

КОЛЛЕКТИВНОЕ СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРИМЕСЕЙ СО СПИНОМ

Э. Г. Батыев*

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 26 апреля 2017 г.

Рассматривается задача о состояниях электронной системы, взаимодействующей с примесями, имеющими спин $1/2$. Показано, что главными при вычислении энергии системы являются процессы с переворотом электронного спина и образование комплексов электрон–дырка–перевернутый спин примеси (дырка на фоне электронов с другой проекцией спина). В системе происходит накопление таких комплексов (нечто вроде образования бозе-конденсата комплексов), что приводит к понижению энергии системы, которое линейно по исходному взаимодействию электрона с примесным спином (в отличие, например, от результата по теории возмущений). Возбуждение дырочного типа и спиновое возбуждение имеют щель в спектре. Малые параметры задачи: взаимодействие электронов с примесными спинами и число примесей. Электрон-электронное взаимодействие не учитывается. Считается, что примеси расположены хаотически и в вычислениях используется известное усреднение по их расположению.

DOI: 10.7868/S0044451017110153

Взаимодействие электрона с примесью определяется оператором

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Описание взаимодействия электронной системы с обычными примесями известно (см., например, [1]). Для не взаимодействующих друг с другом электронов все решается просто: находим собственные состояния электрона в поле примесей и заполняем эти состояния вплоть до уровня Ферми. Если же примеси имеют спин, то так рассуждать нельзя, надо искать общие состояния электронов и примесей. Как оказывается, в такой системе возможно образование состояния нового типа.

Как известно, этот вопрос изучался в связи с эффектом Кондо (см., например, [1]), когда рассматривался вопрос о влиянии рассеяния электрона на примеси со спином на сопротивление системы. Здесь мы будем рассматривать состояние такой системы, когда существенно взаимодействие электронов со всем коллективом таких примесей.

$$H_{int} \rightarrow W(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{S}) = \\ = W(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \left\{ \frac{s^+ S^- + s^- S^+}{2} + s_z S_z \right\}. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{s} — спин электрона, \mathbf{S} — спин примеси.

В дальнейшем для простоты будем считать, что спин примеси равен $1/2$. В этом случае можно, как известно, ввести фермиевские операторы рождения B^\dagger и уничтожения B следующим образом:

$$S^+ \rightarrow B^\dagger, \quad S^- \rightarrow B, \quad S_z \rightarrow B^\dagger B - 1/2. \quad (2)$$

Это для каждой примеси (операторы для разных примесей коммутируют).

Для системы электронов и примесей, вводя операторы рождения $a_\sigma^\dagger(\mathbf{p})$ и уничтожения $a_\sigma(\mathbf{p})$ электрона с импульсом \mathbf{p} и спином σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), для H_{int} получим

* E-mail: batyev@isp.nsc.ru

$$\begin{aligned}
H_{int} &= H_1 + H_2 + H_3; \\
H_1 &= \frac{1}{V} \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{q}} W(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\nu) a_\sigma^\dagger(\mathbf{p}) a_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q}); \\
H_2 &= \frac{1}{2V} \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{q}} U(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\nu) \times \\
&\quad \times \frac{\sigma}{|\sigma|} a_\sigma^\dagger(\mathbf{p}) a_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \left\{ B_\nu^\dagger B_\nu - \frac{1}{2} \right\}; \\
H_3 &= \frac{1}{2V} \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{q}} U(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\nu) \times \\
&\quad \times \left\{ a_\uparrow^\dagger(\mathbf{p}) a_\downarrow(\mathbf{p} + \mathbf{q}) B_\nu + a_\downarrow^\dagger(\mathbf{p}) a_\uparrow(\mathbf{p} + \mathbf{q}) B_\nu^\dagger \right\}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $W(\mathbf{q})$, $U(\mathbf{q})$ — фурье-компоненты взаимодействия электрона с примесью (соответственно $W(\mathbf{r})$ и $U(\mathbf{r})$), ν — номер примеси, \mathbf{R}_ν — радиус-вектор расположения примеси. Подразумевается также суммирование по проекции электронного спина σ .

Гамильтониан задачи:

$$H = H_0 + H_{int}, \quad H_0 = \sum_{\sigma, \mathbf{p}} \xi(\mathbf{p}) a_\sigma^\dagger(\mathbf{p}) a_\sigma(\mathbf{p}). \tag{4}$$

Энергия электрона $\xi(\mathbf{p})$ отсчитана от поверхности Ферми. Исходная энергия примесей равна нулю (не зависит от ориентации спина).

Основные предположения: энергия взаимодействия с примесями мала (по сравнению с энергией Ферми), число примесей мало по сравнению с числом электронов.

Для слабого взаимодействия можно рассматривать все части взаимодействия по-отдельности. Влияние взаимодействия $H_1 + H_2$ известно: о взаимодействии H_1 сказано выше, а взаимодействие H_2 приводит к выстраиванию спинов электронов и примесей, что следует из приближения самосогласованного поля, причем изменение энергии при этом квадратично по взаимодействию, а нас интересуют добавки линейные по взаимодействию.

Главное — это учет части взаимодействия H_3 , что и делается в данной работе.

1.1. Одиночный комплекс

Интересно выяснить, что будет с одиночным комплексом.

Начнем с одиночной примеси (пусть она расположена в начале координат). Гамильтониан

$$\begin{aligned}
H^{(1)} &= \sum_{\sigma, \mathbf{p}} \xi(\mathbf{p}) a_\sigma^\dagger(\mathbf{p}) a_\sigma(\mathbf{p}) + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} U(\mathbf{q}) \times \\
&\quad \times \left\{ a_\uparrow^\dagger(\mathbf{p}) a_\downarrow(\mathbf{p} + \mathbf{q}) B + a_\downarrow^\dagger(\mathbf{p}) a_\uparrow(\mathbf{p} + \mathbf{q}) B^\dagger \right\}.
\end{aligned}$$

В качестве исходного состояния $|0 \downarrow\rangle$ возьмем основное состояние невзаимодействующего ферми-газа и спин примеси вниз (соответствующую энергию примем за начало отсчета). Пробную волновую функцию Ψ запишем в виде

$$\Psi = \left\{ C + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} D(\mathbf{p}, \mathbf{k}) a_\downarrow^\dagger(\mathbf{p}) a_\uparrow(\mathbf{k}) B^\dagger \right\} |0 \downarrow\rangle.$$

Отметим, что в функции $D(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ первый аргумент $|\mathbf{p}| > p_F$, а второй аргумент $|\mathbf{k}| < p_F$.

Уравнения для коэффициентов получим из условия минимума выражения

$$(\Psi, H^{(1)}\Psi) - E^{(1)}(\Psi, \Psi) \rightarrow \min,$$

где множитель Лагранжа $E^{(1)}$, введенный для учета условия нормировки, и есть энергия состояния. Среднее значение оператора энергии имеет вид

$$\begin{aligned}
(\Psi, H^{(1)}\Psi) &= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \left\{ \xi(\mathbf{p}) + |\xi(\mathbf{k})| \right\} |D(\mathbf{p}, \mathbf{k})|^2 + \\
&\quad + \left\{ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} U(\mathbf{p}, \mathbf{k}) C^* D(\mathbf{p}, \mathbf{k}) + \text{C.c.} \right\}.
\end{aligned}$$

В результате получим условия минимума:

$$-E^{(1)}C + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} U(\mathbf{q}) D(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) = 0;$$

$$\left\{ \xi(\mathbf{p}) + |\xi(\mathbf{k})| - E^{(1)} \right\} D(\mathbf{p}, \mathbf{k}) + \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{p})}{2V} C = 0.$$

Учитывая второе выражение в первом, получим

$$E^{(1)} = \frac{-1}{(2V)^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{\xi(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + |\xi(\mathbf{p})| - E^{(1)}}.$$

При суммировании надо учитывать, что $|\mathbf{p}| < p_F$, $|\mathbf{p} + \mathbf{q}| > p_F$. Видно, что независимо от знака взаимодействия энергия $E^{(1)} < 0$, т. е. связанное состояние всегда существует. Кстати, под знаком суммы величиной $E^{(1)}$ можно пренебречь, потому что она мала квадратично по взаимодействию. Предполагается, что взаимодействие является короткодействующим, так что суммирование по импульсам происходит в достаточно широкой области. Полученный результат такой же, как по теории возмущений. Более аккуратное решение этой задачи приведено в следующем разделе.

Таким образом, образуется связанный комплекс: электрон, дырка и примесь со спином. Именно о системе таких комплексов в случае макроскопического количества примесей и пойдет дальше речь.

Рассмотрим теперь такую же задачу (один комплекс) в поле макроскопического количества примесей со спином (гамильтониан H_3). Пробную волновую функцию запишем в виде

$$\Phi_1 = \left\{ C + \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{k}} D_\nu(\mathbf{p}, \mathbf{k}) a_{\downarrow}^\dagger(\mathbf{p}) a_{\uparrow}(\mathbf{k}) B_\nu^\dagger \right\} |0 \downarrow\rangle.$$

Повторяя прежние рассуждения, получим уравнения

$$E_1 C = \frac{1}{2V} \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{k}} D_\nu(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{p}-\mathbf{k})\mathbf{R}_\nu) U(\mathbf{p}-\mathbf{k}),$$

$$\begin{aligned} \{E_1 - \xi(\mathbf{p}) - |\xi(\mathbf{k})|\} D_\nu(\mathbf{p}, \mathbf{k}) &= \\ &= C \frac{U(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \exp(i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{R}_\nu)}{2V}. \end{aligned}$$

Отсюда получается прежнее выражение для энергии, только добавляется в виде множителя перед суммой число примесей N_0

$$E_1 + \frac{N_0}{(2V)^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \frac{|U(\mathbf{q})|^2}{\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q}) + |\xi(\mathbf{p})| - E_1} = 0.$$

Здесь по-прежнему $|\mathbf{p}+\mathbf{q}| > p_F$, $|\mathbf{p}| < p_F$. Отметим, что усреднение по расположению примесей не потребовалось. Это так же, как во втором порядке теории возмущений, если не учитывать в знаменателе E_1 . На самом деле эта величина существенна (как это следует из результата), поэтому для оценки нужно оставить в знаменателе только E_1 . Тогда получим

$$E_1^2 \approx \frac{N_0}{(2V)^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2. \quad (5)$$

Знаки плюс и минус соответствуют возбужденному и основному состояниям. Отметим, что энергия связи линейна по исходному взаимодействию и не зависит от знака взаимодействия. Здесь под N_0 надо понимать число не связанных в других комплексах примесей.

Далее надо рассмотреть состояние с макроскопическим количеством таких комплексов и найти их число в минимуме энергии.

1.2. Одна примесь

С одной примесью можно решить задачу точнее (для слабого взаимодействия) при помощи

графической техники. Рассмотрим функцию Грина примеси $G_i(t, t') = -i\langle TB(t)B^\dagger(t') \rangle$. В частотном представлении в нулевом приближении имеем

$$G_i^{(0)}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_0 + i\delta},$$

где ϵ_0 — энергия возбуждения (далее положим равной нулю). Для искомой функции имеем уравнение

$$G_i(\epsilon) = G_i^{(0)}(\epsilon) + G_i^{(0)}(\epsilon)\Sigma(\epsilon)G_i(\epsilon),$$

а для $\Sigma(\epsilon)$ имеем

$$\Sigma(\epsilon) = -i \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \frac{|V(\mathbf{q})|^2}{(2V)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(\omega, \mathbf{p}) G(\epsilon+\omega, \mathbf{p}+\mathbf{q}),$$

где $|\mathbf{p}| > p_F$, $|\mathbf{p}+\mathbf{q}| < p_F$. Здесь была использована обычная диаграммная техника во втором порядке по взаимодействию, т. е. было записано

$$G_i(t, t') = -i\langle TB(t) \exp\left[-i \int d\tau H_{int}(\tau)\right] B^\dagger(t') \rangle$$

и затем проведено разложение до второго порядка по H_{int} .

Это хорошо, если H_{int} содержит четное число фермиевских операторов (именно для этого случая строится диаграммная техника). В нашем случае H_{int} содержит нечетное число ферми-операторов (два электронных и один спиновый), поэтому используем дополнительное условие, именно, при разложении по малому взаимодействию под знаком T произведения считаем, что операторы H_{int} коммутируют, после чего и получается приведенный выше результат для Σ .

При вычислении Σ используем обычное выражение для электронной функции Грина:

$$G(\epsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\epsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta \operatorname{sign}(\xi(\mathbf{p}))}.$$

В результате получим

$$\begin{aligned} \Sigma(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \frac{|V(\mathbf{q})|^2}{(2V)^2} \left\{ \frac{1}{-\epsilon - \xi(\mathbf{p}) - |\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})| + i\delta} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\epsilon - \xi(\mathbf{p}) - |\xi(\mathbf{p}+\mathbf{q})| + i\delta} \right\}. \end{aligned}$$

Это напоминает то, что было получено при вычислении с пробной функцией. Полос функции $G_i(\epsilon)$ дает энергию возбуждения и его затухание.

2. ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ, ВОЗБУЖДЕНИЯ

2.1. Пробная функция

Оператор взаимодействия H_3 дает рождение и уничтожение комплексов (переворот спина примесей и рождение электрон-дырочных пар), поэтому в основном состоянии можно ожидать накопления комплексов, т. е. образования как бы бозе-конденсата этих комплексов, и действовать по аналогии с теорией сверхпроводимости Бардина – Купера – Шриффера [2].

За исходное (невозмущенное) состояние системы примем состояние $|0 \downarrow\rangle$, т. е. ферми-газ в основном состоянии и все примесные спины вниз (можно было бы взять спины вверх с тем же результатом). Удобно перейти к частицам и дыркам, а именно:

$$a_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{p}) \rightarrow a^{\dagger}(\mathbf{p}), \quad a_{\uparrow}(\mathbf{k}) \rightarrow b^{\dagger}(-\mathbf{k}).$$

Здесь $|\mathbf{p}| > p_F$ (a^{\dagger} – рождение частицы), $|\mathbf{k}| < p_F$ (b^{\dagger} – рождение дырки). Именно эти возбуждения электронной системы нам понадобятся в дальнейшем. В новых обозначениях гамильтониан системы $H \rightarrow H_0 + H_3$ имеет вид

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \xi(\mathbf{p}) a^{\dagger}(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{k}} |\xi(\mathbf{k})| b^{\dagger}(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}),$$

$$H_3 = \frac{1}{2V} \sum_{\nu, \mathbf{p}, \mathbf{k}} U(-\mathbf{p} - \mathbf{k}) \exp(-i(\mathbf{p} + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_{\nu}) \times \quad (6)$$

$$\times a^{\dagger}(\mathbf{p}) b^{\dagger}(\mathbf{k}) B_{\nu}^{\dagger} + \text{H.c.}$$

Возьмем пробную функцию в виде

$$\Phi = \prod_{\mathbf{q}} \Phi(\mathbf{q}) |0 \downarrow\rangle, \quad \Phi(\mathbf{q}) = \left\{ C(\mathbf{q}) + \right.$$

$$\left. + \sum_{\mathbf{p}, \nu} D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\nu}) a^{\dagger}(\mathbf{p}) b^{\dagger}(-\mathbf{p} - \mathbf{q}) B_{\nu}^{\dagger} \right\}. \quad (7)$$

Отметим, что здесь использована пробная функция по аналогии с пробной функцией теории сверхпроводимости [2], где в качестве ортогональных были использованы функции с разными импульсами электронов. Особенность нашей задачи заключается в том, что каждый комплекс состоит как бы из трех частиц и в пробной функции приходится фиксировать импульс одной из них, а затем записывать произведение таких функций. Значения \mathbf{q} и количество функций будут определены позже (из минимума энергии системы).

Состояния с разными значениями \mathbf{q} (второе слагаемое) ортогональны. Нормировка для одного комплекса выражается так:

$$|C(\mathbf{q})|^2 + N_0 \sum_{\mathbf{p}} |D(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 = 1.$$

Но в задаче имеется макроскопическое количество комплексов, поэтому необходимо учесть, что часть состояний примеси может быть занята, так что надо ввести вероятность w того, что состояние свободно. Кроме того, надо учесть, что могут быть заняты и состояния электронов и дырок. Значит, надо ввести вероятность того, что соответствующие состояния свободны:

$$\nu_a(\mathbf{p}) = 1 - n_a(\mathbf{p}), \quad \nu_b(\mathbf{k}) = 1 - n_b(\mathbf{k}).$$

В результате условие нормировки в задаче принимает вид

$$|C(\mathbf{q})|^2 + N_0 w \sum_{\mathbf{p}} \nu_a(\mathbf{p}) \nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}) |D(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 = 1. \quad (8)$$

(См. замечание после формулы (11).)

Начнем с вычисления чисел заполнения, т. е. величин $n_a(\mathbf{p})$, $n_b(\mathbf{k})$. При этом используем волновую функцию (7) и приближение среднего поля. Итак,

$$n_a(\mathbf{p}) = \langle a^{\dagger}(\mathbf{p}) a(\mathbf{p}) \rangle =$$

$$= N_0 w \sum_{\mathbf{q}} |D(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 \nu_a(\mathbf{p}) \nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q});$$

$$n_b(\mathbf{k}) = \langle b^{\dagger}(\mathbf{k}) b(\mathbf{k}) \rangle =$$

$$= N_0 w \sum_{\mathbf{q}} |D(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{q})|^2 \nu_a(-\mathbf{k} - \mathbf{q}) \nu_b(\mathbf{k}).$$

В результате среднее значение кинетической энергии запишется в виде

$$\langle H_0 \rangle = N_0 w \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \left\{ \xi(\mathbf{p}) + |\xi(-\mathbf{p} - \mathbf{q})| \right\} \times$$

$$\times |D(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 \nu_a(\mathbf{p}) \nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}).$$

Среднее значение энергии взаимодействия имеет вид

$$\langle H_3 \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \left\{ C^*(\mathbf{q}) \frac{w N_0}{2V} U^*(\mathbf{q}) \tilde{D}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \right.$$

$$\left. + C(\mathbf{q}) \frac{w N_0}{2V} U(\mathbf{q}) \tilde{D}^*(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right\}.$$

Здесь введено обозначение

$$\tilde{D}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \nu_a(\mathbf{p}) \nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}) D(\mathbf{p}, \mathbf{q}).$$

Отметим, что при суммировании по ν использована обычная процедура усреднения по расположению частиц примеси.

Вводя множитель Лагранжа $-E(\mathbf{q})$ (эта величина без минуса есть соответствующая энергия), получим условия минимума

$$-E(\mathbf{q})C(\mathbf{q}) + \frac{wN_0}{2V} \sum_{\mathbf{p}} U^*(\mathbf{q})\tilde{D}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 0,$$

$$\left\{ -E(\mathbf{q})wN_0 + \xi(\mathbf{p}) + |\xi(-\mathbf{p} - \mathbf{q})| \right\} \times \\ \times D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \frac{wN_0}{2V} U(\mathbf{q})C(\mathbf{q}) = 0.$$

Наконец, учитывая второй результат в первом, получим для макроскопически большого числа примесей ($N_0 \rightarrow \infty$) следующее выражение:

$$E^2(\mathbf{q}) \approx |U(\mathbf{q})|^2 \frac{wN_0}{(2V)^2} \sum_{\mathbf{p}} \nu_a(\mathbf{p})\nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}). \quad (9)$$

Это согласуется с прежним результатом (5). Отрицательное значение $E(\mathbf{q})$ соответствует основному состоянию, а положительное — возбужденному. Отметим, что эта энергия зависит от \mathbf{q} , например, для малых значений $|\mathbf{q}|$ она мала.

Из приведенных выше выражений имеем

$$D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \approx \frac{1}{2V} \frac{U(\mathbf{q})}{E(\mathbf{q})} C(\mathbf{q}). \quad (10)$$

В результате условие нормировки (8) запишется в виде

$$|C(\mathbf{q})|^2 \left\{ 1 + \frac{N_0 w}{(2V)^2} \frac{|U(\mathbf{q})|^2}{|E(\mathbf{q})|^2} \times \right. \\ \left. \times \sum_{\mathbf{p}} \nu_a(\mathbf{p})\nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}) \right\} \approx 1; \quad |C(\mathbf{q})|^2 \approx \frac{1}{2} \quad (11)$$

(использовано соотношение (9)).

В конце этого раздела убедимся, что величины $\nu_a(\mathbf{p}) \approx 1$ ($|\mathbf{p}| > p_F$), $\nu_b(-\mathbf{p} - \mathbf{q}) \approx 1$ ($|\mathbf{p} + \mathbf{q}| < p_F$), поэтому эти величины в суммах (9) и (11) (и предыдущих формулах) просто обозначают область суммирования.

2.2. Оценка количества комплексов

Далее (для получения энергии системы) нужно просуммировать по \mathbf{q} . Сначала найдем количество разных значений \mathbf{q} . Действуем следующим образом. Находим число занятых центров в зависимости от \mathbf{q} и ищем минимум энергии — это определит область суммирования по \mathbf{q} . Число занятых центров:

$$(1-w)N_0 = \sum_{\nu, \mathbf{q}} \langle B_{\nu}^{\dagger} B_{\nu} \rangle_{\mathbf{q}}.$$

Для одного состояния (с заданным значением \mathbf{q}) имеем

$$\langle B_{\nu}^{\dagger} B_{\nu} \rangle_{\mathbf{q}} = w \sum_{\mathbf{p}} |D(\mathbf{p}, \mathbf{q})|^2 = \frac{1 - |C(\mathbf{q})|^2}{N_0} \approx \frac{1}{2N_0}.$$

В результате имеем

$$(1-w)N_0 = \frac{N_1}{2},$$

где N_1 — искомая величина (число различных состояний \mathbf{q}).

Теперь надо определить, какие значения \mathbf{q} дают минимум энергии. Это зависит от радиуса взаимодействия. Пусть мы имеем короткодействующие примеси. Тогда можно заменить $U(\mathbf{q}) \rightarrow U(0)$.

При вычислении суммы по \mathbf{p} в выражении (9) лучше перейти к новым переменным: $\mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p}$. Выберем для области определения \mathbf{q} шаровой слой вблизи значения q_0 (число состояний равно N_1). Максимальное значение суммы в выражении (9) достигается при $q_0 \geq 2p_F$. (Возьмем значение $q_0 = 2p_F$, при этом выигрыш энергии достигается за счет взаимодействия.) Это просто объем сферы Ферми, т.е. $4\pi p_F^3/3 = N_e/(2V)$ (N_e — число электронов). Таким образом, для выражения (9) имеем

$$E^2(\mathbf{q}) \approx |U(0)|^2 \frac{wN_0}{(2V)^2} \frac{N_e}{2}.$$

В результате для энергии системы E получим

$$E = -|U(0)| \sqrt{\frac{wN_0 N_e}{2(2V)^2}} N_1.$$

Учитывая выражение для N_1 имеем

$$E = -|U(0)| \sqrt{\frac{wN_0 N_e}{2V^2}} (1-w)N_0.$$

Минимум достигается при $w = 1/3$.

В результате энергия основного состояния

$$E = -\frac{1}{3} |U(0)| \sqrt{\frac{2N_0^3 N_e}{3V^2}}. \quad (12)$$

Отметим, что в коллективном эффекте принимает участие половина электронов, и если разделить число примесей на две части, с тем чтобы все электроны принимали в нем участие, то выигрыш энергии был бы меньше.

Теперь оценим числа заполнения электронов в основном состоянии $\langle a^{\dagger}(\mathbf{p})a(\mathbf{p}) \rangle$. Используя приведенные выше результаты, см. выражения после формулы (8), а также (10), (11), получим

$$\langle a^{\dagger}(\mathbf{p})a(\mathbf{p}) \rangle = 2(1-w) \frac{N_0}{N_e}.$$

Действительно, эта величина мала по сравнению с $(1 - w)$ (по предположению число примесей мало $N_0 \ll N_e$). То же относится и к дырочным возбуждениям.

2.3. Возбуждения

Для вычисления энергий возбуждений опять действуем по аналогии с теорией сверхпроводимости [2]. Именно, находим энергию системы с одним занятым состоянием, например, для дырки добавка к энергии есть $|\xi(\mathbf{k})|$ плюс изменение энергии из-за занятости состояния. Последнее (для дырки) получится, если провести замену: $N_e/2 \rightarrow N_e/2 - 1$. В результате для дырочного возбуждения имеем

$$\xi_h(\mathbf{k}) = |\xi(\mathbf{k})| + \frac{1}{3} |U(\mathbf{0})| \sqrt{\frac{2N_0^3}{3V^2 N_e}} \quad (|\mathbf{k}| < p_F).$$

Поясним, почему так получается. При вычислении суммы в выражении для энергии (9) надо учитывать все дырочные состояния внутри сферы Ферми, поэтому если одно из них занято, это значение выпадает из суммы. Для электронных состояний этого нет, как это было видно при вычислении суммы (9), поэтому для возбуждений электронного типа изменений энергии нет, так что $\xi_e(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p})$ ($|\mathbf{p}| > p_F$). Таким образом, щель в спектре появляется только для дырочных возбуждений.

Наконец, о спиновом возбуждении. Перевернутый спин выбывает из игры, т. е. в энергии (12) надо заменить $N_0 \rightarrow N_0 - 1$. В результате, увеличение энергии, т. е. энергия спинового возбуждения Ω , есть

$$\Omega = \frac{1}{4} |U(\mathbf{0})| \sqrt{\frac{2N_0 N_e}{3V^2}}.$$

Она того же порядка, что и энергия возбуждения комплекса

$$2|E(\mathbf{q})| = |U(\mathbf{0})| \sqrt{\frac{N_0 N_e}{6V^2}}.$$

Таким образом, число носителей при низких температурах в упорядоченной фазе на четверть меньше, чем в неупорядоченной (выше точки перехода). В качестве функций возбужденных состояний берем функции типа (7), например:

$$\tilde{\Phi} = \prod_{\mathbf{q}} \tilde{\Phi}(\mathbf{q}) b^\dagger(\mathbf{k}) |0 \downarrow\rangle, \quad \tilde{\Phi}(\mathbf{q}) = \left\{ \tilde{C}(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{p}, \nu} \tilde{D}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\nu) a^\dagger(\mathbf{p}) b^\dagger(-\mathbf{p}-\mathbf{q}) B_\nu^\dagger \right\}. \quad (13)$$

Аналогично для других возбуждений. Понятно, что при этом получаются как раз приведенные выше результаты для энергий возбуждений.

2.4. Заключительные замечания

Казалось бы, в такой системе должно образоваться спиновое стекло из-за взаимодействия спинов примесей через электронную систему (так называемое взаимодействие РККИ (РККУ), см., например, книгу [3], гл. 18, формулу (18.125)). Это взаимодействие убывает, осциллируя, пропорционально кубу расстояния между примесями, т. е. пропорционально V/N_0 (N_0 — количество примесей). Таким образом, даже без учета осцилляций взаимодействия и фрустраций, выигрыш энергии спинового стекла при достаточно низких концентрациях примесей заведомо будет содержать множитель N_0^2 в отличие от того выигрыша, который получается здесь, см. результат (12). Не говоря уже о величине взаимодействия, которое в случае спинового стекла будет в квадрате, в то время как в нашем случае в первой степени. Таким образом, можно сделать вывод о том, что для слабого взаимодействия и при достаточно малых концентрациях примесей будет образовываться не спиновое стекло, а упорядоченное состояние, рассмотренное в данной работе.

Благодарю за обсуждение А. В. Чаплика и М. В. Энтина. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00565-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
2. J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
3. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).