

КВАНТОВАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРА ФЕРМИЕВСКИХ КОНФИГУРАЦИОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ АТОМНОЙ СИСТЕМЫ.

Небогатилов Н.М.
Физико-технический институт УрО РАН, г. Ижевск
E-mail: xps@fti.udm.ru

Идея об элементарных возбуждениях системы многих тел является ключевой в современной теории конденсированного состояния. Важной особенностью систем многих частиц является возможность возникновения элементарных возбуждений (возбужденных состояний) особого типа, обязанных взаимодействию между частицами. В макроскопических системах связанных атомов реализуются два типа возбуждений: конфигурационное, обусловленное изменением конфигурации атомов и тепловое, за счет колебаний атомов. Конфигурационные возбуждения ответственны за фазовые переходы в атомной системе. В данной работе рассматривается конфигурационная составляющая энергетической структуры бинарной атомной системы в модели парного межатомного взаимодействия.

I. Модель бинарной атомной системы

Частицы двух сортов (A, B), с заданной концентрацией (с, 1-с), распределяются по узлам некоторой трехмерной решетки. Различные распределения атомов по узлам решетки будем описывать набором величин n_{pi} , могущих принимать значения 0 и 1, где $p=\{A,B\}$, “i” – номер узла. Энергию взаимодействия частиц сорта “p” и “q”, находящихся на узлах “i” и “j” соответственно, будем записывать в виде $v_{ij}^{pq} n_{pi} n_{qj}$. Введем операторы рождения (уничтожения) a_{pi}^+ (a_{pi}) атома сорта “p” на узле “i” со следующей алгеброй: $[a_{pf}, a_{pf}^+] = 1$; $a_{pf}^2 = a_{pf}^{+2} = 0$; $[a_{pf}, n_{qj}] = a_{pf} \delta_{pq} \delta_{ji}$. Величины $n_{pi} = a_{pi}^+ a_{pi}$ при каждом “i” связаны соотношением: $\sum_p n_{pi} = 1$, отражающим тот факт, что каждый узел решетки обязательно занят атомом какого либо сорта. Заполнение узла решетки атомом обусловлено соблюдением своеобразного принципа Паули: на одном узле решетки не может находиться более одной частицы. Поэтому величины n_{pi} обязаны быть операторами проектирования: $n_{pi} n_{qi} = n_{pi} \delta_{pq}$; $n_{pi}^+ = n_{pi} [3,4]$. Исходный гамильтониан системы [4,5] удобно записать в операторном базисе $\{X_i^f\}$ ($X_1^f = a_f$; $X_2^f = d_f$):

$$H = \sum_f -\mu a_f^+ a_f + 1/2 a_f^+ d_f; d_f = a_f O_f; O_f = \sum_j v_{fj} n_j; v_{ff} = 0, \quad (1)$$

где $n_i \equiv n_{Ai}$; $\mu = \mu_A - \mu_B$; $v_{ij} = v_{ij}^{AA} + v_{ij}^{BB} - 2v_{ij}^{AB}$ – энергия смешения. Операторный базис $\{X_i^f\}$ замкнут относительно операции коммутирования с гамильтонианом системы

$$[X_i^f, H] = \sum_j K_{ij} X_j^f.$$

По построению $K_{11} = -\mu$; $K_{12} = 1$. Коэффициенты K_{21}, K_{22} должны определяться при этом самосогласованным образом. Химпотенциал μ удовлетворяет условию: $N^{-1} \sum_f \langle n_f \rangle = c$, где

N – полное число узлов решетки, c – концентрация.

II. Фермиевский энергетический спектр возбуждений

а) Операторный базис $\{Y_f^k\}$

Задача определения возможного энергетического спектра возбуждений системы эквивалентна диагонализации гамильтониана. От операторного базиса $\{X_i^f\}$ перейдем к

операторному базису $\{Y_f^k\}$, в котором исходный гамильтониан (1) принимает канонический вид: $\tilde{H} = \sum_f \tilde{H}_f$

$$\tilde{H}_f = \tilde{H}_f^0 + \sum_k \omega_f^k Y_{f+}^k + Y_f^k$$

Операторы Y_f^k (Y_{f+}^k) будем интерпретировать как операторы уничтожения (рождения) f -ого элементарного возбуждения с энергией возбуждения ω_f^k (k – индекс ветви возбуждения). \tilde{H}_f^0 – энергия возможного основного состояния. Потребуем, чтобы оператор Y_f^k наилучшим образом удовлетворял уравнению [6]:

$$[Y_f^k, H] = \omega_f^k Y_f^k. \quad (2)$$

Энергия возбуждения ω_f^k может, в общем случае, принимать комплексные значения. Поэтому дуальный оператор будем обозначать как Y_{f+}^k ($[Y_{f+}^k, H] = -\omega_f^k Y_f^k$). Операторы Y_f^k будем строить в виде: $Y_f^k = \sum_i b_i^f X_i^f$. Из всех преобразований выделим специальный класс

преобразований, которые оставляют квантовые скобки инвариантными, в частности $[F(Y_f^k(X_i^f)), H] = [\tilde{F}(Y_f^k), \tilde{H}]$, где F -операторная функция. Оператор Y_f^k в базисе $\{Y_f^k\}$ должен удовлетворять уравнению:

$$[Y_f^k, \tilde{H}_j] = \omega_f^k Y_f^k \delta_{fj}. \quad (3)$$

Близость решения уравнения (2,3) к точному решению исходной задачи зависит от способа, используемого при фактическом вычислении функций K_{21}, K_{22} . Но сам способ должен допускать практическую возможность проведения точного самосогласования до конца.

б) вариационный принцип

Уравнение (2) эквивалентно условию стационарности функционалов

$$\begin{aligned} \delta\Phi_1 &= \delta\{[Y_f^k, H]Y_{f+}^k\} - \omega_f^k \langle Y_f^k Y_{f+}^k \rangle = 0 \\ \delta\Phi_2 &= \delta\{[[Y_f^k, H]Y_{f+}^k]_{\pm}\} - \omega_f^k \langle [Y_f^k Y_{f+}^k]_{\pm} \rangle = 0. \end{aligned}$$

Поскольку пространство квантово-механических операторов замкнуто как относительно бинарной операции умножения операторов, так и операции $[\ ,]_{\pm}$, то наилучший оператор Y_f^k должен удовлетворять условию экстремальности обоих функционалов. Вариация осуществляется для операторов Y_f^k, Y_{f+}^k , удовлетворяющих перестановочным соотношениям определенной симметрии (статистики). Условия экстремальности функционалов $\Phi_{1,2}$, записанных в базисе $\{X_i^f\}$, при независимом варьировании функций b_i^k, b_i^k позволяют:

а) определить возможный энергетический спектр возбуждений системы

$$\omega_f^k = \Omega_f + \lambda m \Gamma_f^m; \quad 2\Omega_f = U_f + 2(\langle O_f \rangle - \mu); \quad 2\Gamma_f^m = \{m^2(U_f^2 + 4\langle O_f^2 \rangle_c)\}^{1/2},$$

где $\lambda = \pm 1$; $k = \text{sign}(\lambda)$; $m = 1$ соответствует вещественным значениям энергии возбуждения, $m = i$ комплексным значениям энергии возбуждения.

б) определить функции K_{21}, K_{22} , и построить оператор Y_f^k . Отметим, что $Y_f^{k1} + Y_f^k = 0$, если $k \neq k1$.

В базисе $\{Y_f^k\}$ гамильтониан (1) диагонализуется

$$\tilde{H}_f = \sum_k 1/2(\omega_f^k + K_{11}) s_f^{(k)2} N_f^k; \quad N_f^k = Y_{f+}^k Y_f^k$$

В работе рассмотрена лишь фермиевская по статистике ветвь спектра возбуждений. Требование (3) приводит к уравнениям, позволяющим получить самосогласованные выражения для функций $s_f^{(k)2}, U_f, \langle O_f^2 \rangle_c$. Для функций s_f^k выполняется правило сумм: $\sum_k s_f^{(k)2} = 1$. Отметим следующие свойства операторов N_f^k : $N_f^k N_f^{k1} = N_f^k \delta_{k,k1}$, как следствие

теоремы Вика-Блоха де-Доминисиса [1].

в) квантование энергии возбуждения

Отмеченные выше свойства операторов N_f^k и правило сумм позволяют определить одночастичную функцию распределения вероятности заполнения узла $\langle n_f \rangle$ в виде:

$$\langle n_f \rangle = \gamma U_f / R_f [\exp(2\beta\Omega_f) - 1]^{-1/2}, \text{ где } \gamma = \text{sign}(\sin(\beta\Gamma_f^m)).$$

Поскольку значения функционала $\langle n_f \rangle$ лежат в области $[0,1]$, то с необходимостью должно выполняться условие: $\gamma U_f / R_f \geq 0$. В области значений функции: а) $\sin y_f \geq 0$ ($\gamma = "+"$) б) $\sin(y_f) \leq 0$ ($\gamma = "-"$) условие проективности оператора n_f может быть представлено в виде:

$$\text{а) } \beta\Gamma_f^{(+)} - \alpha = 2\pi s$$

$$\text{б) } \beta\Gamma_f^{(-)} + \alpha = 2\pi(s + 1), \text{ где } \alpha = \arccos(-\exp(-\beta\Omega_f)), s=0,1,2\dots s_{\max}$$

Таким образом, энергия возбуждения ω_f^k есть величина квантованная, то есть зависящая от целочисленного параметра s .

Условие проективности может быть реализовано лишь при следующих значениях параметров: $m^2 = -1$; $\beta\Omega_f > 0$: Таким образом, с принципом распределения атомов по узлам решетки совместимы лишь элементарные возбуждения типа "квазичастица – антиквазичастица".

В работе получено уравнение, связывающее потенциал $\langle O_f \rangle$ на узле "Г" с химпотенциалом системы μ

$$\langle O_f \rangle = 2/3 \{5\mu \pm 4\varepsilon_\gamma\}, \text{ где } \varepsilon_\gamma = [\mu^2 - 9/4\Gamma_f^{(\gamma)2}]^{1/2}$$

Поскольку $\langle O_f \rangle$ - величина, принимающая вещественные значения, то отсюда следует следующее условие $\mu^2 - 9/4\Gamma_f^{(\gamma)2} \geq 0$, накладывающее ограничение на значение s_{\max} .

III. Выводы:

1. Для бинарной атомной системы в модели парного взаимодействия возможны фермиевские по статистике элементарные конфигурационные возбуждения типа "квазичастица – антиквазичастица".
2. Энергетический фермиевский спектр возможных элементарных конфигурационных возбуждений бинарной атомной системы квантован, т.е. энергия возбуждения зависит от целочисленного параметра s .
3. Квантовое число s принимает конечное число целочисленных значений. Возможное максимальное значение квантового числа s_{\max} определяется температурой системы и концентрацией элементов.
4. Вследствие вышесказанного, потенциал, как функция температуры и концентрации, на узле решетки (так и на множестве узлов решетки) принимает ограниченное число возможных квантованных значений.

IV. Литература

1. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.) Введение в квантовую статистическую механику - М.: Наука, 1984. 384с.
2. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике.- М.: Наука, 1961. 312с.
3. Олемской А.И., Умрихин В.В. // Известия вузов. Физика. 1985. N8. С.62.
4. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов.- М.: Наука, 1974.-384с.
5. Белашенко К.Д., Вакс В.Г. // ЖЭТФ. 1997. Т.112. вып. 2(8). С.714.
6. Пайнс Д. Проблема многих тел М.: ИЛ, 1963. 191с.