Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1975

УДК 537.311.33

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ, И. С. СТОЯНОВА

ОБ ОДНОМ ВАРИАЦИОННОМ МЕТОДЕ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ

Развит вариационный метод определения одночастичного энергетического спектра элементарных возбуждений фермиевского типа. Рассмотрен случай вырожденной электронной плазмы в твердом теле.

Введение

Регулярные методы явного решения задачи многих тел, которые можно найти в любом современном учебнике, обычно основаны на использовании более или менее рафинированной формы теории возмущений. Так, в теории электронной плазмы в твердом теле более или менее удовлетворительной трактовке поддаются только случаи «большой» и «малой» концентрации частиц n. К сожалению, в ряде интересных задач (в частности, в задаче об электронно-дырочных каплях) соответствующие критерии применимости выполняются довольно плохо или не выполняются вообще. По этой причине известный интерес могла бы представить формулировка вариационного метода, который в принципе был бы свободен от этих ограничений. В настоящей работе предлагается один возможный вариант такого метода; варьированию подвергается здесь само выражение для энергии фермиевских квазичастиц[1]. Этот метод представляет собой в сущности приложение к данной задаче известного (см., например, [1]) вариационного принципа Н. Н. Боголюбова. Задача об определении одночастичного спектра фермиевских возбуждений сводится при этом к решению некоторого нелинейного интегрального уравнения. Гамильтониан взаимодействия между частицами берется сразу в статически экранированном виде, причем функция экранирования определяется в дальнейшем самосогласованным путем. (Условия применимости аппроксимации статического экранирования хорошо известны.) Мы ограничимся здесь рассмотрением пространственно-однородной и изотропной электронной плазмы с простейшим квадратичным законом дисперсии.

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H_0 + H_{int},$$

[1] Разумеется, этот метод обладает не только преимуществами, но и хорошо известными недостатками, характерными для всех вариационных методов вообще.

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \alpha k^2 a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma}, \tag{1}$$

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q;\sigma\sigma'} W(q)\, a_{k+q\sigma}^{+} a_{k'-q,\sigma'}^{+} a_{k'\sigma'} a_{k\sigma},$$

где $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*}$; $a_{k\sigma}^{+}$, $a_{k\sigma}$ — фермиевские операторы порождения и уничтожения электрона в состоянии (k, σ); k — волновой (или квазиволновой) вектор; σ — спиновое квантовое число; $W(q)$ — Фурье-образ потенциала взаимодействия. В сумме по q отсутствует член с $q=0$, поскольку соответствующая часть потенциала компенсируется полем однородного положительного заряда.

Ограничимся случаем нормальной Ферми-системы при достаточно низких температурах. Последнее условие сводится к неравенству

$$\frac{A}{T} \gg 1, \tag{2}$$

где

$$A = \alpha k_F^2, \quad k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}. \tag{3}$$

Заметим, что величина A не совпадает с истинной энергией Ферми: последняя вычисляется с учетом перенормировки энергетического спектра (см. ниже). Из дальнейшего будет видно, однако, что условие (2) влечет за собой и малость T по сравнению с истинной энергией Ферми.

§ 1. Одночастичный спектр с учетом взаимодействия

Для определения одночастичного спектра системы с учетом взаимодействия между квазичастицами воспользуемся известной теоремой о минимальных свойствах свободной энергии. Преобразуем гамильтониан рассматриваемой системы следующим образом:

$$\begin{gathered} H = \mathcal{H}_0[\varepsilon(k)] + \mathcal{H}'[\varepsilon(k)], \\ \mathcal{H}_0[\varepsilon(k)] = \sum_{k,\sigma} E(k)\, a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma}, \\ H' = \sum_{k_1,\ldots,k_4} W(|k_1 - k_4|)\, a_{k_1}^{+} a_{k_2}^{+} a_{k_3} a_{k_4} \delta_{k_1+k_2-k_3-k_4} - \sum_k \varepsilon(k)\, a_k^{+} a_k, \end{gathered} \tag{4}$$

где

$$E(k) = \alpha k^2 + \varepsilon(k), \tag{5}$$

$\varepsilon(k)$ — некоторая вещественная функция.

Определим модельную свободную энергию F_{mod} равенством

$$F_{\text{mod}} = F_0 + \langle \mathcal{H}' \rangle_0, \tag{6}$$

где

$$F_0 = F(\mathcal{H}_0) = -T \ln \mathrm{Sp}\,(e^{-\mathcal{H}_0/T}), \tag{7}$$

$$\langle \mathcal{H}' \rangle_0 = \frac{\mathrm{Sp}\,(\mathcal{H}' e^{-\mathcal{H}_0/T})}{\mathrm{Sp}\,(e^{-\mathcal{H}_0/T})}. \tag{8}$$

Как известно, [1] имеет место неравенство

$$F(H) \leqslant F_{\text{mod}}(H). \tag{9}$$

Соответственно модельная свободная энергия наилучшим образом аппроксимирует сверху истинную свободную энергию системы, если значение пробной функции $\varepsilon(k)$ определить из условия минимума F_{mod}.

Для плотности свободной энергии воспользуемся выражением

$$F = \mu n - 2T \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln\left(1 + e^{\frac{\mu - E(k)}{T}}\right). \tag{10}$$

Усредняя гамильтониан взаимодействия $\mathscr{H}'$ по каноническому ансамблю с гамильтонианом $\mathscr{H}_0$, получим для плотности энергии взаимодействия

$$\frac{1}{V}\langle \mathscr{H}' \rangle_0 = -\iint \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^6} W(|k-k'|)\bar{n}(k)\bar{n}(k') -$$

$$- 2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[E(k) - \alpha k^2\right]\bar{n}(k). \tag{11}$$

Здесь $\bar{n}(k)$ — функция распределения Ферми для квазичастиц с учетом перенормировки их энергии:

$$\bar{n}(k) = \left\{\exp\left|\frac{\mu - E(k)}{T}\right| + 1\right\}^{-1}. \tag{12}$$

Варьируя F_{mod} по $\varepsilon(k)$ при дополнительном условии

$$n = 2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \quad \bar{n}(k) = \text{const}, \tag{13}$$

получим следующее нелинейное интегральное уравнение:

$$\varepsilon(k, T) = -\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty k'^2 G(k, k')\bar{n}(k', T)\,dk'. \tag{14}$$

Здесь

$$G(k, k') = \int_0^\pi \sin\theta d\theta W(|k-k'|), \quad \theta = \mathbf{k}, \mathbf{k}'.$$

В дальнейшем под $W(|k-k'|)$ будем подразумевать перенормированную энергию взаимодействия между квазичастицами, учитывающую поляризацию среды и экранировку

$$W(k) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 k^2 \varkappa(k)}. \tag{15}$$

Здесь ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость решетки, учитывающая влияние кристалла на кулоновское взаимодействие электронов; множитель $\varkappa(k)$ учитывает вклад свободных носителей заряда в диэлектрическую проницаемость.

При $T=0$ уравнение (14) принимает вид

$$\varepsilon(k) = -\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} k'^2 G(k, k')\,dk'. \tag{16}$$

Для начала воспользуемся выражением для $\varkappa$, полученным в приближении случайных фаз [2], но с перенормированным спектром:

$$\varkappa(k) = 1 - \frac{8\pi e^2}{k^2} \sum_{p,\sigma} \frac{\bar{n}_{p+k} - \bar{n}_p}{E_{p+k} - E_p}. \tag{17}$$

Комбинируя равенства (15) — (17), получаем

$$\varepsilon(k) = -\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} W(|k-k'|)\bar{n}(k') =$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\bar{n}(k')}{(k-k')^2 - \dfrac{16\pi e^2}{\varepsilon_0} \displaystyle\int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \frac{\bar{n}(k'') - \bar{n}(k''+k-k')}{E(k''+k-k') - E(k'')}}. \tag{18}$$

В качестве $\bar{n}(k)$ здесь следует взять функцию Ферми от $E(k)$ при $T=0$.

Это есть нелинейное интегральное уравнение для неизвестной функции $E(k)$.

Подставляя его решение в формулы (17), (15) и (14), получим нелинейное интегральное уравнение типа Гаммерштейна относительно функции $E(k, T)$, где нелинейность содержится уже в функции распределения $\bar{n}(k, T)$.

Нас интересует решение в области низких температур. Предположим выполнение условия вырождения

$$\frac{\varepsilon_F}{T} \gg 1, \tag{19}$$

где $\varepsilon_F = E(k_F) - E(0)$. Тогда

$$\frac{\varepsilon_F}{T} = \frac{A}{T}\left[1 + \frac{\varepsilon(k_F) - \varepsilon(0)}{A}\right]. \tag{20}$$

В силу (20) и (2) предположение (19) сводится к выполнению условия

$$\frac{\varepsilon(k_F) - \varepsilon(0)}{A} > -1. \tag{21}$$

Тогда в окрестности точки $T=0$ легко найти решение интегрального уравнения (14) в виде ряда по степеням малого параметра $\left(\frac{T}{\varepsilon_F}\right)$. Ограничиваясь, как обычно, только первыми членами, представим его в виде

$$\varepsilon(k, T) = \varepsilon(k) + T^2 f(k), \tag{22}$$

где $\varepsilon(k)$ — решение уравнения (18), а

$$f(k) \equiv -\frac{e^2 k_F^2}{2\pi\varepsilon_0 k}\left[B\left(\frac{\partial g}{\partial E'}\right)_{E'=\mu_0} + \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\partial^2 g}{\partial E'^2}\right)_{E'=\mu_0}\right]. \tag{23}$$

Функция $g(k, k')$, входящая в (23),

$$g(k, k') = \int_0^{k_F} k''^2 G(k, k'')\, dk'' \tag{24}$$

зависит от E и E' соответственно через k и k'.

Константа B в (23) представляет собой коэффициент в разложении $\mu(T)$:

$$\mu = \mu_0 + BT^2, \tag{25}$$

$$\mu_0 = A + \varepsilon(k_F). \tag{26}$$

В явном виде

$$B = -\frac{\pi^2}{6}\left[1 + \frac{e^2k_F}{2\pi\varepsilon_0}\left(\frac{\partial g}{\partial E'}\right)_{E, E'=\mu_0}\right]^{-1}\left\{\frac{e^2k_F}{2\pi\varepsilon_0}\left(\frac{\partial^2 g}{\partial E'^2}\right) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1}_{k=k_F} k_F^{-1}\left[2 - k_F\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=k_F}\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1}_{k=k_F}\right]\right\}. \tag{27}$$

§ 2. Пример

В качестве примера воспользуемся простейшим выражением для экранированной энергии взаимодействия:

$$W(k, k') = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{(k-k')^2 + k_0^2}, \tag{28}$$

где k_0 — обратный радиус экранирования. Мы определим его по методу Томаса — Ферми, учитывая перенормировку энергетического спектра. Точность этого подхода, однако, не следует переоценивать. Так, область допустимых значений k здесь ограничена условием $k \ll k_F$.

Вводя безразмерные переменные, запишем уравнение (14) в виде

$$\varepsilon(t) = -\frac{c}{2t}\int_0^\infty t' \ln\left|\frac{(t+t')^2 + \varkappa^2}{(t-t')^2 + \varkappa^2}\right| \bar{n}(t')\,dt'. \tag{29}$$

Здесь $t = \dfrac{k}{k_F}$, $\varkappa = \dfrac{k_0}{k_F}$, $C = \dfrac{e^2k_F}{\varepsilon_0\pi}$.

Выполняя явно намеченные выше вычисления, получаем

$$\varepsilon(t) = -C\left\{1 + \frac{1 - t^2 + \varkappa^2}{4t}\ln\left|\frac{(t+1)^2 + \varkappa^2}{(t-1)^2 + \varkappa^2}\right| - \right.$$

$$\left. - \varkappa\left[\operatorname{arctg}(t+1)\varkappa) - \operatorname{arctg}(t-1)\varkappa)\right]\right\}; \tag{30}$$

$$f(t) = -\frac{c}{2t}\left[B\left(\frac{\partial g}{\partial E'}\right)_{E'=\mu_0} + \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\partial^2 g}{\partial E'^2}\right)_{E'=\mu_0}\right]; \tag{31}$$

$$B = -\frac{\pi^2}{6}\left[\left(\frac{dE}{dt}\right)_{t=1} + \frac{C}{2}\ln\left(1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right)\right]^{-1}\cdot\left\{2 - \left(\frac{d^2E}{dt^2}\right)_{t=1}\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-1}_{t=1} + \right.$$

$$\left. + \frac{C}{2}\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-1}_{t=1}\left[\ln\left(1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right) + \frac{4}{4+\varkappa^2} - \ln\left(1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right)\left(\frac{d^2E}{dt^2}\right)_{t=1}\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-1}_{t=1}\right]\right\}; \tag{32}$$

$$\left(\frac{\partial g}{\partial E'}\right)_{E'=\mu} = \ln\left|\frac{(1+t)^2 + \varkappa^2}{(1-t)^2 + \pi^2}\right|\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-1}_{t=1}; \tag{33}$$

$$\left(\frac{\partial^2 g}{\partial E'^2}\right)_{E'=\mu_0} = \left\{\ln\left|\frac{(1+t)^2 + \varkappa^2}{(1-t)^2 + \varkappa^2}\right| + 4\frac{1 - t^2 + \varkappa^2}{[(1+t)^2 + \varkappa^2][(1-t)^2 + \varkappa^2]}\right\} \times$$

$$\times \left(\frac{dE}{dt}\right)^{-2}_{t=1} - \ln\left|\frac{(t+1)^2 + \varkappa^2}{(t-1)^2 + \varkappa^2}\right|\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-3}_{t=1}\left(\frac{d^2E}{dt^2}\right)_{t=1}; \tag{34}$$

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{t=1} = 2A + C\left[\left(\frac{1}{2} + \frac{\varkappa^2}{4}\right)\ln\left|1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right| - 1\right]; \tag{35}$$

$$\left(\frac{d^2E}{dt^2}\right)_{t=1} = 2A - 2C\left[\left(\frac{1}{4} + \frac{\varkappa^2}{4}\right)\ln\left|1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right| - \frac{\varkappa^2 + 3}{\varkappa^2 + 4}\right]. \tag{36}$$

Как и следовало ожидать, выражение (30) формально совпадает с результатом, получающимся в первом порядке теории возмущений. Заметим при этом, что точка $T=0$ не есть точка ветвления нелинейного интегрального уравнения (14).

Вычислим теперь константу экранировки. При $T=0$

$$k_0^2 = k_F^2\left(\frac{dE}{dk}\right)^{-1}_{k=k_F}. \tag{37}$$

Соответственно

$$\varkappa^2 = 4C\left(\frac{dE}{dt}\right)^{-1}_{t=1}. \tag{38}$$

Пользуясь выражением (35) и полагая $x = \left(\frac{2}{\varkappa}\right)^2$, получим трансцендентное уравнение для неизвестной величины $x \neq 0$:

$$\ln(1 + x) = 2x\frac{x - N}{x + 2}. \tag{39}$$

Здесь $N = 2\frac{A}{C} - 1$.

Уравнение (39) всегда имеет только один положительный корень, x_0^*, который лежит в области $x_1 < x_0 < 2x_1$, где $x_1 = N + 2 = 2A/C + 1$.

Введем обычное обозначение $r_s = \frac{r_0}{a_B}$, где $r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}$, $a_B = \frac{\varepsilon\hbar^2}{m^*e^2}$ — боровский радиус. Тогда

$$\frac{A}{C} = sr_s^{-1}; \qquad s = \frac{\pi}{2}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \simeq 3; \quad x_1 \simeq 6r_s^{-1} + 1.$$

Вычисляя разность

$$\varepsilon(1) - \varepsilon(0) = -C\left\{\frac{\varkappa^2}{4}\ln\left(1 + \frac{4}{\varkappa^2}\right) - \varkappa\,\mathrm{arctg}\left(\frac{2}{\varkappa}\right) - 1 + 2\varkappa\,\mathrm{arctg}\left(\frac{1}{\varkappa}\right)\right\},$$

можем проверить выполнение условия (19) в этом случае. Предположим для определенности, что $\varepsilon_0 \simeq 10$, $m \simeq m^*$, $r_s \simeq 1$, $x \simeq x_1$. Тогда $A/C \simeq 30$ и $\frac{\varepsilon_F}{T} = 0{,}4\frac{A}{T}$. Следовательно, неравенство $\frac{\varepsilon_F}{T} \gg 1$ выполняется всегда, когда отношение A/T достаточно велико.

Приложение

Нелинейное интегральное уравнение (14), или

$$\varphi(x) = \int\limits_0^\infty \frac{K(x, y)\,dy}{\exp\left[\frac{\varphi(y) + \alpha y^2 - M}{T}\right] + 1},$$

близко к уравнениям типа Гаммерштейна, но имеет следующие особенности: бесконечные пределы интегрирования, ядро $K(x, y)$ не удовлетворяет условию:

$$\int dx dy K(x, y) < \infty; \qquad K(x, y) = C\frac{y}{2x}\ln\left|\frac{(x+y)^2+\varkappa^2}{(x-y)^2+\varkappa^2}\right|;$$

параметр T входит не множителем в ядро, а нелинейно в подынтегральном выражении. Применим аппарат теории ветвления решений нелинейных интегральных уравнений. В окрестности точки $T=0$ имеем $\varphi(x)=\varphi_0(x)+\psi(x)$, где $\varphi_0(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\varphi_0(x) = \int_0^\infty K(x, y)\,\theta(M_0 - E_0)\,dy.$$

Здесь $E_0=\varphi_0(y)+dy^2$. Положим, кроме того, $\mu=\mu_0$ (μ_0 — уровень Ферми) и, следуя методу последовательных приближений: $\Psi = T^2\psi_1 + T^3\psi_2 + \dots$. Приравнивая члены с одинаковыми степенями T, получим ряд уравнений метода последовательных приближений. Покажем разрешимость линейного неоднородного уравнения, соответствующего этой системе:

$$K_1\psi_1 = \psi_1 = -\pi^2/6\,M(x).$$

Тогда имеем

$$K_1\psi_1 = \int dy K_1(x, y)\,\psi_1(y)\,dy = N(x);$$

$$K_1(x, y) = K(x, y)\,\delta(\mu_0 - E_0);$$

$$N(x) = K(x, k_F)\,\psi_1(k_F)\left(\frac{dE_0}{dy}\right)_{y=k_F};$$

$$\psi_1(k_F) = \frac{\pi^2}{6}\,\frac{M(k_F)}{1 - K(k_F, k_F)\left(\frac{dE_0}{dx}\right)^{-1}_{x=k_F}};$$

$$M(x) = \int_0^\infty K(x, y)\,\delta'(\mu_0 - E_0)\,dy =$$

$$= \left(\frac{dE_0}{dx}\right)^{-3}_{x=k_F}\left[K'_y(x, y)\Big|_{y=k_F}\left(\frac{dE_0}{dx}\right)_{x=k_F} - K(x, y)\left(\frac{d^2E_0}{dx^2}\right)_{x=k_F}\right]; \qquad (40)$$

$$\psi_1(x) = \frac{\pi^2}{6}M(x) + \frac{\pi^2}{6}M(k_F)\,K(x, k_F)\left[1 - K(k_F, k_F)\left(\frac{dE_0}{dx}\right)_{x=k_F}\right]^{-1}.$$

Итак, видно, что линейное неоднородное уравнение (40) разрешимо. Следовательно, точка $T=0$ не есть точка ветвления уравнения (14).

ЛИТЕРАТУРА

1. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1965.
2. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., 1962.
3. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М., 1965.

Поступила в редакцию
5.7 1973 г.

Кафедра
физики полупроводников