (5.52)$$

[9] Отметим, что выражение (5.39) для причинного коррелятора при $\omega > 0$ совпадает с выражением (5.51) для запаздывающего коррелятора, а при $\omega < 0$ отличается комплексным сопряжением.

в выражении (5.33):

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = 2\,\mu_B^2\,\pi^2 \int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int \delta\left(\varepsilon_+ - \xi(\mathbf{q}_+)\right)\,\delta\left(\varepsilon_- - \xi(\mathbf{q}_-)\right)\,\frac{d\varepsilon}{2\pi}. \qquad (5.53)$$

Смысл данного выражения в том, что в результате поглощения кванта $\hbar\omega$ переменного внешнего поля электрон с энергией ξ_- под уровнем Ферми возбуждается в состояние с энергией ξ_+ над уровнем Ферми. Это выражение дает $\operatorname{Im}\chi$ только при $\omega > 0$, а при $\omega < 0$ оно равно 0, как и должно быть для вероятности распада. Получив $\operatorname{Im}\chi$ при положительных ω, мы распространим его на отрицательные ω по свойству восприимчивости $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$.

Интеграл по ε в (5.53) устраняет одну δ-функцию:

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = \mu_B^2 \int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}} \delta\big(\omega - \xi(\mathbf{q}_+) + \xi(\mathbf{q}_-)\big)\,\frac{d^3q}{(2\pi)^2}. \qquad (5.54)$$

Как и в предыдущем решении, поскольку нас интересует длинноволновый предел $k \ll p_0^{-1}$, переходим от интеграла по q^2dq к интегралу по ξ, который дает $kv_F\cos\theta$ при $\cos\theta > 0$, и 0 в противном случае. Остается интеграл по углам:

$$\int\limits_0^{\pi/2} v_F k\,\cos\theta\,\delta(\omega - v_F k\cos\theta)\,\sin\theta\,d\theta = \begin{cases}\omega & \text{при } 0 < \omega < kv_F,\\ 0 & \text{при } \omega > kv_F.\end{cases} \qquad (5.55)$$

Теперь, поскольку $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$, берем нечетную функцию

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = \mu_B^2\,\nu_0 \begin{cases}\omega & \text{при } |\omega| < kv_F,\\ 0 & \text{при } |\omega| > kv_F\end{cases} \qquad (5.56)$$

и восстанавливаем $\chi(\omega)$ по аналитичности:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\pi}\int \frac{\operatorname{Im}\chi(\omega')d\omega'}{\omega' - \omega - i0}. \qquad (5.57)$$

Это приводит к точно такому же интегралу, что и в предыдущем решении.

Заметим, что в более сложных ситуациях нахождение восприимчивости в два этапа (сначала мнимая часть, а затем вещественная) может оказаться удобнее прямого вычисления. Мнимая часть всегда связана с определенными процессами распада, поэтому она обычно имеет более прозрачную структуру, чем вещественная часть.

25. Нас интересует динамический отклик плотность–плотность. Вычислим его по формуле Кубо (5.2). Для бесспиновых электронов

оператор плотности числа частиц есть

$$\widehat{n}(x,t) = \widehat{\psi}^+(x,t)\widehat{\psi}(x,t), \qquad (5.58)$$

поэтому

$$Q(\omega,k) = \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^\infty \langle\,[\widehat{n}_k(t), \widehat{n}_k(0)]\,\rangle\; e^{i\omega t}\;dt. \qquad (5.59)$$

Раскрываем среднее коммутатора по теореме Вика, как и в предыдущей задаче, и после интегрирования по ε, получаем выражение, аналогичное (5.47):

$$Q(\omega,k) = \int\limits_{\substack{|q_+|>p_0\\ |q_-|<p_0}} \left(\frac{1}{\omega - qk/m + i\delta} + \frac{1}{-\omega - qk/m - i\delta}\right)\frac{dq}{2\pi}. \qquad (5.60)$$

Ограничения, накладываемые принципом Паули, означают, что q меняется в пределах:

$$\begin{aligned} p_0 - \frac{k}{2} < q < p_0 + \frac{k}{2} \quad &\text{при } k > 0,\\ -p_0 - \frac{|k|}{2} < q < -p_0 + \frac{|k|}{2} \quad &\text{при } k < 0. \end{aligned} \qquad (5.61)$$

Следовательно, при малых $k \ll p_0^{-1}$ в подынтегральном выражении (5.60) можно просто положить $q = p_0$ при $k > 0$, и $q = -p_0$ при $k < 0$. При этом мы пренебрегаем зависимостью скорости q/m от энергии в малой окрестности уровня Ферми. Иначе говоря, мы линеаризуем закон дисперсии:

$$\xi(p) = \frac{p^2}{2m} - E_F \to \xi(p) = v_F(|p| - p_0) \qquad (5.62)$$

(что эквивалентно переходу к интегрированию по ξ). Получаем

$$Q(\omega,k) = \frac{k}{2\pi}\left(\frac{1}{\omega - v_F|k| + i\delta} - \frac{1}{\omega + v_F|k| + i\delta}\right), \qquad (5.63)$$

или

$$Q(\omega,k) = \frac{\nu_{1D}\,v_F^2k^2}{\omega^2 - v_F^2k^2 + i\delta\operatorname{sgn}\omega}, \qquad (5.64)$$

где $\nu_{1D} = 1/\pi v_F$ — плотность состояний при $D = 1$ без учета спинового вырождения. Учет спина увеличивает ν_{1D} вдвое.

26. Оператор числа частиц в интервале $0 < x < L$ есть

$$\widehat{N}_L = \int\limits_0^L \widehat{n}(x)\,dx, \quad \widehat{n}(x) = \psi^+(x)\psi(x), \qquad (5.65)$$

а $\widehat{N}_L^2 = \int\limits_0^L\int\limits_0^L \widehat{n}(x)\widehat{n}(x')\,dx\,dx'$. Плотность $\langle n\rangle = p_0/\pi$, следовательно,

$$\langle \widehat{N}_L\rangle = \int\limits_0^L \langle \widehat{n}(x)\rangle\,dx = \frac{p_0}{\pi}L. \tag{5.66}$$

Нас интересует

$$\langle \delta\widehat{N}_L^2\rangle = \int\limits_0^L\int\limits_0^L \langle\!\langle \widehat{n}(x)\widehat{n}(x')\rangle\!\rangle\,dx\,dx', \tag{5.67}$$

где $\langle\!\langle\ldots\rangle\!\rangle$ обозначает неприводимый коррелятор, получаемый «связным» усреднением.

Переходим к импульсному представлению: $\psi(x) = \sum\limits_p a_p\,e^{ipx}$. Тогда

$$\langle \widehat{N}_L^2\rangle = \sum_{p_1,p_2,p_3,p_4}\int\limits_0^L\int\limits_0^L \langle a^+_{p_1}a_{p_2}a^+_{p_3}a_{p_4}\rangle e^{ix(p_2-p_1)+ix'(p_4-p_3)}dx\,dx'. \tag{5.68}$$

Раскроем среднее по теореме Вика:

$$\langle a^+_{p_1}a_{p_2}a^+_{p_3}a_{p_4}\rangle = \langle a^+_{p_1}a_{p_2}\rangle\langle a^+_{p_3}a_{p_4}\rangle + \langle a^+_{p_1}a_{p_4}\rangle\langle a_{p_2}a^+_{p_3}\rangle. \tag{5.69}$$

Нас интересует только второе слагаемое, поскольку первое есть $\langle N_L\rangle^2$ и не дает вклада в неприводимый коррелятор. Получаем

$$\begin{aligned}\langle\!\langle n(x)n(x')\rangle\!\rangle &= \sum \langle a^+_{p_1}a_{p_2}\rangle\langle a^+_{p_3}a_{p_4}\rangle e^{ix(p_2-p_1)+ix'(p_4-p_3)} = \\ &= \int\limits_{-p_0}^{p_0} e^{ip_1(x'-x)}\frac{dp_1}{2\pi}\cdot\left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ip_3(x-x')}\frac{dp_3}{2\pi} - \int\limits_{-p_0}^{p_0} e^{ip_3(x-x')}\frac{dp_3}{2\pi}\right) = \\ &= -\left(\int\limits_{-p_0}^{p_0} e^{ip(x-x')}\frac{dp}{2\pi}\right)^2 + \int\limits_{-p_0}^{p_0} e^{ip(x-x')}\delta(x-x')\frac{dp}{2\pi} = \\ &= -\frac{1}{\pi^2}\frac{\sin^2 p_0(x-x')}{(x-x')^2} + \frac{p_0}{\pi}\delta(x-x').\end{aligned} \tag{5.70}$$

Интегрируя это выражение, находим

$$\langle \delta N_L^2\rangle = \frac{p_0}{\pi}L - \frac{1}{\pi^2}\int\limits_0^L\int\limits_0^L \frac{\sin^2 p_0(x-x')}{(x-x')^2}\,dx\,dx'. \tag{5.71}$$

Перейдем к новым координатам: $u = x - x'$, $v = x + x'$:

$$\begin{aligned}\int\limits_0^L\int\limits_0^L \frac{\sin^2 p_0(x-x')}{(x-x')^2}\,dx\,dx' &= 2\int\limits_0^L du\frac{\sin^2 p_0 u}{u^2}\int\limits_u^L dv = \\ &= 2\int\limits_0^L (L-u)\frac{\sin^2 p_0 u}{u^2}\,du \approx 2\left(\frac{\pi}{2}Lp_0 - \frac{1}{2}\ln Lp_0\right).\end{aligned}$$

Итак, находим

$$\langle \delta N_L^2\rangle = \frac{p_0}{\pi}L - \frac{p_0}{\pi}L + \frac{1}{\pi^2}\ln(Lp_0) = \frac{1}{\pi^2}\ln(p_0 L), \tag{5.72}$$

что и требовалось.

27. (*Первое решение.*) Будем считать электроны бесспиновыми и восстановим зависимость от спина в конце. Возьмем среднее S-матрицы по основному состоянию газа с $U(\mathbf{r}) = 0$,

$$K_\gamma = \left\langle \mathrm{T}\ \exp(-i\int\limits_{-\infty}^{0}\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)dt)\right\rangle, \tag{5.73}$$

и разложим экспоненту в ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{t_1}\ldots\int\limits_{-\infty}^{t_{n-1}}(-i)^n\left\langle \widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_1)\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_2)\ldots\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_n)\right\rangle dt_n\ldots dt_2 dt_1. \tag{5.74}$$

а. Выделим из суммы (5.74) часть с $n > 0$:

$$K_\gamma = 1 + \Lambda. \tag{5.75}$$

Можно обычным образом разложить $\ln K_\gamma$ в ряд по Λ:

$$\ln K_\gamma = \Lambda - \frac{1}{2}\Lambda^2 + \frac{1}{3}\Lambda^3 - \ldots \tag{5.76}$$

Подставим сюда выражение для Λ в виде суммы средних от членов разложения T-экспоненты в ряд и раскроем скобки. Изучив несколько низших порядков теории возмущений убедимся, что при раскрывании средних по теореме Вика сократятся все средние, за исключением связных графиков. Это наблюдение можно обобщить на графики произвольного порядка, и доказать так называемую *теорему о связных графиках.*

Теорема утверждает, что логарифм среднего S-матрицы можно представить в виде ряда:

$$\ln K_\gamma = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}F_n, \tag{5.77}$$

где каждое F_n дается *единственным* графиком (рис. 5.2).

Доказательство теоремы о связных графиках нетрудно получить, заметив, что сокращение несвязных графиков есть факт чисто комбинаторного происхождения. Он опирается на свойства комбинаторных множителей, возникающих при раскрывании среднего (5.74) по теореме Вика, а также на свойства биномиальных коэффициентов, появляющихся из членов Λ^n в (5.76). Множители $1/n$ в (5.77) возникают потому, что способов «связного» усреднения $\langle\!\langle \widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_1)\ldots\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t_n)\rangle\!\rangle$ всего $(n-1)!$, а способов упорядочения времен в графике — $n!$.

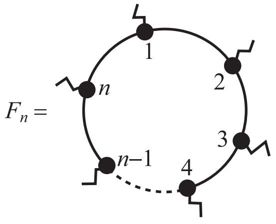

Рис. 5.2

Теорема (5.77) напоминает известную теорему о связных графиках для термодинамического потенциала Ω (см. [1], гл. 3, § 15). Нетрудно заметить, что различие между усредняемыми величинами, $\ln\langle S\rangle$ в одном случае, и Ω — в другом, сводится просто к замене реального времени на мацубаровское. (Напомним, что $e^{\Omega/T}$ есть среднее от S-матрицы во мнимом времени — см. гл. 7.) Ход доказательства в обоих случаях один и тот же.

б. Перейдем к рассмотрению членов ряда (5.77). Первые три графика представлены на рис. 5.3.

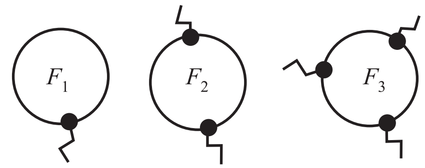

Рис. 5.3

Вычисление удобно провести во временно́м представлении. Вклад F_1 имеет следующий вид:

$$F_1 = -i\int\limits_{-\infty}^{0}\langle\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)\rangle\,dt = -i\int\limits_{-\infty}^{0}\left(\int\langle\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\rangle\,d^3\mathbf{r}\right)e^{\gamma t}\,dt = \\ = -i\,\frac{n}{\gamma}\int U(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}, \qquad (5.78)$$

где n — плотность ферми-газа. Физически этот вклад связан со сдвигом энергии основного состояния, вычисленным в первом порядке теории возмущений. Поэтому он не имеет отношения к вопросу об ортогональности состояний. В самом деле, допустим, что в результате введения возмущения энергия основного состояния изменилась на $\delta\varepsilon$, а само состояние осталось в точности тем же. Тогда

$$\ln K_\gamma = -i\int\limits_{-\infty}^{0}\delta\varepsilon e^{\gamma t}dt = -i\,\frac{\delta\varepsilon}{\gamma}. \qquad (5.79)$$

Вклад второго порядка F_2 есть

$$F_2 = \frac{(-i)^2}{2}\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{0}\langle\!\langle \mathrm{T}\,\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t')\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)\rangle\!\rangle\,dt'\,dt = \\ = -\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{t}\langle\!\langle\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t')\rangle\!\rangle\,dt'\,dt. \qquad (5.80)$$

Выполняя усреднение в $\langle\!\langle\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t)\widehat{\mathscr{H}}_{\rm int}(t')\rangle\!\rangle$ по теореме Вика, получаем

$$e^{\gamma t}e^{\gamma t'}\iint U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')\,\langle\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t')\rangle\,\langle\psi(\mathbf{r},t)\psi^+(\mathbf{r}',t')\rangle\,d^3\mathbf{r}\,d^3\mathbf{r}'. \qquad (5.81)$$

Теперь заменим потенциал рассеяния на δ-функцию, $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, и вычислим парные средние в (5.81) следующим образом:

$$\langle\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t')\rangle_{\mathbf{r}=0} = \sum_{\mathbf{p}}e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)-\delta\xi(\mathbf{p})}n(\mathbf{p}) = \frac{\nu_0}{\delta+i(t-t')}, \qquad (5.82)$$

$$\langle\psi(\mathbf{r},t)\psi^+(\mathbf{r},t')\rangle_{\mathbf{r}=0} = \sum_{\mathbf{p}}e^{i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+\delta\xi(\mathbf{p})}(1-n(\mathbf{p})) = \\ = \frac{\nu_0}{\delta+i(t-t')}. \qquad (5.83)$$

Параметр $\delta\approx E_F^{-1}$ введен в (5.82), (5.83), чтобы регуляризовать интеграл по $\mathbf{p}$. Для вычисления этого интеграла мы воспользовались приближением постоянной плотности состояний в окрестности E_F и заменили интеграл по $\mathbf{p}$ интегралом по ξ. Такое приближение оправдано тем, что нас интересует инфракрасно расходящийся вклад в F_2, который определяется динамикой частиц с энергиями близкими к E_F.

Подставляя (5.82) и (5.83) в выражение (5.81), а последнее, в свою очередь, в (5.80), получаем

$$F_2 = -(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{t}e^{\gamma t}e^{\gamma t'}\frac{dt'\,dt}{(\delta+i(t-t'))^2}. \qquad (5.84)$$

Этот интеграл нетрудно вычислить, если перейти к новым переменным $t_+ = -(t+t')$, $t_- = t-t'$, и учесть, что $dt\,dt' = (1/2)dt_+\,dt_-$. Интегрирование выполняется так:

$$F_2 = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{0}^{+\infty}dt_+e^{-\gamma t_+}\int\limits_{t_+}^{\infty}\frac{dt_-}{(\delta+it_-)^2} = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{0}^{+\infty}\frac{e^{-\gamma t_+}}{t_++i\delta}dt_+. \qquad (5.85)$$

В пределе $\gamma\to 0$, что соответствует медленному включению рассеивающего потенциала $U(\mathbf{r})$, интеграл по t_+ есть $-\ln(i\delta\gamma)\approx\ln(E_F/i\gamma)$. В результате получаем

$$\mathrm{Re}\,F_2 = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2\ln\frac{E_F}{\gamma}. \qquad (5.86)$$

Мы отбросили мнимую часть F_2, поскольку она дает вклад только в неинтересующую нас фазу интеграла перекрытия K_γ.

Для слабого потенциала $U(\mathbf{r})$ величины F_n быстро убывают с ростом n, поскольку величина F_n пропорциональна n-й степени потенциала. Поэтому для оценки $|K_\gamma|$ достаточно учесть только $\operatorname{Re} F_2$, отбросив вклады с $n > 2$. Итак, мы получаем следующее выражение для интеграла перекрытия:

$$|K_\gamma| = \left(\frac{\gamma}{E_F}\right)^{\delta_0^2/2\pi^2}, \quad \delta_0 = \pi\alpha\nu_0. \tag{5.87}$$

Нетрудно убедиться в том, что δ_0 есть в точности фаза рассеяния в s-канале на короткодействующем потенциале $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, взятая в первом борновском приближении.

Напомним, что при вычислении F_2 мы считали фермионы бесспиновыми. Учет двукратного спинового вырождения приводит к дополнительному множителю 2 в выражении (5.84) и далее. В результате множитель $1/2$ в показателе степени в выражении (5.87) сокращается, и окончательный ответ выглядит так:

$$|K_\gamma| = \left(\frac{\gamma}{E_F}\right)^{\alpha}, \quad \alpha = \frac{\delta_0^2}{\pi^2}. \tag{5.88}$$

в. Теперь, зная K_γ, оценим перекрытие основных состояний $\langle 0|0'\rangle$. Для этого полезно подумать о пределах применимости нашего вычисления. Со стороны малых γ имеется ограничение, связанное с конечностью размера системы. Мы считали плотность состояний непрерывной, как и полагается в теории ферми-газа. Однако в конечной системе уровни дискретны.

Оценим расстояние Δ между уровнями в сферическом объеме радиуса L. Если говорить о всех уровнях вместе, то, разумеется, $\Delta = \left(\frac{4\pi}{3}L^3\nu_0\right)^{-1}$. В нашей задаче, однако, важны только состояния с угловым моментом, равным нулю, которых гораздо меньше. Действительно, допустим, что потенциал расположен точно в центре сферы. Тогда угловой момент будет хорошим квантовым числом и, поскольку наш δ-потенциал рассеивает только s-волны, состояния с $l > 0$ «выходят из игры». Уровни же с $l = 0$, принимающие участие в рассеянии, расположены на расстоянии порядка $\Delta_0 = \hbar v_F/L$ друг от друга. (Данная оценка справедлива в окрестности E_F.)

Теперь заметим, что при достаточно малом $\gamma \ll \Delta_0$ мы имеем дело со случаем адиабатически медленного включения возмущения. При этом как во время, так и после действия возмущения состояние системы остается экспоненциально близким к основному, и, следовательно,

$$|K|_{\gamma\ll\Delta_0} = |\langle 0|0'\rangle| + \mathrm{O}(e^{-\Delta_0/\gamma}). \tag{5.89}$$

В принципе, пользоваться обычной теорией возмущений для вычисления K_γ можно только для $\gamma \gg \Delta_0$. Однако по порядку величины

правильный результат получится, если приравнять $K_{\gamma=\Delta_0}$ и $\langle 0|0'\rangle$. Поэтому полагаем

$$\gamma \approx \Delta_0 = \frac{\hbar v_F}{L}, \tag{5.90}$$

что дает требуемую оценку перекрытия основных состояний:

$$\langle 0|0'\rangle \approx \frac{1}{(p_0 L)^\alpha}, \quad \alpha = \frac{\delta_0^2}{\pi^2}, \tag{5.91}$$

где $\delta_0 = \pi\alpha\nu_0$.

Выражение (5.91) получено для слабого потенциала возмущения. Более точная оценка интеграла перекрытия $\langle 0|0'\rangle$, не использующая предположение о слабом возмущении, потребовала бы суммирования всего ряда (5.19), поскольку в каждом порядке имеется логарифмическая расходимость, подобная найденной выше для F_2. Эта более сложная задача может быть решена при помощи метода бозонизации (см. задачу 78, гл. 12).

27 б. (*Второе решение.*) Вычислим F_2, используя технику причинных функций Грина. Для этого рассмотрим первое из выражений (5.80) и раскроем среднее $\langle\!\langle \mathrm{T}\ldots\rangle\!\rangle$ обычным образом как произведение причинных гриновских функций. Как и выше, заменяем потенциал $U(\mathbf{r})$ на δ-функцию $\alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$. В частотном представлении гамильтониан возмущения $\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}} = \alpha e^{\gamma t}\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)|_{\mathbf{r}=0}$ принимает следующий вид:

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}}(\omega) = \frac{\alpha}{\gamma - i\omega}\sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} a^+_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}. \tag{5.92}$$

Подставляя это выражение в (5.80) и переходя к интегралам по $\xi(\mathbf{p})$ и $\xi(\mathbf{p}')$, получаем

$$F_2 = -\frac{1}{2}\nu_0^2 \int \frac{G(\omega_1,\xi_1)\,\alpha}{\gamma - i(\omega_2-\omega_1)}\,\frac{G(\omega_2,\xi_2)\,\alpha}{\gamma - i(\omega_1-\omega_2)}\,\frac{d\omega_1\,d\omega_2\,d\xi_1\,d\xi_2}{(2\pi)^2} = -\frac{1}{2}\alpha^2\nu_0^2\iint I(\xi_1,\xi_2)\,d\xi_1\,d\xi_2. \tag{5.93}$$

Мы ввели обозначение

$$I(\xi_1,\xi_2) = \iint \frac{G(\omega_1,\xi_1)\,G(\omega_2,\xi_2)}{(\omega_1-\omega_2)^2+\gamma^2}\,\frac{d\omega_1\,d\omega_2}{(2\pi)^2}, \tag{5.94}$$

где $G(\omega,\xi) = 1/(\omega - \xi + i\delta\operatorname{sgn}\xi)$. Как и выше, нам будет удобно считать фермионы бесспиновыми и восстановить зависимость от спина в конце.

Вычислим интеграл (5.94) по $\omega_{1,2}$, используя теорему Коши и теорию вычетов. Рассмотрим сначала случай $\xi_1 > 0$ (рис. 5.4). Проинтегрировав по ω_1, находим

$$I = \frac{1}{2\gamma}\int \frac{d\omega_2/2\pi}{(\omega_2 - \xi_1 + i\gamma)(\omega_2 - \xi_2 + i\delta\operatorname{sgn}\xi_2)}. \tag{5.95}$$

Интеграл отличен от 0 только при $\xi_2 < 0$ (рис. 5.5).

В этом случае получаем
$$I = \frac{i}{2\gamma}\,\frac{\theta(\xi_1)\theta(-\xi_2)}{\xi_2 - \xi_1 + i\gamma}. \tag{5.96}$$

Рассмотрим теперь случай $\xi_1 < 0$ (рис. 5.6). Проинтегрировав по ω_1, находим
$$I = \frac{1}{2\gamma}\int \frac{d\omega_2/2\pi}{(\omega_2 - \xi_1 - i\gamma)(\omega_2 - \xi_2 + i\delta\,\mathrm{sgn}\,\xi_2)}. \tag{5.97}$$

Интеграл здесь отличен от 0 только при $\xi_2 > 0$ (рис. 5.7) и равен
$$I = \frac{i}{2\gamma}\,\frac{\theta(-\xi_1)\,\theta(\xi_2)}{\xi_1 - \xi_2 + i\gamma} \tag{5.98}$$

Собирая эти результаты в одно выражение, получаем
$$F_2 = i\frac{\alpha^2\nu_0^2}{4\gamma}\int\limits_{\xi_1\xi_2<0}\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{|\xi_1 - \xi_2| - i\gamma}. \tag{5.99}$$

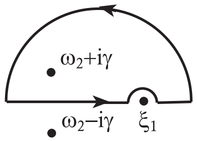

Рис. 5.4

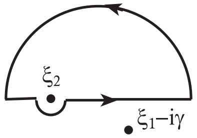

Рис. 5.5

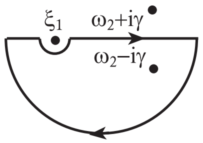

Рис. 5.6

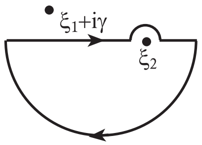

Рис. 5.7

Как уже отмечалось, мнимая часть $\ln K_\gamma$ не имеет отношения к вопросу об ортогональности. Поэтому оставляем только вещественную часть:

$$\mathrm{Re}\,F_2 = -\frac{\alpha^2\nu_0^2}{4}\int\limits_{\xi_1\xi_2<0}\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{(\xi_1 - \xi_2)^2 + \gamma^2} = -\frac{1}{4}(\alpha\nu_0)^2\int\limits_0^{\xi_{\max}}\frac{2\xi\,d\xi}{\xi^2 + \gamma^2} = -\frac{1}{4}(\alpha\nu_0)^2\ln\frac{\xi_{\max}^2 + \gamma^2}{\gamma^2}.$$

Интеграл обрезается сверху при $\xi_{\max} \approx E_F = p_0^2/2m \gg \gamma$, поэтому окончательно имеем
$$\mathrm{Re}\,F_2 = -\frac{\delta_0^2}{2\pi^2}\,\ln\frac{E_F}{\gamma}, \quad \delta_0 = \pi\alpha\nu_0. \tag{5.100}$$

Учет двукратного спинового вырождения дает дополнительный множитель 2 в выражении (5.93) и всех последующих выражениях. В результате множитель 1/2 в (5.100) сокращается и мы приходим к выражению (5.88).

Глава 6
ЭЛЕКТРОНЫ И ФОНОНЫ

6.1. Гамильтониан фононов. Диаграммная техника

Рассмотрим взаимодействие электронов с фононами. Фононы представляют собой кванты колебаний кристаллической решетки. Различают два основных типа фононов — *акустические* и *оптические*. Отличие между ними заключается в том, что частота акустических фононов обращается в нуль при $\mathbf{k} = 0$, а частота оптических фононов положительна при всех $\mathbf{k}$. Акустические фононы существуют во всех кристаллах, поскольку звук может распространяться в любой упругой среде. Оптические же фононы имеются только в кристаллах, содержащих более одного атома в элементарной ячейке.

Для описания закона дисперсии акустических фононов $\omega(\mathbf{k})$ часто пользуются так называемой моделью Дебая. В этой модели закон дисперсии принимается равным $\omega_0(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$ при всех $|\mathbf{k}| < k_D$, где величина k_D выбирается так, чтобы объем шара радиуса k_D давал правильное число колебательных состояний на единицу объема: $(4\pi/3)k_D^3 = (2\pi)^3 v^{-1}$, где v — объем элементарной ячейки кристалла. Аналогично, оптические фононы описываются моделью Эйнштейна, в которой частота фононов полагается не зависящей от волнового вектора: $\omega_0(\mathbf{k}) = \Omega_0 = \mathrm{const}$, причем $|\mathbf{k}| < k_D$ Пример двухкомпонентного кристалла, в котором имеются как акустические, так и оптические фононы, был рассмотрен в задаче 1, где, в частности, было показано, что дисперсия оптических фононов исчезает при сильном отличии масс атомов.

Для квантовомеханического описания фононов вводятся операторы смещения решетки $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ и плотности импульса решетки $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$. (Для определенности мы будем говорить об акустических фононах.) Операторы $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ могут быть стандартным образом записаны через канонические бозе-операторы рождения и уничтожения фононов $b_{\mathbf{k}}^+$ и $b_{\mathbf{k}}$:
$$\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},\alpha}\frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha}}{\sqrt{2V\rho\,\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})}}\left[b_{\mathbf{k}\alpha}\,e^{i\mathbf{kr} - i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} + b_{\mathbf{k}\alpha}^+\,e^{-i\mathbf{kr} + i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t}\right], \tag{6.1}$$

$$\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},\alpha} i\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha}\sqrt{\frac{\rho\,\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})}{2V}}\left[b_{\mathbf{k}\alpha}^+\,e^{-i\mathbf{kr} + i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} - b_{\mathbf{k}\alpha}\,e^{i\mathbf{kr} - i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t}\right], \tag{6.2}$$

где ρ, V — плотность и объем кристалла, а $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha}$ — вектор поляризации фонона. Индекс α нумерует нормальные моды кристалла[1]. Операторы рождения и уничтожения с противоположными $\mathbf{k}$ равны: $b_{-\mathbf{k}\alpha} = b^+_{\mathbf{k}\alpha}$. (Это следует из вещественности $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$.)

Введенные операторы подчиняются следующим коммутационным соотношениям. Коммутаторы бозе-операторов $b_\mathbf{k}$ и $b^+_\mathbf{k}$ канонические: $[b_{\mathbf{k}\alpha}, b^+_{\mathbf{k}'\alpha'}] = (2\pi)^3 V\,\delta_{\alpha\alpha'}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$. Нормировочные множители в определениях (6.1) и (6.2) выбраны так, что коммутационные соотношения для операторов $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$, следующие из (6.1) и (6.2), имеют вид

$$[\widehat{u}_\alpha(\mathbf{r},t), \widehat{p}_\beta(\mathbf{r}',t')] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{6.3}$$

Это в точности соответствует скобкам Пуассона соответствующих классических величин в теории упругости сплошной среды.

Гамильтониан фононов имеет следующий вид:

$$\widehat{\mathscr{H}} = \int\left(\frac{1}{2\rho}\,\widehat{\mathbf{p}}^2 + \frac{\rho c^2}{2}\,\widehat{\mathbf{u}}^2\right)d^3\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})\left(b^+_\mathbf{k} b_\mathbf{k} + \frac{1}{2}\right). \tag{6.4}$$

Нетрудно видеть, что гамильтониан (6.4) приводит к динамике операторов $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$, заданной соотношениями (6.1) и (6.2).

Взаимодействие фононов и электронов является электрическим по своей природе. Колебания решетки приводят к отклонению электрического поля ионов, действующего на электроны, от своего среднего значения. Потенциал возникающего добавочного поля принято называть *деформационным потенциалом.* В отсутствие экранировки кулоновские силы являются дальнодействующими и взаимодействие электронов с фононами оказывается существенно нелокальным. Такая ситуация имеет место для взаимодействия электронов с оптическими фононами. Характер зависимости деформационного потенциала от волновых векторов электронов и фононов определяется симметрией кристаллической решетки.

В отличие от взаимодействия с оптическими фононами, деформационный потенциал акустических фононов обычно является локальным. Дело в том, что при акустических колебаниях решетки с малыми $\mathbf{k}$ смещения соседних атомов практически одинаковы (см. задачу 1). Вследствие этого, электрическая поляризация, возникающая при акустических колебаниях, оказывается пропорциональной градиенту деформации решетки: $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \approx \nabla\operatorname{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Поэтому потенциал электрического поля поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ оказывается пропорциональным деформации решетки: $U(\mathbf{r}) \approx \operatorname{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$.

Взаимодействие электронов с акустическими фононами принято рассматривать с помощью упрощенной модели, в которой пренебрегается взаимодействием с поперечными акустическими модами, имеющими векторы поляризации $\mathbf{e_k} \perp \mathbf{k}$. Оказывается удобным выразить деформационный потенциал через поле

[1] В дальнейшем мы будем рассматривать главным образом продольные колебания, для которых $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha} \parallel \mathbf{k}$.

$$\widehat{\varphi}(\mathbf{r},t) = \sum_\mathbf{k}\sqrt{\frac{\omega_0(\mathbf{k})}{2V}}\,\left\{i\,\widehat{b}_{\mathbf{k},\parallel}\,e^{i\mathbf{kr}-i\omega_0(\mathbf{k})t} - i\,\widehat{b}^+_{\mathbf{k},\parallel}\,e^{-i\mathbf{kr}+i\omega_0(\mathbf{k})t}\right\}. \tag{6.5}$$

Для дебаевских фононов с законом дисперсии $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$ имеет место равенство $\widehat{\varphi}(\mathbf{r},t) = c\sqrt{\rho}\,\operatorname{div}\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$. (Поэтому в атомных единицах $\varphi(\mathbf{r}) \approx \operatorname{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$.) Деформационный потенциал акустических фононов может быть записан как $U(\mathbf{r}) = g\widehat{\varphi}(\mathbf{r})$, где g — константа электрон-фононного взаимодействия.

В описанной модели гамильтониан взаимодействия электронов с фононами записывается через операторы поля (6.5) следующим образом:

$$\widehat{\mathscr{H}}_\text{int} = g\int\widehat{\psi}^+(\mathbf{r})\,\widehat{\psi}(\mathbf{r})\,\widehat{\varphi}(\mathbf{r})\,d^3r \tag{6.6}$$

(так называемый *гамильтониан Фрёлиха*). Хотя из сделанных оценок следует, что $g \approx 1$ в атомных единицах, надо иметь в виду что сила электрон-фононного взаимодействия может весьма сильно варьироваться от одной системы к другой.

Диаграммная техника строится с помощью функции Грина фононов, определенной следующим образом:

$$D(x,x') = -i\langle \mathrm{T}\,\widehat{\varphi}(x)\,\widehat{\varphi}(x')\rangle. \tag{6.7}$$

В отсутствие взаимодействия функция Грина $D(\omega,\,\mathbf{k})$ есть

$$D_0(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i0}. \tag{6.8}$$

Правила диаграммной техники для электронов и фононов почти такие же, как и для случая двухчастичного взаимодействия:

1. Все диаграммы строятся из двух элементов: простых линий, описывающих распространение электронов, и волнистых, описывающих распространение фононов.

2. Две электронных и одна фононная линии соединяются в вершинах.

3. n-му порядку теории возмущений соответствуют диаграммы с $2n$ вершинами.

4. Каждой электронной линии соответствует множитель $G_0(x-x')$ (x — начальная точка, x' — конечная). Каждой фононной — множитель $D_0(x-x')$.

5. Выражение, соответствующее данной диаграмме, следует проинтегрировать по координатам ее вершин. Каждой вершине соответствует множитель g.

6. Получившийся ответ следует умножить на $i^n\,(-1)^F$, где n — число волнистых линий, а F — число замкнутых петель, отвечающих ферми-частицам.

Вычислив собственно-энергетическую часть функции Грина электронов, можно определить спектр электронов с учетом электрон-фононного взаимодействия. Для того чтобы аналогичным образом найти спектр фононов, нужно рассмотреть полюса фононной функции Грина $D(\omega, \mathbf{k})$. Как и для функции Грина электронов $G(\varepsilon, \mathbf{p})$, для фононной функции Грина можно проделать анализ, описанный в п. 4.1.1, выделить собственно-энергетическую часть и провести суммирование диаграмм с помощью уравнения Дайсона. Собственно-энергетическая часть фононов обычно называется *поляризационным оператором* и обозначается через $\Pi(\omega, \mathbf{k})$. Поляризационный оператор $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ есть сумма следующих диаграмм:

Рис. 6.1

Уравнение Дайсона для функции Грина фононов выглядит аналогично уравнению (4.9):

$$D = D_0 + D_0 \Pi\, D \tag{6.9}$$

и решается стандартным образом:

$$D^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = D_0^{-1}(\omega, \mathbf{k}) - \Pi(\omega, \mathbf{k}). \tag{6.10}$$

Поэтому спектр фононов определяется уравнением

$$D_0^{-1}(\omega(\mathbf{k}), \mathbf{k}) = \Pi(\omega(\mathbf{k}), \mathbf{k}). \tag{6.11}$$

Вещественная часть $\omega(\mathbf{k})$ определяет дисперсию фононов, а мнимая — их затухание из-за передачи энергии электронам.

При изучении эффектов электрон-фононного взаимодействия в металле оказывается удобным пользоваться безразмерной константой электрон-фононного взаимодействия $\zeta = g^2\nu_0$ ($\nu_0 = mp_0/2\pi^2\hbar^3$ — плотность электронных состояний без учета спинового вырождения). Оценка ζ из первых принципов дает значение $\zeta \sim 1$. Поэтому, казалось бы, решение задачи в общем виде, эквивалентное суммированию диаграмм произвольно высокого порядка, должно быть невозможным. Однако оказывается, что в задаче присутствует другой малый параметр, позволяющий найти решение без предположения о малости ζ. Этот параметр есть ω_D/ε_F ($\omega_D = ck_D$ — дебаевская частота), что по порядку величины равно $\sqrt{m/M}$, где m и M — массы электронов и ионов. Условие $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ означает, что ионы, ввиду их большой массы, двигаются намного медленнее, чем электроны. Поэтому электроны не могут раскачать решетку, вместо этого они просто подстраиваются под ее локальную конфигурацию. Другая интерпретация условия $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ — большое запаздывание фононов на временах порядка $\hbar/\varepsilon_F$.

Теория электрон-фононного взаимодействия в металле, использующая малый параметр $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$, называется *теорией Мигдала.*

Упрощенно говоря, эта теория позволяет распространить идеи теории полярона (см. задачи 16, 17, 21, 33) на случай электронной ферми–системы. Более формально, теория Мигдала представляет собой набор утверждений о свойствах гриновских функций, вытекающих из медленности динамики фононов по сравнению с динамикой электронов. В этой теории показывается, что перенормировки, хотя и велики, «не распространяются» из простых графиков в более сложные. Это проявляется в том, что нет обратного влияния перенормировки электронного спектра на фононы, а также в малости поправок к вершине электрон-фононного взаимодействия. Основные положения теории Мигдала сформулированы в задачах 29–31. Теория описывает влияние электрон–фононного взаимодействия в терминах перенормировки свойств квазичастиц (электронов и фононов). При этом не происходит какого-либо разрушения ферми-поверхности — утверждается, что картина невзаимодействующих квазичастиц остается справедливой.

В заключение следует сказать, что электрон-фононное взаимодействие — не такая простая вещь, как может показаться из вышеизложенного. Как известно, это взаимодействие приводит к образованию куперовских пар и к сверхпроводимости (см. гл. 10). Кроме того, в одномерном случае электрон-фононное взаимодействие приводит к образованию пайерлсовского диэлектрика (см. задачу 32). Как в случае сверхпроводящего, так и в случае диэлектрического состояний происходит полное «разрушение» ферми-поверхности, проявляющееся в исчезновении состояний с достаточно малыми энергиями. Поэтому, строго говоря, в присутствие электрон–фононного взаимодействия фермижидкость никогда не является устойчивым состоянием при нулевой температуре.

Литература: Вторично–квантованные операторы фононного поля определены в [1], §7. Правила диаграммной техники для электрон–фононного взаимодействия приведены в [1], §9. Весьма прозрачное изложение этих вопросов для модели оптических фононов содержится в [3], §6.10. Теория электрон-фононного взаимодействия в металлах рассмотрена в [1], §21, а также в [6], §64, 65.

6.2. Задачи 28–33

Задача 28. (*Время жизни квазичастиц.*) Рассмотрим вырожденный электронный газ при $T = 0$, взаимодействующий с колебаниями решетки (см. задачи 16, 17). Найдите затухание квазичастицы с энергией $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$, вычислив собственно-энергетическую часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ в низшем порядке по взаимодействию. Затухание дается мнимой частью $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$.

Задача 29. (*Перенормировка спектра электронов.*) Изучите влияние электрон-фононного взаимодействия на спектр электронов. Найдите вещественную часть $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ и убедитесь в том, что она зависит от ε и практически не зависит от $\mathbf{p}$.

Покажите, что $\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon)$ может быть велика только в небольшой по сравнению с ε_F области энергий $|\varepsilon|\leqslant\omega_D$ (мы отсчитываем энергию квазичастиц ε от уровня Ферми). Выразите плотность состояний через $\Sigma(\varepsilon)$ и покажите, что вблизи уровня Ферми электроны «утяжеляются», а плотность состояний — возрастает.

Задача 30. (*Теорема Мигдала — нет перенормировки вершины.*) Оцените поправку к вершине электрон-фононного взаимодействия (рис. 6.2). Покажите, что ее относительная величина порядка ω_D/ε_F.

Для того чтобы прояснить роль параметра ω_D/ε_F теории Мигдала, вычислите вершинную часть в смешанном «импульсно-временном» представлении, в котором функция Грина зависит от импульса и от времени.

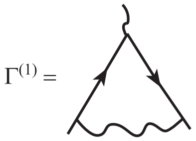

Рис. 6.2

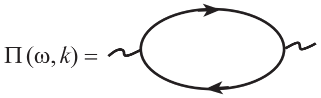

Рис. 6.3

Задача 31. (*Фононы в металле.*) Рассмотрим собственно-энергетическую часть $\Pi(\omega, k)$ фононной функции Грина (рис. 6.3).

а. Получите формулу для перенормированной скорости звука:

$$c^2 = c_0^2(1-2\zeta), \tag{6.12}$$

где $\zeta = g^2\nu_0$ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. (В металлах обычно параметр ζ не мал, но все же $1-2\zeta > 0$.)

б. Рассматривая $\mathrm{Im}\,\Pi(\omega, k)$ при малых ω и k, определите длину затухания звука в металле. Как она зависит от частоты? Сравните с затуханием звука в газе.

Задача 32*. (*Пайерлсовская неустойчивость.*) Найдите $\Pi(\omega, k)$ (см. рис. 6.3) в одномерном случае. Получите логарифмическую особенность $\Pi(\omega, k)$ при $k = 2p_0$. Вблизи этого волнового вектора частота фононов становится мнимой, что означает неустойчивость системы по отношению к какой-то перестройке. Что именно при этом происходит? В какое состояние переходит система?

Задача 33. (*Автолокализация полярона сильной связи.*) Рассмотрим электрон, взаимодействующий с упругой изотропной средой:

$$\hat{\mathscr{H}} = \int\Big[-\frac{1}{2}\psi^+(\mathbf{r})\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \lambda\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})w(\mathbf{r}) + \\ + \frac{1}{2}\rho\dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}Kw^2(\mathbf{r})\Big]\,d^Dr. \tag{6.13}$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — поле смещений среды, а $w(\mathbf{r}) = \nabla\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — деформация среды. Мы используем классическое выражение $\rho\dot{\mathbf{u}}^2/2$ для кинетической

энергии, поскольку нас будет интересовать случай сильного взаимодействия, когда смещение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ достаточно велико. В этой ситуации поля $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и $w(\mathbf{r})$ можно считать классическими. Более того, в духе адиабатического приближения можно считать, что деформация решетки следует за движением электрона, не имея какой-либо собственной динамики[2].

а. Рассмотрим ситуацию, когда электрон вместе с вызванной им деформацией среды $w(\mathbf{r})$ покоится (в этом случае $\dot{\mathbf{u}} = 0$), и найдем $w(\mathbf{r})$, минимизирующую энергию (6.13): $w(\mathbf{r}) = -(\lambda/K)|\psi(\mathbf{r})|^2$. Это выражение означает, что электрон деформирует решетку вокруг себя, причем деформация такова, что энергия электрона в его собственном поле $w(\mathbf{r})$ понижается. Если выигрыш энергии достаточно велик, то электрон «сам себе копает яму» и образует в ней связанное состояние.

Запишите уравнение Шредингера для волновой функции электрона $\psi(\mathbf{r})$, выразив потенциал через $\psi(\mathbf{r})$. Решение этого *нелинейного* уравнения легче всего получить в случае одного пространственного измерения. Найдите $\psi(\mathbf{r})$ в этом случае и определите выигрыш энергии за счет автолокализации. Обсудите, как размер локализованного состояния, энергия связи, и условие его существования зависят от величины константы связи λ и от размерности пространства.

б. Определим эффективную массу автолокализованного состояния полярона[3]. В приближении классической деформации (6.13) найдите энергию состояния, движущегося с постоянной скоростью $\mathbf{v}$, как функцию $\mathbf{v}$ и константы связи λ. Из найденной зависимости получите выражение для эффективной массы полярона. При какой величине взаимодействия λ справедливо использованное приближение сильной связи (т. е. классической деформации)?

6.3. Решения задач 28–33

28. Собственно-энергетическая часть дается диаграммой на рис. 4.10, в которой используется причинная функция Грина электрона в ферми-газе $G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = (\varepsilon - \xi_\mathbf{p} + i0\,\mathrm{sgn}\,\xi_\mathbf{p})^{-1}$. В задаче 16 эта же диаграмма рассматривалась для одного электрона, взаимодействующего с фононами. При этом была использована функция Грина электрона в пустом пространстве (см. (4.34)). Однако в задаче о ферми-газе эта функция не годится, поскольку она не учитывает, что электрон не может переходить в занятые состояния. Таким образом,

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{ig^2}{(2\pi)^4}\int\frac{c^2k^2}{\omega^2 - c^2k^2 + i0}\,\frac{d\omega\,d^3k}{\varepsilon - \omega - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + i\,0\ \mathrm{sgn}\,\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}}. \tag{6.14}$$

---

[2] Адиабатическое приближение для полярона сильной связи и теория автолокализации были впервые предложены в работе: *S. I. Pekar*// J. Phys. (U.S.S.R.). 1946. V. 10. P. 341; см. также: *С. И. Пекар.* Исследования по электронной теории кристаллов.—М.: Гостехиздат, 1951.

[3] *Л. Д. Ландау, С. И. Пекар*// ЖЭТФ. 1948. Т. 18. С. 419.

Основное отличие этого выражения от (4.34) заключается в способе обхода полюсов. Они находятся в точках $\omega_1 = \varepsilon - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + i\,0 \operatorname{sgn} \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}$ и $\omega_{2,3} = \pm(ck - i\,0)$.

Замыкая контур интегрирования по ω так, чтобы внутрь него попал только один полюс из трех, перепишем правую часть выражения (6.14) следующим образом:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 c}{16\pi^3} \int\limits_{|\mathbf{k}|<k_D} \left(\frac{\theta(\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{\varepsilon - ck - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + i0} + \frac{\theta(\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{\varepsilon + ck - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - i0} \right) k\, d^3k. \tag{6.15}$$

Теперь воспользуемся стандартной заменой переменной в интеграле по d^3k, использованной в решении задачи 16. Перейдем к интегрированию по $|\mathbf{k}|$ и $p_1 = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$ по формуле (4.38) (см. также [1], § 21, п. 3). В этих переменных выражение (6.15) для $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ можно переписать так:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 c}{8\pi^2 p} \int\limits_0^{k_D}\!\! \int \left(\frac{\theta(p_1 - p_0)}{\varepsilon - ck - \xi_{p_1} + i0} + \frac{\theta(p_0 - p_1)}{\varepsilon + ck - \xi_{p_1} - i0} \right) p_1 dp_1\, k^2 dk. \tag{6.16}$$

Область интегрирования по p_1 в (6.16) есть

$$|p - k| < p_1 < p + k. \tag{6.17}$$

Теперь удобно перейти от переменной интегрирования p_1 к переменной $\xi = p_1^2/2m - \varepsilon_F$:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 cm}{8\pi^2 p} \int\limits_0^{k_D}\!\! \int \left(\frac{\theta(\xi)}{\varepsilon - ck - \xi + i0} + \frac{\theta(-\xi)}{\varepsilon + ck - \xi - i0} \right) d\xi\, k^2 dk, \tag{6.18}$$

причем интеграл по ξ в (6.18) берется по области

$$\frac{(p-k)^2}{2m} - \varepsilon_F < \xi < \frac{(p+k)^2}{2m} - \varepsilon_F. \tag{6.19}$$

Вещественная часть $\Sigma(\varepsilon, p)$ будет вычислена в следующей задаче, здесь же ограничимся мнимой частью. Применяя известную формулу

$$\operatorname{Im} \frac{1}{x + i0} = -\pi\delta(x), \tag{6.20}$$

получаем

$$\operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon, p) = \frac{g^2 cm}{8\pi p} \iint \big(\theta(-\xi)\delta(\varepsilon + ck - \xi) - \theta(\xi)\delta(\varepsilon - ck - \xi)\big) d\xi k^2 dk. \tag{6.21}$$

Второе слагаемое (оно отлично от нуля при $\varepsilon > 0$) дает время жизни электронных состояний, а первое (отличное от нуля при $\varepsilon < 0$) — дырочных.

До настоящего момента все преобразования были точными. Теперь обратим внимание на то, что при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ вероятность распада можно вычислять, интегрируя в (6.21) не по области (6.19), а просто по всем ξ.

Дело в том, что сохранение энергии при распаде частицы с энергией ε на частицу с энергией ξ и фонона с энергией ck гарантирует соблюдение неравенств (6.19), поскольку $c \ll v_F$ и $\varepsilon \approx \xi_{\mathbf{p}}$.

В силу сказанного интеграл по ξ в (6.21) берем по $-\infty < \xi < \infty$:

$$\operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon, p) = \frac{g^2 c}{8\pi v_F} \int\limits_0^{k_D} \big(\theta(-\varepsilon - ck) - \theta(\varepsilon - ck)\big)\, k^2\, dk. \tag{6.22}$$

При переходе от (6.21) к (6.22) мы заменили в коэффициенте p на p_0.

Интегрируя по k в выражении (6.22), получаем

$$\operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon, p) = -\frac{g^2 c}{8\pi v_F} \operatorname{sgn} \varepsilon \int\limits_0^{k_\varepsilon} k^2\, dk = -\operatorname{sgn} \varepsilon\, \frac{g^2 c k_\varepsilon^3}{24\pi v_F}, \tag{6.23}$$

где $k_\varepsilon = \min[k_D, |\varepsilon|/c]$. Найденная мнимая часть $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon, p)$ при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ является функцией одного только ε, и не зависит от p.

Переходя к безразмерной константе ζ электрон-фононного взаимодействия, $g^2 = \zeta/\nu_0$, получаем

$$\operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon) = -\frac{\zeta\pi}{12 p_0^2 c^2} \operatorname{sgn} \varepsilon \cdot \begin{cases} |\varepsilon|^3 & \text{при } |\varepsilon| < \omega_D, \\ \omega_D^3 & \text{при } |\varepsilon| > \omega_D. \end{cases} \tag{6.24}$$

То обстоятельство, что $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon)$ оказалась нечетной функцией ε, является следствием электрон-дырочной симметрии, имеющей место при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$.

Обратим внимание на то, что при малых энергиях

$$\operatorname{Im} \Sigma(\varepsilon) \ll \varepsilon, \tag{6.25}$$

т. е. время жизни квазичастицы с энергией вблизи уровня Ферми очень велико по сравнению с $\hbar/\varepsilon$, и растет при уменьшении энергии быстрее, чем ε^{-1}. Это означает, что электрон-фононное взаимодействие не разрушает ферми-жидкостную картину.

Зависимость $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon < \omega_D) \sim \varepsilon^3$ можно объяснить качественно. Вероятность испускания электроном фонона с заданным волновым вектором k пропорциональна k, поскольку оператор электрон-фононного взаимодействия пропорционален градиенту смещения решетки (иными словами, фонон с $k = 0$ не должен испускаться вообще — это просто трансляция кристалла, как целого). При этом, однако, если $\varepsilon < \omega_D$, то электрон не может испускать фононы с произвольно большими k. Дело в том, что испустив фонон с большой энергией, электрон перешел бы в состояние с энергией, меньшей ε_F. Но такие состояния заняты, и перейти в них нельзя. По этой причине электрон будет испускать только фононы с волновыми векторами $k \leqslant \varepsilon/c$. При этом число конечных состояний — порядка площади поверхности сферы радиуса k. (Именно площади, а не объема — из-за законов сохранения!) Перемножая вероятность испускания фонона и число конечных состояний, получаем для вероятности распада $\gamma \sim \varepsilon^3$.

Таким образом, в ферми-системе вероятности процессов рассеяния при малых энергиях сильно уменьшаются. Это означает, что вблизи ферми-поверхности можно говорить о хорошо определенных квазичастицах. Большие времена жизни квазичастиц — ключевое свойство для обоснования теории ферми-жидкости.

Результат (6.24) в случае $\varepsilon > \omega_D$ также можно понять с помощью качественных соображений. При $\varepsilon > \omega_D$ электрон способен испускать фононы с импульсами вплоть до k_D, оставаясь снаружи ферми-сферы. Поэтому вероятность распада определяется фононами с $k \approx k_D$ и не зависит от ε. Конечные состояния электрона лежат в тонком сферическом слое, имеющем толщину порядка $\omega_D \ll \varepsilon_F$.

Нетрудно видеть, что даже при электрон-фононном взаимодействии $\zeta \sim 1$ вероятность распада γ сравнивается с ε только при $\varepsilon \approx \omega_D$.

29. В задаче 28 было получено выражение (6.18) для $\Sigma(\varepsilon, p)$ и вычислена его мнимая часть. Рассмотрим теперь вещественную часть $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, p)$ и найдем перенормировку спектра квазичастиц. Запишем вещественную часть выражения (6.18) в виде

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 cm}{8\pi^2|\mathbf{p}|}\int\limits_0^{k_D} I(k)\, k^2\, dk, \tag{6.26}$$

где интеграл

$$I(k) = \int\limits_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \left[\frac{\theta(\xi)}{\varepsilon - ck - \xi} + \frac{\theta(-\xi)}{\varepsilon + ck - \xi}\right] d\xi \tag{6.27}$$

понимается в смысле главного значения, а область интегрирования по ξ дается условием (6.19).

Интегрирование по ξ дает

$$I(k) = \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon - ck - \xi_{\max}}\right| + \ln\left|\frac{\varepsilon + ck - \xi_{\min}}{\varepsilon + ck}\right|. \tag{6.28}$$

Это выражение удобно представить в таком виде:

$$I(k) = \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon + ck}\right| + \ln\left|\frac{\varepsilon + ck - \xi_{\min}}{\varepsilon - ck - \xi_{\max}}\right|. \tag{6.29}$$

Первое слагаемое в (6.29) после интегрирования по $k < k_D$ дает вклад в $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, существенно зависящий от ε в области $|\varepsilon| \leqslant \omega_D$. Зависимость этого вклада от $\mathbf{p}$, возникающая благодаря коэффициенту $|\mathbf{p}|^{-1}$ в (6.26), — довольно слабая (величина (6.26) чувствительна только к большим изменениям $\mathbf{p}$ порядка p_0). В то же время второе слагаемое в выражении (6.29) дает «регулярный» вклад в $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, слабо меняющийся как функция ε и p при изменениях $|\delta\varepsilon| \lesssim \varepsilon_F$, $|\delta\mathbf{p}| \lesssim p_0$. Чтобы в этом убедиться, заметим, что $ck \ll |\xi_{\min}|, \xi_{\max}$, и поэтому во втором логарифме в (6.29) можно пренебречь ck по сравнению с $\xi_{\min}$, $\xi_{\max}$.

Имея это в виду, представим собственно-энергетическую часть в виде $\Sigma(\varepsilon) + \Sigma$ и при малом $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ и $|\mathbf{p}|$, близком к p_0, включим Σ в перенормировку затравочных химпотенциала $\mu = E_F$ и скорости $v_F = p_0/m$. Таким образом, получаем

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon) = \frac{g^2 c}{8\pi^2 v_F}\int\limits_0^{k_D} \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon + ck}\right| k^2 dk. \tag{6.30}$$

Обратим внимание на характерное свойство электрон-фононной собственно–энергетической части — независимость от импульса p электрона. Физическая причина этого — медленность фононов, приводящая к тому, что испущенный электроном фонон мгновенно отстает. В результате поглощение и испускание фонона становятся локальными процессами.

Интеграл в выражении (6.30) нетрудно вычислить. Однако поскольку получающееся выражение достаточно громоздко, нам будет более удобно рассмотреть предельные случаи $\varepsilon \ll \omega_D$ и $\varepsilon \gg \omega_D$.

А. При $\varepsilon \ll \omega_D$ можно разложить логарифм в (6.30), считая $\varepsilon \ll ck$:

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon) = -\frac{2g^2\varepsilon}{8\pi^2 v_F}\int\limits_0^{k_D} k\, dk = -\frac{g^2 k_D^2}{8\pi^2 v_F}\varepsilon = -b\,\varepsilon, \quad b = \zeta\frac{k_D^2}{4p_0^2}. \tag{6.31}$$

Б. При $\varepsilon \gg \omega_D$, напротив, имеем $\varepsilon \gg ck$, и снова разлагаем логарифм в (6.30):

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon) = -\frac{g^2 c^2}{8\pi^2 v_F}\int\limits_0^{k_D} \frac{k^3\, dk}{\varepsilon} = -\frac{g^2 c^2 k_D^4}{32\pi^2 v_F\, \varepsilon} = -\frac{b\,\omega_D^2}{4\varepsilon}. \tag{6.32}$$

Экстраполируя полученные выражения в область $\varepsilon \approx \omega_D$, можно сделать вывод, что в этой области возрастание $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon)$ сменяется убыванием, т. е. $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon)$ имеет там экстремум.

Выпишем теперь перенормированную функцию Грина. При $\varepsilon \ll \omega_D$ она имеет следующий вид:

$$G(\varepsilon, p) = \frac{1}{(1+b)\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} + i\gamma(\varepsilon)}, \tag{6.33}$$

где $\gamma(\varepsilon)$ дается выражением (6.24). При интересующих нас $\varepsilon \ll \omega_D$ затухание $\gamma(\varepsilon) \ll \varepsilon$.

Сравним полученное выражение (6.33) с определением (4.14) квазичастичной функции Грина. Видим, что амплитуда функции Грина (6.33), даваемая величиной вычета в полюсе, есть $Z = 1/(1+b)$.

Закон же дисперсии квазичастиц, согласно (6.33), имеет вид

$$\varepsilon = \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{1+b}. \tag{6.34}$$

Отсюда находим перенормировку эффективной массы:

$$m^* = (1+b)m. \tag{6.35}$$

Видно, что электрон действительно «утяжеляется» (ибо он вынужден тащить за собой фононное «облако»). Следовательно, плотность состояний, пропорциональная эффективной массе, увеличивается. Обратим внимание на то, что при электрон-фононном взаимодействии $\zeta \sim 1$ величина b, определяющая величину перенормировки, оказывается порядка единицы.

Перенормировка плотности состояний вблизи поверхности Ферми имеет простое качественное объяснение. Чем выше энергия электрона по сравнению с уровнем Ферми, тем более активно этот электрон испускает фононы (как видно из решения предыдущей задачи). В результате энергия электрона уменьшается, и он «прижимается» к поверхности Ферми. (Эти рассуждения немного неточны, поскольку при $\varepsilon \ll \omega_D$ вклад в $\Sigma(\varepsilon)$ дают, главным образом, не реальные, а виртуальные процессы. Поэтому следовало бы говорить об испускании и поглощении виртуальных фононов.)

30. Запишем выражение для поправки к вершинной части электрон-фононного взаимодействия, соответствующее диаграмме на рис. 6.2:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3 \int G(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1) G(\varepsilon_1+\omega, \mathbf{p}_1+\mathbf{k}) D(\varepsilon-\varepsilon_1, \mathbf{p}-\mathbf{p}_1) \frac{d^3p_1\, d\varepsilon_1}{(2\pi)^4}. \tag{6.36}$$

Мы не будем вычислять $\Gamma^{(1)}$ точно, а попытаемся ее оценить по порядку величины. Вначале рассмотрим интеграл по ε_1. Полагая характерную передачу импульса порядка $k_D \approx p_0$, и учитывая, что $D(\varepsilon-\varepsilon_1)$ квадратично спадает при $|\varepsilon-\varepsilon_1| \gg \omega_D$, получаем, что основной вклад в интеграл дает область $|\varepsilon-\varepsilon_1| \approx \omega_D$. Оценив таким образом интеграл по ε_1, находим

$$\Gamma^{(1)} \approx \int \frac{g^3 \omega_D\, d^3p_1}{(\varepsilon_1 - \xi_{\mathbf{p}_1} + i0\,\mathrm{sgn}\,\xi_1)(\varepsilon_1 - \omega - \xi_{\mathbf{p}_1+\mathbf{k}} + i0\,\mathrm{sgn}\,\xi_2)}. \tag{6.37}$$

Теперь рассмотрим интеграл по импульсу p_1. Характерная передача импульса — порядка $k_D \approx p_0$. Поэтому мы можем оценить знаменатели как ε_F, причем $d^3p_1 \sim p_0^3$. Собирая все вместе, имеем

$$\Gamma^{(1)} \approx g^3 \omega_D \frac{p_0^2}{v_F} \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_F^2} \approx g^3 \frac{p_0^2}{v_F \varepsilon_F} \omega_D. \tag{6.38}$$

Относительная величина этой поправки

$$\frac{\Gamma^{(1)}}{g} \approx g^2 \frac{p_0^2}{v_F \varepsilon_F} \omega_D \approx \zeta \sqrt{\frac{m}{M}}. \tag{6.39}$$

Здесь использована известная оценка $\omega_D/\varepsilon_F \approx \sqrt{m/M}$, где m и M — масса электрона и иона соответственно. Электроны намного легче ионов, поэтому рассмотренная поправка к вершинной части пренебрежимо мала.

Приведенное рассуждение не является вполне строгим: оно оказывается ошибочным при $\omega \approx kv_F$, $\omega \ll \omega_D$. В этом случае полюсы функций Грина сближаются, и интеграл надо анализировать более аккуратно. Однако в большинстве задач эта область не важна, поскольку скорость звука c много меньше v_F.

Чтобы прояснить физический смысл полученного неравенства $\Gamma^{(1)} \ll g$, вычислим вершинную часть в смешанном «импульсно-временном представлении». Это позволит нам лучше проследить за ролью различных характерных времен. Нам потребуются функции Грина фонона и электрона. Сначала найдем

$$D(\mathbf{k}, t) = \int D(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{-ick}{2} e^{-ick|t|}. \tag{6.40}$$

Аналогично можно вычислить и электронную функцию Грина:

$$G(\mathbf{p}, t) = -ie^{-i\xi_{\mathbf{p}} t} \begin{cases} \theta(\xi_{\mathbf{p}}) & \text{при } t > 0, \\ \theta(-\xi_{\mathbf{p}}) & \text{при } t < 0. \end{cases} \tag{6.41}$$

Обратим внимание на то, что $D(\mathbf{k}, t)$ — более медленно меняющаяся функция времени, чем $G(\mathbf{p}, t)$ (при импульсе $\mathbf{p}$, не слишком близком к ферми-поверхности).

На диаграмме, дающей поправку к вершине взаимодействия $\Gamma^{(1)}$, расставим импульсы и времена, как показано на рис. 6.4. Получаем следующее выражение:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3 \iint e^{-i\omega t}\, G(\mathbf{p}_1, t-t_1)\, G(\mathbf{p}_1+\mathbf{k}, t_2-t) \times \\ \times D(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1, t_1-t_2) \frac{d^3p_1 dt}{(2\pi)^3}. \tag{6.42}$$

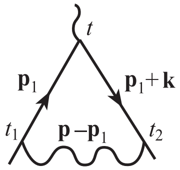

Рис. 6.4

При $p_1 \approx p_0$ электронные функции Грина меняются за времена порядка ε_F^{-1}. По этой причине

$$|t_1 - t| \approx |t_2 - t| \approx |t_1 - t_2| \approx \varepsilon_F^{-1}.$$

Это означает, что фононный пропагатор берется при $t_1 \approx t_2$. Поэтому он оказывается пропорционален $c|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1| \approx \omega_D$, и, таким образом, возникает малый параметр ω_D/ε_F.

Иными словами, электроны быстро (за время порядка ε_F^{-1}) поглощают фонон, подстраиваясь под деформацию решетки. При этом они не успевают за счет своего движения снова «раскачать» решетку — на это требуется время порядка ω_D^{-1}. Это есть проявление адиабатичности движения ионов. В силу своей большой массы ионы движутся медленно и электроны всегда успевают подстроиться под их локальную конфигурацию.

Утверждение о малости вершинных поправок (теорема Мигдала) ценно тем, что позволяет оставить в диаграммном ряде наиболее существенные вклады и просуммировать их, не предполагая малости электрон-фононного взаимодействия. Однако не следует думать, что все фононные перенормировки малы и потому несущественны. Иногда они приводят к важным эффектам, один из которых — сверхпроводимость.

31. Запишем выражение для поляризационного оператора фононов, соответствующее диаграмме на рис. 6.3:

$$\Pi = -\frac{2ig^2}{(2\pi)^4}\int\frac{d\varepsilon\, d^3p}{(\varepsilon-\xi_{\mathbf{p}}+i0\,\mathrm{sgn}\,\xi_{\mathbf{p}})(\varepsilon+\omega-\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}+i0\ \mathrm{sgn}\,\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}})} \tag{6.43}$$

(множитель 2 возникает из-за суммирования по спину). Заметим, что именно такое выражение было рассмотрено в задаче 24а. Поэтому мы можем просто воспользоваться ответом (5.39), справедливым при $k \ll p_0$, $\omega \ll \varepsilon_F$:

$$\Pi(\omega,k) = -2g^2\nu_0\left[1-\frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{\omega-kv_F}{\omega+kv_F}\right| + \frac{\pi i|\omega|}{2kv_F}\theta\left(1-\frac{|\omega|}{kv_F}\right)\right]. \tag{6.44}$$

а. Функция Грина фононов определяется из уравнения Дайсона:

$$D^{-1}(\omega,k) = D_0^{-1}(\omega,k) - \Pi(\omega,k), \tag{6.45}$$

а спектр фононов — из уравнения $D^{-1}(\omega,k)=0$. Поскольку скорость звука много меньше скорости Ферми, то нас интересует $\omega \ll kv_F$. В таком пределе поляризационный оператор есть просто

$$\Pi(\omega,k) \approx -2g^2\nu_0 = -2\zeta. \tag{6.46}$$

Поэтому функция Грина акустических фононов есть

$$D^{-1}(\omega,k) = D_0^{-1}(\omega,k) - \Pi(\omega,k) \approx \frac{\omega^2-c_0^2k^2}{c_0^2k^2} + 2\zeta, \tag{6.47}$$

где c_0 — затравочная скорость звука. Получаем закон дисперсии фононов $\omega = ck$, где

$$c^2 = c_0^2(1-2\zeta). \tag{6.48}$$

Уменьшение частоты фонона вследствие взаимодействия с электронами можно объяснить тем, что электроны, быстро подстраиваясь под деформационный потенциал, скапливаются в его минимумах и тем самым понижают энергию системы.

б. Чтобы найти затухание фононов, рассмотрим мнимую часть поляризационного оператора:

$$\mathrm{Im}\,\Pi(\omega,k) = -\frac{\pi\zeta\,|\omega|}{kv_F}. \tag{6.49}$$

Подставляя в уравнение Дайсона (6.45) $\omega = ck + i\gamma$, получаем

$$\gamma = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c^2}{v_F}k = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c}{v_F}\omega. \tag{6.50}$$

Хотя затухание и оказывается пропорциональным частоте, оно все же мало по сравнению с ω по параметру $c/v_F \approx \sqrt{m/M}$.

Сравним найденный результат (6.50) с затуханием звука в классической гидродинамике. В обычных жидкостях и газах затухание звука по порядку величины равно

$$\gamma \approx \frac{\eta\omega^2}{\rho c^3}, \tag{6.51}$$

где η, ρ — вязкость и плотность среды. Поэтому можно сказать, что «эффективная вязкость» электронного газа растет с уменьшением частоты:

$$\eta(\omega) \sim \omega^{-1}. \tag{6.52}$$

Физически, большая эффективная вязкость электронного газа связана с высокой плотностью электрон-дырочных возбуждений с энергией $\omega < c|\mathbf{k}|$. Именно такие пары возбуждаются звуковой волной.

32. В размерности $D = 1$ поляризационный оператор, соответствующий рис. 6.3, равен

$$\Pi(\omega,k) = -2ig^2\int G(p,\varepsilon)\,G(p+k,\varepsilon+\omega)\frac{dp\,d\varepsilon}{(2\pi)^2} \tag{6.53}$$

(множитель 2 учитывает спин). Вычисляя интеграл по ε, получаем

$$\Pi(\omega,k) = -\frac{g^2}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{(n(\xi_p)-n(\xi_{p+k}))\,dp}{\omega-\xi_{p+k}+\xi_p+i0\,\lambda_{p,k}},\ \ \lambda_{p,k} = \mathrm{sgn}\,\xi_{p+k}-\mathrm{sgn}\,\xi_p. \tag{6.54}$$

Интеграл (6.54) дается суммой вкладов двух областей, в которых разность $n(\xi_p)-n(\xi_{p+k})$ отлична от нуля:

$$\mathbf{А}\colon \xi_p > 0,\ \xi_{p+k} < 0; \quad \mathbf{Б}\colon \xi_p < 0,\ \xi_{p+k} > 0.$$

Рассмотрим $k > 0$. В этом случае области

$$\mathbf{А}\colon -p_0-k < p < -p_0, \quad \mathbf{Б}\colon p_0-k < p_0 < p_0.$$

Поэтому можно переписать (6.54) следующим образом:

$$\Pi(\omega,k) = \\ = -\frac{g^2}{\pi}\int\limits_{-p_0-k}^{-p_0}\frac{dp}{\omega-k^2/2m-pk/m-i0} + \frac{g^2}{\pi}\int\limits_{p_0-k}^{p_0}\frac{dp}{\omega-k^2/2m-pk/m+i0}. \tag{6.55}$$

Интеграл по p легко вычисляется и равен

$$\Pi(\omega, k) = \frac{mg^2}{\pi k} \ln X,$$

где

$$X = \frac{\left(k^2/2m - kp_0/m - \omega + i0\right)\left(k^2/2m - kp_0/m + \omega + i0\right)}{\left(k^2/2m + kp_0/m + \omega - i0\right)\left(k^2/2m + kp_0/m - \omega - i0\right)}. \qquad (6.56)$$

Рассмотрим поляризационный оператор (6.56) при $k = 2p_0 + x$, $\omega = 0$:

$$\Pi(\omega = 0, k = 2p_0 + x) = -\frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|x|}.$$

Это выражение логарифмически расходится при $k = 2p_0$.

Найденная логарифмическая особенность $\Pi(\omega, k)$ проявляется в спектре фононов. Запишем дисперсионное уравнение

$$D^{-1}(\omega, k) = D_0^{-1}(\omega, k) - \Pi(\omega, k). \qquad (6.57)$$

Нас интересуют значения k вблизи $k = 2p_0$ и малые ω. В этой области дисперсионное уравнение принимает такой вид

$$\frac{\omega^2 - \omega_{2p_0}^2}{\omega_{2p_0}^2} + \frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|k - 2p_0|} = 0, \qquad (6.58)$$

Строго говоря, следовало бы использовать $\Pi(\omega, 2p_0)$ при $\omega \neq 0$. Это, однако, не меняет качественных выводов. Получаем закон дисперсии

$$\omega^2 = \omega_{2p_0}^2 \left(1 - \frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|k - 2p_0|}\right). \qquad (6.59)$$

При k достаточно близком к $2p_0$ второй член в правой части (6.59) превосходит первый, и потому частота фононов становится мнимой. Это означает, что в системе возникает неустойчивость вблизи волнового вектора $k = 2p_0$ — кристаллическая решетка стремится деформироваться. На первый взгляд это кажется несколько странным — ведь деформация решетки требует энергии. Однако оказывается, что из-за взаимодействия с электронами деформация становится энергетически выгодной. Неустойчивость одномерного металла по отношению к образованию модуляции плотности с периодом π/p_0 приводит к так называемому переходу Пайерлса. Равновесная амплитуда возникающей модуляции определяется балансом электронной и упругой энергии (см. разд. 6.4).

Чтобы разобраться в происхождении пайерлсовской деформации и выяснить, чем выделен волновой вектор $2p_0$, предположим, что каким-то образом возникла спонтанная модуляция решетки с волновым вектором Q. Что происходит при этом с электронами? На них действует деформационный потенциал, период которого есть $2\pi/Q$. Как известно, в периодическом потенциале электронный спектр приобретает зонную структуру, и в нем открываются щели. Их появление

связано с вырождением электронного спектра: состояния с импульсами p и $-p$ в отсутствие потенциала имеют одинаковую энергию. Если внешний потенциал их перемешивает, то это вырождение снимается, и уровни расщепляются. Потенциал с периодом $2\pi/Q$ в низшем порядке теории возмущений смешивает состояние с импульсом p с состояниями с импульсами $p \pm Q$. Вырождение происходит при $p = \pm Q/2$. Именно при этих значениях p в спектре и открывается самая большая щель (рис. 6.5).

При образовании щели состояния над ней выталкиваются вверх по шкале энергий, а под ней — вниз. Как при этом изменяется полная энергия электронов, зависит от положения уровня Ферми ε_F по отношению к щели. Если ε_F лежит существенно ниже, чем щель, то энергии состояний под ним почти никак не изменяются. А если ε_F лежит выше, чем щель, то, хотя энергии некоторых электронов изменятся сильно, но, поскольку состояния выталкиваются из щели вверх и вниз симметрично, *суммарная* энергия меняется незначительно. Однако ситуация станет совершенно иной, если уровень Ферми находится в точности там, где открывается щель. Тогда все занятые состояния выталкиваются из щели вниз, и энергия электронного газа понижается. Это происходит, если выполнено условие $p_0 = Q/2$.

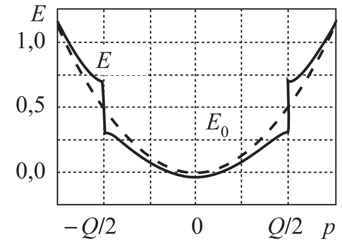

Рис. 6.5

Таким образом, модуляция решетки с волновым вектором $Q = 2p_0$ может привести к существенному понижению энергии системы. Наше вычисление, предсказывающее неустойчивость, означает, что выигрыш в энергии решетки за счет взаимодействия с электронами превосходит энергию упругой деформации, что и приводит к неустойчивости. В результате образуется состояние, в котором смещение решетки и плотность электронов модулированы с периодом π/p_0. Такое состояние называется *волной зарядовой плотности.*

Пайерлсовскую неустойчивость можно также назвать «кооперативным эффектом Яна–Теллера». Напомним, что эффект Яна–Теллера в молекулах состоит в том, что симметричные конфигурации молекул оказываются неустойчивыми. Деформация молекулы, разрушающая симметрию, снимает вырождение электронных уровней, и если при этом вырожденный уровень был не полностью заполнен, то это приводит к понижению энергии молекулы. В эффекте Пайерлса трансляционно-инвариантная конфигурация решетки неустойчива по аналогичным причинам.

33 а. Рассмотрим случай одного измерения, $D = 1$. Мы предполагаем, что система покоится, т. е. $\dot{\mathbf{u}} = 0$. Минимизируя в этом случае энергию (6.13) по отношению к деформации $w(x)$, находим связь $w(x)$ с плотностью: $w(x) = -(\lambda/K)\,|\psi(x)|^2$. Подставив это выражение в деформационный потенциал, действующий на электрон, приходим к нелинейному уравнению Шредингера:

$$-\frac{1}{2}\psi'' - \lambda^2 K|\psi|^2\psi = E\psi. \tag{6.60}$$

Ищем солитонное решение в виде

$$\psi(x) = \frac{A}{\operatorname{ch} Bx}. \tag{6.61}$$

Находим $B^2 = \lambda^2 A^2/K$, $E = -B^2/2$. Недостающую связь A и B получаем из условия нормировки:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)dx = \frac{2A^2}{B} = 1. \tag{6.62}$$

Это дает энергию связи $E_0 = -(\lambda^2/K)^2/8$ и размер локализованного состояния $B^{-1} = 2K/\lambda^2$.

Найдем энергию деформации

$$E_{\text{упр}} = \frac{K}{2}\int w^2(x)dx = \frac{\lambda^2}{2K}\int \psi^4(x)dx = \frac{g^4}{12K^2}. \tag{6.63}$$

Полная энергия отрицательна:

$$E_{\text{полн}} = E_0 + E_{\text{упр}} = \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8}\right)\frac{\lambda^4}{K^2} = -\frac{\lambda^4}{24K^2} \ < \ 0 \tag{6.64}$$

и поэтому образование локализованного состояния выгодно при сколь угодно малом λ.

При $D > 1$ все несколько сложнее. Решить задачу точно уже нельзя, но качественное поведение можно получить из «соображений размерности». Рассмотрим локализованное состояние электрона, сосредоточенное в области порядка a:

$$\psi(r) \approx a^{-D/2} f(r/a), \tag{6.65}$$

где $f(r)$ — функция типа колокола размера порядка единицы. Эту функцию можно получить вариационным или каким-либо еще численным методом. Точный вид $f(r)$ нам не потребуется, но можно иметь в виду, например, функцию вида $f(r) = e^{-r^2}$. Найдем зависимость кинетической и упругой энергии от a:

$$E_{\text{кин}} = \frac{c_1}{a^2}, \quad E_{\text{упр}} = -\frac{c_2\lambda^2}{Ka^D}, \tag{6.66}$$

где $c_{1,2}$ — положительные константы порядка единицы. Для ответа на вопрос о локализации следует найти a, минимизирующее энергию

$$E_{\text{полн}} = \frac{c_1}{a^2} - \frac{c_2\lambda^2}{Ka^D}, \tag{6.67}$$

имея в виду, что это выражение применимо только при a, большем постоянной решетки a_0. Видим, что имеется критическое значение $\lambda_c \approx Ka_0^{D-2}$, такое, что при $\lambda < \lambda_c$ локализованное состояние невыгодно, а при $\lambda > \lambda_c$ оно образуется, причем сразу сжимается до размера порядка постоянной решетки.

33б. Чтобы определить эффективную массу полярона, найдем энергию полярона, движущегося с постоянной скоростью $\mathbf{v}$. Движение полярона удобно рассмотреть в сопутствующей системе отсчета. Для волновой функции электрона преобразование Галилея дает

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \widetilde{\psi}(\mathbf{r}', t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\mathbf{v}\mathbf{r}' + \frac{m\mathbf{v}^2}{2}t\right)\right], \tag{6.68}$$

где $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$ — координата в движущейся системе отсчета (см. задачу к § 17 [2]). Поскольку преобразование меняет только фазу $\psi(\mathbf{r}, t)$, но не $|\psi|$, взаимодействие с решеткой $\lambda w(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2$ в сопутствующей системе отсчета сохраняет свой вид, а из кинетической энергии электрона вычитается $m\mathbf{v}^2/2$.

Влияние движения на энергию решетки оказывается более существенным. Поскольку при переходе в движущуюся систему отсчета временная производная оказывается связанной с пространственной производной ($\partial_t = \partial_{t'} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}'}$), скорость смещения среды в сопутствующей системе отсчета есть $\dot{u} = (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{u}$. Следовательно, плотность кинетической энергии системы равна $\rho((\mathbf{v}\nabla)\mathbf{u})^2/2$. Упругая же энергия зависит от деформации $w = \nabla\mathbf{u}$, и поэтому не меняется при движении. Физическая причина отличия кинетической энергии от нуля в том, что локализованная деформация, движущаяся с постоянной скоростью, раскачивает атомы решетки.

В размерности $D = 1$ получается плотность кинетической энергии $\rho\mathbf{v}^2 w^2/2$, совпадающая по форме с плотностью упругой энергии $Kw^2/2$. Поэтому в данном случае уравнение для $\widetilde{\psi}$ будет иметь вид (6.60) с точностью до замены: $E \longrightarrow E - m\mathbf{v}^2/2$ и $K \longrightarrow K + \rho\mathbf{v}^2$. Используя результат (6.64) для энергии связи неподвижного полярона, получаем изменение энергии вследствие движения:

$$\Delta E(\mathbf{v}) = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + \frac{\lambda^4}{24K^2} - \frac{\lambda^4}{24(K + \rho\mathbf{v}^2)^2}. \tag{6.69}$$

Раскладывая выражение (6.69) при малом $\mathbf{v}$, получаем массу полярона

$$m_* = m + \frac{\lambda^4\rho}{6K^3}. \tag{6.70}$$

Как видно из зависимости (6.69), приближение эффективной массы (6.70) применимо при скорости движения полярона много меньшей скорости звука, $v \ll c$.

В размерности $D > 1$, как уже отмечалось, задача об отыскании минимума энергии (6.13) и волновой функции автолокализованного состояния может быть решена только численно. Изменение энергии полярона в результате его движения рассматривается при $D > 1$ аналогично одномерному случаю. Для массы полярона при этом получается формула вида (6.70), в которой коэффициент $1/6$ заменяется на другое число, зависящее от размерности D и деталей взаимодействия на малых расстояниях.

Отметим, что масса полярона (6.70) может намного превосходить массу электрона. Например в случае, когда электрон-фононное взаимодействие не имеет никакой специфической малости, в атомных единицах $\lambda \sim 1$, $K \sim 1$, а $\rho \approx M/m$, где M — характерная масса иона решетки. При этом $m_* \approx M$. Разумеется в реальных полупроводниках масса полярона обычно не достигает массы иона, поскольку константа связи λ, как правило, не превосходит $1/10$, а поправка к массе в (6.70) пропорциональна λ^4.

Сравним перенормировку массы полярона сильной связи (6.70) с результатом $m_*/m = 1 + (4/3\pi^2)g^2m^2c\,\ln(k_D/mc)$ для полярона слабой связи, полученным в задаче 16 (см. выражение (4.45)). Прежде всего отметим, что константа связи λ в гамильтониане сильной связи (6.13) связана с константой связи g в гамильтониане Фрёлиха (6.6) следующим образом: $\lambda = gK^{1/2}$. Поэтому результат (6.70) можно записать в атомных единицах как $m_*/m = 1 + (g^2/c)^2/6$. Сравнивая эти два выражения для эффективной массы, видим, что переход из режима слабой связи в режим сильной связи происходит при относительно малой величине константы $g \ll 1$.

6.4. Эффект Пайерлса. Теория среднего поля

Электрон-фононное взаимодействие в металле может приводить к двум различным, хотя в чем-то и родственным, неустойчивостям: пайерлсовской, переводящей металл в диэлектрическое состояние, и куперовской, делающей металл сверхпроводником (см. гл. 10). Эффектом Пайерлса (см. задачу 32) называется неустойчивость одномерной электрон-фононной системы, приводящая к образованию модуляции смещения решетки с волновым вектором $k = 2p_0$ (это соответствует периоду в пространстве, равному среднему расстоянию между электронами с одной проекцией спина). Из-за рассеяния электронов на периодическом деформационном потенциале с $k = 2p_0$ в окрестности уровня Ферми в спектре электронов открывается щель, величина которой пропорциональна амплитуде модуляции. Энергия заполненных состояний, находящихся под щелью, понижается на величину бóльшую, чем затраченная системой при возникновении модуляции упругая энергия. Такой баланс энергии делает пайерлсовское состояние более выгодным по сравнению с исходным металлическим состоянием. Пайерлсовское состояние является диэлектриком, поскольку в нем отсутствуют электронные возбуждения с энергиями, меньшими величины щели в спектре. Пайерлсовская неустойчивость наиболее ярко выражена в одномерной системе, но встречается также и в реальных трехмерных системах, структура которых в том или ином смысле «квазиодномерна».

Цель этого раздела — изложить простую теорию, позволяющую обосновать описанную картину и выяснить некоторые интересные детали устройства пайерлсовского состояния. Мы ограничимся здесь случаем нулевой температуры (некоторые вопросы термодинамики перехода Пайерлса рассмотрены в задаче 39). По характеру применяемого приближения использованный ниже метод является так называемой *теорией среднего поля*, поскольку модуляция решетки, на фоне которой двигаются электроны и фононы, рассматривается в этой теории как статическая. При этом предполагается, что действующий на электроны деформационный потенциал флуктуирует относительно слабо. Такое приближение позволяет найти гриновские функции электронов и фононов и определить, как их закон дисперсии меняется при переходе в пайерлсовское состояние.

Начнем с того, что явно выделим область импульсов вблизи поверхности Ферми. Запишем для этого ψ-оператор в виде суммы вкладов частиц с энергиями вблизи E_F, движущихся направо и налево:

$$\psi(x) = \psi_1(x)\,e^{ip_0x} + \psi_2(x)\,e^{-ip_0x}, \tag{6.71}$$

где $\psi_i(x)$, $i = 1, 2$, предполагаются медленными функциями x. После этого гамильтониан свободных электронов принимает вид

$$\mathscr{H}_0 = \int \psi^+(x)\left(-\frac{\nabla^2}{2m} - E_F\right)\psi(x)dx \approx \\ \approx -iv_F\int\left(\psi_1^+(x)\,\frac{\partial\psi_1}{\partial x} - \psi_2^+(x)\,\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right)dx. \tag{6.72}$$

Предположим теперь, что в системе возникла статическая модуляция смещения решетки $u(x) = u_0\cos(2p_0x + \varphi)$. При этом на электроны действует деформационный потенциал $U(x) = g\partial u/\partial x$. Соответствующий вклад в гамильтониан есть

$$\widehat{\mathscr{H}}_{\text{int}} = \int U(x)\,\psi^+(x)\psi(x)\,dx \;\approx \Delta\int\left(\psi_1^+(x)\psi_2(x) + \text{h.c.}\right)\,dx, \tag{6.73}$$

где $\Delta = gu_0p_0e^{i\varphi}$. Нам будет удобно воспользоваться матричной формой записи. Будем считать ψ двухкомпонентным вектором (его компоненты — ψ_1 и ψ_2). Тогда гамильтониан можно представить с помощью матрицы, действующей на этот вектор:

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} v_F\widehat{k} & \Delta \\ \Delta^* & -v_F\widehat{k} \end{pmatrix}. \tag{6.74}$$

Здесь $\widehat{k} = -i\partial/\partial x$. Перейдя к импульсному представлению, нетрудно найти собственные значения и собственные векторы оператора (6.74):

$$\varepsilon_{\pm}(k) = \pm\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}\,, \quad |\pm, k\rangle = \begin{pmatrix} u_{\pm} \\ -v_{\pm} \end{pmatrix}, \tag{6.75}$$

где

$$u_{\pm}^2 = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{v_F k}{\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}}\right), \quad v_{\pm}^2 = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{v_F k}{\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}}\right). \tag{6.76}$$

Таким образом, наш вывод о том, что в спектре возбуждений открывается щель, оказывается справедливым, причем величина щели есть $2|\Delta|$.

Используя найденные собственные состояния и их энергии (6.75), найдем изменение полной энергии электронов, вызванное «внешним» деформационным потенциалом $U(x)$. Все электронные состояния (6.75) с $\varepsilon > 0$ при $T = 0$ будут пустыми, а состояния с $\varepsilon < 0$ — занятыми. Поэтому энергия системы равна

$$E_{\text{эл}} = -2\sum_k \sqrt{v_F^2 k^2 + |\Delta|^2} \tag{6.77}$$

(множитель 2 учитывает спиновое вырождение). Эта сумма расходится степенным образом при $k \to \pm\infty$ благодаря электронным состояниям, расположенным глубоко под уровнем Ферми. Однако поскольку энергия этих состояний почти не меняется при включении потенциала $U(x)$, они дают относительно небольшой вклад в *изменение* энергии

$$\delta E_{\text{эл}} = E_{\text{эл}}(\Delta) - E_{\text{эл}}(\Delta = 0) = -2\sum\nolimits_k \left(\sqrt{v_F^2 k^2 + |\Delta|^2} - v_F|k|\right). \tag{6.78}$$

Это выражение все еще расходится при больших k, но уже лишь логарифмически. Обрезая эту расходимость при $k \approx \pm p_0$, получаем

$$\delta E_{\text{эл}} = -\frac{L|\Delta|^2}{\pi v_F}\left(\ln\frac{2\varepsilon_*}{|\Delta|} - \frac{1}{2}\right), \tag{6.79}$$

где $\varepsilon_* = v_F p_0$, а L — размер системы. Наше вычисиление $\delta E_{\text{эл}}$ корректно, поскольку $|\Delta| \ll \varepsilon_F$.

Чтобы определить оптимальную величину энергетической щели Δ, найдем изменение энергии решетки при возникновении модуляции:

$$\delta E_{\text{реш}} = \frac{\rho c^2}{2}\int\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 dx = \rho c^2 p_0^2 u_0^2 L = \frac{L|\Delta|^2}{g^2}. \tag{6.80}$$

Видно, что при самых малых $|\Delta|$ отрицательное изменение энергии электронов (6.79) преобладает. Величина Δ определяется из условия минимизации полной энергии $\delta E_{\text{эл}} + \delta E_{\text{реш}}$ как функции Δ, что дает

$$\Delta_0 = \varepsilon_* \exp\left(-\pi\, v_F/g^2\right). \tag{6.81}$$

Величина Δ_0 определяет характерный масштаб энергий, при которых имеет место эффект Пайерлса. Как видно из (6.75), именно при энергиях $\varepsilon \approx \Delta_0$ происходят изменения в спектре электронов. Величина Δ_0 также определяет температуру $T_c \approx \Delta_0$, при которой происходит фазовый переход в пайерлсовское состояние (см. задачу 39). В реальных материалах температура T_c может составлять от нескольких единиц до сотен градусов.

Рассмотрим теперь функции Грина электронов и фононов. Благодаря наличию правых и левых состояний, для описания электронов, рассеивающихся на модуляции с $k = 2p_0$, необходимо использовать четыре функции:

$$G_{11}(x, x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_1(x)\psi_1^+(x')\rangle\,; \quad G_{22}(x, x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_2(x)\psi_2^+(x')\rangle;$$
$$G_{12}(x, x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_1(x)\psi_2^+(x')\rangle\,; \quad G_{21}(x, x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_2(x)\psi_1^+(x')\rangle.$$

Функции $G_{ij}(x, x')$ можно вычислить, обратив матрицу $\varepsilon - \widehat{H}$:

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}_{\varepsilon,k} = \left(\varepsilon - \widehat{H}\right)^{-1} =$$
$$= \frac{1}{\varepsilon^2 - v_F^2 k^2 - |\Delta|^2 + i0}\begin{pmatrix} \varepsilon + v_F k & \Delta \\ \Delta^+ & \varepsilon - v_F k \end{pmatrix}. \tag{6.82}$$

Полюсы электронных функций Грина (6.82) дают закон дисперсии квазичастиц $\varepsilon(k) = \pm\left(k^2 v_F^2 + \Delta^2\right)^{1/2}$, в точности совпадающий с (6.75). Наличие щели в спектре подтверждает наш вывод о диэлектрическом характере основного сотояния.

Перед тем, как исследовать функцию Грина фононов, отметим некоторые качественные черты пайерлсовского состояния. При возникновении волны зарядовой плотности в системе спонтанно нарушается трансляционная симметрия движения электронов относительно решетки (возникающая модуляция решетки понижает симметрию основного состояния). При этом, однако, исходный микроскопический гамильтониан своей симметрии не теряет. Поэтому в системе должна появиться мягкая ветвь спектра элементарных возбуждений подобная акустическим фононам[4)], частота которой обращается в нуль при $k = 0$.

В данном случае мягкая мода возникает благодаря тому, что энергия системы никак не зависит от фазы волны зарядовой плотности φ, если последняя постоянна. Если же φ медленно изменяется в пространстве, то это эквивалентно тому, что волновой вектор $k(x)$ отклоняется от

[4)] Читатель, знакомый с теоремой Голдстоуна, знает, что в этом проявляется общий принцип, требующий появления мягкой *голдстоуновской* моды при нарушении непрерывной симметрии в основном состоянии системы.

$2p_0$ на $\partial\varphi/\partial x$. Модуляция с волновым вектором, отклоняющимся от оптимального значения $k = 2p_0$, приводит к некоторому увеличению энергии системы. Из этих рассуждений видно, что только *изменение* фазы модуляции $\varphi(x,t)$ в пространстве (или во времени) может привести к состоянию с бо́льшей энергией. Таким образом, фаза $\varphi(x,t)$ и есть переменная, описывающая в данном случае мягкую моду, часто поэтому называемую «фазонной модой». Как мы увидим ниже, из-за взаимодействия с электронами фазонная мода приобретает скорость $v_F \gg c$. Кроме фазонной моды, в системе есть также другая мода, связанная с отклонением $|\Delta|$ от Δ_0 (так называемый «амплитудон»). Поскольку энергия системы явно зависит от $|\Delta|$, мода колебаний амплитуды Δ не является мягкой: спектр соответствующих возбуждений отделен от энергии основного состояния щелью конечной величины.

Имея в виду вышесказанное, рассмотрим функцию Грина фононов $D(\omega,k)$. Уравнение Дайсона в этом случае имеет вид

$$D^{-1}(\omega,k) = D_0^{-1}(\omega,k) - g^2\Pi(\omega,k), \quad D_0(\omega,k) = \frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2 - \omega_0^2(k)}, \tag{6.83}$$

где $\omega_0(k) = c|k|$. При интересующих нас $k \approx 2p_0$ поляризационный оператор $\Pi(\omega,k)$ имеет нетривиальную зависимость от $\delta k = k - 2p_0$. В этой области он выражается через матричные функции Грина (6.82) следующим образом:

$$\Pi(\omega,k) = -i\iint \mathrm{Tr}\,(\sigma_x G(\varepsilon_+,q_+)\sigma_x G(\varepsilon_-,q_-))\,\frac{d\varepsilon\,dq}{(2\pi)^2}, \tag{6.84}$$

где $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \frac{1}{2}\omega$, $q_\pm = q \pm \frac{1}{2}\delta k$, а матрица Паули σ_x и след $\mathrm{Tr}\ldots$ определены в двумерном пространстве правых и левых состояний электронов, в соответствии с (6.82). Используя выражения (6.82) для матричных функций Грина, получаем

$$\Pi(\omega,k) = -i\iint \frac{(\varepsilon_+ - v_F q_+)(\varepsilon_- + v_F q_-) + \Delta^2}{(\varepsilon_+^2 - v_F^2 q_+^2 - \Delta^2 + i0)(\varepsilon_-^2 - v_F^2 q_-^2 - \Delta^2 + i0)}\,\frac{d\varepsilon\,dq}{(2\pi)^2}, \tag{6.85}$$

Рассмотрим сначала случай $\omega = 0$, $\delta k = 0$ (т. е. $k = 2p_0$). Выражение (6.85) при этом дает

$$\Pi_0 \equiv \Pi(\omega = 0, k = 2p_0) = -\frac{i}{v_F}\iint \frac{\varepsilon^2 - \widetilde{q}^2 + \Delta^2}{(\varepsilon^2 - \widetilde{q}^2 - \Delta^2 + i0)^2}\,\frac{d\varepsilon\,d\widetilde{q}}{(2\pi)^2}, \tag{6.86}$$

где $\widetilde{q} = v_F q$. Вычислить интеграл в (6.86) можно следующим образом. Перейдем от вещественной частоты к мнимой по формуле $\varepsilon \longrightarrow i\varepsilon$. При таком преобразовании, как нетрудно видеть, направления обхода полюсов в выражении (6.86) остаются прежними. В результате получаем интеграл от функции, обладающей круговой симметрией:

$$\Pi_0 = \frac{1}{v_F}\iint \frac{-\varepsilon^2 - \widetilde{q}^2 + \Delta^2}{(\varepsilon^2 + \widetilde{q}^2 + \Delta^2 + i0)^2}\,\frac{d\varepsilon\,d\widetilde{q}}{(2\pi)^2} = \\ = \frac{1}{2\pi v_F}\int_0^{\varepsilon_0} \frac{-r^2 + \Delta^2}{(r^2 + \Delta^2)^2}\,r\,dr = -\frac{1}{2\pi v_F}\ln\frac{\varepsilon_0}{e\Delta}, \tag{6.87}$$

где $e = 2,7182\ldots$, $r = (\varepsilon^2 + \widetilde{q}^{\,2})^{1/2}$, а значение энергии ε_0, на которой обрезан логарифмически расходящийся интеграл, выбрано порядка E_F.

Частота фононов с $k = 2p_0$, согласно рассуждениям о мягкой моде, должна быть равна нулю. Нетрудно видеть, что именно так и получается, если записать закон дисперсии $D^{-1}(\omega,k)_{k=2p_0} = 0$ с помощью уравнения Дайсона (6.83):

$$\left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2(k)} - 1 - g^2\Pi(\omega,k)\right)_{k=2p_0} = 0. \tag{6.88}$$

Условие того, что данное уравнение имеет решение $\omega = 0$, имеет вид $1 + g^2\Pi_0 = 0$, что, согласно результату (6.87), эквивалентно соотношению (6.81) теории среднего поля, определяющему величину щели Δ.

С помощью изложенного метода можно найти поляризационный оператор $\Pi(\omega,k)$ при произвольных ω и k. Для этого перейдем к мнимым частотам $\varepsilon \longrightarrow i\varepsilon$, $\omega \longrightarrow i\omega$ непосредственно в выражении (6.85). При этом получаем

$$\Pi(w,w^*) = \frac{1}{2iv_F}\iint \frac{-z_+^* z_- + \Delta^2}{(z_+^* z_+ + \Delta^2)(z_-^* z_- + \Delta^2)}\,\frac{dz^*dz}{(2\pi)^2}, \quad z_\pm = z \pm w/2, \tag{6.89}$$

где $z = v_F q + i\varepsilon$, $w = v_F\delta k + i\omega$. В силу круговой симметрии интегрируемой функции, выражение (6.89) зависит только от абсолютной величины комплексного w, причем $\Pi(w=0) = \Pi_0$. При малых w выражение (6.89) принимает вид

$$\Pi(w,w^*) = \Pi_0 + \alpha\frac{g^2}{v_F}\frac{w^*w}{\Delta^2}, \quad |w| \ll \Delta, \tag{6.90}$$

где $\alpha > 0$ — константа порядка единицы. Интеграл в (6.89) нетрудно вычислить точно, если сначала проинтегрировать по углу $\arg(z)$, а затем — по $|z|$. Однако для анализа закона дисперсии при $k \approx 2p_0$ нам будет вполне достаточно разложения (6.90).

Закон дисперсии $D^{-1}(\omega,k) = 0$, с учетом уравнения Дайсона (6.83), в котором поляризационный оператор имеет вид (6.90), дает

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2(k)_{k=2p_0}} - \alpha\frac{g^2}{v_F}\frac{w^*w}{\Delta^2} = 0 \tag{6.91}$$

(мы учли, что $1 + g^2\Pi_0 = 0$). Переходя в выражении (6.91) от мнимой частоты обратно к вещественной, $\omega \longrightarrow \omega/i$, получаем линейный закон дисперсии вблизи $k \approx 2p_0$:

$$\left(\frac{\Delta^2}{\omega_0^2(k)_{k=2p_0}} + \alpha\frac{g^2}{v_F}\right)\omega^2 = \alpha\frac{g^2}{v_F}v_F^2\delta k^2. \qquad (6.92)$$

При малой константе электрон-фононного взаимодействия g величина Δ экспоненциально мала, и поэтому фазовая скорость $v_* = d\omega/dk$ близка к v_F. Качественный вид закона дисперсии фононов, получающегося в изложенной теории среднего поля, изображен на рис. 6.6. Исходный линейный фононный спектр и линеаризованный закон дисперсии (6.91) в окрестности $k = 2p_0$ показаны штриховой линией.

Развитый выше аппарат во многом аналогичен теории сверхпроводимости (см. п. 10.2.2). Основное формальное отличие состоит в том, что в теории сверхпроводимости рассматриваются процессы рассеяния электронов с противоположными импульсами, а в данной задаче — процессы переброса электронов с одной стороны ферми-поверхности на другую (или, что то же самое, рассеяние электронов и дырок, двигающихся в противоположные стороны). Поэтому, как иногда говорят, в пайерлсовском диэлектрике имеет место спаривание электронов и дырок с противоположными импульсами.

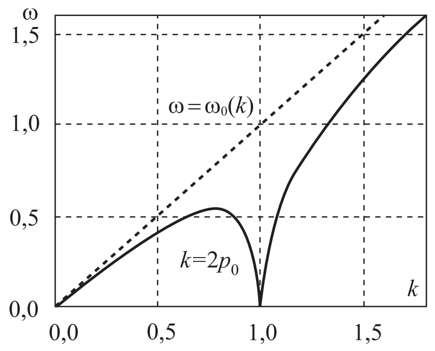

Рис. 6.6

Важное отличие от сверхпроводимости заключается однако в том, насколько теория среднего поля, пренебрегающая флуктуациями Δ, соответствует реальному положению вещей. Оказывается, что в сверхпроводниках флуктуациями можно пренебречь из-за малости температуры фазового перехода по сравнению с E_F (эта малость связана с тем, что температура сверхпроводящего перехода пропорциональна ω_D). В случае же с эффектом Пайерлса все не столь просто. Во-первых, температура перехода Пайерлса, как правило, выше, чем в сверхпроводниках, и поэтому флуктуации сильнее. Во-вторых, дополнительное усиление флуктуаций происходит из-за квазиодномерности. Конечно, реальные кристаллы все-таки трехмерны, и поэтому флуктуации не разрушают дальний порядок полностью, как это должно было бы случиться в чисто одномерном случае. Соответствующие эффекты трехмерности обычно малы, однако совсем пренебречь ими нельзя — они отвечают за поддержание дальнего порядка. Вследствие всего этого интервал температур

вблизи $T = T_c$, в котором эффекты флуктуаций существенны, обычно оказывается довольно большим.

Отметим также, что одномерность играет в эффекте Пайерлса существенную роль. Можно проверить, что в размерностях больше единицы сингулярность поляризационного оператора при $k = 2p_0$ (так называемая коновская особенность) оказывается более слабой и не приводит к неустойчивости.

Несмотря на одномерность, эффект Пайерлса — часто встречающееся явление. Существуют кристаллы, в которых молекулы упорядочены в одномерные цепочки, вдоль которых распространяются электроны. В таких квазиодномерных сруктурах эффект Пайерлса приводит к фазовому переходу, при котором изменяется период решетки. Физика возникающих в таких системах состояний весьма разнообразна и интересна, поскольку помимо электрон-фононного взаимодействия часто оказывается существенным также и электрон-электроннное взаимодействие. В результате в таких системах могут возникать не только *волны зарядовой плотности*, рассмотренные выше, но и *волны спиновой плотности*, а также сверхпроводимость. Кроме того, иногда эффект Пайерлса может проявляться в «недоразвитом» виде и в трехмерных кристаллах (например, в висмуте, ферми-поверхность которого имеет плоские области, и выглядит скорее как гладко обструганный брусок, а не как сфера)[5].

[5] Подробнее с физикой волн зарядовой плотности можно ознакомиться по обзорам: *Л. П. Булаевский*// УФН. 1975. Т. 115. С. 261; *G. Grüner*// Rev. Mod. Phys. 1988. V. 60 (4). P. 1129–1181; и книге: Charge density waves in solids/ Eds. *L. P. Gorkov*, *G. Grüner*. North Holland, 1989; см. также оригинальные работы: *P. A. Lee*, *T. M. Rice*, *P. W. Anderson*// Solid State Comm. 1974. V. 14. P. 703; *С. А. Бразовский*, *И. Е. Дзялошинский*// ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 2338.