

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.

Амплитуду полного электростатического потенциала можно записать в виде суммы потенциалов, создаваемых распределением положительных и отрицательных зарядов:

$$\Phi_K = \Phi_K^{\text{ext}} + \Phi_K^{\text{ind}}. \quad (\text{D.5})$$

Здесь Φ_K^{ext} — потенциал, создаваемый фоном положительных зарядов, а Φ_K^{ind} — потенциал, обусловленный «деформацией» электронного газа. Потенциал Φ_K связан, очевидно, с изменением полной плотности заряда ρ_K , также представляющей собой сумму:

$$\rho_K = \rho_K^{\text{ext}} + \rho_K^{\text{ind}}. \quad (\text{D.6})$$

Потенциал Φ_K и плотность заряда ρ_K связаны между собой опять-таки уравнением Пуассона. Тем же путем, что и (D.3), получим:

$$K^2 \Phi_K = 4\pi \rho_K. \quad (\text{D.7})$$

Но «деформация» плотности электронного газа ρ_K^{ind} связана с полным статическим электрическим потенциалом Φ_K уравнением Томаса — Ферми ¹⁾ (8.21б):

$$-e [n(\mathbf{r}) - n_0] = \rho_K^{\text{ind}} \sin Kx = -\frac{3n_0 e^2}{2\varepsilon_F} \Phi_K \sin Kx, \quad (\text{D.8})$$

или

$$\Phi_K = -\frac{2\varepsilon_F}{3n_0 e^2} \rho_K^{\text{ind}}. \quad (\text{D.9})$$

Объединив (D.7) и (D.9), получим отношение изменения индуцированного заряда к полному изменению заряда:

$$\frac{\rho_K^{\text{ind}}}{\rho_K} = -\frac{6\pi n_0 e^2}{\varepsilon_F K^2} = -\frac{\lambda^2}{K^2}. \quad (\text{D.10})$$

Здесь введена величина постоянной экранирования $\lambda \equiv (6\pi n_0 e^2 / \varepsilon_F)^{1/2}$.

Диэлектрическая функция $\varepsilon(K, \omega)$ является мерой реакции электронного газа на действие внешнего электрического поля, характеризующегося волновым вектором K и частотой ω . Диэлектрическая функция определяется соотношением между амплитудой «внешней» плотности заряда ρ_K^{ext} и амплитудой Φ_K полного потенциала; это соотношение имеет следующий вид:

$$\boxed{K^2 \Phi_K = \frac{4\pi}{\varepsilon(K, \omega)} \rho_K^{\text{ext}},} \quad (\text{D.11})$$

где значения Φ_K и ρ_K^{ext} относятся к одной и той же частоте. Соотношение (D.11) имеет вид уравнения Пуассона (D.7), но вместо амплитуды полной плотности заряда в правой части стоит амплитуда «внешней» плотности заряда ρ_K^{ext} . Заметим, что при равенстве нулю функции $\varepsilon(K, \omega)$ потенциал Φ_K может оставаться конечным даже при отсутствии «внешнего» заряда. В этих

¹⁾ Использование уравнения Томаса — Ферми эквивалентно приближению, хорошо отвечающему случаю длинных волн ($K \rightarrow 0$) и нулевой частоте.

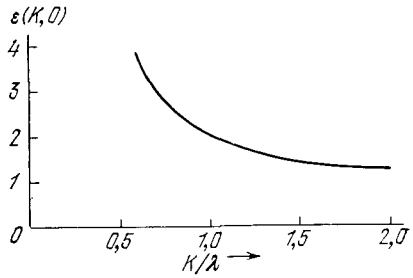


Рис. D.1. Зависимость статической диэлектрической функции ферми-газа свободных электронов (приближение Томаса — Ферми). По оси абсцисс отложено отношение K/λ .

условиях система будет находиться в состоянии свободных колебаний (т. е. без воздействия вынуждающей внешней силы).

Если взять отношение соответственно правых и левых частей (D.11) и (D.7), то получим выражение для $\epsilon(K, \omega)$ через амплитуды плотности зарядов:

$$\epsilon(K, \omega) = \frac{\rho_K^{\text{ext}}}{\rho_K} = 1 - \frac{\rho_K^{\text{ind}}}{\rho_K}. \quad (\text{D.12})$$

Используя (D.10), можно получить выражение для диэлектрической функции, соответствующее приближению, отвечающему уравнению Томаса — Ферми, а именно:

$$\epsilon(K, 0) = 1 + \frac{\lambda^2}{K^2}; \quad \lambda^2 \equiv \frac{6\pi n_0 e^2}{\epsilon_F}. \quad (\text{D.13})$$

Зависимость $\epsilon(K, 0)$ от K/λ показана на рис. D.1. В более точном приближении выражение для диэлектрической функции было получено Линдхардом¹⁾.

Сопоставление (D.7) и (D.11) позволяет получить еще одно выражение, определяющее диэлектрическую функцию, а именно:

$$\Phi_K = \Phi_K^{\text{ext}} / \epsilon(K, \omega); \quad (\text{D.14})$$

тем самым утверждается, что полный электростатический потенциал равен внешнему потенциалу, деленному на диэлектрическую функцию. Если Φ_K^{ext} определить как изменение потенциала положительных ионных остовов в металле вследствие прохождения фонона с волновым вектором K , а $\epsilon(K, \omega)$ — как диэлектрическую функцию электронного газа, то Φ_K будет полным потенциалом, обусловленным фононом, куда входят и вклады со стороны электронов проводимости, и со стороны ионных остовов.

Поскольку $\epsilon(K, \omega) \rightarrow \infty$ при $K \rightarrow 0$, то полный потенциал Φ_K будет стремиться к нулю при внешних конечных длинноволновых потенциалах. Коротковолновое возмущение экранируется менее эффективно. Экранирование свободных зарядов показано на рис. 8.9. Резко изменяющиеся (при больших K)

¹⁾ Обстоятельное обсуждение полученной Линдхардом диэлектрической функции имеется в книге Займана [8]. Последовательные шаги алгебраической оценки уравнения, использованного Займаном, описаны в статье Киталя [9].

компоненты кулоновского потенциала $1/r$ экранируются слабее, чем компоненты медленно меняющиеся (при малых K). Таким образом, «хвост», обусловленный дальнедействующим кулоновским потенциалом, экранируется электронным газом, однако потенциал глубоко погруженной центральной части ионного остова не экранируется. Как показано в книге автора [22], формула (1.24), фурье-компоненты *неэкранированного* («голого») кулоновского потенциала $\varphi(r) = 1/r$ имеют вид

$$\varphi_K^{\text{ext}} = 4\pi/K^2. \quad (\text{D.15})$$

Итак, из (D.13) и (D.14) для *экранированного кулоновского потенциала* имеем:

$$\varphi_K = \frac{4\pi}{\varepsilon(K)K^2} = \frac{4\pi}{K^2 + \lambda^2}. \quad (\text{D.16})$$

Различие между «голым» и экранированным потенциалами наиболее заметно для $K \ll \lambda$. В этом предельном случае экранированный потенциал не зависит от волнового вектора:

$$\varphi_K \approx \frac{4\pi}{\lambda^2} = \frac{2}{3} \varepsilon_F \cdot \frac{1}{n_0 e^2}. \quad (\text{D.17})$$

Мы ввели для диэлектрической функции электронного газа два предельных выражения:

$$\varepsilon(K, 0) = 1 + \frac{\lambda^2}{K^2}; \quad \varepsilon(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (\text{D.18})$$

Заметим, что предел $\varepsilon(K, 0)$ при $K \rightarrow 0$ не совпадает с пределом $\varepsilon(0, \omega)$ при $\omega \rightarrow 0$. Это означает, что в области начала координат плоскости ω, K на поведение диэлектрической функции надо обращать особое внимание.

Полная теория показывает, что в области $\omega < v_F K$ (v_F — скорость Ферми) мы получим диэлектрическую функцию электронного газа для случая Томаса — Ферми (для малых K):

$$\varepsilon(K, \omega) \approx 1 + \frac{\lambda^2}{K^2}. \quad (\text{D.19})$$

Расчеты диэлектрической функции $\varepsilon(K, \omega)$ для общего случая значительно более сложны.

Полученные результаты мы применим к задаче о модах упругих колебаний решетки положительных ионов массы M , погруженных в вырожденный электронный газ (электроны массы m). Диэлектрическая функция подсистемы положительных ионов имеет вид

$$1 - \frac{4\pi n e^2}{M\omega^2}. \quad (\text{D.20})$$

При этом предполагается, что расстояние между ионами столь велико, что ионы можно считать независимыми. Теперь «наполним» решетку электронным газом (чтобы получить исходную ситуацию задачи) и рассмотрим полную диэлектрическую функцию системы «решетка плюс электроны». Вводя, согласно (D.13), λ — электронную постоянную экранирования, получим:

$$\varepsilon(K, \omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{M\omega^2} + \frac{\lambda^2}{K^2}. \quad (\text{D.21})$$

При малых K и низких ω единицей в правой части (D.21) можно пренебречь. Моды продольных колебаний системы определяются (как мы установили ранее в гл. 5) нулями функции $\epsilon(K, \omega)$. В точках, где функция $\epsilon(K, \omega)$ обращается в нуль (учитывая, что $\epsilon_F \equiv 1/2 m v_F^2$), имеем:

$$\omega^2 = \frac{4\pi n^2 e^2}{M \lambda^2} K^2 = \frac{4\pi n e^2}{M} \frac{\epsilon_F}{6\pi n e^2} K^2 = \frac{m}{3M} v_F^2 K^2, \quad (\text{D.22})$$

или

$$\omega = v K, \quad v = v_F \sqrt{m/3M}. \quad (\text{D.23})$$

Нетрудно заметить, что эти выражения описывают длинноволновые акустические фононы. Приведенная формула для скорости находится в хорошем согласии с экспериментальными значениями скорости продольных волн в щелочных металлах. Например, для калия формула дает $v = 1,8 \cdot 10^5$ см/сек, а наблюдаемое значение для скорости продольных волн в направлении [100] равно $2,2 \cdot 10^5$ см/сек (при 4°K). Поскольку $v \ll v_F$, условие применимости диэлектрической функции (D.19) к электронному газу, а именно условие $\omega < v_F K$, в данном случае выполняется.

Имеется, однако, и другой тип нуля функции $\epsilon(K, \omega)$, т.е. другое условие, при котором в задаче о решетке положительных ионов, погруженных в электронный газ, диэлектрическая функция обращается в нуль. В случае высоких частот к диэлектрической функции в виде (D.20) надо добавить диэлектрический вклад электронного газа $-\omega_p^2/\omega^2$ из второго из выражений (D.18) и воспользоваться полученным выражением вместо (D.19). А именно, получим:

$$\epsilon(0, \omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{M \omega^2} - \frac{4\pi n e^2}{m \omega^2}. \quad (\text{D.24})$$

Эта функция обращается в нуль при

$$\omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{\mu}; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{M} + \frac{1}{m}. \quad (\text{D.25})$$

Условие (D.25) есть выражение для электронной плазменной частоты, где, однако, вместо массы электрона стоит масса μ , вносящая поправку на движение положительных ионов.

Е. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФЕРМИ — ДИРАКА

Выражение для функции распределения Ферми — Дирака можно легко вывести, имея даже небольшой багаж знаний о статистической физике. Функция распределения Ферми — Дирака $f(\epsilon)$ есть вероятность того, что одночастичное состояние с энергией ϵ является занятым, когда система частиц, для которой указанное состояние — одно из возможных, находится в тепловом равновесии при температуре T . Воспользуемся распределением Гиббса, которое является обобщением распределения Больцмана; согласно Гиббсу¹⁾ вероятность $P(N, \epsilon_i)$ того, что система содержит N частиц и ее полная энергия равна ϵ_i , пропорциональна

$$\exp [(\mu N - \epsilon_i)/k_B T]. \quad (\text{E.1})$$

¹⁾ См. книгу Киттеля [10].