

Это взаимодействие проявляется в притяжении, которое обратно пропорционально седьмой степени расстояния между двумя осцилляторами.

Поляризуемость осциллятора, по определению поляризуемости (см. гл. 13), равна отношению

$$\alpha \equiv \frac{\text{электрический дипольный момент}}{\text{напряженность электрического поля}} = \frac{e^2}{\beta}. \quad (\text{B.10})$$

Итак, для ΔU имеем:

$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{\alpha^2}{2R^6} = -\frac{C}{R^6}, \quad (\text{B.11})$$

где $C \equiv \hbar\omega_0\alpha^2$. Это и есть обсуждавшееся в гл. 3 *ван-дер-ваальсово взаимодействие* (3.3). Это взаимодействие относится к числу квантовых взаимодействий, поскольку $\Delta U \rightarrow 0$ при $\hbar \rightarrow 0$. Резюмируя, можно сказать, что энергия нулевых колебаний системы уменьшается за счет диполь-дипольного взаимодействия $\mathcal{H}_1 = -2e^2x_1x_2/R^3$ (B.3), хотя дипольный момент $-ex_1$, усредненный по изолированному атому, равен нулю.

Ван-дер-Ваальсово взаимодействие приводит к притяжению даже между параллельными пластинками плоского конденсатора. Весьма простая и изящная теория для этой геометрии была предложена Казимиром [3]. Непосредственные измерения взаимодействия между параллельными пластинками были выполнены Б. Н. Дерягиным [4].

Расчет ван-дер-ваальсовых сил между двумя атомами водорода дан в курсе Полинга и Уилсона [5]. Эффекты запаздывания изменяют форму взаимодействия на очень больших расстояниях; соответствующие поправки были вычислены Казимиром и Полдером [6].

С. СИНГУЛЯРНОСТИ ВАН ХОВА В ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Для функции плотности состояний было получено выражение (6.34):

$$\mathcal{D}(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int \frac{dS_{\omega}}{v_g}. \quad (\text{C.1})$$

Из этого выражения можно видеть, что подинтегральная функция имеет сингулярность (особенность) там, где обращается в нуль групповая скорость $v_g \equiv |\nabla_{\mathbf{K}}\omega|$, т. е. там, где зависимость частоты ω от волнового вектора \mathbf{K} имеет локальный плоский участок. Точки в \mathbf{K} -пространстве, для которых это имеет место, называются *критическими точками*. Критическая точка может отвечать максимуму или минимуму функции, а также быть седловой точкой. Мы последовательно рассмотрим поведение функции плотности состояний в каждом из этих случаев. Приводимые ниже соображения относятся к любому дисперсионному закону (т. е. зависимости ω от \mathbf{K}) и не ограничены случаем фононов. Они, следовательно, применимы к электронным энергетическим зонам (гл. 9) и к спектрам спиновых волн (гл. 16). В случае седловых точек ход изменения функции плотности состояний в зависимости от частоты меняется особенно резко, как можно видеть из графиков на рис. С.1, а и г.

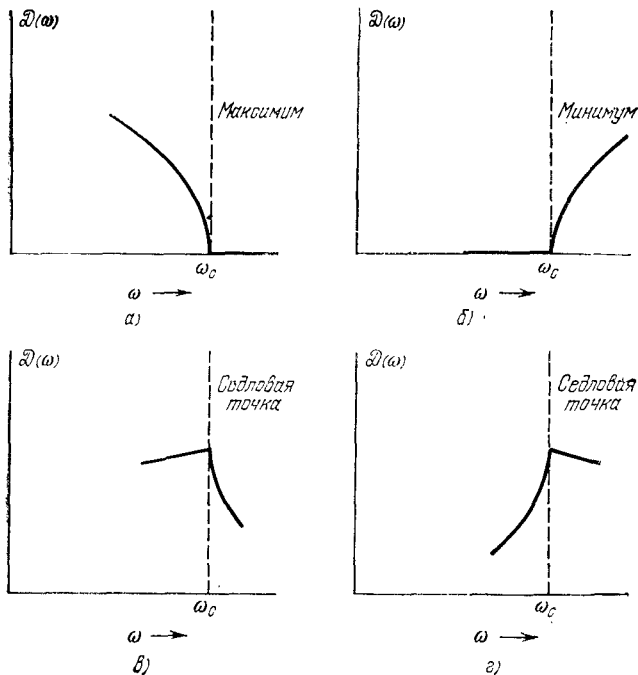


Рис. С.1. Разрывы функции плотности состояний $\mathcal{D}(\omega)$ вблизи критических точек (максимум, минимум и два типа седловых точек). Здесь кривые проведены лишь для вкладов в $\mathcal{D}(\omega)$ от локальных областей поверхности частот вблизи критических точек. (Эти вклады следует, вообще говоря, добавлять к зависимости $\mathcal{D}(\omega)$ общего вида, определяемой *всей* поверхностью частот $\omega(\mathbf{k})$.)

Пусть \mathbf{K}_c является критической точкой. Введем разность $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{K}_c$ и разложим функцию $\omega(\mathbf{q})$ в ряд вблизи критической точки. Ограничиваясь в разложении первыми наиболее важными членами, получим:

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_c + a_1 q_1^2 + a_2 q_2^2 + a_3 q_3^2 + \dots \quad (\text{С.2})$$

Здесь q_1, q_2, q_3 соответствуют локальным главным осям поверхности постоянной частоты, ω_c — частота в критической точке (при $\mathbf{K} = \mathbf{K}_c$).

а) *Случай максимума.* Предположим для простоты, что локальная поверхность постоянной частоты имеет форму сферы; тогда

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_c - a q^2. \quad (\text{С.3})$$

Для объема сферы радиуса q в фурье-пространстве имеем:

$$\Omega = \frac{4\pi}{3} q^3 = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\omega_c - \omega}{a} \right)^{3/2}.$$

Тогда для функции плотности состояний вблизи ω_c , но при $\omega < \omega_c$ получим:

$$\mathcal{D}(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left| \frac{d\Omega}{d\omega} \right| = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{2\pi}{a^{3/2}} (\omega_c - \omega)^{1/2}, \quad (\text{С.4})$$

а для значений $\omega > \omega_c$

$$\mathcal{D}(\omega) = 0. \quad (\text{C.5})$$

Это определение отражает вклад в плотность состояний того участка частотной поверхности вблизи ω_c , который отвечает значениям $\omega > \omega_c$. Зависимость $\mathcal{D}(\omega)$ в этом случае изображена графически на рис. С.1, а.

б) *Минимум*. Предположим, что

$$\omega(q) = \omega_c + a q^2. \quad (\text{C.6})$$

Из тех же соображений, что и выше, получим:

$$\mathcal{D}(\omega) = 0 \quad \text{для} \quad \omega < \omega_c, \quad (\text{C.7})$$

$$\mathcal{D}(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{2\pi}{a^{1/2}} (\omega - \omega_c)^{1/2} \quad \text{для} \quad \omega > \omega_c. \quad (\text{C.8})$$

График $\mathcal{D}(\omega)$ для этого случая приведен на рис. С.1, б.

в) *Седловая точка*. Предположим, что

$$\omega(q) = \omega_c - a(q_1^2 + q_2^2 - q_3^2). \quad (\text{C.9})$$

Чтобы найти плотность состояний для $\omega < \omega_c$, произведем преобразование координат:

$$\begin{aligned} q_1 a^{1/2} &= (\omega_c - \omega)^{1/2} \operatorname{ch} \xi \cos \varphi, \\ q_2 a^{1/2} &= (\omega_c - \omega)^{1/2} \operatorname{ch} \xi \sin \varphi, \\ q_3 a^{1/2} &= (\omega_c - \omega)^{1/2} \operatorname{sh} \xi. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Подставив (С.10) в (С.9), можно убедиться в том, что (С.9) при этом выполняется; при подстановке используются известные соотношения:

$$\operatorname{ch}^2 \xi - \operatorname{sh}^2 \xi = 1, \quad \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1. \quad (\text{C.11})$$

Для элемента объема в фурье-пространстве имеем:

$$dq_1 dq_2 dq_3 = \left| J \begin{pmatrix} q_1, q_2, q_3 \\ \omega, \xi, \varphi \end{pmatrix} \right| d\omega d\xi d\varphi, \quad (\text{C.12})$$

где J — якобиан преобразования:

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial \omega} & \frac{\partial q_2}{\partial \omega} & \frac{\partial q_3}{\partial \omega} \\ \frac{\partial q_1}{\partial \xi} & \frac{\partial q_2}{\partial \xi} & \frac{\partial q_3}{\partial \xi} \\ \frac{\partial q_1}{\partial \varphi} & \frac{\partial q_2}{\partial \varphi} & \frac{\partial q_3}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \frac{(\omega_c - \omega)^{1/2}}{2a^{3/2}} \operatorname{ch} \xi. \quad (\text{C.13})$$

Якобиан раскрывается прямым расчетом, хотя это и несколько утомительно.

В результате для функции плотности состояний (все еще для $\omega < \omega_c$) получаем:

$$\mathcal{D}(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\omega \int J d\xi \int d\varphi = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\omega \frac{(\omega_c - \omega)^{1/2}}{2a^{3/2}} \int d(\operatorname{sh} \xi) \int d\varphi, \quad (\text{C.14})$$

где

$$d\omega \int J d\xi \int d\varphi$$

— есть объем слоя в фурье-пространстве, ограниченный поверхностями постоянной частоты между ω и $\omega + d\omega$ [здесь использовано соотношение: $(\text{ch } \xi) d\xi = d(\text{sh } \xi)$]. Интеграл по $d\varphi$ равен 2π . Мы ограничили интересующую нас область внутренней частью фиксированной сферы радиуса Q вокруг критической точки K_c . Таким образом, полученное выражение для $\mathcal{D}(\omega)$ описывает лишь вклад от внутренней части этой сферы.

Верхний предел для $\text{sh } \xi$ находится из условия:

$$Q^2 = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = \frac{\omega_c - \omega}{a} (\text{ch}^2 \xi + \text{sh}^2 \xi) = \frac{\omega_c - \omega}{a} (1 + 2 \text{sh}^2 \xi); \quad (\text{C.15})$$

отсюда получим:

$$\int d(\text{sh } \xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{aQ^2}{\omega_c - \omega} - 1 \right)^{1/2}; \quad (\text{C.16})$$

следовательно,

$$\mathcal{D}(\omega) \sim (Q^2 + \omega - \omega_c)^{1/2} \quad \text{для } \omega < \omega_c. \quad (\text{C.17})$$

Для области значений $\omega - \omega_c \ll Q$, разложив (C.17) в ряд, получим:

$$\mathcal{D}(\omega) \sim Q - \frac{\omega_c - \omega}{2Q}. \quad (\text{C.17a})$$

Чтобы найти плотность состояний для $\omega > \omega_c$, воспользуемся другим преобразованием координат, а именно:

$$\begin{aligned} q_1 a^{1/2} &= (\omega - \omega_c)^{1/2} \text{sh } \xi \cos \varphi, \\ q_2 a^{1/2} &= (\omega - \omega_c)^{1/2} \text{sh } \xi \sin \varphi, \\ q_3 a^{1/2} &= (\omega - \omega_c)^{1/2} \text{ch } \xi. \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Элемент объема

$$dq_1 dq_2 dq_3 = \frac{(\omega - \omega_c)^{1/2}}{2a^{3/2}} d\omega d\xi d\varphi; \quad (\text{C.19})$$

пределы для $\text{ch } \xi$ даются неравенством

$$1 \leq \text{ch } \xi \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{aQ^2}{\omega_c - \omega} + 1 \right)^{1/2}. \quad (\text{C.20})$$

Следовательно, для функции плотности состояний получим:

$$\mathcal{D}(\omega) \sim \frac{1}{2} (Q^2 + \omega - \omega_c)^{1/2} - (\omega - \omega_c)^{1/2} \quad \text{для } \omega > \omega_c. \quad (\text{C.21})$$

Производная $\mathcal{D}(\omega)$ по ω при $\omega = \omega_c$ обращается в бесконечность; главный член производной

$$\frac{d\mathcal{D}(\omega)}{d\omega} \sim - \frac{1}{2(\omega - \omega_c)^{1/2}} \quad (\text{C.22})$$

стремится к $-\infty$ при $\omega \rightarrow \omega_c$ в согласии со сказанным выше.

Поведение функции $\mathcal{D}(\omega)$ вблизи седловой точки в случае (C.9) изображено графически на рис. C.1, а; поведение вблизи седловой точки в случае

$$\omega(q) = \omega_c - a(q_1^2 - q_2^2 - q_3^2) \quad (\text{C.23})$$

показано на рис. C.1, б, представляющем собой обращение графика рис. C.1, а.

Теорема ван Хова. Ван Хов¹⁾ топологическими методами показал, что седловая точка каждого типа [выше были рассмотрены лишь два частных случая — (С.9) и (С.23)] будет встречаться на каждом «листе» дисперсионного закона $\omega(\mathbf{k})$ по крайней мере 3 раза. Дисперсионные кривые для фононов в алюминии, приведенные на рис. 6.12, позволяют видеть многие из ожидаемых типов особенностей.

Д. ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ОТ ВОЛНОВОГО ВЕКТОРА ДЛЯ ФЕРМИ-ГАЗА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Диэлектрическая функция $\varepsilon(K, \omega)$, определяемая ниже, описывает важные свойства электронного газа. Чтобы найти диэлектрическую функцию, рассмотрим реакцию электронов на действие приложенного извне электростатического поля. Мы начнем рассмотрение с простого случая однородного электронного газа с концентрацией заряда $-n_0e$ при наличии фона положительных зарядов с концентрацией $+n_0e$. Пусть фон положительных зарядов механически деформирован и его изменение в пространстве описывается синусоидальным законом:

$$\rho^+(x) = n_0e + \rho_K^{\text{ext}} \sin Kx. \quad (\text{D.1})$$

Член $\rho_K^{\text{ext}} \sin Kx$ приводит к тому, что электростатическое поле фактически возрастет. Это поле мы и будем называть внешним полем, действующим на электронный газ.

Электростатический потенциал φ , создаваемый распределением заряда, можно определить из уравнения Пуассона: $\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho$. Полагая

$$\varphi = \varphi_K^{\text{ext}} \sin Kx, \quad \rho = \rho_K^{\text{ext}} \sin Kx, \quad (\text{D.2})$$

из уравнения Пуассона получим:

$$K^2 \varphi_K^{\text{ext}} = 4\pi \rho_K^{\text{ext}}. \quad (\text{D.3})$$

Электронный газ будет подвергаться комбинированному воздействию, во-первых, со стороны электростатического потенциала φ_K^{ext} распределения положительных зарядов, и, во-вторых, со стороны пока неизвестного индуцированного электростатического потенциала

$$\varphi_K^{\text{ind}} \sin Kx,$$

вызванного «деформацией» распределения заряда самого электронного газа. Для плотности электронного заряда имеем:

$$\rho^-(x) = -n_0e + \rho_K^{\text{ind}} \sin Kx, \quad (\text{D.4})$$

где ρ_K^{ind} — амплитуда изменения плотности заряда, индуцированного в электронном газе. Мы хотим найти ρ_K^{ind} , выраженное через ρ_K^{ext} .

¹⁾ Эта теорема приведена в работе ван Хова [7]. Индекс критической точки означает число положительных знаков квадратичной формы ω вблизи критической точки. В случае трех измерений каждая ветвь $\omega(\mathbf{q})$ имеет по крайней мере один максимум, три седловых точки каждого типа (индексы 1 и 2) и один минимум. Эти результаты являются следствием установленной в топологии теоремы Морса.