УДК 539.2

ВЛИЯНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОСТИ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПОЛЯРИЗАЦИЮ КРИСТАЛЛОВ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Г.В. ГРУШЕВСКАЯ[*], Л.И. ГУРСКИЙ[**]

[*]*Белорусский государственный университет*
Минск, Беларусь;

[**]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники*
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 10 июня 2005

Исходя из первых принципов, предложен метод расчета электрофизических свойств кристаллов в рамках квантовой теории возмущений с использованием температурных функций Грина. Для описания наноструктурированных кристаллов развит метод вычисления диэлектрической поляризации кристаллов в сильных электромагнитных полях с учетом релятивистских поправок, описывающих магнитооптические эффекты.

Ключевые слова: поляризация, кристалл, квантовая теория возмущений, рассеяние.

Введение

В настоящее время представляет интерес моделирование электрофизических свойств наноструктурированных материалов, перспективных в использовании при разработках наноэлектронных устройств. К таким материалам относятся углеродные нанотрубки, углеродная нанопена и другие материалы с включениями в виде наноразмерных пузырьков, фотонные кристаллы. Численное моделирование зонной структуры таких наноструктурированных кристаллов необходимо проводить с учетом мультипольного характера взаимодействия сильных электромагнитных полей с веществом. Особенностью наноструктурированных кристаллов является наличие направлений, перераспределение электронной плотности вдоль которых должно описываться большим числом значимых мультипольных моментов переходов в сильных электромагнитных полях. Так как при этом поправки на несферичность ячеистого (маффин-тин (МТ)) потенциала нельзя считать пренебрежимо малыми, то выбор пробных сферически симметричных волновых функции для вариационных расчетов "из первых принципов" методом рассеянных волн становится неоднозначным, как становится неоднозначным и выбор разбиения кристаллического пространства в такого типа расчетах [1, 2]. В сильных электромагнитных полях начинают проявляться магнитооптические эффекты, корректное описание которых возможно только с учетом релятивистских поправок.

Целью данной работы является развитие методов расчета электрофизических характеристик кристаллов, исходя из "первых принципов", в частности, определенного метода вычисления диэлектрической поляризации кристаллов в сильных электромагнитных полях с учетом релятивистских поправок, описывающих магнитооптические эффекты.

Модель

Рассмотрим квантово-полевое уравнение Швингера–Дайсона [3]

$$\left(\hbar z_\nu - E(p) - \Sigma^e(p, z_\nu)\right) G_1(p, z_\nu) = 1, \tag{1}$$

описывающее поле, получаемое квантованием уравнения Дирака в неявно релятивистской форме, в импульсном представлении. Здесь $\Sigma^e(p, z_\nu)$ — собственная энергия, являющаяся многочастичной поправкой к энергии $E(p)$ одночастичного состояния; $G_1(p, z_\nu)$ — одночастичная температурная функция Грина; z_ν — мацубаровские частоты; $\hbar$ — постоянная Планка. В рамках теории возмущений основной проблемой при решении уравнения (1), возникающей в физике твердого тела, является выбор нулевого приближения, так как выбор в качестве нулевого приближения функции Грина свободного электрона не оправдан из-за наличия сильного кристаллического поля. В качестве одночастичного состояния мы могли бы использовать квазичастичное состояние $\varphi(p)$, описываемое однородным уравнением Швингера–Дайсона:

$$\left(\hbar z_\nu - E(p) - \Sigma^e(p, z_\nu)\right) \varphi(p) = 0. \tag{2}$$

Однако из-за неэрмитовости эффективного одночастичного гамильтониана не существует билинейного разложения свободной функции Грина, имеющего вид [4]

$$G_1(p, z) = \sum_n \frac{\varphi_n(p)\varphi_n^*(p)}{z - \omega_n}, \tag{3}$$

где $\omega_n, \varphi_n(p)$ — собственные значения и собственные состояния квазичастицы соответственно. Следовательно, проблема начального выбора при таком подходе не решается. Выходом из создавшегося положения было бы аппроксимировать состояние $\varphi(p)$ квазичастицы в разложении (3) одночастичными состояниями, рассчитываемыми с помощью непертурбативных методов, например, вариационного метода в рамках функционала плотности. В нерелятивистском случае такой подход допустим [5], так как разложение (3) существует для исходного самосопряженного гамильтониана. В релятивистском случае исходный гамильтониан не является существенно самосопряженным. Поэтому собственные значения ω_n квазичастичного состояния в (3) могут принимать комплексные значения. Следовательно, концепция квазичастицы теряет физический смысл, если не задать условия, обеспечивающие вещественность энергии квазичастицы. Вещественность энергии имеет место, если одночастичное релятивистское состояние представляет собой волновой пакет [6]. Расплывание волнового пакета из-за того, что масса электрона ненулевая, делает весьма проблематичным использование билинейного разложения, конструируемого с помощью функционала плотности, в качестве свободной функции Грина для кристалла. Поэтому далее нами предлагается подход к решению релятивистского уравнения Швингера–Дайсона в неявно релятивистской форме для температурных функций Грина в рамках теории возмущений с использованием техники проективных операторов [7].

Квантовая теория возмущений для дираковской задачи

Разложение релятивистской функции Грина в ряд теории возмущений формально выглядит, как разложение функции Грина в ряд нерелятивистской квантовомеханической теории возмущений [8]:

$$\sum_{n'} \langle p \mid \chi_{n'} \rangle \gamma_0 \langle \chi_n \mid p \rangle = \sum_{n'} \langle p \mid \chi_{n'}^{(0)} \rangle \gamma_0 \langle \chi_n^{(0)} \mid p \rangle + \frac{k_B T}{-i\hbar} \times$$

$$\times \sum_{n',n''} \langle p \mid \chi_{n''} \rangle \gamma_0 \langle \chi_{n'} \mid p_1 \rangle \gamma_0 \frac{\langle p_1 \mid i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu) \mid p_2 \rangle}{\hbar z_{12} - E_{n'} + E_{n''}} \gamma_0 \langle p_2 \mid \chi_{n''} \rangle \gamma_0 \langle \chi_n \mid p \rangle. \tag{4}$$

Здесь $|\chi_n\rangle$ — биспиноры в стандартном представлении [9]; $\gamma_0\langle\chi_n|$ — дираковскосопряженные биспиноры; p, p_1, p_2 обозначают импульсы электрона; n указывает номер зоны; z_{12} — комплексая частота; T — температура; k_B — постоянная Больцмана; γ_μ — матрицы Дирака.

Далее предлагается диаграммная техника проективных операторов. Осуществляя перестановку частиц с импульсами p, p_2, переставляя частицы с импульсами p, p_1 и учитывая коммутационные соотношения для проективных операторов в уравнении (4), получаем

$$G(p,E_n,z_{12})=G^0(p,E_n)-\delta(p-p_2)\frac{k_BT}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\langle p|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_{n'}^{(0)}|p_2\rangle$$

$$\times\gamma_0\frac{\langle p_1|i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)|p_2\rangle}{-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}}\gamma_0\left(|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_n|\right)^\dagger-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\langle p|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_{n'}^{(0)}|p_1\rangle$$

$$\times\frac{\gamma_0 i\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)\gamma_0}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\langle p_2|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_n|p_2\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-i\hbar}$$

$$\times\sum_{n',n''}\langle p|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_{n'}^{(0)}|p_1\rangle\frac{\gamma_0 i\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)\gamma_0}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\left(|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_n|\right)^\dagger$$

$$+\frac{k_BT}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\langle p_2|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_{n'}^{(0)}|p_2\rangle\gamma_0\frac{\langle p_1|i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)|p_1\rangle}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_0\langle p|\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_n|p\rangle, \quad (5)$$

где $G_1^0(\tilde{p})$ — свободная температурная функция Грина дираковской частицы. Отсюда следует [8], что техника проективных операторов позволяет представить второй и третий члены в выражении (5) в виде диаграмм, которые описывают обменное взаимодействие, обусловленное принципом исключения Паули. Четвертый член описывает влияние многочастичных кулоновских корреляций на распределение зарядовой плотности. Последнее слагаемое выражения (5) дает поправку, соответствующую несвязной диаграмме. Выражение $\frac{1}{E_{n''}+\hbar z_{12}-E_{n'}}$ можем переписать в виде

$$\frac{1}{E_{n''}+\hbar z_{12}-E_{n'}}\sim\delta(E_{n'''}-E_{n''})\sum_{n'''}\frac{|\chi_{n'''}\rangle\gamma_0\langle\chi_{n'''}|}{E_{n'''}+\hbar z_{12}-E_{n'}}=\hat{G}_1\delta(E_{n'''}-E_{n''}). \quad (6)$$

Здесь δ — функция вошла в выражение как следствие свойства проективных операторов [8].

Как известно, односвязные диаграммы в разложении функции Грина в ряд квантовой теории возмущений учитываются простым повторением сильносвязных диаграмм. В нерелятивистском случае мы можем использовать трансляционную симметрию, чтобы развести сильносвязные диаграммы сколь угодно далеко в данный момент времени. Но для релятивистской теории упорядочение во времени теряет смысл. Последнее означает, что в отличие от нерелятивистской диаграммной техники проективных операторов в релятивистском случае имеются симметричные и антисимметричные проекторы, соответствующие частице и античастице. Поэтому трансляционная симметриия существует по отношению к диаграммам, имеющим как электронные, так и позитронные линии. Следовательно, мы должны в разложениии релятивистской функции Грина учитывать односвязные диаграммы, имеющие как электронные, так и позитронные линии. Разложение (4) можно переписать в виде ряда, учитывающего односвязные диаграммы, которые не являются трансляционно-симметричными. Проективная диаграммная техника в этом подходе следующая [3]. Строим обычную нерелятивистскую диаграмму. Домножаем вклады внутренних поддиаграмм на эрмитовосопряженные (так как античастицы распространяются обратно во времени) и суммируем по всем поляризациям λ внутренних линий $|\chi_\lambda^+\rangle\gamma_0\langle\chi_\lambda|$:

$$G(p,E_n,z_{12})\sim G^0(p,E_n)-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle\gamma_0$$

$$\times\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}_{int}^\dagger(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\sum_\lambda \imath\,|\,\chi_\lambda^+\rangle\gamma_0\langle\chi_\lambda\,|$$

$$\times\gamma_0\left\langle p_2\,|\,\chi_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_n\,|\,p_2\right\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle$$

$$\times\gamma_0\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}_{int}^\dagger(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_0\sum_\lambda i\,|\,\chi_\lambda^+\rangle\gamma_0\langle\chi_\lambda\,|\left(|\,\chi_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_0\langle\chi_n\,|\right)^\dagger, \qquad (7)$$

где $i\,|\,\chi_\lambda^+\rangle$ — биспинор, описывающий античастицу, знак $*$ означает комплексное сопряжение. Процесс поглощения виртуального фотона античастицей из виртуальной электрон-позитронной пары, как и должно, описывается электромагнитным взаимодействием вида

$$\hat{H}_{int}\equiv -e^+A^\mu,\quad e^+=-e. \qquad (8)$$

Техника проективных операторов требует перейти к вейлевскому представлению биспиноров [9, 10]. Тогда формула (7) принимает вид:

$$\breve{G}(p,E_n,z_{12})\sim\breve{G}^0(p,E_n)-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_5\left\langle\breve{\chi}_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle\gamma_5$$

$$\times\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}_{int}^\dagger(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\sum_\lambda i\,|\,\breve{\chi}_\lambda\rangle\gamma_5\langle\breve{\chi}_\lambda\,|$$

$$\times\gamma_5\left\langle p_2\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_5\left\langle\breve{\chi}_n\,|\,p_2\right\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_5\left\langle\breve{\chi}_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle$$

$$\times\gamma_5\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}_{int}^\dagger(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_5\sum_\lambda i\,|\,\breve{\chi}_\lambda\rangle\gamma_5\langle\breve{\chi}_\lambda\,|\left(|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\rangle\gamma_5\langle\breve{\chi}_n\,|\right)^\dagger, \qquad (9)$$

где $\breve{\chi}$ — биспинор в вейлевском представлении. С использованием известного правила перемножения трех матриц Дирака [11] распишем функцию Грина (9) в матричном виде $\breve{G}\to\breve{G}_{\alpha\beta}$:

$$\breve{G}_{\alpha\beta}(p,E_n,z_{12})\sim\breve{G}_{\alpha\beta}^0(p,E_n)-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left(\left\langle p\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_5\right)_\alpha\left(\gamma_5\left\langle\breve{\chi}_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle\right)_\beta$$

$$\times\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}_{int}^\dagger(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\sum_\lambda i\,|\,\breve{\chi}_\lambda\rangle_\delta\,\gamma_{5_\delta}\langle\breve{\chi}_\lambda\,|$$

$$\times\gamma_5\left\langle p_2\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle_\kappa\gamma_{5\kappa}\left\langle\breve{\chi}_n\,|\,p_2\right\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-i\hbar}\sum_{n',n''}\left(\left\langle p\,|\,\breve{\chi}_{n''}^{(0)}\right\rangle\gamma_5\right)_\alpha\left(\gamma_5\left\langle\breve{\chi}_{n'}^{(0)}\,|\,p_1\right\rangle\right)_\beta$$

$$\times\frac{i\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{-i\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_5\sum_\lambda i\,|\,\breve{\chi}_\lambda\rangle_\delta\,\gamma_{5\delta}\,\langle\breve{\chi}_\lambda\,|\Big(|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\rangle_\kappa\gamma_{5\kappa}\langle\breve{\chi}_n\,|\Big)^\dagger. \tag{10}$$

Суммирование по поляризациям $\sum_\lambda |\,\breve{\chi}_\lambda\rangle_\delta\,\gamma_{5\kappa}\,\langle\breve{\chi}_\lambda\,| = (m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)_{\delta\kappa}$ в (10) и использование свойств γ_5-матрицы [12] дают следующее уравнение для функции Грина:

$$\breve{G}(p,E_n,z_{12})\sim\breve{G}^0(p,E_n)-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-\hbar}\sum_{n',n''}\Big\langle p\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle\gamma_5\Big\langle\breve{\chi}^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\Big\rangle\gamma_5$$

$$\times\frac{\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)_{\delta\alpha}}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_5(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)_{\beta\kappa}$$

$$\times\Big\langle p_2\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle_\kappa\gamma_{5\delta}\Big\langle\breve{\chi}_n\,|\,p_2\Big\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-\hbar}\sum_{n',n''}\Big\langle p\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle\gamma_5\Big\langle\breve{\chi}^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\Big\rangle$$

$$\times\gamma_5\frac{\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)_{\delta\alpha}}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12}^*)}\frac{\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z_{12})}\gamma_5(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)_{\beta\kappa}\Big(|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\rangle_\kappa\gamma_{5\delta}\langle\breve{\chi}_n\,|\Big)^\dagger. \tag{11}$$

Замечаем, что так как энергия равна $E(p)=m^2+\sum_{i=1}^3 p_i^2$,

$$\frac{1}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z^*)}\frac{1}{(-E_{n'}+E_{n''}+\hbar z)}=\frac{1}{(E_{n''}-E_{n'})^2-(\hbar z)^2}$$

$$=\frac{1}{E^2(\breve{p})-(\hbar z)^2}=\frac{1}{m^2-(\hbar z)^2+\sum\limits_{i=1}^3\breve{p}_i^2}=\frac{1}{m^2-\sum\limits_{\mu=0}^3\breve{p}_\mu^2}, \tag{12}$$

где $E(\breve{p})\overset{def}{=}E_{n''}-E_{n'}$; $\breve{p}_0=\hbar z$; $\breve{p}_\mu$ — 4-импульс биспинора. Подставив (12) в (11), получаем

$$\breve{G}(p,E_n,z_{12})\sim\breve{G}^0(p,E_n)-\frac{k_BT\delta(p-p_1)}{-\hbar}\sum_{n',n''}\Big\langle p\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle\gamma_5\Big\langle\breve{\chi}^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\Big\rangle\gamma_5$$

$$\times\,\mathrm{Tr}\left[\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)\gamma_5\frac{(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)}{m^2-\breve{p}_\mu^2}\Big\langle p_2\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle\gamma_5\Big\langle\breve{\chi}_n\,|\,p_2\Big\rangle\right]+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_BT}{-\hbar}$$

$$\times\sum_{n',n''}\Big\langle p\,|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\Big\rangle\gamma_5\Big\langle\breve{\chi}^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\Big\rangle\gamma_5\,\mathrm{Tr}\left[\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)\hat{H}^\dagger_{int}(\gamma_\mu)\gamma_5\frac{(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)}{m^2-\breve{p}_\mu^2}\Big(|\,\breve{\chi}^{(0)}_{n''}\rangle\gamma_5\langle\breve{\chi}_n\,|\Big)^\dagger\right]. \tag{13}$$

Мы видим, что суммирование по внутренним линиям диаграмм приводит к появлению операции взятия следа Tr и появлению в (13) члена $\frac{(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)}{m^2-\breve{p}_\mu^2}$, являющегося биспинорной функцией Грина $\breve{G}_{1,\alpha\beta}$:

$$\breve{G}_{1,\alpha\beta}=\frac{(m+\gamma_\mu\,\breve{p}_\mu)_{\alpha\beta}}{m^2-\sum\limits_{\mu=0}^3\breve{p}_\mu^2}. \tag{14}$$

Предположим, что энергии E_n таковы, что можно пренебречь рождением электрон-позитронных пар. Это означает, что приблизительно заменив биспиноры $\breve{\chi}_n$ биспинорами χ_n в стандартном представлении, получим:

$$G(p,E_n,z_{12}) = \lim_{\chi^+\to 0}\breve{G}(p,E_n,z_{12}) \approx G^0(p,E_n)$$

$$-\frac{k_B T\delta(p-p_1)}{-\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle \operatorname{Tr}\gamma_0\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)\hat{H}^{\dagger}_{int}(\gamma_\mu)\gamma_0\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}$$

$$\times\left\langle p_2\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_n\,|\,p_2\right\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)\frac{k_B T}{-\hbar}$$

$$\times\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle \operatorname{Tr}\gamma_0\hat{H}_{int}(\gamma_\mu)\hat{H}^{\dagger}_{int}(\gamma_\mu)\gamma_0\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}\Big(|\,\chi^{(0)}_{n''}\rangle\gamma_0\langle\chi_n\,|\Big)^{\dagger}. \tag{15}$$

Покажем, как от техники проективных операторов перейти к феймановской диаграммной технике (по крайней мере в низкоэнергетическом пределе). Пусть скалярный потенциал $A_0\equiv V=1/r$ в уравнении (8) является кулоновским потенциалом. Тогда уравнение (15) записывается в виде

$$G(p,E_n,z_{12})\approx G^0(p,E_n)-\frac{k_B T\delta(p-p_1)}{\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle \operatorname{Tr}\gamma_0\imath e(-\gamma_0\hat{A}_0+\vec{\gamma}\hat{\vec{A}})$$

$$\times\imath e(-\gamma_0\hat{A}_0+\vec{\gamma}\hat{\vec{A}})^{\dagger}\gamma_0\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}\left\langle p_2\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_n\,|\,p_2\right\rangle+\frac{k_B T\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)}{\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle$$

$$\times\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle \operatorname{Tr}\gamma_0\imath e(-\gamma_0\hat{A}_0+\vec{\gamma}\hat{\vec{A}})\imath e(-\gamma_0\hat{A}_0+\vec{\gamma}\hat{\vec{A}})^{\dagger}\gamma_0\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}\Big(|\,\chi^{(0)}_{n''}\rangle\gamma_0\langle\chi_n\,|\Big)^{\dagger}. \tag{16}$$

Используя перестановочные соотношения для γ-матриц

$$\gamma_0\vec{\gamma}=-\vec{\gamma}\gamma_0,\gamma_0^2=\gamma_i^2=1, \tag{17}$$

преобразуем уравнение (16) к виду

$$G(p,E_n,z_{12})\approx G^0(p,E_n)-\frac{k_B T\delta(p-p_1)}{\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle$$

$$\times\operatorname{Tr} ie\gamma_\kappa\hat{A}_\kappa\hat{A}^{\dagger}_\tau ie\gamma_\tau\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}\left\langle p_2\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi_n\,|\,p_2\right\rangle+\delta(p-p_1)\delta(p_1-p_2)$$

$$\times\frac{k_B T}{\hbar}\sum_{n',n''}\left\langle p\,|\,\chi^{(0)}_{n''}\right\rangle\gamma_0\left\langle\chi^{(0)}_{n'}\,|\,p_1\right\rangle\operatorname{Tr} ie\gamma_\kappa\hat{A}_\kappa\hat{A}^{\dagger}_\tau ie\gamma_\tau\frac{(m+\gamma_\mu p_\mu)}{m^2-p^2_\mu}\Big(|\,\chi^{(0)}_{n''}\rangle\gamma_0\langle\chi_n\,|\Big)^{\dagger}, \tag{18}$$

где $\{A^\mu\}=\{A^i,V\}$ — 4-х мерный вектор-потенциал. Обозначим в (18) произведение $\hat{A}_\mu\hat{A}^{\dagger}_\nu$ через $D_{\mu\nu}$, а дробный множитель вида $(m+\gamma_\mu p_\mu)_{\alpha\beta}/(m^2-\sum_{\mu=0}^{3}p^2_\mu)$ через $G_{1,\alpha\beta}$:

$$D_{\mu\nu} = \hat{A}_\mu \hat{A}_\nu^\dagger, \qquad G_{1,\alpha\beta} = \frac{(m + \gamma_\mu p_\mu)_{\alpha\beta}}{m^2 - \sum\limits_{\mu=0}^{3} p_\mu^2}. \tag{19}$$

$D_{\mu\nu}$ и $G_{1,\alpha\beta}$ есть в точности фотонный пропагатор и релятивистская спинорная функция Грина электрона соответственно. Тем самым мы доказали, что в рассматриваемом приближении диаграммные вклады эквивалентны феймановским диаграммам для расчета функции Грина частиц со спином 1/2 с вершинами $ie\gamma^\mu$ и фотонными линиями

$$D_{\mu\nu}(p) = -g_{\mu\nu} \left\langle q \left| \frac{1}{r} \right| p + q \right\rangle = -\frac{g_{\mu\nu}}{p^2}, \tag{20}$$

$\mu(\nu) = 0,1,2,3$; $g_{\mu\nu}$ — метрический тензор.

Диэлектрическая поляризация наноструктурированных кристаллов в сильном электромагнитном поле

С помощью описанного подхода оценим обменно-корреляционный вклад в функцию Грина в длинноволновом приближении:

$$\vec{p} \to 0 \qquad p_0 \Rightarrow m + \hbar\tilde{z} + (\tilde{E}_{n''} - \tilde{E}_{n'}). \tag{21}$$

Подставив выражения (21) и (20) в уравнение (18), получим разложение:

$$G(p, E_n, z_{12}) \approx G^0(p, E_n) - \frac{k_B T \delta(p - p_1)}{-\hbar} \sum_{n',n''} \operatorname{Tr} \left\langle p \mid \chi_{n''}^{(0)} \right\rangle \gamma_0 \left\langle \chi_{n'}^{(0)} \mid p_1 \right\rangle$$

$$\times e\gamma_\kappa g^{\kappa\tau} e\gamma_\tau \frac{1}{(-\tilde{E}_{n'} + \tilde{E}_{n''}(p_2) + \hbar\tilde{z}_{12})} \left\langle p_2 \mid \chi_{n''}^{(0)} \right\rangle \gamma_0 \left\langle \chi_n \mid p_2 \right\rangle / q^2 + \delta(p - p_1)\delta(p_1 - p_2) \frac{k_B T}{-\hbar}$$

$$\times \sum_{n',n''} \operatorname{Tr} \left\langle p \mid \chi_{n''}^{(0)} \right\rangle \gamma_0 \left\langle \chi_{n'}^{(0)} \mid p_1 \right\rangle e\gamma_\kappa g^{\kappa\tau} e\gamma_\tau \frac{1}{(-\tilde{E}_{n'} + \tilde{E}_{n''}(p_2) + \hbar\tilde{z}_{12})} \Big(\mid \chi_{n''}^{(0)} \rangle \gamma_0 \langle \chi_n \mid \Big)^\dagger / q^2. \tag{22}$$

Данное выражение можно использовать для расчета многочастичных эффектов в кристаллах. Например, используя несферический потенциал, предложенный в [8], можно записать поляризационную часть $\delta\hat{G}_1$ возмущенной функции Грина с помощью приближенного выражения типа (22). При этом мы получим поправку к температурной функции Грина электрона, описывающую несферическую часть корреляционных взаимодействий, в виде (заметим, что это же выражение было получено в [2] с использованием феймановской диаграммной техники)

$$\delta G_1^{(k)}(\tilde{p}) = -C \frac{k_B T}{\hbar} \sum_{n'',z'} G^0(\tilde{p}, E_n) \int dq \frac{4r_0}{3\varepsilon_0 q^4} e_c \operatorname{Tr} \int dp dp_1 dp_2\, \chi_{n''}{}^{(k)}(p_1) \chi_n^{*(k)}(p)$$

$$\times e g^{\nu\mu} \gamma_\mu \chi_n{}^{(k)}(p_1) \chi_{n''}^{*}{}^{(k)}(p_2) e g_{\mu\nu} \gamma^\nu \frac{e\gamma_\kappa}{\hbar z' - E_n(p_1)} \frac{e\gamma_\kappa}{(-\hbar z' + E_{n''}(p_2) + \hbar z_{12})}, \tag{23}$$

где $C = C^{2\pm\frac{1}{2},0}_{(2\pm\frac{1}{2},0)(2\pm\frac{1}{2},0)}$ — коэффициент Клебша–Гордона; ε_0 — диэлектрическая постояная; r_0 — радиус сферы, аппроксимирующей эллипсоид, с помощью которого моделируем атомные МТ-области в вычислениях из "первых принципов"; e_c — эксцентриситет МТ-эллипсоида вращения, который служит мерой наноструктурированности кристалла. Индекс k в данной ситуации различает два возможных случая: спин вверх и спин вниз.

Корреляции (23) ответственны за поляризационные эффекты и экранирование атомного потенциала в твердых телах за счет рассеяния локализованных блоховских электронов. Значение параметра ε_c для наноструктурированных кристаллов намного больше, чем для плотноупакованных. Следовательно, наноструктурированность приводит к тому, что в диэлектрическую проницаемость дадут вклад не только коллективные плазменные колебания свободных блоховских электронов, но и осцилляции в распределении локализованных блоховских электронов. Таким образом, эффект экранирования внешнего электрического поля в наноструктурированных кристаллах обусловлен плазменными колебаниями, частоты которых определяются дипольными моментами межзонных переходов.

RELATIVISTIC POLARIZATION IN CELL POTENTIAL APPROXIMATION AND SCATTERING OF ELECRONS ON NUCLEI IN CRYSTALS

L.I. GURSKY, H.V. GRUSHEVSKAYA

Abstract

Based on *'ab initio'* calculation, a method to calculate electrophysical properties of crystals was offered within the framework of a quantum theory of perturbations with use of temperature Green functions. To describe nanostructured crystals a method of an estimation of dielectric polarization of crystals in strong electromagnetic fields was developed by taking into account of relativistic corrections corresponding to magnetooptical effects.

Литература

1. *Грушевская Г.В., Гурский Л.И.* // Проблемы проектирования и производства радиоэлектронных средств: сборник материалов III Международной научно-технической конференции. Т. 2. С. 171–178 / Полоцкий гос. университет. Новополоцк, 2004.
2. *Гурский Л.И., Грушевская Г.В.* // Докл. БГУИР. 2004. № 2. С. 173–185.
3. *Грушевская Г.В.* // Низкораз. сис.-2: Физико-химия элементов и систем с низкоразмерным структурированием (получение, диагностика, применение новых материалов и структур). Вып. 4. Гродно, 2004. С. 16–20.
4. *Крефт В.-Д., Кремп Д., Эбелинг В., Репке Г.* Квантовая статистика систем заряженных частиц. М., 1988. 408 с.
5. *Aryasetiawan F., Gunnarson O.* // Rep. Prog. Phys. 1998. Vol. 61. P. 237–312.
6. *Фок В.А.* Начала квантовой механики. М., 1976. 376 с.
7. *Barut A.O., Raczka R.* Theory of group representations and their applications. Vol. 1. Warszawa, 1977
8. *Грушевская Г.В., Гурский Л.И., Комаров Л.И., Крылов Г.Г.* // Докл. АН Беларуси. 1996. № 5. С. 58–64.
9. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М., 1980. 704 с.
10. *Grushevskaya H.V.* // Proceedings of the 12th "Foundation & Advances in Nonlinear Science". Conference-School, September 27–30, 2004. Belarusan State University Press. Minsk, 2005. P. 19–27.
11. *Федоров Ф.И.* Группа Лоренца. М., 1979. 384 с.
12. *Michio Kaku.* Quantum field theory. Oxford University Press, 1993.