16

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

П.Н.Исаев

КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ В ЭКСИТОННОЙ МОДЕЛИ

ПРЕПРИНТ 85-25

НОВОСИБИРСК

КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ В ЭКСИТОННОЙ МОДЕЛИ

П.Н. Исаев

А н н о т а ц и я

В работе рассмотрен регулярный метод построения многочастичных функций распределения в микроканоническом ансамбле, а также метод расчета парных сверток аддитивных операторов при крупнояческом огрублении. В экситонной модели с эквидистантным спектром исследованы квантовые поправки к плотности состояний и скоростям переходов в газокинетическом приближении.

I.ВВЕДЕНИЕ

Экситонная модель предравновесного распада [I-3] интенсивно используется для расчета спектров частиц, вылетающих на различных стадиях процесса релаксации возбужденного ядра (см.напр. обзор [4]). В условиях, когда равновесное число квазичастиц невелико, время свободного пробега превышает время столкновения и справедливо марковское приближение. В этом случае кинетический процесс подчиняется уравнению Паули, и отдельные акты переходов идут с сохранением энергии. Основную же долю времени квазичастицы ведут себя как свободные и описываются гамильтонианом идеальной системы.

Модель содержит также ряд предложений, которые носят конструктивный характер и позволяют выразить окончательный результат через несколько параметров (характерное значение матричного элемента $\mathcal{F}$ остаточного взаимодействия, плотность одночастичных состояний g эффективного эквидистантного спектра). В первых вариантах модели для плотности состояний и многочастичных функций распределения были взяты классические выражения. Однако, для конфигураций с числом частиц p и дырок h, близких к своим равновесным значениям, становятся существенными эффекты вырождения и необходимо учесть принцип Паули. Эффекты первого порядка по степени вырождения в плотности состояний были рассмотрены в работе Вильямса [5]. Попытка учета влияния принципа Паули в многочастичных функциях распределения и, следовательно, в скоростях переходов, была предпринята в работе [6]. Однако, авторы этой работы использовали метод перебора конфигураций частиц и дырок, запрещенных по принципу Паули. Эта процедура не имеет регулярного характера и не гарантирует того, что все конфигурации учтены. Мы увидим также, что использование приближенных формул для плотности состояний накладывает определение требования на точность, с которой необходимо знать многочастичные функции распределения. В работе [6] , однако, использовались для этого классические выражения, что оказывается недостаточным.

В настоящей работе мы рассмотрим регулярный метод построения многочастичных функций распределения в микроканоническом ансамбле. В разделе 2 мы посмотрим их разложения в виде ряда через классические аналоги. Здесь же на основе квазичастичного гамильтониана с учетом свойств симметрии сверток матричных элементов от фермионных операторов (приложение В) даны выражения для эффективных плотностей состояний, доступных в переходах $(p, h) \to (p, h), (p \pm 1, h \pm 1)$. В разделе 3 обсуждаются эффекты квантового вырождения в плотности состояний $\omega_{ph}(E)$. В разделе 4 получены выражения для скоростей переходов с учетом квантовых поправок в первом неисчезающем порядке по степени эффектов вырождения.

2. Многочастичные функции распределения в микроканоническом ансамбле

Рассмотрим идеальную систему p фермионов с гамильтонианом H_0 и оператором числа частиц $\hat{p}$ в представлении вторичного квантования:

$$H_0 = \sum_1 \varepsilon_1 a_1^+ a_1 , \qquad \hat{p} = \sum_1 n_{1p} . \tag{I}$$

Статистический оператор $w(p, E)$ микроканонического ансамбля с энергией E выразим через проекционный оператор $\Pi(p, E)$ и плотность состояний $\omega_p(E)$ по формулам

$$w(p,E) = \frac{1}{\omega_p(E)} \Pi(p,E) , \tag{2}$$

$$\Pi(p,E) = \delta(p,\hat{p})\, \delta(E - H_0) , \tag{3}$$

$$\omega_p(E) = \mathrm{Sp}\, \Pi(p,E) . \tag{4}$$

Одночастичная функция распределения $\langle n_1 \rangle_{pE}$ в микроканоническом ансамбле дается следующим определением

$$\langle n_1 \rangle_{pE} = \frac{1}{\omega_p(E)} \mathrm{Sp} \left\{ \Pi(p,E)\, a_1^+ a_1 \right\} . \tag{5}$$

Используя правила коммутации $a_1 \Pi(p, E) = \Pi(p-1, E-\varepsilon_1)\, a_1$, получаем следующее производящее соотношение

$$\langle n_1 \rangle_{pE} = \frac{\omega_{p-1}(E-\varepsilon_1)}{\omega_p(E)} \left(1 - \langle n_1 \rangle_{p-1, E-\varepsilon_1} \right) . \tag{6}$$

Итерируя это соотношение, находим представление для одночастичной функции распределения в виде суммы точных функций плотности состояний подсистем

$$\langle n_1 \rangle_{pE} = \frac{1}{\omega_p(E)} \sum_{k=1}^{p} (-)^{k+1}\, \omega_{p-k}(E - k\varepsilon_1) \tag{7}$$

где для положительных аргументов $\omega_0(E) = 0$. В частности, для одночастичных энергий в интервале $E/2 < \varepsilon_1 < E$ функция распределения $\langle n_1 \rangle_{pE}$ дается только первым слагаемым суммы (7).

Для макроскопической системы $p \gg I$, $E \gg \varepsilon_1$, имеет место теорема эквивалентности между микроканонической и большим каноническим ансамблем. В классическом пределе (большие температуры) в области характерных одночастичных энергий $\bar{\varepsilon}_1$ числа заполнения малы и определяются первым слагаемым суммы (7)

$$\langle n_1 \rangle_{pE}^{\text{класс}} = \frac{\omega_{p-1}(E-\varepsilon_1)}{\omega_p(E)} = e^{\beta(\mu - \varepsilon_1)} \ll 1 \tag{8}$$

где $\beta = \frac{\partial}{\partial E} \ln \omega_p(E)$, $\mu = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial p} \ln \omega_p(E)$. В вырожденном случае необходимо просуммировать все члены ряда (7), что дает распределение Ферми-Дирака

$$\langle n_1 \rangle_{pE}^{\text{кл}} = e^{\beta(\mu-\varepsilon_1)} - e^{2\beta(\mu-\varepsilon_1)} + \ldots = \left[e^{\beta(\varepsilon_1 - \mu)} + 1 \right]^{-1} \tag{9}$$

в соответствии с теоремой эквивалентности.

Отметим, что для идеальных бозонов производящее соотношение в микроканоническом ансамбле имеет вид, аналогичный (6), с точностью до замены знака перед $\langle n_1 \rangle_{p-1, E-\varepsilon_1}$ в скобках, и в макроскопическом пределе дает распределение Бозе-Эйнштейна в соответствии с теоремой эквивалентности. Аналогичным способом легко найти распределения для других ансамблей. Так, полагая $w_G(\mu, \beta) = Z_\mu^{-1}(\beta) \exp[\beta(\hat{p} - H_0)]$ с учетом правил коммутации получаем производящее соотношение

$$\langle n_1 \rangle_{\mu\beta} = e^{\beta(\mu - \varepsilon_1)} \left(1 \mp \langle n_1 \rangle_{\mu\beta} \right) \tag{I0}$$

откуда вытекают распределения ферми- и бозе-статистик. Для канонического ансамбля $w_B(p, \beta) = Z_p^{-1}(\beta) \exp(-\beta H_0)$ и произвольной статистики имеем

$$\langle n_1 \rangle_{p\beta} = \frac{Z_{p-1}(\beta)}{Z_p(\beta)} e^{-\beta\varepsilon_1} \left(1 \mp \langle n_1 \rangle_{p-1, \beta} \right) \tag{II}$$

откуда для функций распределения получаем представление в виде ряда

$$\langle n_1 \rangle_{p\beta} = \sum_{k=1}^{p} (\mp)^{k+1} \exp\left[\beta \left(f_k(p,\beta) - k\varepsilon_1 \right) \right] \tag{I2}$$

где $f_k(p,\beta)$ определяются через свободную энергию $F_p(\beta)$ соотношением $f_k(p,\beta) = F_p(\beta) - F_{p-k}(\beta) = \frac{1}{\beta}\ln[Z_{p-1}(\beta)/Z_p(\beta)]$.

Определим неприводимую s -частичную функцию распределения в микроканоническом ансамбле в области попарно несовпадающих аргументов следующим выражением

$$\langle n_1 \dots n_s \rangle_{pE} = \frac{1}{\omega_p(E)} Sp\{\Pi(p,E)\, \alpha_1^+ \alpha_1 \dots \alpha_s^+ \alpha_s\} \tag{I3}$$

Она нормирована условием

$$\sum_{1\dots s}{}' \langle n_1 \dots n_s \rangle_{pE} = \frac{p!}{(p-s)!} \tag{I4}$$

где штрих у знака суммы означает, что суммирование ведется по несовпадающим комбинациям индексов. С учетом правил коммутации получаем следующее производящее соотношение ($\sigma_s = \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_s$):

$$\langle n_1 \dots n_s \rangle_{pE} = \frac{\omega_{p-s}(E-\sigma_s)}{\omega_p(E)} \langle (1-n_1)\dots(1-n_s)\rangle_{p'E'}, \quad p' = p-s,\ E' = E-\sigma_s. \tag{I5}$$

которое выражает s -частичную функцию распределения через неприводимые распределения более низкого порядка. Если при данном $p \gg s$ энергия системы велика, так что на одну частицу приходится $E/p \gg \varepsilon_F$, квантовые поправки в (I5) можно учесть по теории возмущений. Итерируя соотношение (I5) находим

$$\langle n_1 \dots n_s \rangle_{pE} = \frac{\omega_{p-s}(E-\sigma_s)}{\omega_p(E)} - \sum_{k=1}^{s} \frac{\omega_{p-s-1}(E-\sigma_s-\varepsilon_k)}{\omega_p(E)} \tag{I6}$$

Не составляет труда обобщить полученные выражения на случай смеси двух газов p- и h -частиц. Приведем окончательные формулы для распределений, нормировки, производящего соотношения и разложения для этого случая:

$$\langle n_{1p} \dots n_{sp} n_{1'h} \dots n_{t'h} \rangle_{phE} = \frac{1}{\omega_{ph}(E)} Sp\{\Pi(phE)\, \alpha_1^+ \alpha_1 \dots \alpha_s^+ \alpha_s\, \beta_{1'}^+ \beta_{1'} \dots \beta_{t'}^+ \beta_{t'}\} \tag{I7}$$

$$\sum_{1\dots t'}{}' \langle n_{1p} \dots n_{t'h} \rangle_{phE} = \frac{p!\,h!}{(p-s)!\,(h-t)!} \tag{I8}$$

$$\langle n_{1p} \dots n_{t'h} \rangle_{phE} = \frac{\omega_{p-s,h-t}(E-\sigma_{st})}{\omega_{ph}(E)} \langle (1-n_{1p})\dots(1-n_{t'h})\rangle_{p-s,h-t,E-\sigma_{st}} \tag{I9}$$

$$\langle n_{1p} \dots n_{t'h} \rangle_{phE} = \frac{\omega_{p-s,h-t}(E-\sigma_{st})}{\omega_{ph}(E)} - \sum_{k=1}^{s} \frac{\omega_{p-s-1,h-t}(E-\sigma_{st}-\varepsilon_k)}{\omega_{ph}(E)} - \sum_{k=1'}^{t'} \frac{\omega_{p-s,h-t-1}(E-\sigma_{st}-\varepsilon_k)}{\omega_{ph}(E)} \tag{20}$$

где обозначено $\sigma_{st} = \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_s + \varepsilon_{1'} + \dots + \varepsilon_{t'}$.

Отметим, что использование точных функций плотности состояний $\omega_{ph}(E)$ дает представление для многочастичных функций распределения в виде ряда по степени вырождения системы. Поэтому при использовании аналогичного разложения для $\omega_{ph}(E)$ в сумме (20) необходимо учитывать члены одного порядка, возникающие в различных слагаемых этой суммы.

В заключение раздела приведем выражения для скоростей переходов в экситонной модели. Взаимодействие между квазичастицами (в частично-дырочном представлении гамильтониан выписан в Приложении А) генерирует переходы как по одну сторону от поверхности Ферми (процессы $(p,h) \to (p,h)$ так и через поверхность (процессы $(p,h) \to (p\pm 1, h\pm 1)$). В газокинетическом приближении скорость переходов определяется сверткой (см. Приложение В)

$$\lambda^{(k)}(phE) = 2\pi \sum_f \langle |V_{fi}^{(k)}|^2 \rangle_{phE}\, \delta(E-E_f) = 2\pi \langle |V_{fi}^{(k)}|^2 \rangle_{p+k,h+k,E;phE}\, \omega_{p+k,h+k}(E) \tag{21}$$

где индекс k нумерует типы процессов, $V^{(k)}$ – соответствующие компоненты остаточного взаимодействия. Для переходов $(p,h) \to (p\pm k, h\pm k)$ на массовой поверхности k принимает значения 0,$\pm$I и соответствующие слагаемые взаимодействия $V^{(k)}$ даются выражениями (А3) и(А4). В Приложении В дан регулярный метод расчета такого рода сверток и с учетом (В8) - (ВI0) получаем ($\delta(12,\bar{3}\bar{4}) = \delta(\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)$)

$$\lambda^{(0)}(phE) = 2\pi \sum_{1234}{}' |\mathcal{F}(12,34)|^2\, \delta(12,\bar{3}\bar{4}) \{ \langle (1-n_{1p})(1-n_{2h}) n_{3h} n_{4p} \rangle_{phE} + \frac{1}{4} \langle (1-n_{1p})(1-n_{2p}) n_{3p} n_{4p} \rangle_{phE} + \frac{1}{4} \langle (1-n_{1h})(1-n_{2h}) n_{3h} n_{4h} \rangle_{phE} \}, \tag{22}$$

$$\lambda^{(+)}(phE) = 2\pi \sum_{1234}{}' |\tilde{\mathcal{F}}(12,34)|^2 \frac{1}{2} \{ \delta(124,\bar{3}) \langle (1-n_{1p})(1-n_{2p}) n_{3p} (1-n_{4h}) \rangle_{phE} + \delta(134,\bar{2}) \langle (1-n_{1p}) n_{2h} (1-n_{3h})(1-n_{4h}) \rangle_{phE} \}, \tag{23}$$

$$\lambda^{(-)}(phE) = 2\pi \sum_{1234}{}' |\tilde{\mathcal{F}}(12,34)|^2 \frac{1}{2} \{ \delta(134,\bar{2}) \langle n_{1h} (1-n_{2p}) n_{3p} n_{4p} \rangle_{phE} + \delta(124,\bar{3}) \langle n_{1h} n_{2h} (1-n_{3h}) n_{4p} \rangle_{phE} \}. \tag{24}$$

Обычно предполагается, что матричный элемент $|\tilde{\mathcal{F}}(12,34)|^2$ слабо зависит от одночастичных индексов и в качестве феноменологической константы $\mathcal{F}^2$ выносится из-под знака суммы. В результате скорость переходов $\lambda^{(k)}(phE)$ выражается через эффективную плотность конечных состояний $\omega_f^{(k)}(phE)$, доступных в k-ом процессе, по формуле

$$\lambda^{(k)}(phE) = 2\pi\, \mathcal{F}^2\, \omega_f^{(k)}(phE) \tag{25}$$

откуда для $\omega_f^{(k)}(phE)$ находим следующие точные определения

$$\omega_+^{(0)}(phE) = \frac{1}{4}\sum_{1234}{}' \delta(12,\bar{3}\bar{4}) \Big\{ \langle (1-n_{1p})(1-n_{2p}) n_{3p} n_{4p} \rangle_{phE} + \langle (1-n_{1h})(1-n_{2h}) n_{3h} n_{4h} \rangle_{phE} + 4 \langle (1-n_{1p})(1-n_{2h}) n_{3h} n_{4p} \rangle_{phE} \Big\} \tag{26}$$

$$\omega_+^{(+)}(phE) = \frac{1}{2}\sum_{1234}{}' \delta(123,\bar{4}) \Big\{ \langle (1-n_{1p})(1-n_{2p})(1-n_{3h}) n_{4p} \rangle_{phE} + \langle (1-n_{1p})(1-n_{2h})(1-n_{3h}) n_{4h} \rangle_{phE} \Big\} \tag{27}$$

$$\omega_+^{(-)}(phE) = \frac{1}{2}\sum_{1234}{}' \delta(123,\bar{4}) \Big\{ \langle n_{1h} n_{2p} n_{3p} (1-n_{4p}) \rangle_{phE} + \langle n_{1h} n_{2h} n_{3p} (1-n_{4h}) \rangle_{phE} \Big\} \tag{28}$$

Здесь мы учли симметрию по одночастичным индексам. Численные множители в этих выражениях имеют комбинаторное происхождение. Суммирование по одночастичным индексам ведется по всей области их изменения за исключением попарно совпадающих комбинаций. Поэтому для всех распределений $\langle \ldots \rangle_{phE}$, входящих в (26) - (28), необходимо пользоваться выражениями (20), что после перехода от суммирования к интегрированию позволяет снять ограничения на область изменения аргументов.

3. Квантовые поправки в плотности уровней

Как отмечалось в предыдущем разделе, для учета квантовых поправок одного порядка необходимо знать функцию плотности состояний с соответствующей степенью точности. С этой целью мы подробнее исследуем модель с эквидистантным одночастичным спектром с плотностью состояний g = I.

Поскольку переход к частично-дырочному представлению содержит произвол в выборе начала отсчета энергетических уровней, проведем химпотенциал между последним занятым уровнем и первым пустым в конфигурации, отвечающей основному состоянию идеальной системы. В этом случае спектры частиц и дырок идентичны и имеют осцилляторный вид $\varepsilon_k^{(p)} = \varepsilon_k^{(h)} = \varepsilon_k = k + 1/2$, k = 0,I,.., что позволяет сохранить явную симметрию по p и h во всех последующих выражениях. Такое определение отлично от обычного, где спектр частиц начинается с k = I, а дырок - с k = 0.

Для простоты ограничимся конфигурациями с h = 0. Прямой подсчет степени вырождения данного уровня энергии E дает

$$\omega_p(m) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_0} \frac{dz}{z^{m+1}} \prod_{k=1}^{p} \frac{1}{1-z^k}, \qquad m = E - \frac{p^2}{2} \tag{29}$$

где m - энергия возбуждения, которая отсчитывается от энергии

основного состояния и принимает целочисленные значения (m = = 0, 1, 2, ...); контур C_0 представляет собой окружность $|z|$ = = ρ < I. Соотношение (29) позволяет построить разностное уравнение для функции $\omega_p(m)$ в виде

$$\omega_p(m) = \sum_{s=0}^{[m/p]} \omega_{p-1}(m - sp), \qquad \omega_1(m) = \begin{cases} 1, & m \geq 0 \\ 0, & m < 0 \end{cases} \tag{30}$$

На основе этого уравнения можно построить несколько первых решений или составить несложную программу численного расчета на компьютере. Из (30) следует, что при $m \leq p$ функция $\omega_p(m)$ не зависит от p и определяется универсальной функцией $\mathring{\omega}(m)$:

$$\omega_{m+k}(m) = \omega_m(m) = \mathring{\omega}(m), \qquad k = 1, 2, \ldots \tag{3I}$$

После замены переменной интегрирования $z = e^{-\beta}$ получаем следующее интегральное представление для функции $\omega_p(\xi)$ от непрерывной переменной ξ

$$\omega_p(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\beta\, e^{\beta\xi} Z_p(\beta), \qquad Z_p(\beta) = \prod_{k=1}^{p} \frac{1}{1 - e^{-\beta k}} \tag{32}$$

где контур C охватывает полуотрезок мнимой оси $0 \leq \mathrm{Im}\,\beta < 2\pi$ В целочисленных точках $\xi = m$ функции (32) и (29) совпадают.

Интегральное представление (32) несингулярно и определяется конечной суммой вычетов в полюсах функции $Z_p(\beta)$ на указанном полуотрезке. Это обстоятельство отличает выражение (32) от сингулярного интегрального представления, использованного в работе [5], и позволяет построить регулярное разложение для функции $\omega_p(\xi)$ в ряд по степеням ξ.

С этой целью исследуем аналитические свойства функции $Z_p(\beta)$ внутри контура C. Полюса функции $Z_p(\beta)$ расположены в точках $\beta = 0$ и $\beta = 2\pi i n/m$, где $2 \leq m < p$, $1 \leq n < m$ - пара целых взаимнопростых чисел. Полюс в точке $\beta = 0$ имеет максимальный порядок p, остальные полюса имеют порядки, не превышающие $[p/2]$. Так, в точке $\beta = i\pi$ порядок полюса равен $[p/2]$, в точках $\beta = i\pi/3$ и $\beta = i2\pi/3$ - порядок $[p/3]$ и т.д. В общем случае пара полюсов в точках $\beta = 2\pi i n/m$ и $\beta = 2\pi i(m-n)/m$, расположенных симметрично относительно точки $i\pi$, имеют порядок $[p/m]$. В частности, имеются два полюса первого порядка в точках $\beta = 2\pi i/p$ и $\beta = 2\pi i(p-1)/p$.

Вычет в полюсах $\mathrm{Im}\,\beta \neq 0$ порядка s можно представить в виде полинома степени s -I с коэффициентами, осциллирующими при изменении энергии. Поскольку s не превышает величину $[p/2]$ для функции $\omega_p(\xi)$ справедливо следующее полиномиальное представление

$$\omega_p(\xi) = \sum_{k=0}^{p-1} c_k(\xi)\, \xi^{p-1-k} \qquad (33)$$

где первые $p-[p/2]$ коэффициентов $c_k(\xi)$ не зависят от энергии ξ и определяются исключительно вычетом в полюсе $\beta = 0$. Остальные коэффициенты наряду с постоянными компонентами содержат также осциллирующие слагаемые.

Таким образом, ограничиваясь вычетом в точке $\beta = 0$ мы с гарантией получаем $p-[p/2]$ членов разложения $\omega_p(\ )$ по степеням ξ, что позволяет с контролируемой степенью точности учесть эффекты квантового вырождения. Для ускорения сходимости указанные члены разложения можно перегруппировать, для чего воспользуемся тем же приемом, что и авторы работы [5]. Выделив в (34) нерегулярные в точке $\beta = 0$ сомножители, получаем

$$\omega_p(\xi) = \frac{1}{2\pi i}\int_C d\beta\, \frac{e^{\beta u}}{\beta^p p!} \prod_{k=1}^{p} \frac{\beta k/2}{sh(\beta k/2)}, \quad u = \xi + \frac{1}{4}p(p+1) \qquad (34)$$

Учитывая, что

$$\prod_{k=1}^{p} \frac{\beta k/2}{sh(\beta k/2)} = 1 + f_p^{(1)}\beta^2 + f_p^{(2)}\beta^4 + \ldots \qquad (35)$$

где

$$f_p^{(1)} = -\frac{p(p+1)(2p+1)}{6\cdot 24} \qquad (36)$$

$$f_p^{(2)} = \frac{p(p+1)(2p+1)}{16\cdot 180\cdot 360}\left[p(p+1)(50p+61) - 12\right] \qquad (37)$$

находим

$$\omega_p(\xi) = \frac{u^{p-1}}{p!(p-1)!}\left\{1 + f_p^{(1)}\frac{(p-1)(p-2)}{u^2} + f_p^{(2)}\frac{(p-1)(p-2)(p-3)(p-4)}{u^4} + \ldots\right\} \qquad (38)$$

Таким образом, указанный прием позволяет построить разложение $\omega_p(\xi)$ по степеням и одинаковой четкости. Нетрудно видеть, что формула (38) представляет собой разложение по степеням квантового параметра ε_F/T. Действительно, в силу эквидистантности одночастичного спектра энергия Ферми системы p идеальных частиц равна $\varepsilon_F = p$, а температура определяется по классической формуле $T = E/p$. Поэтому квантовые эффекты опре-

деляются параметром $\varepsilon_F/T = p^2/E$, который с точностью до перегруппировки членов явно входит в разложение (38). Лишний множитель p в поправках обусловлен аддитивным характером энтропии системы.

В работе [5] получено выражение для $\omega_p^W(\xi)$ без учета квантовых поправок. В формуле (38) - это первый сомножитель, стоящий перед фигурной скобкой. Интересно проверить, насколько учет квантовых поправок улучшает формулу Вильямса $\omega_p^W(\xi)$. С этой целью мы выполнили компьютерный расчет $\omega_p(\xi)$ по соотношению (30) при $p = 10$ (кривая 1 на рисунке). Это значение p выбрано для того, чтобы в вырожденной области энергий $\xi < 50$ подробно исследовать эффекты от квантовых поправок. Из рисунка видно, что учет квантовых поправок позволяет заметно продвинуться в вырожденную область (кривая 3). Даже при $\xi = p$ ошибка формулы (38) составляет всего лишь 36 %, тогда как формула Вильямса (кривая 2) дает вдвое завышенное значение. С ростом энергии точность нашей формулы начинает быстро улучшаться и уже в области $\xi \geq 20$ выражение (38) воспроизводит ход точной кривой почти на порядок лучше, чем по формуле Вильямса.

Не составляет труда обобщить формулу (38) на случай произвольного числа частиц p и дырок h. Поскольку учет дырочных состояний в подынтегральном выражении в (34) проводится мультипликативным образом, непосредственно находим $(n = p + h)$

$$\omega_{ph}(\xi) = \frac{w^{n-1}}{p!\,h!\,(n-1)!}\left\{1 + (f_p^{(1)} + f_h^{(1)})\frac{(n-1)(n-2)}{w^2} + (f_p^{(2)} + f_h^{(2)} + f_p^{(1)} f_h^{(1)})\frac{(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}{w^4} + \ldots\right\} \qquad (39)$$

Коэффициенты $f_h^{(k)}$ находятся из (36) и (37) заменой $p \to h$, аргумент w дается выражением $w = E - A_{ph}$, $A_{ph} = [p(p-1) + h(h-1)]/4$. Благодаря переопределению одночастичного спектра мы устранили нефизическую асимметрию по аргументам p и h, имевшую место в формуле Вильямса.

4. Эффективная плотность конечных состояний

Теперь мы готовы к тому, чтобы регулярным образом вычислить квантовые поправки в эффективной плотности конечных состояний $\omega_+^{(\mu)}(phE)$. Полиномиальное представление (33) с учетом только полюса при $\beta = 0$ в принципе позволяет учесть квантовые поправки по степени вырождения вплоть до $n-[p/2]-[h/2]$ порядка. Мы ограничимся первым порядком разложения и на примере $\omega_+^{(-)}(phE)$ подробно рассмотрим происхождение этих поправок.

Для первого слагаемого в (28) с учетом (20) получаем

$$\overset{1}{\omega}{}_+^{(-)}(phE) = \frac{1}{2\omega_{ph}(E)} \sum_{1234}{}' \delta(123,\bar{4}) \Big\{ \omega_{p-2,h-1}(E-\varepsilon_1-\varepsilon_2-\varepsilon_3) - \omega_{p-2,h-2}(E-2\varepsilon_1-\varepsilon_2-\varepsilon_3) -$$

$$-2\omega_{p-3,h-1}(E-\varepsilon_1-2\varepsilon_2-\varepsilon_3) - \omega_{p-3,h-1}(E-\varepsilon_1-\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4) \Big\} ; \qquad (40)$$

где учтена симметрия по индексам 2 и 3. После перехода от суммирования к интегрированию и снятия δ -функций находим

$$\overset{1}{\omega}{}_+^{(-)}(phE) = \frac{1}{4\omega_{ph}(E)} \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon^2 \Big\{ \omega_{p-2,h-1}(E-\varepsilon) - \frac{1}{2}\omega_{p-2,h-2}(E-\varepsilon) - \frac{9}{8}\omega_{p-3,h-1}(E-\varepsilon) \Big\} \qquad (41)$$

Удобно выразить интеграл (37) через лапласовские образы $L(\varepsilon^2) = 2/\beta^3$, $L(\omega_{ph}(E)) = Z_{ph}(\beta)$. Имея в виду только вычет в полюсе $\beta = 0$, получаем

$$\overset{1}{\omega}{}_+^{(-)}(phE) = \frac{1}{2\omega_{ph}(E)} \oint_{C_0} \frac{d\beta}{2\pi i} \frac{e^{\beta E}}{\beta^3} \Big\{ Z_{p-2,h-1}(\beta) - \frac{1}{2} Z_{p-2,h-2}(\beta) - \frac{9}{8} Z_{p-3,h-1}(\beta) \Big\} . \qquad (42)$$

Здесь подынтегральное выражение обладает свойствами, которые подробно исследованы в предыдущем разделе.

Прежде всего замечаем, что в силу характера разложения (35) необходимая степень точности достигается учетом первого члена этого разложения для всех трех слагаемых в (42). Кроме того, без потери точности можно пренебречь сдвигом аргументов A_{ph} во втором и третьем слагаемом, полагая $A_{p-2,h-2} \approx \approx A_{p-3,h-1} \approx A_{ph}$. В первом слагаемом в (42) таким сдвигом пренебрегать нельзя: разложение $A_{p-2,h-1} = A_{ph} - \frac{1}{2}(2p+h-4)$ порождает поправку, которая в первом порядке должна быть учтена со вторым и третьим слагаемыми в (42). В результате получаем

$$\overset{1}{\omega}{}_+^{(-)}(phE) = \frac{p(p-1)h}{2} \left[1 - \frac{(n-1)(p-6)}{8(E-A_{ph})} \right] . \qquad (43)$$

Для расчета второго слагаемого в (28) нет необходимости повторять вычисления: в силу явной симметрии по переменным p и h результат непосредственно находится из (43) заменой $p \leftrightarrow h$. Окончательное выражение для $\omega_+^{(-)}(phE)$ принимает следующий вид

$$\omega_+^{(-)}(phE) = \frac{ph(n-2)}{2} \left[1 - \frac{n-1}{n-2} \frac{p^2+h^2-7n+12}{8(E-A_{ph})} \right] . \qquad (44)$$

Аналогичным образом находятся квантовые поправки в эффективных плотностях конечных состояний $\omega_+^{(+)}(phE)$ и $\omega_+^{(0)}(phE)$ Без вычислений приведем окончательный результат:

$$\omega_+^{(+)}(phE) = \frac{(E-A_{ph})^2}{2(n+1)} \left[1 - \frac{n+1}{n} \frac{5p(p-1)+5h(h-1)+8ph}{8(E-A_{ph})} \right] \qquad (45)$$

$$\omega_+^{(0)}(phE) = \frac{E-A_{ph}}{2n} \left[p(p-1)\left(1 - \frac{n(p-3)}{2(E-A_{ph})}\right) + h(h-1)\left(1 - \frac{n(h-3)}{2(E-A_{ph})}\right) + \right.$$

$$\left. + 4ph\left(1 - \frac{n(n-2)}{4(E-A_{ph})}\right) \right] . \qquad (46)$$

В классическом переделе формулы (44) - (46) совпадают с результатами работы [5] , однако, квантовые поправки отличаются от соответствующих выражений из работы [6] . Полученные выражения, включая определение $A_{ph} = (p^2+h^2-n)/4$, явно симметричны по p и h . Следующая поправка будет пропорциональна $n^4/(E-A_{ph})^2$. Разложение (39) позволяет построить поправки вплоть до членов, пропорциональных $[n^2/(E-A_{ph})]^4$.

5. Заключение

Мы рассмотрели регулярный способ построения многочастичных функций распределения в микроканоническом ансамбле. Подробно исследованы квантовые поправки к формуле Вильямса для плотности состояний и скоростей переходов в экситонной модели. Обнаружено, что источником квантовых поправок служит как представление функций распределения в микроканоническом ансамбле через плотность состояний $\omega_{ph}(E)$, так и эффекты квантового вырождения в $\omega_{ph}(E)$. Это обстоятельство не было учтено авторами работы [6] .

Отметим, что переопределение спектров частиц и дырок востановило физическую симметрию описания, которая отсутствует в традиционном определении экситонной модели. Полученные выражения для плотности эффективных состояний явно симметричны по p и h.

Методом микроканонического ансамбля получены выражения для парных сверток аддитивных операторов, необходимые для реализации процедуры крупноячеечного огрубления с произвольным набором макропеременных.

Автор глубоко признателен В.Г.Зелевинскому за плодотворные дискуссии и полезные замечания, высказанные в ходе обсуждений.

Приложение А

Пусть H – квазичастичный гамильтониан с двухчастичным эффективным взаимодействием $\mathcal{F}$ выражений через операторы рождения и уничтожения квазичастиц a_1, a_1^+ в одночастичных состояниях $|1\rangle$.

$$H=\sum_{12}\varepsilon_{12}a_1^+a_2+\frac{1}{2}\sum_{1234}\mathcal{F}(12,34)a_1^+a_2^+a_3a_4 \qquad (\text{AI})$$

Выберем в качестве $|1\rangle$ набор состояний, решающих задачу Хартри-Фока, и в этом представлении перейдем к частично-дырочному описанию, полагая $a_1=\alpha_1$ для свободных и $a_1=\beta_1^+$ – для занятых состояний. Кроме того, в произведениях фермионных операторов выделим все комбинации, в которых появляются операторы чисел заполнения $n_{1p}=\alpha_1^+\alpha_1$, $n_{1h}=\beta_1^+\beta_1$. В результате для гамильтониана $\mathcal{H}=H-\mu N$, $N=\sum_1 a_1^+a_1$ получим

$$\mathcal{H}=H_{ph}^{(0)}+\sum_{123}{}'\tilde{\mathcal{F}}(13;32)(n_{3p}-n_{3h})(\alpha_1^+\alpha_2-\beta_2^+\beta_1)+ \qquad (\text{A2})$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{1234}{}'\tilde{\mathcal{F}}(12,34)(\alpha_1^+\alpha_2^+\alpha_3\alpha_4+\beta_4^+\beta_3^+\beta_2\beta_1)-\sum_{1234}{}'\tilde{\mathcal{F}}(12;34)\alpha_1^+\alpha_4\beta_3^+\beta_2 \qquad (\text{A3})$$

$$+\sum_{123}{}'\tilde{\mathcal{F}}(13,32)(n_{3p}-n_{3h})(\alpha_1^+\beta_2^++\beta_1\alpha_2)+\frac{1}{2}\sum_{1234}{}'\tilde{\mathcal{F}}(12;34)(\alpha_2^+\alpha_3-\beta_3^+\beta_2)(\alpha_1^+\beta_4^++\beta_1\alpha_4) \qquad (\text{A4})$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{1234}{}'\tilde{\mathcal{F}}(12;34)(\alpha_1^+\alpha_2^+\beta_3^+\beta_4^++\beta_1\beta_2\alpha_3\alpha_4) \qquad (\text{A5})$$

где $\tilde{\mathcal{F}}(12,34)$ – антисимметризованный матричный элемент. Здесь $H_{ph}^{(0)}$ – оператор, диагональный в (p,h) представлении. Второе слагаемое в (А2) описывает рассеяние квазицастиц на флуктуациях среднего поля, но в силу специфики эквидистантной модели этот оператор не дает переходов на массовой поверхности.

Тоже самое относится и к первому слагаемому в (А4). Операторы (А3) описывают столкновения квазицастиц без изменения числа частиц p и дырок h. Операторы (А4) и (А5) имеют правила отбора $\Delta p=\Delta h=\pm 1$, ± 2 соответственно, однако в последнем случае переходы на массовой поверхности отсутствуют.

В газокинетическом приближении поляризационными эффектами можно пренебречь (основную долю времени система эволюционирует как свободная) и представить $H_{ph}^{(0)}$ гамильтонианом смеси идеальных газов p- и h – частиц

$$H_{ph}^{(0)}=\sum_1\varepsilon_1(n_{1p}+n_{1h}) \qquad (\text{A6})$$

Мы не делаем различия в обозначениях одночастичных состояний $|1\rangle$, относящихся к частицам и дыркам: эту функцию выполняют обозначения фермионных операторов частиц α и дырок β, а также индексы в операторах чисел заполнения n_{1p}, n_{1h}.

Приложение В

Скорость переходов определяется матричным элементом $|V_{ij}|^2$, усредненным и просуммированным по определенным совокупностям состояний $\{\Phi_i\}_{phE}$ и $\{\Phi_j\}_{phE}$ с фиксированным набором макропеременных p, h и энергией Е. Аналогичного типа средние возникают при крупноячеечном огрублении квантовостатистического описания (см.напр. [7]), поэтому представляется полезным развить процедуру расчета такого рода сверток для произвольных одночастичных $F^{(1)}=\sum_{12}{}'F_{12}a_1^+a_2$ и двухчастичных $F^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{1234}{}'F_{12,34}a_1^+a_2^+a_3a_4$ операторов, и некоторого набора макропеременных В. В качестве макропеременных В могут быть выбраны любые величины, являющиеся интегралами движения по отношению к гамильтониану $H_0=\sum_1\varepsilon_1a_1^+a_1$ (например, число частиц p и дырок h, проекция момента М и т.п.), либо специально приспособленные операторы $\bar{B}=\sum_1 b_{11}a_1^+a_1$, характеризующие среднее значение величины В по стационарным состояниям Φ_i.

Парной сверткой оператора F мы называем величину

$$\langle|F_{ij}|^2\rangle_{BE,B'E'}=\sum_{ij}\frac{\delta(E-E_i)\delta(B,B_i)}{\omega_B(E)}F_{ij}\frac{\delta(E'-E_j)\delta(B',B_j)}{\omega_{B'}(E')}(F^+)_{ji} \qquad (\text{BI})$$

усредненную по совокупностям состояний $\{\Phi_i\}_{BE}$ и $\{\Phi_j\}_{B'E'}$. Вычисление сверток одно- и двухчастичных операторов проводится с помощью следующих конструкций

$$I^{(1)}_{BE,B'E'}(12|1'2') = \frac{1}{\omega_B(E)\omega_{B'}(E')} \operatorname{Sp}\{\Pi(BE)a_1^+a_2\,\Pi(B'E')a_{2'}^+a_{1'}\} \quad (B2)$$

$$I^{(2)}_{BE,B'E'}(1234|1'2'3'4') = \frac{1}{\omega_B(E)\omega_{B'}(E')} \operatorname{Sp}\{\Pi(BE)a_1^+a_2^+a_3a_4\,\Pi(B'E')a_{4'}^+a_{3'}^+a_{2'}a_{1'}\} \quad (B3)$$

С учетом правил коммутации и свойств проекционного операторов

$$\Pi(BE)a_1^+a_2 = a_1^+a_2\,\Pi(B-b_{12}, E-\omega_{12}), \quad b_{12} = b_1 - b_2, \quad \omega_{12} = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \quad (B4)$$

$$\Pi(BE)\,\Pi(B'E') = \delta(E-E')\,\delta(B,B')\,\Pi(BE) \quad (B5)$$

получаем по два эквивалентных представления для $I^{(1)}$ и $I^{(2)}$ через многочастичные функции распределения (9) в микроканоническом ансамбле

$$I^{(1)}_{BE,B'E'} = \delta(E-E'-\omega_{12})\,\delta(B-B', b_{12})\,\frac{\delta_{11'}\delta_{22'}}{\omega_{B'}(E')}\langle n_1(1-n_2)\rangle_{BE} = \delta(E-E'-\omega_{12})\,\delta(B-B', b_{12})\,\frac{\delta_{11'}\delta_{22'}}{\omega_B(E)}\langle (1-n_1)n_2\rangle_{B'E'} \quad (B6)$$

$$I^{(2)}_{BE,B'E'} = \delta(E-E'-\omega_{14}-\omega_{23})\,\delta(B-B', b_{14}+b_{23})(\delta_{11'}\delta_{22'} - \delta_{12'}\delta_{21'})(\delta_{33'}\delta_{44'} - \delta_{34'}\delta_{43'}) \times \langle n_1n_2(1-n_3)(1-n_4)\rangle_{BE}/\omega_{B'}(E') = \delta(E-E'-\omega_{14}-\omega_{23})\,\delta(B-B', b_{14}+b_{23}) \times (\delta_{11'}\delta_{22'} - \delta_{12'}\delta_{21'})(\delta_{33'}\delta_{44'} - \delta_{34'}\delta_{43'})\langle (1-n_1)(1-n_2)n_3n_4\rangle_{B'E'}/\omega_B(E) \quad (B7)$$

Сворачивая $I^{(1)}$ и $I^{(2)}$ с одночастичными и двухчастичными матричными элементами соответствующих операторов F, окончательно получаем ($\omega = E-E'$, $\Delta B = B-B'$)

$$\langle |F^{(1)}_{ij}|^2\rangle_{BE,B'E'} = {\sum_{12}}'\frac{\delta(\omega-\omega_{12})\,\delta(\Delta B, b_{12})}{\omega_{B'}(E')}|F_{12}|^2\langle n_1(1-n_2)\rangle_{BE} = {\sum_{12}}'\frac{\delta(\omega-\omega_{12})\,\delta(\Delta B, b_{12})}{\omega_B(E)}|F_{12}|^2\langle (1-n_1)n_2\rangle_{B'E'} \quad (B8)$$

$$\langle |F^{(2)}_{ij}|^2\rangle_{BE,B'E'} = \frac{1}{4}{\sum_{1234}}'\frac{\delta(\omega-\omega_{14}-\omega_{23})\,\delta(\Delta B, b_{14}+b_{23})}{\omega_{B'}(E')}|\tilde F_{12,34}|^2\langle n_1n_2(1-n_3)(1-n_4)\rangle_{BE} = \frac{1}{4}\sum_{1234}\frac{\delta(\omega-\omega_{14}-\omega_{23})\,\delta(\Delta B, b_{14}+b_{23})}{\omega_B(E)}|\tilde F_{12,34}|^2\langle (1-n_1)(1-n_2)n_3n_4\rangle_{B'E'}. \quad (B9)$$

Если нас интересует сумма, скажем, по индексу i в совокупности состояний $\{\varphi_i\}_{BE}$ (см.определение скоростей переходов),то в силу (B2) и (B3) находим

$$\sum_{i\in BE}\langle |F_{ij}|^2\rangle_{B'E'} = \langle |F_{ij}|^2\rangle_{BE,B'E'}\ \omega_B(E). \quad (B10)$$

δ -символы, стоящие в (B8) и (B9), выделяют компоненты операторов F с соответствующими правилами отбора. Таким образом, формулы (B8) - (B10) решают поставленную задачу. Приложение для конкретного случая смеси газов p- и h -частиц не составляет труда.

Выражения (B8) и (B9) можно упростить в важном случае вырожденной макроскопической системы $N \gg 1$, воспользовавшись эквивалентностью микроканонического и канонического ансамблей. В приближении, когда характерная энергия каждой частицы $\bar\varepsilon_k$ в распределении $\langle n_1 \dots n_s\rangle$ $(s \ll N)$ мала по сравнению с полной энергией E, корреляционными эффектами можно пренебречь и в результате с учетом (8) получаем

$$\langle n_1 \dots n_s\rangle = \langle n_1\rangle \dots \langle n_s\rangle \quad (B11)$$

где $\langle n_1\rangle = [\exp(\beta(\varepsilon_1 - \mu + \lambda b_1)) + 1]^{-1}$, λ - лагранжевый множитель, фиксирующий среднее по ансамблю значение величины B. Во всех сомножителях (B11) мы пренебрегли изменениями температуры , химпотенциала μ и λ , соответствующими изменению величин E, N и B на характерные значения $\bar\varepsilon_1 + \dots + \bar\varepsilon_s$, s и $\bar b_1 + \dots + \bar b_s$ (эффекты порядка N^{-1}). С этой степенью точности свертки (B8) и (B9) можно представить в стандартной симметричной форме

$$\langle |F^{(k)}_{ij}|^2\rangle_{BE,B'E'} = \frac{w^{(k)}(BE, B'E')}{[\omega_B(E)\,\omega_{B'}(E')]^{1/2}}, \quad (B12)$$

где величины $w^{(k)}(BE, B'E')$ даются выражениями

$$w^{(1)}(BE, B'E') = {\sum_{12}}'\delta(\omega-\omega_{12})\,\delta(\Delta B, b_{12})\,|F_{12}|^2 S_{12}(\beta\mu\lambda) \quad (B13)$$

$$w^{(2)}(BE, B'E') = \frac{1}{4}{\sum_{1234}}'\delta(\omega-\omega_{12}-\omega_{34})\,\delta(\Delta B, b_{12}+b_{14})\,|\tilde F_{12,34}|^2 S_{14}(\beta\mu\lambda)\,S_{23}(\beta\mu\lambda) \quad (B14)$$

Фактор $S_{12}(\beta, \mu, \lambda)$ с учетом входящих в суммы (B13) и (B14) законов сохранения определяются формулой

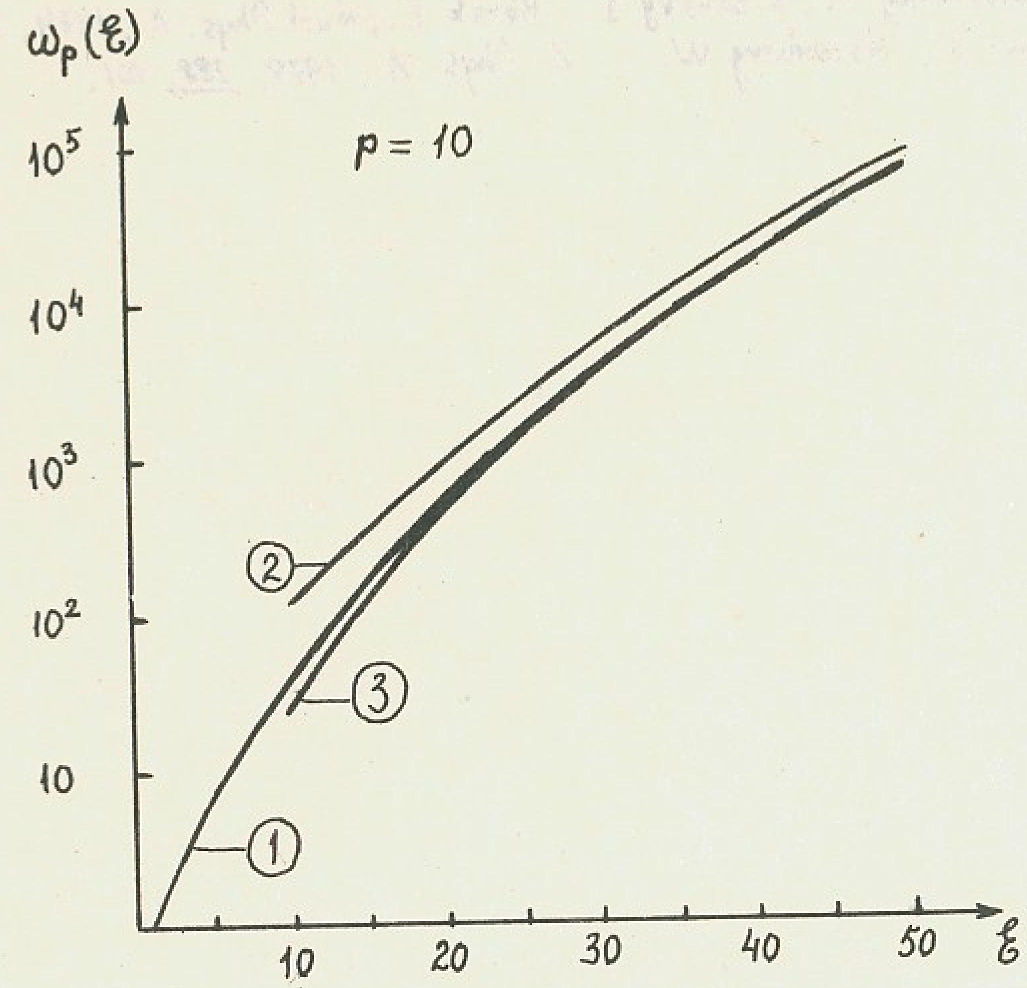
$$S_{12}(\beta,\mu,\lambda) = \left[\frac{\omega_B(E)}{\omega_{B'}(E')}\right]^{1/2}\langle n_1\rangle(1-\langle n_2\rangle) = 2\Big/\left(\operatorname{ch}\frac{z_1+z_2}{2} + \operatorname{ch}\frac{z_1-z_2}{2}\right) \quad (B15)$$

где $z_k = \beta(\varepsilon_k - \mu + \lambda b_k)$. Формулы (B12) - (B15) можно использовать для точных расчетов сверток (B8),(B9) и количественных оценок интенсивности $w^{(k)}(BE, B'E')$. Без ухудшения точности лагранжевы множители β , λ в (I5) определяются по средним величинам $(E + E')/2$ и $(B + B')/2$, что восстанавливает явную симметрию сверток (B12).

Очевидно, что развитая процедура позволяет регулярным образом строить свертки любых аддитивных операторов для произвольного набора макропеременных крупноячеечного огрубления, причем последние могут быть введены как переменные микроканонического, канонического и большого канонического ансамбля.

ЛИТЕРАТУРА

1. Griffin J.J., Phys. Rev. Lett. 1966, 17, 478.
2. Blann M., Phys. Rev. Lett. 1968, 21, 1357.
3. Cline C.K., Blann M., Nucl. Phys. A, 1971, 172, 225.
4. Зайдель К., Зелигер Д., Райер Р., Тонеев В.Д. ЭЧАЯ, 1976, 7, № 2, 499.
5. Williams F.C., Nucl. Phys. A., 1971, 166, 231.
6. Obložinský P., Ribanský I., Běták E., Nucl. Phys. A, 1974, 226, 347.
7. Ayik S., Nörenberg W., Z. Phys. A, 1978, 288, 401.



П.Н.Исаев

КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ В ЭКСИТОННОЙ МОДЕЛИ

Препринт

№ 85-25

Работа поступила - 25 февраля 1985 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов
Подписано к печати I.03.1985 г. МН 06564
Формат бумаги 60x90 I/16 Усл.I,5 печ.л., I,2 учетно-изд.л.
Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 25.

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90