

✓ П
425



С. В. Ивлиев, В. Н. Собакин

008-85

344 3354

ИФН

ОБМЕННЫЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ
ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕМ ЭЛЕКТРОННОМ
ГАЗЕ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

МОСКВА 1985

Министерство высшего и среднего специального
образования СССР

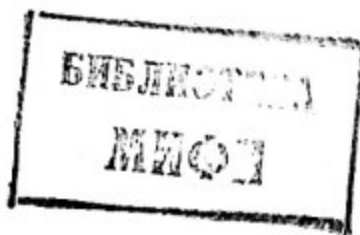
Московский ордена Трудового Красного Знамени
инженерно-физический институт

П
И 25

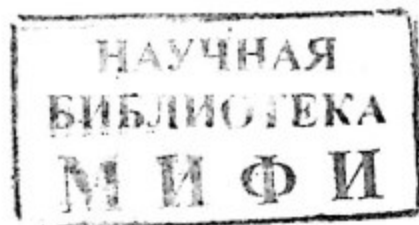
С.В.Ивлиев, В.Н.Собакин

ОБМЕННЫЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ
ВО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕМ ЭЛЕКТРОННОМ
ГАЗЕ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

Препринт 008-85



Утверждено
редсоветом института



Москва 1985

Ивлиев С.В., Собакин В.Н. Обменные и корреляционные эффекты во взаимодействующем электронном газе простых металлов. - М.: Препринт МИФИ, 008-85, 1985 . - 28 с.

Рассматривается решение замкнутой системы уравнений, самосообразным образом описывающей электрон-ионную систему простых металлов. В модели "желе" исследовано поведение взаимодействующего электронного газа при плотностях, отвечающих реальным металлам. С учетом сильного электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействий получено выражение для вершины в форме поправки на локальное поле.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие теоретической физики твердого тела в последние годы в значительной степени связано с проблемой самосогласованного описания свойств взаимодействующих электронов и ионов в металлах. Построение последовательной микроскопической теории таких систем является крайне актуальным не только с чисто академической, но и с практической точки зрения, поскольку предоставляет возможность анализа большого числа наблюдаемых характеристик металлов. Отличительной особенностью рассматриваемой системы простого металла является сильное взаимодействие как между электронами и ионами, так и электронов между собой. Отсутствие явных малых параметров в такой задаче долгое время не позволяло использовать какие-либо четко обоснованные теоретические методы. В то же время уже использование модели почти свободных электронов привело к хорошему объяснению многих измеряемых свойств металла, что прямо указывает на то, что электроны в простых металлах можно считать эффективно почти невзаимодействующими. Естественно, такое предположение требует обоснования. С физической точки зрения ясно, что природу такого поведения электронов следует искать в рассмотрении сложных процессов экранировки подстраивающимися электронами всех типов взаимодействий. Именно попытке последовательного учета таких процессов и посвящена настоящая работа.

В понимании физических процессов в системе простого металла к настоящему времени достигнут весьма значительный прогресс. Большим успехом микроскопической теории явилось создание метода псевдопотенциала [1, 2], в рамках которого удалось последовательно рассмотреть характер электрон-ионного взаимодействия. Разработка и применение адиабатического подхода в теории фононных спектров [3] привели к количественному согласию вычисленных и экспериментальных спектров металлов. Однако учет электрон-электронного взаимодействия все еще представляет значительные трудности. Это связано с существенно многочастичным характером

взаимодействия и, следовательно, с необходимостью учитывать сложные обменные и корреляционные эффекты в системе электронов. Одним из возможных решений этой сложной проблемы является получение и исследование функции диэлектрической проницаемости электронного газа. При этом наибольший интерес, естественно, представляет область электронных плотностей, отвечающих реальным металлам. В последние годы разными методами получен целый ряд выражений для диэлектрической проницаемости взаимодействующего электронного газа, в той или иной мере учитывающих эффекты кулоновского взаимодействия между электронами [4 - 13]. Однако практически все полученные результаты имеют ограниченную область применения и нуждаются в дополнительном обосновании. Поэтому необходимо продолжать усилия для построения последовательной теории, возможно более полно учитывающей эффекты обмена и корреляции в системе электронов. Ниже для решения этой задачи используется замкнутая формально точная система для функций Грина электронов и ионов, где учитываются все взаимодействия. Исследованы свойства и поведение электрон-электронной вершинной функции в широком интервале электронных плотностей в модели "желе".

I. Самосогласованные уравнения для электронной системы металла

Будем рассматривать систему взаимодействующих электронов и ионов в простом металле (ионы с замкнутыми внутренними электронными оболочками). В такой постановке спектр возбуждений этой системы возникает самосогласованным образом. Конструктивным для такого подхода является использование метода функций Грина, несмотря на значительную сложность получаемых уравнений. Однако при этом обнаруживается и целый ряд преимуществ: во-первых, четко и однозначно определяются все исходные потенциалы взаимодействий; функции типа диэлектрической проницаемости возникают непосредственно в процессе исследования задачи, позволяя учитывать в них вклад не только прямого межэлектронного взаимодействия, но и взаимодействие типа "электрон-ион-электрон"; во-вторых, наличие таких уравнений позволяет сделать достаточно корректно последовательные приближения, которые ясно отражают физику процесса.

Для получения уравнений воспользуемся методом функционального дифференцирования [14]. При этом подчеркнем, что никаких ограничений на величины взаимодействий или возможные значения плотности электронов не накладывается. Единственным требованием является естественная малость смещений ионов от своих положений равновесия по сравнению с параметром решетки:

$$\frac{u}{a} \ll 1.$$

Разложение по параметру $\frac{u}{a}$ проводится только до второго порядка, что отвечает гармоническому приближению. Таким образом, ангармонические эффекты заведомо не рассматриваются. Дальнейшее изложение этого раздела в значительной мере опирается на работу [15].

Полный электрон-ионный гамильтониан задачи есть

$$H = H_e + H_i + H_{ei}, \quad (1)$$

причем электроны рассматриваются во вторично-квантованном представлении и спин не учитывается. Везде ниже полагаем $\hbar = 1$ и $T = 0$. Тогда

$$H_e = \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) \left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right) \psi(\vec{r}, t) + \\ + \frac{1}{2} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi^\dagger(\vec{r}', t) V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}', t) \psi(\vec{r}, t), \quad (2)$$

где $\psi^\dagger(\vec{r}, t)$ и $\psi(\vec{r}, t)$ — операторы рождения и уничтожения электронов, соответственно, в представлении вторичного квантования; V_{ee} — потенциал электрон-электронного взаимодействия;

$$H_i = \frac{1}{2} \sum_n M(\dot{u}_n)^2 + \frac{1}{2} \sum_{nn'} V_{ii}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'}) = \\ = \frac{1}{2} \sum_n M(\dot{u}_n)^2 + \frac{1}{2} \sum_{nn'} V_{ii}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0) + \frac{1}{2} \sum_{nn'} (u_n^\alpha - u_{n'}^\alpha) \nabla_\alpha V_{ii}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0) + \\ + \frac{1}{4} \sum_{nn'} (u_n^\alpha - u_{n'}^\alpha)(u_n^\beta - u_{n'}^\beta) \nabla_\alpha \nabla_\beta V_{ii}(\vec{R}_n^0 - \vec{R}_{n'}^0), \quad (3)$$

где $u_n^\alpha = u_n^\alpha(t)$ — α -компонента смещения n -го иона; V_{ii} — потенциал взаимодействия "голых" ионов между собой;

$$H_{ei} = \sum_n \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n) \psi(\vec{r}, t) = \sum_n \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) - \\ - \sum_n \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \nabla_\alpha V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) u_n^\alpha + \frac{1}{2} \sum_n \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \nabla_\alpha \nabla_\beta V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) u_n^\alpha u_n^\beta, \quad (4)$$

где V_{ei} — потенциал взаимодействия электронов и "голых" ионов. Под "голым" ионом понимается ядро вместе с электронами внутренних оболочек, а валентные электроны будут образовывать электронную подсистему. Успехи теории псевдопотенциала для металлов показали, что такое рассмотрение вполне корректно для простых металлов. Конкретный вид V_{ee} , V_{ii} и V_{ei} в данном случае несуществен. Важно подчеркнуть только, что все они считаются локальными.

Для последующих вычислений введем обычным образом функцию Грина электронов

$$G(\vec{r}t; \vec{r}'t') = -i \langle T \psi(\vec{r}, t) \psi^\dagger(\vec{r}', t') \rangle \quad (5)$$

и функцию Грина ионных смещений

$$D_{nn'}^{\alpha\beta}(t, t') = -i \langle T (u_n^\alpha(t) - \langle u_n^\alpha \rangle) (u_{n'}^\beta(t') - \langle u_{n'}^\beta \rangle) \rangle, \quad (6)$$

где T — хронологический оператор, а угловые скобки означают усреднение по основному состоянию взаимодействующей системы.

Добавим в исходный гамильтониан внешнее поле $U(\vec{r}, t)$, действующее на электроны и внешний ток $I_n^\alpha(t)$, действующий на ионы,

$$H_{ext} = \int d\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}, t) U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) + \sum_n I_n^\alpha(t) u_n^\alpha(t). \quad (7)$$

Тогда в представлении взаимодействия с $H_{B_3} = H_{ext}$ имеем

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\langle S \rangle} \cdot \langle AS \rangle,$$

где $S = T \exp[-i \int H_{B_3}(t) dt]$ — обычным образом определенная S — матрица. В частности, прямо из определения получаем

$$\frac{\delta \langle u_n^\alpha(t) \rangle}{\delta I_{n'}^\beta(t')} = \frac{\delta \{ \langle u_n^\alpha(t) S \rangle \cdot \frac{1}{\langle S \rangle} \}}{\delta I_{n'}^\beta(t')} = \quad (8)$$

$$= -i \{ \langle T u_n^\alpha(t) u_{n'}^\beta(t') \rangle - \langle u_n^\alpha \rangle \langle u_{n'}^\beta \rangle \} = D_{nn'}^{\alpha\beta}(t, t').$$

Для построения уравнений для функций Грина электронов и ионов запишем уравнение движения для операторов $\psi(\vec{r}, t)$ и $u_n^\alpha(t)$:

$$i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \psi^\dagger(\vec{r}, t)}; \quad -M \frac{\partial^2 u_n^\alpha(t)}{\partial t^2} = \frac{\delta H}{\delta u_n^\alpha(t)}. \quad (9)$$

В дальнейшем для удобства обозначим $(\vec{r}, t) = x$. Опуская все промежуточные выкладки (они достаточно подробно приводятся в /15/), получаем из (9) после домножения на $-i\psi^\dagger(x')$, действия

оператором T и усреднения уравнение для функции Грина электронов

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} - V(x) \right] G(x, x') - \int dx_2 \Sigma(x, x_2) G(x_2, x') = \delta(x - x'), \quad (10)$$

где мы ввели эффективное поле $V(x)$:

$$V(x) = U(x) + \int d\vec{r}'' V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}'') \langle \rho_e(\vec{r}'', t) \rangle + \sum_n V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) - \sum_n \nabla V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) \langle u_n^\alpha(t) \rangle, \quad (11)$$

г. $\rho_e(x) = \langle \psi^\dagger(x) \psi(x) \rangle$ есть не что иное, как средняя плотность электронов. При этом выражение для электронной собственно-энергетической части представляется в виде

$$\Sigma(x, x_3) = -i \int dx_1 dx_2 \frac{\delta G^{-1}(x_1, x_3)}{\delta V(x_2)} G(x, x_1) \left\{ \int d\vec{r}'' V_{ee}(\vec{r} - \vec{r}'') \frac{\delta V(x_2)}{\delta U(\vec{r}'' t)} + \right. \\ \left. + \sum_n \nabla V_{ei}(\vec{r} - \vec{R}_n^0) \frac{\delta V(x_2)}{\delta I_n^\alpha(t)} \right\}. \quad (12)$$

Для дальнейших преобразований удобно определить неприводимую вершинную функцию межелектронного взаимодействия

$$\Gamma(x_1, x_2, x_3) = - \frac{\delta G^{-1}(x_1, x_2)}{\delta V(x_3)}, \quad (13)$$

а также поляризационный оператор электронов

$$\Pi(x_1, x_2) = - \frac{\delta \langle \rho_e(x_1) \rangle}{\delta V(x_2)} = i \int dx_3 dx_4 G(x_1, x_4) G(x_3, x_1) \Gamma(x_4, x_3, x_2), \quad (14)$$

который естественным образом дает отклик электронной плотности на общее эффективное поле $V(x)$. На языке диаграмм Фейнмана

$$\Pi(x_1, x_2) = x_1 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} x_2, \quad \text{где } x_4 \text{ --- } x_3 \text{ ---}$$

где сплошная линия соответствует точной функции Грина электронов, а заштрихованный треугольник обозначает вершину. Также аналогично определяются функция диэлектрической проницаемости $\epsilon(x_1, x_2)$ и полная восприимчивость $\chi(x_1, x_2)$ системы электронов

$$\epsilon(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2) + \int d\vec{r}'' V_{ee}(\vec{r}_1 - \vec{r}'') \Pi(\vec{r}'' t, x_2), \quad (15) \\ \chi(x_1, x_2) = - \int dx_3 \Pi(x_1, x_3) \epsilon^{-1}(x_3, x_2).$$

2. Исследование общего уравнения для вершинной функции

Анализ полученной системы самосогласованных уравнений показывает, что вычисление вершинной функции $\Gamma(x_1, x_2, x_3)$ является крайне трудной задачей. Эта функция входит в явном виде в выражение для собственно-энергетической части $\Sigma(x, x')$ (I6) и, следовательно, в уравнение для электронной функции Грина. Кроме того, выражение для поляризационного оператора (I4) также содержит $\Gamma(x_1, x_2, x_3)$; таким образом и диэлектрическая проницаемость и эффективный межэлектронный потенциал и уравнение для функции Грина ионных смещений сложным образом зависят от вершинной функции. Используя определение этой функции (I3) и соотношение

$$G^{-1}(x, x') = \left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} - V(x) \right] \delta(x - x') - \Sigma(x, x'), \quad (19)$$

где $\Sigma(x, x')$ дается (I6), можно получить уравнение для вершины

$$\Gamma(x, x', x_1) = \delta(x - x_1) \delta(x - x') - \frac{\delta \Sigma(x, x')}{\delta V(x_1)}. \quad (20)$$

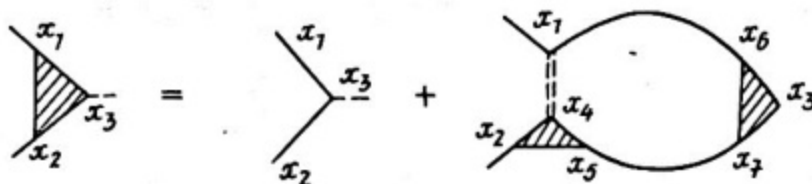
С помощью правил функционального дифференцирования легко получаем

$$\begin{aligned} \Gamma(x_1, x_2, x_3) = & \delta(x_1 - x_2) \delta(x_1 - x_3) + \\ & + \int dx_4 dx_5 dx_6 dx_7 \frac{\delta \Sigma(x_1, x_2)}{\delta G(x_4, x_5)} G(x_4, x_6) G(x_7, x_5) \Gamma(x_6, x_7, x_3). \end{aligned} \quad (21)$$

Учитывая явное выражение для $\Sigma(x_1, x_2)$ (I6), окончательное уравнение для вершины приобретает вид

$$\begin{aligned} \Gamma(x_1, x_2, x_3) = & \delta(x_1 - x_2) \delta(x_1 - x_3) + i \int dx_4 dx_5 dx_6 dx_7 \Gamma(x_5, x_2, x_4) \times \\ & \times W(x_1, x_4) G(x_1, x_6) G(x_7, x_5) \Gamma(x_6, x_7, x_3). \end{aligned} \quad (22)$$

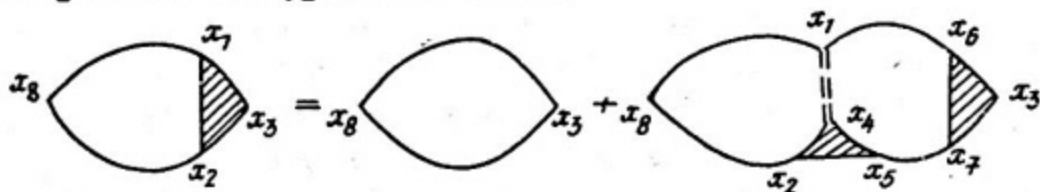
На языке диаграмм Фейнмана это уравнение записывается следующим образом:



Уравнение (22) представляет собой нелинейное интегральное уравнение, и оно является основным для анализа всех изменений во взаимодействии между электронами за счет многочастичных эффек-

тов. Следует понимать, что в этом уравнении функции $G(x, x')$ и $W(x_1, x_4)$ также неявно зависят от вершинной функции.

Теперь перейдем к более детальному исследованию уравнения (22) и его графического аналога. Простое замыкание внешних линий приводит это уравнение к виду



Аналитически это соответствует домножению уравнения на $i\theta(x_8, x_1)\theta(x_2, x_8)$ и интегрированию по x_1, x_2 , так что в результате

$$\Pi(x_8, x_3) = \Pi_0(x_8, x_3) - \int dx_1 dx_2 dx_4 dx_5 dx_6 dx_7 G(x_8, x_1) \times \\ \times \theta(x_2, x_8) \Gamma(x_5, x_2, x_4) W(x_1, x_4) \theta(x_1, x_6) \theta(x_7, x_5) \Gamma(x_6, x_7, x_3). \quad (23)$$

Здесь $\Pi_0(x_8, x_3)$, в отличие от поляризационного оператора Линдхарда, определяется через точные функции Грина электронов. Уравнения, полученные в предыдущем разделе, вместе с нелинейным интегральным уравнением (22) составляют замкнутую относительно всех неизвестных функций систему, самосогласованным образом описывающую простые металлы. Эта система из-за ее сложности не позволяет непосредственно рассчитывать различные характеристики металлов, поэтому необходимо сделать ряд приближений и допущений для того, чтобы иметь возможность получить конкретные результаты.

В дальнейшем будем рассматривать металл с модели "желе", предполагая таким образом пространственную однородность системы электронов и ионов. Такие системы удобно исследовать в импульсном представлении, поэтому проведем обычным образом фурье-преобразование всех уравнений. В результате уравнение (23) принимает следующий вид:

$$i \int \frac{dp}{(2\pi)^4} G(p+q) \theta(p) \Gamma(p, q) = i \int \frac{dp}{(2\pi)^4} G(p+q) G(p) - \\ - \int \frac{dp dk}{(2\pi)^6} \theta(p) \theta(p+q) \theta(p+k) \theta(p+k+q) W(k) \Gamma(p, k) \Gamma(k, q) \quad (24)$$

(здесь $dp = d\omega dp_x dp_y dp_z$).

Аналогично преобразуются и другие уравнения. Например;

$$\Sigma(p) = i \int \frac{dk}{(2\pi)^4} \theta(p+k) W(k) \Gamma(p, k). \quad (25)$$

Однако несмотря на некоторое упрощение уравнений решение их все еще представляет значительные трудности. В связи с этим ограничимся в дальнейшем приближением, в котором вершинная функция $\Gamma(p, q)$ зависит лишь от одной переменной — переданного импульса q , поскольку при $T = 0$ основной вклад во все процессы взаимодействия вносят электроны на поверхности Ферми, и зависимость вершины от p оказывается фактически энергетической. В результате этого уравнение (24) сильно упрощается:

$$\Gamma(q)\Pi_0(q) = \Pi_0(q) - \Gamma(q) \int \frac{dp dk}{(2\pi)^8} \epsilon(p) \epsilon(p+q) \epsilon(p+k) \epsilon(p+q+k) W(k) \Gamma(k). \quad (26)$$

Для обратной величины $\Gamma^{-1}(q)$ имеем

$$\Gamma^{-1}(q) = 1 + \frac{1}{\Pi_0(q)} \int \frac{dp dk}{(2\pi)^8} \epsilon(p) \epsilon(p+q) \epsilon(p+k) \epsilon(p+q+k) \frac{W(k)}{\Gamma^{-1}(k)}. \quad (27)$$

Это интегральное уравнение по-прежнему остается нелинейным, но его уже можно решать методом итераций. Причем реально все расчеты будут ограничиваться лишь первой итерацией. Эффективный потенциал $W(k)$, входящий в уравнение (27), определяется согласно (17) следующим выражением:

$$W(q) = \frac{V_{ee}(\vec{q})}{\epsilon(q)} - \vec{q}^2 \frac{V_{ei}^2(\vec{q})}{\epsilon^2(q)} D(q), \quad (28)$$

где $D(q) = D(\vec{q}, \omega)$ — функция Грина ионных смещений в импульсном представлении, а $\epsilon(q) = 1 + V_{ee}(q)\Gamma(q)\Pi_0(q)$ — диэлектрическая проницаемость взаимодействующего электронного газа.

Уравнение (27) является основным при анализе влияния многочастичных обменных и корреляционных эффектов, присущих ферми-системам с сильным взаимодействием. Его вывод, как видно из изложенного, является достаточно последовательным и корректным, в отличие от некоторых других подходов, где часто приходится сталкиваться с исключением из рассмотрения членов, не содержащих очевидных малых параметров. В дальнейшем уравнение (27) будет использовано для изучения свойств электронного газа в модели пассивного нейтрализующего фона, а также в более реалистичной модели "желе", когда ионная подсистема по-прежнему считается пространственно-однородной (что оправдано в пределе малых q), но обладает собственной ветвью продольных плазменных колебаний.

3. Свойства взаимодействующего электронного газа

Взаимодействующий электронный газ определяет формирование основных характеристик металла. Начнем анализ свойств электронной системы с простейшего приближения, исключив из рассмотрения сильное в принципе электрон-ионное взаимодействие. В таком приближении ионная решетка заменяется однородным положительно заряженным фоном, который в нулевом приближении не обладает собственным колебательным спектром и служит лишь для компенсации полного заряда электронного газа, обеспечивая электронейтральность всей системы. Для характеристики поведения такой системы оказывается удобным ввести безразмерный параметр r_s с помощью соотношения

$$\frac{\Omega}{N} = \frac{4\pi}{3} (a_0 r_s)^3,$$

определяющего объем, приходящийся на один электрон системы (a_0 — Борковский радиус), так что величина r_s определяется плотностью электронов. Кроме того, поскольку теперь среднее расстояние между электронами также оказывается порядка r_s , то легко получаем, что отношение средней потенциальной энергии к кинетической

$$\frac{\langle U \rangle}{\epsilon_{кин}} \sim r_s^2$$

также определяется этим параметром. Тогда, очевидно, при малых r_s кинетическая энергия вносит определяющий вклад в полную энергию системы, так что в этом случае электронный газ близок к невзаимодействующему идеальному газу. С уменьшением плотности системы (и, соответственно, с увеличением параметра r_s) вклад кулоновского межэлектронного взаимодействия начинает играть все большую роль, а система электронов становится принципиально сильно взаимодействующей. При этом оказывается, во-первых, что никакого малого параметра, характерного для такой системы, не имеется, и, следовательно, теоретическое описание ее свойств требует принципиально многочастичного подхода, а, во-вторых, остается проблематичным сопоставление результатов такого исследования с электронными характеристиками реальных металлов, поскольку нет возможности реализовать изучаемую модель экспериментально. Тем не менее изучение такой модельной системы является очень важным для анализа сравнительной роли различных физических факторов в формировании ее результирующих характеристик.

Наиболее общим подходом при описании поведения взаимодействующей системы электронов является использование функции диэлектрической проницаемости $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, определяющей все наблюдаемые характеристики этой системы (см., например, [17]). В настоящее время имеется достаточно много работ, посвященных получению и анализу этой функции при различных значениях r_s , но в области $2 < r_s < 6$, отвечающей электронным плотностям, наблюдаемым в реальных металлах, достаточно удовлетворительных результатов пока не получено. Сформулированная в предыдущих разделах система уравнений для описания взаимодействующей электрон-ионной системы представляет возможность корректно проследить за включением сложных обменных и корреляционных эффектов в такой системе при значениях r_s , близких к реально наблюдаемым.

Итак, рассматриваем систему взаимодействующих электронов на фоне неподвижного равномерно распределенного положительного заряда. Вклад этого фона в уравнение (19) для функции Грина электронов оказывается точно компенсированным средним эффективным полем $V(x)$ системы электронов. В результате система уравнений, подлежащая совместному решению, принимает в рассматриваемом приближении вид:

$$\Gamma^{-1}(q) = 1 + \frac{1}{\Pi_0(q)} \int \frac{dp dk}{(2\pi)^8} G(p) G(p+k) G(p+q) G(p+q+k) \frac{v(\vec{k})}{\Gamma^{-1}(k) + v(\vec{k}) \Pi_0(k)}; \quad (29)$$

$$\Pi_0(q) = i \int \frac{dp}{(2\pi)^4} G(p) G(p+q); \quad (30)$$

$$G^{-1}(p) = \omega - \epsilon_{\vec{p}} - \Sigma(\vec{p}, \omega) + i \delta \operatorname{sgn}(p - p_F); \quad (31)$$

$$\Sigma(p) = i \int \frac{dk}{(2\pi)^4} G(p+k) \frac{v(\vec{k})}{\Gamma^{-1}(k) + v(\vec{k}) \Pi_0(k)}; \quad (32)$$

Диэлектрическая проницаемость системы определяется следующим образом:

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{v(\vec{q}) \Pi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - v(\vec{q}) F(\vec{q}, \omega) \Pi_0(\vec{q}, \omega)}, \quad (33)$$

где $F(\vec{q}, \omega)$ — так называемая поправка на локальное поле.

Представляя вершинную функцию в виде

$$\Gamma^1(q) = 1 - v(\vec{q}) F(\vec{q}, \omega) \Pi_0(\vec{q}, \omega), \quad (34)$$

получаем уравнение для величины $F(\vec{q}, \omega)$:

$$F(q) = -\frac{1}{v(\vec{q}) \Pi_0^2(q)} \int \frac{dp dk}{(2\pi)^6} G(p) G(p+q) G(p+k) G(p+k+q) \tilde{W}(k), \quad (35)$$

где $\tilde{W}(k)$ — полный эффективный потенциал электрон-электронного взаимодействия с учетом всех эффектов экранировки:

$$\tilde{W}(k) = \frac{v(\vec{k})}{1 + v(\vec{k})(1 - F(k)) \Pi_0(k)}. \quad (36)$$

Функцию Грина взаимодействующих электронов определяем в форме

$$G(\vec{p}, \omega) = \frac{Z_p}{\omega - E_p + i\delta \operatorname{sgn}(p - p_F)} + g_R, \quad (37)$$

где g_R — ее регулярная часть, не содержащая полюсов; Z_p — множитель, который в дальнейшем будет полагать равным единице; E_p — перенормированная энергия электрона. Из общей теории диэлектрической проницаемости известно (см. [17]), что нули этой функции могут лежать лишь в нижней полуплоскости комплексных частот ω , поэтому, замыкая контур интегрирования в верхней полуплоскости, можно провести интегрирование по частотам в формуле (35). В результате, пренебрегая регулярными частями функции Грина, получаем

$$F(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{v(\vec{q}) \Pi_0^2(\vec{q}, \omega)} \int \frac{d\vec{p} d\vec{k}}{(2\pi)^6} n_p n_k \left\{ \frac{\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, E_p - E_k)}{(\omega + E_p - E_{p+q} + i\delta)(\omega + E_k - E_{k+q} + i\delta)} + \right. \quad (38)$$

$$\left. \frac{\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, E_p - E_k)}{(\omega + E_{p-q} - E_p + i\delta)(\omega + E_{k-q} - E_k + i\delta)} \frac{\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q}, E_p - E_k + \omega)}{(\omega + E_k - E_{k+q} + i\delta)(\omega + E_{p-q} - E_p + i\delta)} - \right.$$

$$\left. \frac{\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k} - \vec{q}, E_p - E_k - \omega)}{(\omega + E_{k-q} - E_k + i\delta)(\omega + E_p - E_{p+q} + i\delta)} \right\},$$

где n_p, n_k — фермиевские числа заполнения для электронов. Аналогичное интегрирование в выражении для электронной собственно-энергетической части дает

$$\Sigma(\vec{p}, \omega) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} n_k \frac{v(\vec{k} - \vec{p})}{1 + v(\vec{k} - \vec{p})(1 - F(\vec{k} - \vec{p}, E_k - \omega)) \Pi_0(\vec{k} - \vec{p}, E_k - \omega)}. \quad (39)$$

В большинстве работ, связанных с учетом и вычислением поправки на локальное поле, диэлектрическую проницаемость принято записывать через функцию Линдхарда $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ в виде

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{\nu(\vec{q}) \chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 + \nu(\vec{q}) \tilde{F}(\vec{q}, \omega) \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (40)$$

Сравнивая эту формулу и (33), получаем

$$\tilde{F}(\vec{q}, \omega) = F(\vec{q}, \omega) - (\Pi_0^{-1}(\vec{q}, \omega) + \chi_0^{-1}(\vec{q}, \omega)). \quad (41)$$

Функция $\tilde{F}(\vec{q}, \omega)$ также часто называется поправкой на локальное поле, однако, как было отмечено в обзоре [6], она содержит члены, не относящиеся с физической точки зрения к истинной поправке на локальное поле. Следует подчеркнуть, что учет отличия $\Pi_0(q)$ от $\chi_0(q)$ особенно необходим при рассмотрении области больших \vec{q} ($q \gg k_F$), так как в противном случае получается совершенно неправильное поведение функции $\tilde{F}(q)$ в пределе $q \rightarrow \infty$. При малых же волновых векторах поведение $F(q)$ и $\tilde{F}(q)$ почти одинаково.

Теперь обратимся к анализу выражения (36) для функции $W(q)$. Отмечаем, прежде всего, что принципиально важную роль играет экранирование эффективного межэлектронного взаимодействия. Этот эффект приводит к тому, что эффективный потенциал взаимодействия $\tilde{W}(k)$ остается формально малым при всех реальных плотностях. Для доказательства этого утверждения обезразмерим кулоновский потенциал, отнеся его к характерной энергии:

$$\frac{4\pi e^2}{\Omega_0 k_F^2} \cdot \frac{1}{\epsilon_F} \cdot \frac{1}{k^2} = 6\alpha^4 r_s \frac{1}{k^2} \approx \frac{0,44 r_s}{k^2}, \quad (42)$$

где $\alpha = \sqrt[3]{4/9\pi}$, а $k = q/k_F$.

Кроме того, безразмерный параметр экранирования также оказывается пропорциональным r_s :

$$k^2 \nu(q) \chi_0(q) = \frac{4\pi e^2}{\Omega_0 k_F^2} \cdot \frac{m k_F}{\pi^2 \hbar^2} \Omega_0 = \frac{4\alpha}{\pi} r_s \approx 0,66 r_s. \quad (43)$$

В результате поведение функции $\tilde{W}(k)$ можно представить в виде

$$\tilde{W}(k) = \frac{0,44 r_s}{k^2 + 0,66 r_s f(k)}, \quad (44)$$

где $f(k) = \frac{1}{2} + \frac{4-k^2}{8k} \ln \left| \frac{2-k}{2+k} \right|$ — известная функция Линдхарда. Из полученного выражения непосредственно видно, что величина $\tilde{W}(k)$ оказывается меньше единицы практически для всех интересующих нас значений \vec{k} и r_s , тогда как незранированное кулоновское взаимодействие остается пропорциональным r_s , что не позволяет считать его малым в области малых плотностей. Факт формальной малости величины \tilde{W} при любых значениях r_s позволяет ограничиться линейными по $\tilde{W}(k)$ членами разложения в выражениях (38), (39). Можно ожидать, что учет следующих членов разложения не изменит качественно поведение системы. В учетом этого в формуле (35) достаточно заменить Π_0^2 на χ_0^2 , а в качестве функций Грина электронов подставить свободные функции Грина $G_0(p)$. Выражение для $\Pi_0^{-1}(q)$ в (41) представляется в следующем виде:

$$\Pi_0^{-1}(q) = -\chi_0^{-1}(q) + \frac{1}{\chi_0^2(q)} \int \frac{d\vec{p} d\vec{k}}{(2\pi)^6} \frac{(n_p - n_{p+q})(n_k - n_{k+q})}{(\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+q} + i\delta)^2} \tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon_p - \epsilon_k). \quad (45)$$

С той же точностью теперь функции n_p есть просто единичные функции θ_p . Окончательно для поправки на локальное поле получаем следующее выражение:

$$\tilde{F}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{v(\vec{q})\chi_0^2(q)} \int \frac{d\vec{p} d\vec{k}}{(2\pi)^6} \frac{(\theta_p - \theta_{p+q})(\theta_k - \theta_{k+q})}{\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+q} + i\delta} \tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon_p - \epsilon_k) \times \quad (46)$$

$$\times \left(\frac{1}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+q} + i\delta} \right).$$

Полученное выражение, естественно, справедливо лишь при малых частотах, что мы уже и предположили, когда пренебрегли зависимостью \tilde{W} от частоты ω в формуле (36). Так как $\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon_p - \epsilon_k)$ пропорционален $v(\vec{p} - \vec{k})$, то очевидно, что наибольший вклад в интеграл (44) дают векторы $\vec{p} \approx \vec{k}$. При этом частотная зависимость $\tilde{W}(\vec{p} - \vec{k}, \epsilon_p - \epsilon_k)$ становится действительно практически несущественной, и, учитывая, что $F(\vec{q}, \omega)$ при малых q пропорционально q^2 , выражение для $\tilde{W}(q)$ можно с хорошей точностью записать в виде

$$\tilde{W}(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_F^2 \lambda^2}, \quad (47)$$

где ввели функцию $\lambda^2 = \frac{4\pi e^2}{k_F^2} \Pi_0(0)$. Разлагая $\Pi_0(q)$ по степеням \tilde{W} и оставляя только линейный член, в пределе $q \rightarrow 0$ аналитически получаем

$$\lambda^2 = \frac{4\pi e^2}{k_F^2} \Pi_0(0) = \frac{4\alpha}{\pi} r_S \left(1 - \frac{2\alpha}{\pi} r_S \left(1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{\lambda^2}{4} \right) \ln \frac{4+\lambda^2}{\lambda^2} \right) \right), \quad (48)$$

что является условием для самосогласованного определения параметра экранирования λ^2 . Легко показать, что в предельных случаях малых и больших плотностей $\lambda^2 = \frac{4\alpha}{\pi} r_S$. В промежуточной области r_S это уравнение решалось численно. Результат показывает, что с хорошей точностью (лучше чем 5%), λ^2 совпадает со своим значением, полученным в приближении хаотических фаз:

$$\lambda^2 = \lambda_{RPA}^2 = \frac{4\alpha}{\pi} r_S. \quad (49)$$

Формула (46) позволяет вычислить $\tilde{F}(\vec{q}, \omega)$ во всем интервале значений волнового вектора. Шестикратный интеграл после ряда преобразований удается аналитически привести к двукратному, вычисление которого уже требует применения численных методов. Из предшествующего вывода уравнения (46) ясно, что наиболее достоверным можно считать случай $\omega \rightarrow 0$, который одновременно представляет и наибольший интерес.

В пределе малых и больших волновых векторов выражение для $\tilde{F}(\vec{q}, 0)$ довольно легко вычисляется аналитически. В результате имеем

$$\tilde{F}(\vec{q}, 0) = \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 \left(1 - \frac{\lambda^2}{4} \ln \frac{4+\lambda^2}{\lambda^2} \right); \quad (50)$$

$$\tilde{F}(\vec{q}, 0) = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{3} + \frac{3}{4} \lambda^2 - \lambda^3 \arctg \frac{2}{\lambda} - \frac{1}{8} \lambda^4 + \left(\frac{3}{8} \lambda^4 + \frac{\lambda^6}{36} \right) \ln \frac{4+\lambda^2}{\lambda^2} \right). \quad (51)$$

При этом $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{F}(\vec{q} \rightarrow \infty, 0) = \frac{1}{3}$, а $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \tilde{F}(\vec{q} \rightarrow \infty, 0) = \frac{1}{2}$. Наконец, вычислим также и предел больших частот:

$$\tilde{F}(\vec{q} \rightarrow 0, \omega) = \frac{3}{20} \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 \left(1 - \lambda^2 + \frac{1}{4} \lambda^2 (1 + \lambda^2) \ln \frac{4+\lambda^2}{\lambda^2} \right) = \frac{3}{20} \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 f(r_S). \quad (52)$$

При таком поведении поправки на локальное поле закон дисперсии плазмонов при малых волновых векторах дается выражением

$$\omega = \omega_{pl} + \frac{\hbar^2 q^2}{m} \cdot \frac{3\epsilon_F}{5\hbar \omega_{pl}} \left(1 - \frac{\alpha r_S}{3\pi} f(r_S) \right). \quad (53)$$

Отметим, что вывод закона дисперсии плазмонов из выражения (52) в рамках установленных ограничений, строго говоря, не совсем корректен, поскольку до сих пор в $\tilde{W}(\vec{q}, \omega)$ полагалось $\omega \rightarrow 0$.

Однако, полученное выражение охватывает имеющиеся экспериментальные результаты, хотя следует подчеркнуть, что существующие данные (см. [6]) имеют очень большой разброс и поэтому вполне удовлетворительно описываются практически любой зависящей от частоты поправкой на локальное поле. Следовательно, эксперимент не дает возможности проверить правильность поведения этой функции при $\omega \rightarrow \infty$.

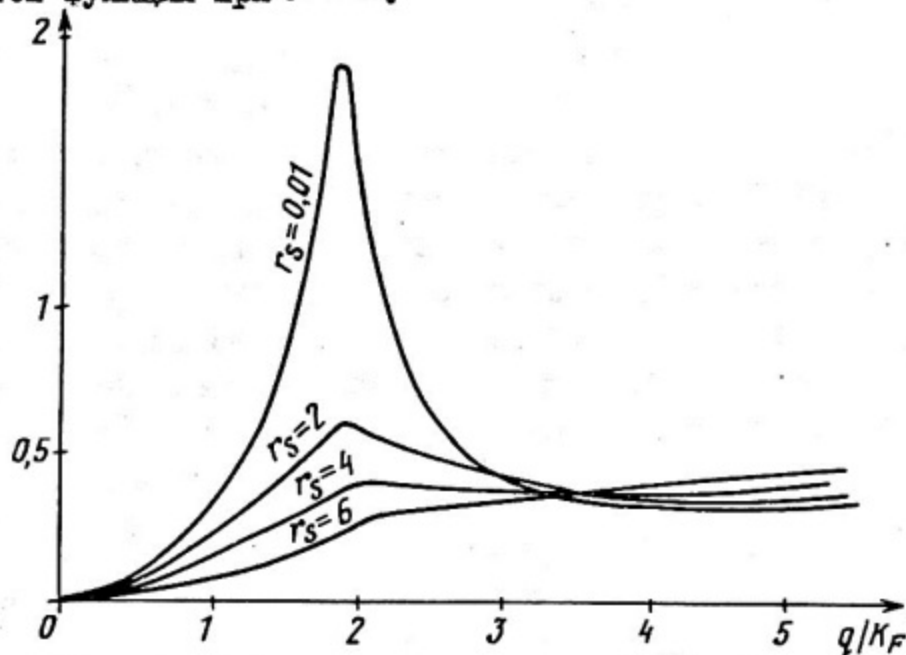


Рис. I

На рис. I приведены зависимости $\tilde{F}(q, 0)$ от волнового вектора для различных значений параметра r_s .

Отличительной чертой полученной поправки на локальное поле является ее сильная зависимость от электронной плотности, что является новым результатом в микроскопическом подходе. Следует отметить, что функция $\tilde{F}(\vec{q}, \omega)$ при замене эффективного межэлектронного потенциала $\tilde{W}(q)$ на неэкранированный кулоновский потенциал $v(\vec{q})$ в точности переходит в соответствующее выражение для поправки на локальное поле, которое было получено самыми различными методами и является наиболее "популярным" среди функций, определяемых в рамках микроскопического подхода [6, 9, 10]. Однако из настоящего рассмотрения становится ясно, что использование неэкранированного кулоновского потенциала в формуле (46) совместно с учетом лишь линейного по потенциалу приближения имеет смысл только при $r_s \gtrsim 2$ (см. оценку (42)).

Как видно из рис. I, резкий пик при $q \approx 2k_F$, характерный почти для всех типичных поправок на локальное поле (см. обзор

[6]), проявляется в $\tilde{F}(\vec{q}, 0)$ только при малых r_s ; в области же $r_s \sim 6$ пик практически полностью исчезает. Как следствие, это приводит и к отсутствию пиков в поведении статического структурного фактора $S(\vec{q})$, характерных для систем с ближайшим порядком. Таким образом, в рамках данного подхода электронная система остается результативно "хорошим" газом при всех реальных плотностях. На это же указывает и поведение функции в пределе малых q . Как известно [18], $\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(\vec{q}, 0)$ непосредственно связан со сжимаемостью взаимодействующего электронного газа

$$\epsilon_{q \rightarrow 0}(q, 0) = 1 + \left(\frac{\lambda_{TF}}{q}\right)^2 \frac{\alpha}{\alpha_f}, \quad (54)$$

где $\lambda_{TF}^2 = \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F}$, а $\alpha_f = \frac{3}{2n\epsilon_F}$ — сжимаемость свободных электронов. Сравнение (50) и (44) приводит к выражению

$$\frac{\alpha_f}{\alpha} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi} \left(1 - \frac{\lambda^2}{4} \ln \frac{4 + \lambda^2}{\lambda^2}\right), \quad (55)$$

где $\lambda^2 = \frac{4\alpha}{\pi} r_s$ в соответствии с (49).

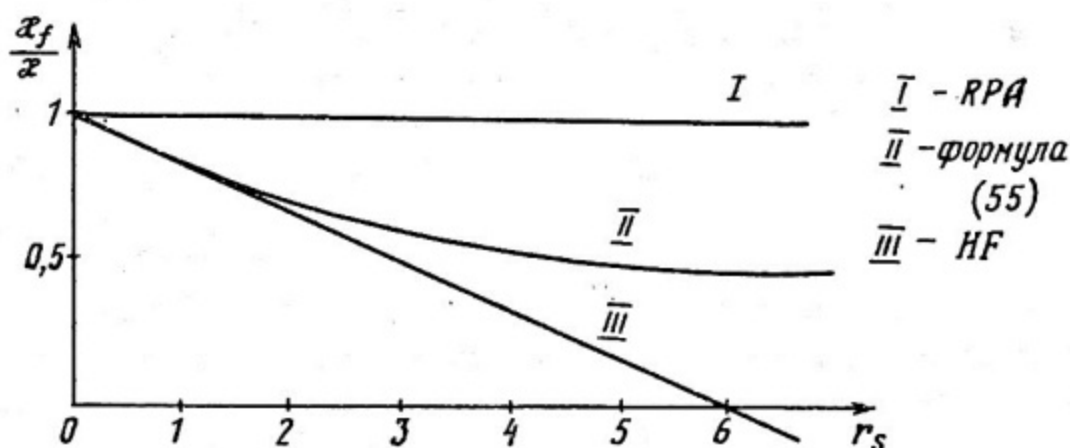


Рис. 2

Функция, стоящая в правой части выражения (55), не обращается в нуль ни при каких значениях r_s , и, следовательно, сжимаемость взаимодействующего электронного газа всегда остается положительной, плавно меняясь от α_f при малых r_s до $2\alpha_f$ при $r_s \gg 1$. На рис. 2 показано поведение сжимаемости при различных r_s . Для сравнения приводятся аналогичные зависимости в приближениях хаотических фаз и Хартри-Фока.

Теперь учтем [17], что сжимаемость также связана с энергией основного состояния взаимодействующего электронного газа следующим соотношением:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial r_s} = \frac{1}{6} \alpha^2 r_s^2 \left[r_s^2 \frac{d^2 \epsilon(r_s)}{dr_s^2} - 2r_s \frac{d\epsilon(r_s)}{dr_s} \right], \quad (56)$$

где $\epsilon(r_s)$ – энергия основного состояния электронного газа, выраженная в ридбергах. Отсутствие нулей у функции (55) фактически означает, что отвечающая ей зависимость энергии электронной системы от плотности не имеет экстремумов и точек перегиба. Графически зависимость энергии от r_s , отвечающая полученному выражению для сжимаемости, приведена на рис. 3.

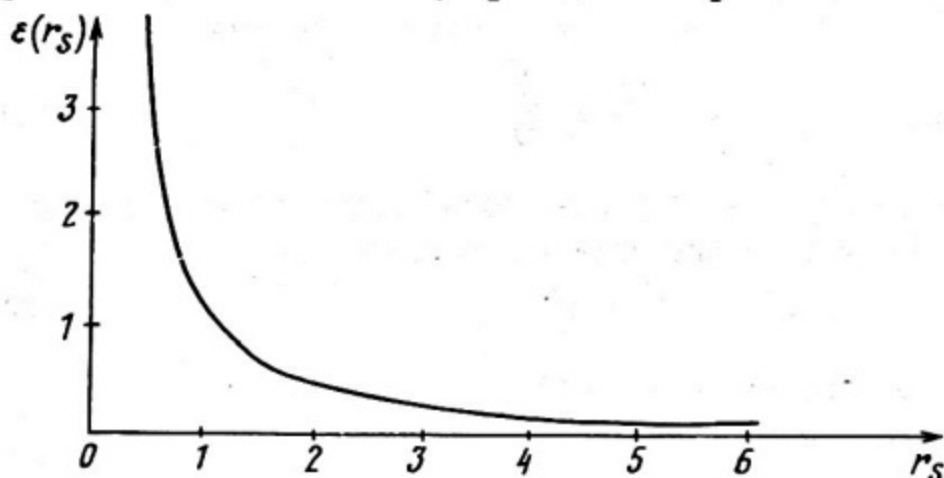


Рис. 3

Видно, что энергия остается положительной для всех r_s , причем асимптотика при $r_s \gg 1$ определяется выражением

$$\epsilon(r_s) \underset{r_s \gg 1}{\approx} \frac{1,1}{r_s^2}. \quad (57)$$

Такое поведение означает, что за счет многочастичных корреляционных эффектов происходит компенсация отрицательного вклада обменной энергии. Таким образом, вклад корреляционной энергии при значениях r_s , отвечающих реальным металлам, нельзя считать малым, и его необходимо учитывать при рассмотрении свойств этих металлов. Следует также отметить, что предел $\epsilon(q, 0)$ играет важную роль в определении экранирующих свойств электронов, в частности, прямо касается вопроса о законе дисперсии фононов в металлах. Экранирование внешнего заряда приводит к образованию вокруг него электронной "шубы", которую можно приблизительно характеризовать радиусом экранирования $r_{\text{экр}}$. (Амплитуды фриделевских осцилляций малы по сравнению с изменением плотности вблизи заряда.) Радиус экранирования прямо связан с поведением $\epsilon(q, 0)$ при малых q и выражается соотношением $r_{\text{экр}} \approx \mu^{-1}$, где μ входит в

$\varepsilon(q, 0) = 1 + \mu^2 \cdot q^{-2}$. В рамках RPA $r_{\text{экр}} \sim a_0 \sqrt{r_s}$, учет только обменных поправок приводит к $\tilde{F}(q, 0) = \frac{1}{4} (q/k_F)^2$ и $r_{\text{экр}} \sim a_0 \sqrt{r_s (1 - \frac{\alpha}{8} r_s)}$. Из этого выражения следует, что с увеличением r_s радиус экранирования сначала растёт, затем начинает резко уменьшаться и при $r_s \sim 6$ становится равным нулю. Такое поведение означает нефизический наплыв электронов на заряд при плотностях, отвечающих реальным металлам, и, связано, по-видимому, с неучетом кулоновского отталкивания между электронами. Формула (55) даёт, на наш взгляд, более правильное поведение: $r_{\text{экр}}$ с ростом r_s растёт, хотя и более медленно, чем в RPA. Наконец, выражение (51) совместно с соотношением Кимбола-Никлассона [19]

$$g(0) = 1 - \frac{3}{2} \tilde{F}(q \rightarrow \infty, 0) \quad (58)$$

даёт правильное качественное поведение функции парных корреляций $g(r)$ в нуле. Действительно, в нашем случае $g(0) = \frac{1}{2}$ при $r_s \ll 1$ и плавно уменьшается до значения $g(0) = \frac{1}{4}$ с ростом r_s .

Таким образом, полученная поправка на локальное поле (43) хорошо согласуется с уже существующими функциями и обладает рядом новых интересных свойств.

В целом характеризуя предложенный подход к изучению системы взаимодействующих электронов на нейтрализующем пассивном фоне, можно сказать, что он позволяет последовательно исследовать свойства такой системы и путем четких, физически ясных приближений подойти к ответу на вопрос о перенормировке вершины электрон-электронного взаимодействия за счет многочастичных корреляционных и обменных эффектов.

4. Влияние ионных колебаний на свойства электронной подсистемы

Полученные в предыдущем разделе результаты касались свойств взаимодействующего электронного газа на фоне пассивного нейтрализующего положительного фона. Такая система является простейшей моделью металла, и в ней в принципе не учитываются возможные ионные степени свободы. Часто считается, что наличие колеблющихся ионов слабо сказывается на поведении электронов, в частности, на их взаимодействии между собой. Для исследования проблемы взаимного влияния электронной и ионной подсистем вос-

пользуемся развитым в предыдущих разделах подходом, который позволяет самосогласованно рассматривать электрон-ионную систему в целом. По-прежнему ограничимся моделью "желе", т.е. будем предполагать пространственную однородность системы. Однако теперь будем считать, что ионная подсистема может совершать малые колебания относительно равновесной плотности. Кроме того, допустим, что затравочные ион-ионное $V_{ii}(q)$ и электрон-ионное $V_{ei}(q)$ взаимодействия являются чисто кулоновскими, т.е.

$$V_{ii}(q) = -V_{ei}(q) = \frac{4\pi e^2}{\Omega_0 q^2} \quad (59)$$

В отсутствие электрон-ионного взаимодействия ионная подсистема обладает собственной ветвью продольных колебаний, характеризующихся плазменной ионной частотой

$$\omega_i^2(q) = \omega_{pi}^2 = \frac{4\pi e^2 n_i}{M} \quad (60)$$

где n_i — концентрация; M — масса ионов.

Для дальнейшего анализа обратимся, во-первых, к уравнению для функции Грина ионных смещений. При Фурье-преобразовании с учетом (59) оно дает функцию

$$D(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{M} (\omega^2 - \frac{\omega_{pi}^2}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} + i\delta)^{-1} \quad (61)$$

Во-вторых, рассмотрим уравнение для эффективного межэлектронного потенциала W (28), в которое наряду с прямым экранированным электрон-электронным взаимодействием входит еще и косвенное взаимодействие типа "электрон-ион-электрон":

$$W(\vec{q}, \omega) = \frac{V_{ee}(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} - \vec{q}^2 \frac{V_{ei}(\vec{q})}{\epsilon^2(\vec{q}, \omega)} D(\vec{q}, \omega) \quad (62)$$

Вернемся к уравнениям (38), (45), (46), определяющим в итоге вершину электрон-электронного взаимодействия, записанную через поправку на локальное поле. При этом мы с самого начала будем интересоваться лишь областью $q \ll k_F$ и $\omega \rightarrow 0$, где q и ω — внешние аргументы вершинной функции. В формуле типа (46) значение перенормированного потенциала $\tilde{W}(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k)$ определится с учетом (62) следующим образом

$$\tilde{W}(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k) = \frac{v(\vec{p}-\vec{k})}{\tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k)} - (\vec{p}-\vec{k})^2 D(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k) \frac{V_{ei}(\vec{p}-\vec{k})}{\tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k) \epsilon(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p-\epsilon_k)} \quad (63)$$

Теперь рассмотрим уравнение (46) с потенциалом (63) в пределе $\omega = 0$; $q \rightarrow 0$. Разность ступенчатых функций $\theta_p - \theta_{p+q}$ переходит в $\frac{\vec{p}\vec{q}}{p^2} \delta(p-k_F)$ и аналогично $\theta_k - \theta_{k+q} = \frac{\vec{k}\vec{q}}{k^2} \delta(k-k_F)$. Таким образом, вклад в вершину при малых q дают только электроны с поверхности Ферми, при этом $\epsilon_p = \epsilon_k = \epsilon_F$. Тогда из (63) получаем

$$\tilde{W}(\vec{p}-\vec{k}, \epsilon_p - \epsilon_k) = \frac{V_{ee}(\vec{p}-\vec{k})}{\tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, 0)} - \frac{(\vec{p}-\vec{k})^2}{M\omega_{pi}^2} \cdot \frac{V_{ei}^2(\vec{p}-\vec{k})}{\tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, 0)} \quad (64)$$

Подставляя определение затравочных потенциалов (59) в это выражение, имеем

$$\tilde{W}(\vec{p}-\vec{k}, 0) = \frac{4\pi e^2}{\Omega_0(\vec{p}-\vec{k})^2 \tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, 0)} - \frac{(\vec{p}-\vec{k})^2}{4\pi e^2} \Omega_0 \left[\frac{4\pi e^2}{\Omega_0(\vec{p}-\vec{k})^2} \right]^2 \frac{1}{\tilde{\epsilon}(\vec{p}-\vec{k}, 0)} \equiv 0, \quad (65)$$

причем это верно во всей области $0 \leq |\vec{p}-\vec{k}| \leq 2k_F$. Это означает, что вклад косвенного притяжения между электронами через ионы в точности сокращается с вкладом прямого кулоновского отталкивания в области значений $\omega = 0$ и $q \rightarrow 0$. Обращаясь к формуле (46) для поправки на локальное поле $\tilde{F}(\vec{q}, \omega)$, получаем, что с точностью до членов порядка q^2 эта функция равна нулю; при этом вершина электрон-электронного взаимодействия совпадает с нулевой вершиной

$$\Gamma(q, 0) = \Gamma_0(q, 0) = 1. \quad (66)$$

Подчеркнем, что это равенство остается справедливым во всей области изменения электронной плотности. Отсюда следует очень важный вывод: колебания ионов около положений равновесия оказывают весьма существенное влияние на свойства электронной подсистемы. В частности, экранирующие свойства электронного газа при $q \rightarrow 0$ хорошо описываются известным выражением для диэлектрической проницаемости в рамках RPA, а корреляционные и обменные эффекты компенсируются подстраивающимся положительным фоном, не давая тем самым вклада в диэлектрическую проницаемость системы. Отметим тот факт, что данный эффект не зависит от массы иона. Величина этой массы накладывает лишь ограничение на пределы области, где волновой вектор можно считать малым, и где эффект компенсации будет существенным. Действительно, легко оценить характерные значения вектора q , до которых будет проявляться данный эффект. Из уравнения (63) ясно, что условием компенсации является фактически требование

$$M(\epsilon_p - \epsilon_k)^2 \ll M \frac{\omega_{pi}^2}{\epsilon(\vec{p} - \vec{k}, 0)} \quad (67)$$

При этом наличие разностей $n_p - n_{p+q}$ и $n_k - n_{k+q}$ в уравнении (44), приводит к тому, что характерные значения

$$\epsilon_p - \epsilon_k \sim \frac{(p_F + q)^2}{2m} - \frac{(p_F - q)^2}{2m} = \frac{2p_F q}{m},$$

характерные $|\vec{p} - \vec{k}| \sim k_F$. Подставляя эти значения в соотношение (67) получаем условие

$$q \ll \sqrt{\frac{m}{M}} k_F \quad (68)$$

Из этой оценки следует, что данный эффект, определяемый электронами с характерными расстояниями друг относительно друга $r \sim \sqrt{\frac{M}{m}} k_F^{-1}$, в значительной степени влияет на свойства длинноволновых возбуждений, в частности, акустических фононов.

Заметим теперь, что при больших значениях волновых векторов, т.е. на малых расстояниях от возмущающего заряда, значение потенциала \tilde{W} (63) отнюдь не обращается в нуль, так как теперь $\epsilon_p - \epsilon_k \sim \epsilon_F$ и в результате вклад взаимодействия типа "электрон-ион-электрон" оказывается прямо пропорциональным параметру $\frac{m}{M}$, и поэтому им можно пренебречь по сравнению с прямым электрон-электронным взаимодействием. Следовательно, в этом случае многочастичные обменные и корреляционные эффекты будут отчетливо проявляться.

Возможно, что полученный результат, доказывающий квазисвободу электронов на больших расстояниях друг от друга, является основанием того, что большое число физических явлений в простых металлах хорошо описываются моделью свободных электронов, несмотря на сильное взаимодействие электронов между собой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе метода функций Грина и метода функциональных производных [14] построена формально замкнутая система уравнений, самосогласованным образом описывающая электрон-ионную систему простого металла. Наибольший интерес представляет нелинейное интегральное уравнение для электрон-электронной вершины (22), последовательно учитывающее обменные и кор-

реляционные эффекты. В модели с неподвижным положительным фоном исследован эффективный потенциал взаимодействия между электронами. Эта величина определяется экранированным кулоновским взаимодействием, причем параметр экранирования с большой точностью (лучше 5%) совпадает со своим значением, полученным в приближении хаотических фаз. Показано, что эффективный потенциал взаимодействия остается формально малым для всех значений плотности, отвечающих реальным металлам. В результате физически ясных приближений получается выражение для вершины электрон-электронного взаимодействия, которое представляется в форме функции поправки на локальное поле, входящей в диэлектрическую проницаемость взаимодействующего электронного газа. Эта функция хорошо согласуется при малых r_s с одной из наиболее "популярных" поправок на локальное поле [6], и, кроме того, обладает рядом новых интересных свойств. Значение этой функции в пределе малых и больших волновых векторов и частот получены аналитически. Для случая $\omega = 0$ и произвольных волновых векторов результат получен численными методами. Отличительными особенностями являются сильная зависимость поправки на локальное поле от параметра плотности, отсутствие нефизических особенностей в поведении сжимаемости и правильное качественное поведение соответствующей функции парных корреляций в нуле. В рамках разработанного подхода непосредственно видны также пути возможного уточнения полученных результатов. В модели "желе" на однородном фоне положительно заряженных ионов, обладающих собственной продольной ветвью плазменных колебаний, рассчитано влияние косвенного взаимодействия типа "электрон-ион-электрон" на свойства электронов. Показано, что в пределе значений $\omega \rightarrow 0$, $q \rightarrow 0$ вклад экранированного кулоновского отталкивания полностью компенсируется взаимодействием электронов через ионы. При этом вершина межэлектронного взаимодействия независимо от плотности системы оказывается равной единице. Это означает, что взаимодействующие электроны на фоне подвижных ионов при обмене малыми импульсами ведут себя практически как свободные, причем этот эффект не зависит от массы иона. Данный результат, возможно, дополнительно объясняет тот факт, что множество физических явлений в простых металлах достаточно хорошо описываются моделью квазисвободных электронов.

Список литературы

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. - М.: Мир, 1968.
2. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. - М.: Мир, 1973.
3. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. Фононы в непереходных металлах. - УФН, 1974, т. II2, с. 369.
4. Toigo F., Woodruff T.O. Calculation of the Dielectric Function for a Degenerate Electron Gas with Interaction. - *Phys. Rev. B*, 1970, v. 2, N 10, p. 3958-3966.
5. Yashishta P., Singwi K.S. Electron Correlations at Metallic Densities. - *Phys. Rev. B*, 1972, v. 6, N 3, p. 875-887.
6. Горобченко В.Д., Максимов Е.Г. Диэлектрическая проницаемость взаимодействующего электронного газа. - УФН, 1980, т. I30, № I, с. 65 - III.
7. Горобченко В.Д. Новый подход к теории диэлектрической проницаемости системы взаимодействующих электронов. - ЖЭТФ, 1979, т. 77, № 3, с. II97 - I206.
8. Горобченко В.Д., Кон В.Г. Самосогласованный учет обменно-корреляционных эффектов в электрическом газе. - ЖЭТФ, 1981, т. 80, № 2, с. 754 - 766.
9. Devreese J.T., Brosens F., Lemmens L.F. Dielectric function of the electron gas with dynamical-exchange decoupling. I. Analytical treatment. - *Phys. Rev. B*, 1980, v. 21, N 4, p. 1349-1362.
10. Devreese J.T., Brosens F., Lemmens L.P. Dielectric function of the electron gas with dynamical-exchange decoupling. II. Discussion and results. - *Phys. Rev. B*, 1980, v. 21, N 4, p. 1362-1379.
11. Utsumi K., Ichimaru S. Dielectric formulation of strongly coupled electron liquid at metallic densities. Longitudinal response. - *Phys. Rev. B*, 1980, v. 22, N 4, p. 1522-1533.
12. Utsumi K., Ichimaru S. Dielectric formulation of strongly coupled electron liquid at metallic densities. II. Exchange effects and static properties. - *Phys. Rev. B*, 1980, v. 22, N 11, p. 5203-5212.
13. Utsumi K., Ichimaru S. Dielectric formulation of strongly coupled electron liquid at metallic densities. III. Dynamic structure factors. - *Phys. Rev. B*, 1981, v. 23, N 7, p. 3291-3300.

14. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. - М.: ГИФМЛ, 1961.

15. Максимов Е.Г. Самосогласованное описание электрон-фононной системы в металлах и проблема устойчивости решетки. - ЖЭТФ, 1975, т. 69, № 6, с. 2236 - 2248.

16. Gillis N. S. *Self-Consistent Phonons and Coupled Electron Phonon System.* - *Phys. Rev. B*, 1970, v.1, N4, p. 1872-1876.

17. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. - М.: Мир, 1967.

18. Nozieres P., Luttinger O.M. *Derivation of the Landau Theory of Fermi Liquids.* - *Phys. Rev.*, 1962, v.127, N5, p. 1423-1440.

19. Niklasson G. *Dielectric function of the uniform electron gas for large frequencies or wave vectors.* - *Phys. Rev. B*, 1974, v.10, N8, p. 3052-3061.

Оглавление

Введение.....	3
I. Самосогласованные уравнения для электрон-ионной системы металла.....	4
2. Исследование общего уравнения для вершинной функции....	9
3. Свойства взаимодействующего электронного газа.....	12
4. Влияние ионных колебаний на свойства электронной подсистемы.....	21
Заключение.....	24
Список литературы.....	26

Сергей Владимирович Ивлиев
Виктор Николаевич Собакин

Обменные и корреляционные эффекты
во взаимодействующем электронном
газе простых металлов

Рукопись поступила в издательский отдел 22/II-85 г.

Редактор Н.Н.Поспелова
Технический редактор З.И. Хазова
Корректор Е.В.Кречкова

Л.-103952 Подписано в печать 7/VI-85 г. Формат 60x84 I/I6
Объем 1,75 п.л. Уч.-изд.л. 1,5 Тираж 150 экз. Цена 10 коп.
Изд. № 008-85 Заказ 1091

Типография МИФИ, Каширское шоссе, д. 31