сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-85-248

Д.И.Пушкаров

О СТАТИСТИКЕ ДЕФЕКТОНОВ В КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

1985

Как показано в [1,2], характерной особенностью спектра дефектонных возбуждений в квантовых кристаллах является его малая ширина Δ, которая для вакансионов составляет несколько градусов К, а для примесей ^3He в твердом ^4He порядка 10^{-4} К. Поэтому и температура вырождения дефектонного газа T_0 очень мала:

$$T_0 \sim \Delta x^{2/3}, \qquad /1/$$

где x - безразмерная концентрация дефектов. Для вакансионного газа с концентрацией $x \sim 10^{-3} - 10^{-4}$ температура вырождения $T_0 \sim 10^{-2}$ К. Таким образом, в довольно широком интервале температур можно считать, что дефектоны подчиняются статистике Больцмана. Тем не менее, при достаточно низких температурах статистика дефектонов может стать существенной и привести к вполне определенным эффектам. Так, в случае бозевских возбуждений возможно появление сверхтекучих свойств кристалла, обусловленное сверхтекучим потоком вакансионного газа.

С другой стороны, малая ширина дефектонной зоны приводит к аномально большим сечениям рассеяния дефектонов друг на друге [1,2]. Поэтому даже при относительно небольших концентрациях происходит самолокализация дефектонов. С понижением концентрации ($x < \sigma^{-1}$, где σ - сечение рассеяния в единицах a^2, где a - межатомное расстояние/ дефектоны превращаются в "хорошие" квазичастицы с хорошо определенным квазиимпульсом и законом дисперсии. Для дефектонного газа это связано и с возрастанием роли статистики. Так, в случае фермиевских возбуждений энергия, связанная со статистикой /энергия Ферми/

$$\epsilon_F \sim T_0 \sim \Delta x^{2/3}, \qquad /2/$$

в то время как энергия взаимодействия между дефектонами пропорциональна концентрации

$$E \sim V_0 x . \qquad /3/$$

Таким образом, при малых концентрациях

$$\frac{\epsilon_F}{E} \sim \frac{\Delta}{V_0} x^{-1/3} \gg 1 \qquad /4/$$

СТАТИСТИКА ДЕФЕКТОНОВ В ТРЕХМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

Для выяснения коллективных свойств дефектонов рассмотрим упрощенную модель кристалла, в котором взаимодействие между атомами, находящимися в разных узлах решетки, не зависит от статистики атомов, занимающих эти узлы. Такая ситуация имеет место, например, в случае изотопических примесей. Таким образом, будем предполагать, что атомы матрицы отличаются от дефектов только спином. Поэтому и переход дефекта в другой узел проявляется только как переход его спина. Тогда формально можно считать, что в каждом узле решетки расположена частица, которая может находиться в двух состояниях, которые будем отличать индексом s. $s = 0$ соответствует случаю, когда в данном узле находится бозевская частица, а $s = 1$ означает наличие фермиевской частицы. Расположение дефектов в кристалле при этом произвольно. В бозевском кристалле состояние с $s = 1$ формально можно рассматривать как возбужденное, а с $s = 0$ - как основное, в то время как для фермиевского кристалла будет наоборот. В любом кристалле вакансиям приписываем спин, равный нулю.

Поскольку число частиц в каждом состоянии равно либо нулю, либо единице, то собственные значения оператора числа частиц

$$N_{ns} = 0,1, \qquad /5/$$

а так как в каждом узле всегда есть одна частица, то

$$N_{n0} + N_{n1} = 1. \qquad /6/$$

Все узлы решетки будем считать пронумерованными. Способ нумерации при этом произволен, но постоянен. Вводя в рассмотрение операторы рождения a^+_{ns} и уничтожения a_{ns} частиц в узле n в состоянии s, пишем

$$\hat{N}_{ns} = a^+_{ns} a_{ns}. \qquad /7/$$

Волновую функцию в представлении чисел заполнения обозначим через $|\ldots N_{ns} \ldots\rangle$.

Операторы a^+ и a построим из операторов b^+ и b, обладающих свойствами

$$b^+_{ns} b_{ns} = \hat{N}_{ns} \qquad \sum_s b^+_{ns} b_{ns} = 1,$$

$$b^+_{ns} |\ldots N_{ns} \ldots\rangle = (1 - N_{ns}) |\ldots N_{ns} + 1 \ldots\rangle, \qquad /8/$$

$$b_{ns} |\ldots N_{ns} \ldots\rangle = N_{ns} |\ldots N_{ns} - 1 \ldots\rangle.$$

Отсюда следуют их коммутационные соотношения

$$b_{ns} b^+_{m\sigma} - b^+_{m\sigma} b_{ns} = \delta_{mn} \delta_{s\sigma} (1 - 2\hat{N}_{ns}),$$

$$b_{m\sigma} b_{ns} - b_{ns} b_{m\sigma} = 0, \qquad /9/$$

$$b^+_{m\sigma} b^+_{ns} - b^+_{ns} b^+_{m\sigma} = 0.$$

Это - известные перестановочные соотношения для операторов Паули. При этом учитывается тот факт, что в одном узле не может быть больше одной частицы. Однако в /9/ не учитывается правильно симметрия волновых функций. Так, например, для частиц, находящихся в разных узлах, соотношения /2/ совпадают с соответствующими для бозевских операторов, в то время как в этих же узлах могут находиться ферми-частицы. Чтобы правильно учесть статистику атомов /но не возбуждений!/, операторы a^+ и a можно записать в виде

$$a^+_{ns} = e^{i\pi s \sum_{\ell < n} \hat{N}_{\ell 1}} b^+_{ns}, \qquad a_{ns} = e^{-i\pi s \sum_{\ell < n} \hat{N}_{\ell 1}} b_{ns}. \qquad /10/$$

Очевидно,

$$a^+_{ns} a_{ns} = b^+_{ns} b_{ns} = \hat{N}_{ns}. \qquad /11/$$

Найдем коммутационные соотношения для операторов a^+_{ns} и $a_{m\sigma}$. Для этого пишем:

$$a_{m\sigma} a^+_{ns} = e^{-i\pi\sigma \sum_{\ell < m} \hat{N}_{\ell 1}} b_{m\sigma} e^{i\pi s \sum_{\ell < n} \hat{N}_{\ell 1}} b^+_{ns} =$$

$$= e^{-i\pi\sigma \sum_{\ell < m} \hat{N}_{\ell 1}} e^{i\pi s \sum_{\ell < n} (\hat{N}_{\ell 1} - \sigma \delta_{\ell m})} b_{m\sigma} b^+_{ns} =$$

$$= e^{-i\pi\sigma \sum_{\ell < m} \hat{N}_{\ell 1}} e^{i\pi s \sum_{\ell < n} (\hat{N}_{\ell 1} - \sigma \delta_{\ell m})} (b^+_{ns} b_{m\sigma} + \delta_{mn} \delta_{s\sigma} (1 - 2\hat{N}_{ns})) =$$

$$= a^+_{ns} a_{m\sigma} e^{i\pi\sigma s (\sum_{\ell < m} \delta_{\ell n} + \sum_{\ell < n} \delta_{\ell m})} + \delta_{mn} \delta_{s\sigma} (1 - 2\hat{N}_{ns}).$$

Следовательно,

$$a_{m\sigma} a^+_{ns} - e^{i\pi s\sigma (1 - \delta_{mn})} a^+_{ns} a_{m\sigma} = (1 - 2\hat{N}_{ns}) \delta_{mn} \delta_{s\sigma}. \qquad /12/$$

Аналогично, для операторов $a_{m\sigma}$ и a_{ns} имеем

$$a_{m\sigma} a_{ns} - e^{i\pi s\sigma} a_{ns} a_{m\sigma} = 0 \qquad m \neq n \qquad /13/$$

$$a_{ns} a_{n\sigma} = 0.$$

и, следовательно,

$$a^+_{m\sigma} a^+_{ns} - e^{i\pi s\sigma} a^+_{ns} a^+_{m\sigma} = 0 \qquad m \neq n$$
$$a^+_{ms} a^+_{m\sigma} = 0. \tag{14}$$

Тогда оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования с учетом только парных взаимодействий записывается в виде:

$$H = \sum_{m \neq n} A_{mn} a^+_{n\sigma} a^+_{ms} a_{m\sigma} a_{ns}, \tag{15}$$

где A_{mn} - матричный элемент оператора парного взаимодействия между атомами, расположенными в узлах m и n.

Ясно, что операторы a^+ и a не подчиняются определенной статистике, что связано с хаотическим распределением дефектов. Из них, однако, можно составить новые операторы

$$\alpha_n = a^+_{n\sigma} a_{ns}, \qquad \alpha^+_n = a^+_{ns} a_{n\sigma}, \tag{16}$$

имеющие смысл операторов рождения и уничтожения "возбуждения" в узле n. Действительно, оператор $\alpha^+_n \alpha_n = a^+_{ns} a_{ns} = \hat{N}_{ns}$ совпадает с оператором числа дефектов $\hat{N}_{ns}$/индекс s в /16/ относится к "возбужденному" состоянию, а σ - к "основному"/. Несмотря на сложный вид соотношений /12-14/, коммутационные соотношения операторов /16/ для конкретных случаев сильно упрощаются и принимают знакомый вид. Так, учитывая, что $\alpha_n \alpha^+_n = \hat{N}_{n\sigma}$ и нормировочное условие $N_{n\sigma} + N_{ns} = 1$, легко получаем

$$\alpha_n \alpha^+_n + \alpha^+_n \alpha_n = 1. \tag{17}$$

Для произвольных же m, n, σ, s прямой подсчет с учетом /12/-/14/ дает

$$\alpha_m \alpha^+_n - e^{i\pi(s-\sigma)(1-\delta_{mn})} \alpha^+_n \alpha_m = (1-2\hat{N}_n)\delta_{mn}, \tag{18}$$

где $\hat{N}_n = \alpha^+_n \alpha_n$.

Для определенности рассмотрим кристалл бозевского типа (^4He) с примесями /атомами замещения/ фермиевского типа (^3He). В этом случае операторы рождения и уничтожения возбуждения в узельном представлении будут соответственно $\alpha^+_n = a^+_{n1} a_{n0}$ и $\alpha_n = a^+_{n0} a_{n1}$. Легко видеть, что они удовлетворяют точным фермиевским перестановочным соотношениям:

$$\alpha_m \alpha^+_n + \alpha^+_n \alpha_m = \delta_{mn},$$
$$\alpha_n \alpha_n = \alpha^+_n \alpha^+_n = 0. \tag{19}$$

Подставляя в /15/, имеем

$$H = \sum_{m \neq n} A_{mn} \alpha^+_m \alpha_n. \tag{20}$$

Так как матрица A_{mn} зависит /в пренебрежении фононными смещениями/ только от разности координат узлов $\vec{R}_m - \vec{R}_n$, гамильтониан /20/ можно привести к диагональному виду с помощью преобразования Фурье:

$$\alpha^+_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \alpha^+_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_m}, \qquad \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}_n}$$
$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \alpha^+_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}. \tag{21}$$

Новые операторы $\alpha^+_{\vec{k}}$ и $\alpha_{\vec{k}}$ являются операторами рождения и уничтожения дефектонов с квазиимпульсом $\vec{k}$, а

$$\epsilon(\vec{k}) = \sum_n A_{mn} e^{i\vec{k}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)} \tag{22}$$

задает закон дисперсии дефектонов.

Так как преобразование Фурье сохраняет симметрию волновой функции, операторы $\alpha_{\vec{k}}$, так же как и α_n, являются фермиевскими.

В случае кристалла из фермиевских атомов /например, ^3He / с вакансиями или атомами замещения бозевского типа (^4He), оператор $\alpha^+_n = a^+_{n1} a_{n0}$ имеет смысл оператора уничтожения возбуждения, так как он соответствует восстановлению "собственного" атома в узле n.

Если дефекты и атомы кристалла подчиняются одной и той же статистике, то операторы /16/ составлены из операторов одной статистики, а их перестановочные соотношения можно получить формально, подставляя в /18/ /но не в /16// $s = \sigma$ /или $s - \sigma = 2$/:

$$\alpha_m \alpha^+_n - \alpha^+_n \alpha_m = (1 - 2\hat{N}_n)\delta_{mn}. \tag{23}$$

Если концентрация дефектов мала /что практически всегда выполняется/, соотношения /23/ можно приближенно заменить бозевскими.

Таким образом, о статистике дефектонов в квантовых кристаллах можно сказать следующее:

1. Вакансионы подчиняются статистике атомов матрицы.
2. Атомы замещения фермиевского типа в фермиевском кристалле создают возбуждения бозевского типа.
3. Если статистика атомов замещения отличается от статистики атомов матрицы, примесоны подчиняются ферми-статистике. Таким образом, делокализованные атомы замещения ^4He в твердом ^3He являются дефектонами фермиевского типа.
4. Атомы внедрения превращаются в примесоны, подчиняющиеся той же статистике, что и сама примесь.

Аналогичным образом, очевидно, можно рассмотреть и статистику дефектонов в сложной решетке, а также статистику вакансионов в неупорядоченном кристалле из ферми- и бозе-частиц. При этом, в отличие от настоящих частиц /возбуждений вакуума/, дефектонные возбуждения не всегда будут описываться бозе- или ферми-статистикой даже приближенно.

ОДНОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

Иная ситуация возникает в одномерном случае. Как показано в /3/, если для одномерного газа паулионов ограничиться только взаимодействием ближайших частиц, то гамильтониан такого газа можно представить в виде гамильтониана идеального газа фермионов. Таким образом, дефектонный газ в одномерном кристалле можно описывать статистикой Ферми-Дирака. Действительно, гамильтониан в этом случае имеет вид

$$H = A \sum_n (b_n^+ b_{n+1} + b_{n+1}^+ b_n). \qquad /24/$$

Введем новые операторы фермиевского типа:

$$F_n = e^{i\pi \sum_{\ell<n} \hat{N}_\ell} b_n ; \quad F_n^+ = e^{-i\pi \sum_{\ell<n} \hat{N}_\ell} b_n^+ . \qquad /25/$$

Тогда $b_n^+ b_{n+1} = F_n^+ F_{n+1}$, $b_{n+1}^+ b_n = F_{n+1}^+ F_n$, и, следовательно,

$$H = A \sum_n (F_{n+1}^+ F_n + F_n^+ F_{n+1}). \qquad /26/$$

Вводя операторы рождения и уничтожения дефектона

$$F_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} F_n , \qquad F_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n F_n^+ e^{-ikn} , \qquad /27/$$

получаем оператор энергии дефектонного газа в виде гамильтониана идеального ферми-газа

$$H = \sum_k \epsilon(k) F_k^+ F_k , \qquad /28/$$

где $\epsilon(k) = 2A \cos k$ - закон дисперсии дефектонов в одномерном кристалле. Еще раз отметим, что этот результат существенно связан с предположением о взаимодействии только между ближайшими соседями, чего не предполагалось в трехмерном случае.

Вид гамильтониана /28/ указывает также на невозможность бозе-эйнштейновской конденсации в одномерном случае.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пушкаров Д.И. ЖЭТФ, 1970, 59, с.1755.
2. Пушкаров Д.И. Письма в ЖЭТФ, 1974, 19, с.751.
3. Chesnut D.B., Suna A. J.Chem.Phys., 1963, 39, p.146.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 апреля 1985 года.

Вниманию организаций и лиц, заинтересованных в получении публикаций Объединенного института ядерных исследований

Принимается подписка на препринты и сообщения Объединенного института ядерных исследований.

Установлена следующая стоимость подписки на 12 месяцев на издания ОИЯИ, включая пересылку, по отдельным тематическим категориям:

ИНДЕКС	ТЕМАТИКА	Цена подписки на год
1.	Экспериментальная физика высоких энергий	10 р. 80 коп.
2.	Теоретическая физика высоких энергий	17 р. 80 коп.
3.	Экспериментальная нейтронная физика	4 р. 80 коп.
4.	Теоретическая физика низких энергий	8 р. 80 коп.
5.	Математика	4 р. 80 коп.
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия	4 р. 80 коп.
7.	Физика тяжелых ионов	2 р. 85 коп.
8.	Криогеника	2 р. 85 коп.
9.	Ускорители	7 р. 80 коп.
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных	7 р. 80 коп.
11.	Вычислительная математика и техника	6 р. 80 коп.
12.	Химия	1 р. 70 коп.
13.	Техника физического эксперимента	8 р. 80 коп.
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами	1 р. 70 коп.
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях	1 р. 50 коп.
16.	Дозиметрия и физика защиты	1 р. 90 коп.
17.	Теория конденсированного состояния	6 р. 80 коп.
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники	2 р. 35 коп.
19.	Биофизика	1 р. 20 коп.

Подписка может быть оформлена с любого месяца текущего года.

По всем вопросам оформления подписки следует обращаться в издательский отдел ОИЯИ по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79.

Пушкаров Д.И. Р17-85-248

О статистике дефектонов в квантовых кристаллах

Рассмотрены коллективные свойства дефектонов различного вида /вакансионов, атомов замещения и атомов внедрения/ в квантовых кристаллах бозевского и фермиевского типов. Результаты можно использовать при изучении низкотемпературного поведения дефектонов в кристаллах изотопов гелия.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Pushkarov D.I. P17-85-248

On the Defecton Statistics in Quantum Crystals

Statistical properties of defecton excitations related to defects of different kind (vacancies, impurities and interstitials) are considered in quantum crystals both of Bose-type and Fermi-type. The results may be applied when studying the low-temperature behaviour of defectons in solid ^{3}He and ^{4}He.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985