

## Теория систем многих частиц и ее применение к электронному газу

Важный недостаток приближения Хартри — Фока заключается в том, что при вычислении полной энергии электронного газа практически нельзя учесть корреляцию в движении электронов с антипараллельными спинами. Физически ясно, что кулоновское отталкивание стремится разделить электроны с антипараллельными спинами. Фактическое пренебрежение корреляцией не так существенно для электронов с параллельными спинами. Мы видели, когда шла речь о так называемой фермидырке, что принцип Паули автоматически вводит сильную корреляцию в этом последнем случае.

В гл. 5 мы определили *энергию корреляции* как разность между точным значением энергии и значением, вычисленным в приближении Хартри — Фока. В настоящей главе мы рассмотрим методы приближенного вычисления энергии корреляции для вырожденного электронного газа, в частности при высокой плотности ( $r_s < 1$ ). При достаточно низкой плотности задача носит несколько иной характер: считается, что в этом случае электронный газ конденсируется в кристалл с объемноцентрированной кубической структурой. Мы рассмотрим предельный случай низкой плотности (предел Вигнера). Принято считать [1], что при  $r_s \gg 5$  электронный кристалл находится в устойчивом состоянии, тогда как при меньших значениях  $r_s$  устойчивым состоянием будет газовая фаза.

В последние годы было разработано много мощных методов для вычисления свойств электронного газа. Большинство этих методов ведет к эквивалентным результатам. Простейшими из этих новых методов являются приближения самосогласованного поля, предложенные, с одной стороны, Эренрейхом и Коэном [2] и, с другой — Голдстоуном и Готтфридом [3]. После того как мы изложим метод самосогласованного поля, мы покажем, сколь удобно для расчетов свойств систем многих частиц использовать диэлектрическую проницаемость как функцию частоты и волнового числа. В заключение мы обсудим диаграммы Голдстоуна и теорему о связанных диаграммах.

Вопросы, затронутые в настоящей главе, хорошо изложены в книге Пайнса [4], где дана также библиография основных работ.

Наиболее прямой подход к расчету энергии корреляции состоит в рассмотрении кулоновского взаимодействия как возмущения, влияющего на пары электронов с антипараллельными спинами, и далее в вычислении энергии корреляции по обычной теории возмущений до второго и более высоких порядков. Во втором порядке кулоновская энергия  $\varepsilon^{(2)}$  двух свободных электронов в объеме  $\Omega$  в состояниях  $\mathbf{k}_1 \uparrow$ ,  $\mathbf{k}_2 \uparrow$  имеет вид

$$\varepsilon_{12}^{(2)} = - \sum_{34} \frac{2m \langle 12 | V | 34 \rangle \langle 34 | V | 12 \rangle}{k_3^2 + k_4^2 - k_1^2 - k_2^2}. \quad (6.1)$$

где

$$\begin{aligned} \langle 12 | V | 34 \rangle &= \frac{1}{\Omega^2} \int d^3x d^3y \exp[-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{y})] \times \\ &\times \left( \sum_{\mathbf{K}} \frac{4\pi e^2}{\Omega K^2} \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})] \right) \exp[i(\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x} + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{y})] = \\ &= \frac{4\pi e^2}{\Omega g^2} \cdot \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Здесь  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2$  — импульс, передаваемый при взаимодействии электронов с  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ , когда они за счет виртуального рассеяния приобретают импульсы  $\mathbf{k}_3$  и  $\mathbf{k}_4$ . Итак,

$$\varepsilon_{12}^{(2)} = -m \left( \frac{4\pi e^2}{\Omega} \right)^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^4} \frac{1}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}. \quad (6.3)$$

Суммирование по  $\mathbf{q}$  можно заменить интегрированием

$$\sum \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dq \frac{\pi}{q^4} \int_{-1}^1 d\mu \frac{1}{1 + \mu\kappa}, \quad (6.4)$$

где  $\kappa = |\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1|/q$ ,  $\mu = \cos \theta$ . Угол  $\theta$  отсчитывается от направления  $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ . Интеграл по  $d\theta$  в (6.4) равен

$$\frac{1}{\kappa} \ln \frac{1 + \kappa}{1 - \kappa}.$$

Интеграл по  $dq$  дает  $1/q^3$  и, очевидно, расходится на нижнем пределе (при  $q \rightarrow 0$ ).

Устранение этой расходимости может быть выполнено при тщательном анализе диаграмм, первоначально развитом Бракнером; оказалось возможным просуммировать во всех порядках наиболее важные члены в разложениях теории возмущений. Мы изложим метод Бракнера в приложении (в конце книги). Для

расчета энергии корреляции существуют и более простые методы, но анализ Бракнера представляется нам наиболее наглядным и важным.

В предложенном Бракнером методе расчета энергии корреляции электронного газа в предельном случае высокой плотности в величине энергии имеются вклады во всех порядках теории возмущений. Это связано с дальнедействующим характером кулоновских сил. В задачах, непосредственно отражающих реальные физические ситуации, можно ожидать, что кулоновское взаимодействие пары электронов будет экранироваться (за исключением области малых расстояний) другими электронами системы. Можно ожидать, что невозмущенный потенциал  $e^2/r$  в случае учета возмущения примет, по-видимому, иной вид, типа, например,  $(e^2/r)e^{-r/l_s}$ , где  $l_s$  — длина экранирования — равна по порядку величины отношению скорости Ферми  $v_F$  к плазменной частоте, т. е.

$$l_s \sim v_F \left( \frac{m}{ne^2} \right)^{1/2}$$

Этот экранированный потенциал будет представлять собой бесконечный ряд по степеням  $(e^2)^{1/2}$ . Нельзя ожидать, что такого рода ряды удастся получить при помощи теории возмущений в каком-то конечном порядке. Расчеты Гелл-Манна и Бракнера [5] позволили получить весьма существенные результаты, но из этих результатов также следует, что применение теории возмущений не является естественным путем для рассмотрения проблемы. Наиболее физически прозрачен, по-видимому, подход, основанный на методе самосогласованного поля в форме, описанной в работе [2].

### Метод самосогласованного поля

Рассмотрим отдельную частицу, для которой одночастичный гамильтониан имеет вид  $H = H_0 + V(\mathbf{x}, t)$ , где  $H_0 = p^2/2m$ , а  $V(\mathbf{x}, t)$  — самосогласованный потенциал, описывающий взаимодействие этой частицы со всеми прочими частицами системы. Пусть  $\rho$  — статистический оператор для одной частицы, т. е. *одночастичная* матрица плотности. Если  $\psi_m$  — решение одночастичного уравнения Хартри — Фока, то при помощи собственных функций  $|\mathbf{k}\rangle$  оператора  $H_0$  это решение можно представить в виде ряда <sup>1)</sup>

$$|m\rangle \equiv \psi_m(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k} | m \rangle. \quad (6.5)$$

<sup>1)</sup> Здесь оператор  $\rho$  не имеет ничего общего с оператором плотности частиц, введенным в теории вторичного квантования (см. гл. 5).

Тогда матрица плотности может быть определена следующим образом:

$$\langle \mathbf{k}' | \rho | \mathbf{k} \rangle \equiv \sum_m \langle \mathbf{k}' | m \rangle P_m \langle m | \mathbf{k} \rangle, \quad (6.6)$$

где  $P_m$  — средняя по ансамблю вероятность того, что состояние  $m$  занято. Равновесный статистический оператор  $\rho_0$  для невозмущенной системы ( $V=0$ ) обладает следующим свойством:

$$\rho_0 | \mathbf{k} \rangle = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k} \rangle, \quad (6.7)$$

где  $f_0(\varepsilon)$  — статистическая функция распределения.

Уравнение движения для  $\rho = \rho_0 + \delta\rho$  имеет вид

$$i\dot{\rho} = [H, \rho]. \quad (6.8)$$

Если же мы линеаризуем уравнение (6.8), пренебрегая членами порядка  $V\delta\rho$ , то получим

$$i\delta\dot{\rho} \approx [H_0, \delta\rho] + [V, \rho_0]. \quad (6.9)$$

Введем далее матричные элементы между состояниями  $|\mathbf{k}\rangle$  и  $|\mathbf{k}+\mathbf{q}\rangle$ :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{k} | \delta\rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle &= \langle \mathbf{k} | [H_0, \delta\rho] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \langle \mathbf{k} | [V, \rho_0] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \\ &= (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \mathbf{k} | \delta\rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})] V_{\mathbf{q}}(t), \end{aligned} \quad (6.10)$$

где

$$V_{\mathbf{q}}(t) = \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \int d^3x V(\mathbf{x}, t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (6.11)$$

есть  $\mathbf{q}$ -я фурье-компонента потенциала  $V(\mathbf{x}, t)$ . Другие фурье-компоненты в настоящем разделе определяются подобным же образом.

Потенциал  $V$  состоит из потенциала внешнего поля  $V^0$  и экранирующего потенциала  $V^s$ , связанного с индуцированным изменением электронной плотности  $\delta n$ .

Таким образом,  $V^0$  может быть, например, потенциалом заряженной примеси, а  $V^s$  — потенциалом экранирующих зарядов в электронном газе, индуцированным потенциалом  $V_0$ . Итак, индуцированное изменение электронной плотности равно

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{x}) &= \sum_m |m\rangle P_m \langle m| = \sum_m \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}' | m \rangle P_m \langle m | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | = \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k} | \langle \mathbf{k}' | \rho | \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | \delta\rho | \mathbf{k}' + \mathbf{q} \rangle = \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \delta n_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Экранирующий потенциал связан с  $\delta n(\mathbf{x})$  уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V^s = -4\pi e^2 \delta n, \quad q^2 V_q^s(t) = -4\pi e^2 \langle \mathbf{k} | \delta n | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle, \quad (6.13)$$

и, следовательно,

$$V_q^s(t) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | \delta \rho | \mathbf{k}' + \mathbf{q} \rangle. \quad (6.14)$$

Комбинируя (6.10) и (6.14), получим уравнение движения для случая отсутствия внешнего возмущения:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{k} | \delta \rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \mathbf{k} | \delta \rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \\ + \frac{4\pi e^2}{q^2} [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | \delta \rho | \mathbf{k}' + \mathbf{q} \rangle. \quad (6.15)$$

Это уравнение имеет тот же вид, что и полученное Бомом и Пайнсом (см. обзор [6]) в приближении хаотических фаз.

Свойства электронного газа, в котором имеет место взаимодействие между электронами, удобно выражать через продольную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ . Мы можем определить диэлектрическую проницаемость различными эквивалентными способами. Согласно обычному определению диэлектрическая проницаемость связывает компоненты поляризации  $P_q$  с продольным электрическим полем  $E_q$  следующим образом:

$$E_q + 4\pi P_q = \epsilon(\omega, \mathbf{q}) E_q = D_q. \quad (6.16)$$

Напомним, что  $V = V^0 + V^s$  есть суммарный потенциал, где  $V^0$  — потенциал внешних источников, а  $V^s$  — потенциал индуцированного заряда. Соотношение (6.16) эквивалентно соотношению

$$V_q - V_q^s = \epsilon(\omega, \mathbf{q}) V_q, \quad (6.17)$$

поскольку продольная поляризация  $P_q$  создает индуцированное электрическое поле  $-E_q^s/4\pi$ , где  $E_q^s$  соответствует потенциалу  $V_q^s$ . Итак,

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) = \frac{V_q^0}{V_q} \quad (6.18)$$

представляет собой отношение внешнего потенциала к эффективному потенциалу. Далее имеем

$$\operatorname{div} \mathbf{P} = e\delta n, \quad -iqP_q = e\delta n_q, \quad eE_q = -iqV_q, \quad (6.19)$$

и, следовательно,

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) = 1 + 4\pi \left( \frac{P_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}} \right) = 1 - 4\pi \frac{e^2 \delta n_{\mathbf{q}}}{q^2 V_{\mathbf{q}}}, \quad (6.20)$$

где  $\omega$  — частота, связанная с  $V_{\mathbf{q}}$ . Определение диэлектрической проницаемости соотношением (6.16) используется также ниже, в формуле (6.40), но там оно оказывается удобным для обсуждения (6.42), т. е. зависимости диэлектрической проницаемости от плотности пробного и индуцированного зарядов.

Теперь, если в уравнении движения (6.10) рассматривать потенциал  $V_{\mathbf{q}}(t)$  как зависящую со временем силу, определяющую поведение системы, то мы имеем

$$\langle \mathbf{k} | \delta \rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \frac{f_0(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \omega + is} V_{\mathbf{q}}, \quad (6.21)$$

причем

$$\delta n_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k} | \delta \rho | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \omega + is} V_{\mathbf{q}}. \quad (6.22)$$

Наконец, мы можем записать следующее выражение для продольной диэлектрической проницаемости в приближении самоогласованного поля:

$$\epsilon_{\text{SCF}}(\omega, \mathbf{q}) = 1 - \lim_{s \rightarrow +0} \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \omega + is}. \quad (6.23)$$

Это очень важный результат, при помощи которого мы можем вычислять многие характеристики системы, включая и энергию корреляции. Приведенное выражение (6.23) является приближенным, поскольку при его выводе мы исходили из одночастичного, а не многочастичного гамильтониана. Приближение состоит в том, что электрон рассматривается как свободная частица, движущаяся в поле, описываемом усредненным потенциалом  $V(\mathbf{x}, t)$  системы. Полученный результат эквивалентен результату Нозьера и Пайнса, установленному в приближении хаотических фаз. Вычисление поперечной диэлектрической проницаемости электронного газа предоставляется читателю в виде упражнения (см. задачу 16.3).

В предельном случае  $\omega \gg k_F q / m$  выражение (6.23) принимает вид

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} + i \frac{e^2}{2\pi q^2} \int d^3 k \mathbf{q} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \delta\left(\omega + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m}\right); \quad (6.24)$$

здесь введено обозначение  $\omega_p^2 = 4\pi n e^2/m$  и использовано известное тождество

$$\lim_{s \rightarrow +0} \frac{1}{x + is} \equiv \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x). \quad (6.25)$$

Здесь  $\mathcal{P}$  — символ главного значения. При абсолютном нуле поглощения, определяемое величиной  $\text{Im}\{\epsilon\}$ , исчезает, если  $\omega > k_F q/m$ ; в этом случае мы говорим, что имеем дело с плазменной областью. При  $\omega < k_F q/m$  мнимая часть  $\epsilon$  при абсолютном нуле равна  $2m^2 e^2 \omega/q^3$ ; вещественная часть  $\epsilon$  в (6.24) получается, если записать

$$\underline{f}_0(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - \underline{f}_0(\epsilon_{\mathbf{k}}) \approx \mathbf{q} \cdot \frac{\partial \underline{f}_0}{\partial \mathbf{k}} \quad (6.26)$$

и

$$\frac{1}{\omega + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{q}/m)} \approx \frac{1}{\omega} \left( 1 - \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m\omega} \right). \quad (6.27)$$

Вещественная часть  $\epsilon$  имеет тогда тот же вид, что и диэлектрическая проницаемость плазмы при  $q=0$  (см. гл. 3). Решив уравнения движения (6.15) для неподвижной системы, получим приближенные собственные частоты в виде функций от  $\mathbf{q}$ . Эти собственные частоты являются как раз корнями выражения для  $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$  в виде (6.23). Найденные уравнения движения эквивалентны рассмотренным в работе [7]. Собственные значения получаются двух типов: значения первого типа —  $\omega \approx \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}$  — описывают энергию, необходимую для образования пары электрон — дырка путем перехода электрона из состояния  $\mathbf{k}$  ферми-фона в состояние  $\mathbf{k}+\mathbf{q}$  вне ферми-фона. Собственные значения второго типа появляются при малых  $\mathbf{q}$  и определяются уравнением  $\omega^2 \approx 4\pi n e^2/m$ . Таким образом, имеются коллективные возбуждения и наряду с ними возбуждения, носящие характер квазичастиц, но полное число степеней свободы равно  $3n$ .

Мнимый член в (6.24) характеризует затухание плазменных колебаний (которое называют затуханием Ландау). Величина затухания определяется числом частиц, компоненты скорости которых  $k^b/m$  в направлении  $\mathbf{q}$  распространения коллективного возбуждения равны фазовой скорости  $\omega/q$  распространения возбуждения. Колебания именно этих частиц оказываются в фазе с возбуждением и именно они «отбирают» от него энергию. Такое затухание существенно при больших значениях  $q$ ; тогда плазмы уже нельзя считать «хорошими» нормальными колебаниями. В вырожденном ферми-газе максимальная скорость электронов равна  $v_F$ ; при значениях  $q$ , удовлетворяющих условию  $\omega_p/q > v_F$ , в плазме не могут существовать частицы, перемещающиеся с указанной фазовой скоростью. Это значит, что

мнимая часть  $\epsilon(\omega, q)$  обращается в нуль для  $q < q_c = \omega_p/v_F$ . Пользуясь (5.71) и (5.73), получим  $q_c/k_F = 0,48r_s^{1/2}$ . Если все колебания, для которых  $q > q_c$  мы будем считать колебаниями отдельных частиц, то для отношения числа плазмонных колебаний  $n'$  к полному числу степеней свободы  $3n$  получим

$$\frac{n'}{3n} = \frac{1}{2 \cdot 3} (0,48)^3 r_s^{3/2} = 0,018 r_s^{3/2}, \quad (6.28)$$

где двойка в знаменателе появляется из-за спина. В случае натрия  $r_s = 3,96$  и, следовательно, 14% степеней свободы связано с плазмонными колебаниями.

Теперь подведем итоги. При малых  $q$  нормальные колебания системы — плазмоны; при больших  $q$  нормальные колебания в основном представляют собой возбуждения отдельных частиц.

Плазмоны в металлах наблюдались в виде дискретных пиков на кривой зависимости энергетических потерь от напряжения для быстрых электронов, проходящих через тонкие металлические пленки. Более подробные данные о плазмонах были получены в экспериментах по наблюдению светового излучения, испускаемого возбужденными плазмонами [8, 9]. Угловое распределение интенсивности излучения, т. е. ее зависимость от направления наблюдения, а также от толщины пленки были предсказаны в работе [10].

Энергии, соответствующие пикам на экспериментально полученной кривой энергетических потерь, и значения плазменных частот (в электрон-вольтах), вычисленные для предполагаемых валентностей, даны в приводимой ниже таблице.

Элемент	Be	B	C	Mg	Al	Si	Ge
Валентность	2	3	4	2	3	4	4
$\epsilon_{\text{выч. эв}}$	19	24	25	11	16	17	16
$\Delta E_{\text{набл. эв}}$	19	19	22	10	15	17	17

При вычислении значений плазменных частот введены поправки на диэлектрическую проницаемость ионных остовов. Для щелочных металлов сравнения экспериментальных данных с вычисленными также обнаруживают поразительное совпадение: пики на кривой неупругих потерь, как и следовало ожидать, очень близки к граничным частотам для оптической прозрач-



ности. В этом легко убедиться при рассмотрении данных следующей таблицы.

Элемент	Li	Na	K
$\omega_{\text{выч}}, \text{ эв}$	8,0	5,7	3,9
$\Delta E, \text{ эв}$	9,5	5,4	3,8
$\omega_{\text{опт}}, \text{ эв}$	8,0	5,9	3,9

Диэлектрическая проницаемость в модели Томаса — Ферми. Приближение Томаса — Ферми при вычислении диэлектрической проницаемости электронного газа соответствует квазистатическому приближению ( $\omega \rightarrow 0$ ), применимому в случае больших длин волн ( $q/k_F \ll 1$ ). Основное предположение [11] состоит в том, что локальная плотность электронов  $n(\mathbf{x})$  удовлетворяет соотношению

$$n(\mathbf{x}) \sim [\epsilon_F - V(\mathbf{x})]^{3/2}, \quad (6.29)$$

где  $V(\mathbf{x})$  — потенциальная энергия, а  $\epsilon_F$  — энергия Ферми. Таким образом, для «слабого» потенциала можно написать

$$\delta n \approx -\frac{3n}{2\epsilon_F} V, \quad (6.30)$$

или для соответствующих фурье-компонент —

$$\delta n_q \approx -\frac{3n}{2\epsilon_F} V_q. \quad (6.31)$$

Но, согласно уравнению Пуассона (6.13), вариация  $\delta n_q$  соответствует изменению потенциала  $V_q^s$ , т. е.

$$\delta n_q = \frac{q^2}{4\pi e^2} V_q^s. \quad (6.32)$$

Из определения (6.18) диэлектрической проницаемости имеем для случая модели Томаса — Ферми

$$\epsilon_{\text{TF}}(\mathbf{q}) = \frac{V_q - V_q^s}{V_q} = 1 - \frac{(4\pi e^2 \delta n_q / q^2)}{(-2\epsilon_F \delta n_q / 3n)}, \quad (6.33)$$

или

$$\epsilon_{\text{TF}}(\mathbf{q}) = \frac{q^2 + k_s^2}{q^2}, \quad (6.34)$$

где

$$k_s^2 \equiv \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F}. \quad (6.35)$$

Отметим, что  $V_{\mathbf{q}} - V_{\mathbf{q}}^s$  — внешний потенциал, а  $(V_{\mathbf{q}} - V_{\mathbf{q}}^s) + V_{\mathbf{q}}^s \equiv V_{\mathbf{q}}$  — эффективный потенциал. Можно ожидать, что выражение для диэлектрической проницаемости в модели Тома-са — Ферми (6.34) будет частным случаем этого выражения, полученного в приближении самосогласованного поля (6.23), когда  $\omega = 0$  и  $q/k_F \ll 1$ . Действительно, в этом предельном случае

$$\epsilon_{\text{ср}}(0, \mathbf{q}) \approx 1 - \left(\frac{4\pi e^2}{q^2}\right) \frac{2m}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{\mathbf{q} \cdot \partial f_0 / \partial \mathbf{k}}{\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}} = 1 + \left(\frac{4\pi e^2}{q^2}\right) \frac{8\pi k_F}{(2\pi)^3}. \quad (6.36)$$

Это выражение совпадает с (6.34), поскольку  $m = k_F^2 / 2\varepsilon_F$ , а  $k_F^3 = 3\pi^2$ .

### Диэлектрический формализм [12]

Вычисление диэлектрической проницаемости по методу самосогласованного поля основано на модели независимых частиц и является лишь приближенным. Теперь мы вычислим более общее выражение для диэлектрической проницаемости при помощи матричных элементов между *точными собственными функциями* системы многих тел. Представим себе, что мы ввели в систему пробный заряд, распределение которого характеризуется волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $\omega$ . Плотность пробного заряда будем описывать функцией

$$er_{\mathbf{q}} [\exp[-i(\omega t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})] + \exp[i(\omega t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})]],$$

где  $r_{\mathbf{q}}$  — вещественная величина. В отсутствие пробного заряда среднее значение  $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle$  операторов  $\rho_{\mathbf{q}}$  флуктуаций плотности заряда всех частиц будет равно нулю. Напомним, что, согласно (5.118),

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}}. \quad (6.37)$$

При наличии пробного заряда  $\langle \rho_{\pm \mathbf{q}} \rangle \neq 0$ . Попытаемся решить задачу для компоненты плотности индуцированных зарядов.

По определению  $\mathbf{D}$  и  $\mathbf{E}$  имеем

$$\text{div } \mathbf{D} = 4\pi \text{ (плотность пробного заряда)}, \quad (6.38)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 4\pi \text{ (плотность пробного заряда + плотность индуцированного заряда)}. \quad (6.39)$$

Вводя теперь соответствующую этой ситуации диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ , получим

$$-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}_{\mathbf{q}} = -i\epsilon(\omega, \mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{q}} = 4\pi e r_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t}, \quad (6.40)$$

$$-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{q}} = 4\pi e (r_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t} + \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle). \quad (6.41)$$

Разделив (6.41) на (6.40), получим

$$\frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} = 1 + \frac{\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle}{r_{\mathbf{q}} e^{-i\omega t}} = \frac{\text{полный заряд}}{\text{пробный заряд}}. \quad (6.42)$$

Вычислим теперь величину  $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle$ , характеризующую реакцию системы на введение пробного заряда. Гамильтониан системы равен  $H = H_0 + H'$ , где для образца единичного объема имеем, согласно (5.113),

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q^2} (\rho_{\mathbf{q}}^+ \rho_{\mathbf{q}} - n); \quad (6.43)$$

$H'$  — оператор кулоновского взаимодействия между системой и пробным зарядом — имеет вид

$$H' = \frac{4\pi e^2}{q^2} \rho_{-\mathbf{q}} r_{\mathbf{q}} \exp[-i\omega t + st] + \text{к. с.} \quad (6.44)$$

При адиабатическом включении взаимодействия величина  $s$  мала и положительна. Предполагается, что пробный заряд достаточно мал, поэтому реакция системы на внесение пробного заряда носит линейный характер. Будем считать, что в начальный момент ( $t = -\infty$ ) система находится в основном состоянии  $\Phi_0$ . После внесения пробного заряда  $\Phi_0 \rightarrow \Phi_0(r_{\mathbf{q}})$ . Функция  $\Phi_0(r_{\mathbf{q}})$  представляет собой решение уравнения Шредингера, найденное в первом приближении теории возмущений, зависящих от времени, т. е.

$$\Phi_0(r_{\mathbf{q}}) = \Phi_0 - \sum_n' \frac{4\pi e^2}{q^2} r_{\mathbf{q}} \left( \frac{\langle n | \rho_{-\mathbf{q}} | 0 \rangle \exp(-i\omega t + st)}{-\omega + \omega_{n0} - is} + \frac{\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle \exp(i\omega t + st)}{\omega + \omega_{n0} + is} \right) \Phi_n, \quad (6.45)$$

где  $\epsilon_n - \epsilon_0 = \omega_{n0}$ . Тогда с точностью до членов первого порядка относительно  $r_{\mathbf{q}} \exp(-i\omega t + st)$  имеем

$$\langle \Phi_0(r_{\mathbf{q}}) | \rho_{\mathbf{q}} | \Phi_0(r_{\mathbf{q}}) \rangle = -\frac{4\pi e^2}{q^2} r_{\mathbf{q}} \exp(-i\omega t + st) \times \\ \times \sum_n \langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle^2 \left( \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + is} + \frac{1}{-\omega + \omega_{n0} - is} \right), \quad (6.46)$$

где использовано свойство симметрии  $|\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 = |\langle n | \rho_{-\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2$ . Подставляя (6.46) в (6.42), получаем точный результат

$$\frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\delta} + \frac{1}{-\omega + \omega_{n0} - i\delta} \right\}. \quad (6.47)$$

Собственные частоты системы определяются как корни уравнения  $\epsilon(\omega, \mathbf{q}) = 0$ , поскольку, согласно (6.42), каждый корень является особой точкой, соответствующей собственному колебанию, возникшему в силу реакции системы на внесение пробного заряда. Используя тождество

$$\lim_{s \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm is} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (6.48)$$

получим для мнимой части (6.47)

$$\text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 [\delta(\omega + \omega_{n0}) - \delta(\omega - \omega_{n0})]. \quad (6.49)$$

Проинтегрировав (6.49) по всем положительным частотам  $\omega$ , найдем

$$\int_0^{\infty} d\omega \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 = -\frac{4\pi e^2}{q^2} \langle 0 | \rho_{\mathbf{q}}^+ \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle. \quad (6.50)$$

Напомним, что волновые функции, использованные в качестве базиса в данном рассмотрении, являются истинными собственными функциями данной задачи с учетом внутренних взаимодействий.

Среднее значение энергии кулоновского взаимодействия в основном состоянии, согласно (5.113), можно представить в виде

$$E_{\text{взаим}} = \langle 0 | \sum_{\mathbf{q}}' \frac{2\pi e^2}{q^2} (\rho_{\mathbf{q}}^- \rho_{\mathbf{q}} - n) | 0 \rangle, \quad (6.51)$$

или

$$E_{\text{взаим}} = - \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) + \frac{2\pi n e^2}{q^2} \right\}. \quad (6.52)$$

Это выражение формально определяет кулоновскую энергию точного основного состояния через мнимую часть диэлектрической проницаемости. Мы не получим, разумеется, энергии точного основного состояния, если просто добавим  $E_{\text{взаим}}$  к энер-

гии невозмущенного основного состояния, поскольку кинетическая энергия последнего изменяется вследствие кулоновского взаимодействия. Иначе говоря,  $\Phi_0$  есть функция  $e^2$ . Чтобы получить полную энергию точного основного состояния, мы воспользуемся следующей теоремой.

**Т е о р е м а.** Пусть дан гамильтониан

$$H = H_0 + gH_{\text{взаим}}, \quad (6.53)$$

где  $H_0$  — кинетическая энергия,  $g$  — константа связи, а собственное значение оператора  $H$  имеет вид

$$E_{\text{взаим}}(g) = \langle \Phi_0(g) | gH_{\text{взаим}} | \Phi_0(g) \rangle. \quad (6.54)$$

Тогда точное значение полной энергии основного состояния

$$E_0(g) = \langle \Phi_0(g) | H_0 + gH_{\text{взаим}} | \Phi_0(g) \rangle \quad (6.55)$$

определяется выражением

$$E_0(g) = E_0(0) + \int_0^g g^{-1} E_{\text{взаим}}(g) dg. \quad (6.56)$$

*Доказательство.* Согласно (6.54) и (6.55) имеем

$$\frac{dE_0}{dg} = g^{-1} E_{\text{взаим}}(g) + E_0(g) \frac{d}{dg} \langle \Phi_0(g) | \Phi_0(g) \rangle, \quad (6.57)$$

где второй член в правой части уравнения равен нулю, поскольку по условию нормировки он не зависит от величины  $g$ . Здесь  $E_0(g)$  — точное собственное значение, а  $\Phi_0(g)$  — точная собственная функция. Таким образом, мы имеем частный случай теоремы Фейнмана

$$\frac{dE_0}{dg} = g^{-1} E_{\text{взаим}}(g), \quad (6.58)$$

откуда, после интегрирования, сразу получаем искомый результат (6.56).

В задаче об электронном газе для энергии основного состояния на единицу объема (без кулоновского взаимодействия) было получено выражение

$$E_0(0) = \frac{3}{5} n \epsilon_F. \quad (6.59)$$

Константа связи  $g = e^2$ , так что, определив величину  $E_{\text{взаим}}$  из (6.52) или иным путем, мы можем, пользуясь (6.56), найти полную энергию при наличии кулоновского взаимодействия. Например, если мы приближенно, пользуясь выражением (6.47), вычислим величину  $1/\epsilon(\omega, \mathbf{q})$ , взяв матричные элементы в представлении плоских волн, то получим энергию взаимодей-

ствия  $E_{\text{взаим}}$  точно равной обычному выражению для энергии обмена в приближении Хартри — Фока. Поскольку в этом приближении в  $\Phi_0$  не всегда входит  $e^2$ , энергия основного состояния будет просто равна сумме  $E_{\text{взаим}}$  и энергии Ферми. Значительно лучший результат для энергии получается, если воспользоваться выражением для диэлектрической проницаемости (6.23), вытекающим из теории самосогласованного поля.

Если дельта-функцию взять в виде интеграла и ввести в (6.49), то получим

$$\begin{aligned} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) &= \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{ij} \frac{1}{2\pi} \int dt (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \langle \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i(0)] \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j(t)] \rangle, \end{aligned} \quad (6.60)$$

где  $\mathbf{x}_i$  — переменные в представлении Гейзенберга. Воспользуемся введенной Ван Хове [13] функцией  $\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q})$ , называемой динамическим структурным фактором. Эта функция определяется следующим выражением:

$$\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{ij} \frac{1}{2\pi} \int dt \exp[-i\omega t] \langle \exp[-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i(0)] \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j(t)] \rangle. \quad (6.61)$$

Она обладает тем свойством, что представляет собой фурье-образ функции парного распределения

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, t) &= N^{-1} \left\langle \sum_{ij} \int d^3x' \delta[\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(0) + \mathbf{x}'] \delta[\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j(t)] \right\rangle = \\ &= N^{-1} \left\langle \sum_{ij} \delta[\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(0) + \mathbf{x}_j(t)] \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.62)$$

Таким образом,

$$\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{N}{2\pi} \int d^3x dt \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} - \omega t)] G(\mathbf{x}, t). \quad (6.63)$$

В дальнейшем при рассмотрении задачи о дифракции нейтронов мы увидим, что функция  $\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q})$  описывает рассеивающие свойства системы в первом борновском приближении (см. также задачи 2.6, 6.9, 6.10).

Используя (5.110), мы можем также представить  $\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q})$  в виде

$$\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \langle \rho_{\mathbf{q}}(t) \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger}(0) \rangle = \sum_n |\langle n | \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (6.64)$$

Итак,  $\mathcal{S}(\omega, \mathbf{q})$  действительно можно считать структурным фактором, который описывает спектр элементарных возбуждений, в данном случае — флуктуации плотности системы. Это представление может быть равным образом использовано как для бозонных, так и для фермионных систем, только в каждом случае в разложении для  $\rho_{\mathbf{q}}$  надо брать соответствующие операторы.

Из выражений (6.60) и (6.61) имеем

$$\text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) = \frac{4\pi e^2}{q^2} [\mathcal{S}(-\omega, \mathbf{q}) - \mathcal{S}(\omega, \mathbf{q})]. \quad (6.65)$$

Это соотношение устанавливает связь между диэлектрической проницаемостью и корреляционной функцией  $\mathcal{S}(\omega, \mathbf{q})$ .

### Диэлектрическое экранирование точечных заряженных примесей

Диэлектрический формализм проблемы многих тел находит интересное применение в задаче об экранировании точечных заряженных примесей в электронном газе. Экранирование кулоновского потенциала электронным газом является важным эффектом. Дело в том, что экранирование электрон-электронного взаимодействия в модели свободных электронов или в модели квазичастиц «работает» столь же хорошо и в процессах переноса. Экранирование заряженных примесей приводит к ряду важных следствий и в теории сплавов.

Пусть заряд точечной примеси равен  $Z$ ; распределение плотности этого заряда можно описать функцией

$$\rho(\mathbf{x}) = Z \delta(\mathbf{x}) = \frac{Z}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}. \quad (6.66)$$

Потенциал заряда в свободном пространстве равен

$$V_0(\mathbf{x}) = \frac{Z}{r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}; \quad (6.67)$$

при наличии среды в области, где реакцию можно считать линейной, он принимает вид

$$V(\mathbf{x}, \omega) = \frac{Z}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{4\pi}{q^2 \epsilon(\omega, \mathbf{q})} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}. \quad (6.68)$$

Обычно мы имеем дело с потенциалом  $V(\mathbf{x})$ , т. е. с величиной  $V(\mathbf{x}, \omega)$  при  $\omega=0$ , поскольку считаем распределение примесей стационарным. Нас интересует также распределение заряда  $\Delta\rho(\mathbf{x})$ , индуцированного зарядом плотностью  $Z\delta(\mathbf{x})$ . Воспользовавшись выражением (6.68) для случая  $\omega=0$  и уравнением

$$\nabla^2 V = -4\pi [\Delta\rho + Z\delta(\mathbf{x})], \quad (6.69)$$

получим

$$\Delta\rho(\mathbf{x}) = \frac{Z}{(2\pi)^3} \int d^3q \left( \frac{1}{\epsilon(0, \mathbf{q})} - 1 \right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}. \quad (6.70)$$

Если функция  $1/\epsilon(0, \mathbf{q})$  имеет полюсы, то должны появиться объемные колебания плотности экранированного заряда. Полная величина  $\Delta\rho$  смещенного при экранировании заряда запишется в виде

$$\begin{aligned} \Delta\rho &= \int d^3x \Delta\rho(\mathbf{x}) = \frac{Z}{(2\pi)^3} \int d^3q \int d^3x \left( \frac{1}{\epsilon(0, \mathbf{q})} - 1 \right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = \\ &= Z \int d^3q \delta(\mathbf{q}) \left( \frac{1}{\epsilon(0, \mathbf{q})} - 1 \right) = Z \left( \frac{1}{\epsilon(0, 0)} - 1 \right) \end{aligned} \quad (6.71)$$

Входящую сюда величину  $\epsilon(0, 0)$  не всегда можно считать хорошо определенной, так как она может зависеть от того, в какой последовательности стремятся к нулю значения аргументов  $\omega$  и  $\mathbf{q}$ .

Рассмотрим теперь экранирование в некоторых частных случаях, соответствующих разным приближенным методам описания системы.

а. *Модель Томаса — Ферми.* Диэлектрическая проницаемость в этом приближении определяется выражениями (6.34) и (6.35), т. е.

$$\epsilon_{\text{TF}}(0, \mathbf{q}) \approx 1 + \frac{k_s^2}{q^2}; \quad k_s^2 = \frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F} = \frac{4k_F}{a_H} \approx \frac{2,6}{r_s}. \quad (6.72)$$

Здесь  $a_H$  — боровский радиус,  $r_s$  — радиус сферы  $s$ , выраженный в единицах боровского радиуса. Согласно (6.68), экранирующий потенциал равен

$$V(\mathbf{x}) = \frac{Z}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{4\pi}{q^2 + k_s^2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = \frac{Z}{r} e^{-k_s r}, \quad (6.73)$$

а соответствующая этому случаю длина экранирования —

$$l_s = \frac{1}{k_s} \sim n^{-1/3}. \quad (6.74)$$

В случае меди  $k_s \approx 1,8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ , и, следовательно,  $l_s \approx 0,55 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . В случае калия  $l_s$  примерно вдвое больше, чем для меди. Экранирование является очень важной характеристикой электронного газа. Экранирующий заряд, располагающийся вокруг примеси, сосредоточен в основном внутри сферы, в центре которой расположена точечная примесь, а взаимодействие примесных атомов между собой мало.



Из выражения (6.71) следует, что экранирующий заряд равен  $-Z$ . Плотность индуцированного заряда составляет

$$\Delta\rho(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \nabla^2 V = -\frac{k_s^2 Z}{4\pi r} e^{-k_s r}. \quad (6.75)$$

Эта функция имеет особенность при  $r=0$ ; величина ее монотонно уменьшается при возрастании  $r$ . Вытекающее отсюда бесконечное значение электронной плотности на ядре противоречит наблюдаемому конечному времени жизни позитронов в металле и конечному значению найтовского сдвига для атомов примеси.

б. *Приближение Хартри*. Диэлектрическая проницаемость определяется в задаче 6.1. Величина экранирующего заряда получается бесконечной, так как кулоновское взаимодействие между электронами не учитывается.

в. *Метод самосогласованного поля или приближение хаотических фаз*. В этом случае для диэлектрической проницаемости имеем выражение (6.23); непосредственное сравнение последнего с выражением, полученным в задаче 6.1 (в приближении Хартри), дает (для  $\omega=0$ ) соотношение

$$\epsilon_{\text{SCF}} = 2 - \frac{1}{\epsilon_{\text{H}}} = 1 + \frac{k_s^2}{2q^2} g(q), \quad (6.76)$$

где  $\epsilon_{\text{H}}$  — диэлектрическая проницаемость в приближении Хартри. Общее обсуждение вопроса о связи между  $\epsilon_{\text{H}}$  и  $\epsilon_{\text{SCF}}$  имеется в книге Пайнса [4]. В этом случае мы видим, что полный экранирующий заряд равен  $-Z$ . При  $\omega=0$  функция диэлектрической проницаемости имеет особенность типа  $(q - 2k_{\text{F}}) \ln|q - 2k_{\text{F}}|$ , и поэтому выражение для плотности заряда содержит осциллирующие члены, которые при больших  $r$  имеют вид  $r^{-3} \cos 2k_{\text{F}}r$ . Пример графика соответствующей зависимости приведен на рис. 6.1.

Что произойдет при  $q=2k_{\text{F}}$ ? При  $q < 2k_{\text{F}}$  вектор может расположиться так, что оба его конца будут лежать на поверхности Ферми. Таким образом, энергетический знаменатель в выражении (6.23) может быть малым и, следовательно, соответствующий вклад в величину диэлектрической проницаемости окажется значительным. Однако при  $q > 2k_{\text{F}}$  невозможно удалить электрон из занятого состояния  $\mathbf{k}$  и перенести его в незанятое состояние  $\mathbf{k}+\mathbf{q}$  так, чтобы закон сохранения энергии соблюдался хотя бы приближенно. В этом случае энергетический знаменатель всегда велик, и поэтому вклад всех процессов в величину диэлектрической проницаемости мал.

Кон подметил следующее интересное обстоятельство. Внезапный скачок диэлектрической проницаемости при возрастании  $q$  выше  $2k_{\text{F}}$  должен сопровождаться небольшим внезапным

возрастанием собственной частоты  $\omega(\mathbf{q})$  колебаний решетки, когда  $q$  достигает значения  $2k_F$ . Чем меньше диэлектрическая проницаемость (зависящая от  $q$ ), тем слабее будет реакция электронов на движение ионов и тем выше будет частота колебаний решетки. Детальное теоретическое обсуждение влияния

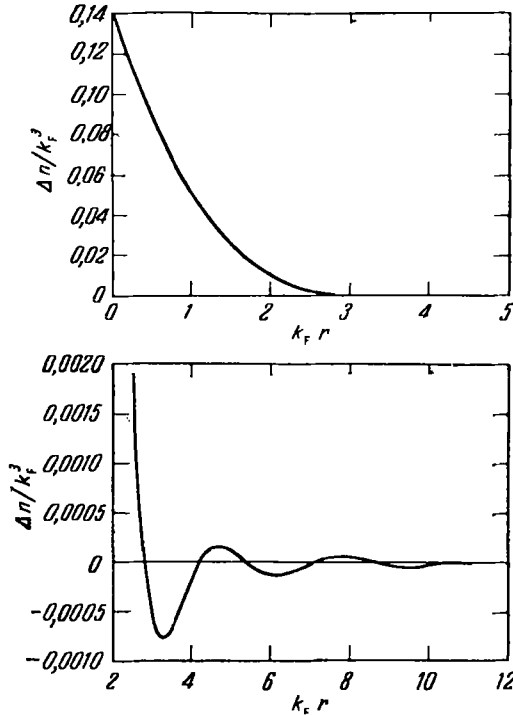


Рис. 6.1. Распределение плотности экранирующего заряда вокруг точечного заряда в случае электронного газа с  $r_s = 3$  [18].

Кривые вычислены по теории многих тел.

формы поверхности Ферми на спектр фононов имеется в работе [14]. Остается все же неясным, почему этот эффект должен сохраняться и при наличии столкновений электронов с фононами и примесными атомами.

### Численные расчеты энергии корреляции

Воспользовавшись (5.97), выпишем энергию основного состояния, приходящуюся на один электрон:

$$\epsilon_0 = \left( \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + \epsilon_c \right) R_y, \quad (6.77)$$

где первые два члена в скобках — энергия в приближении Хар-

три — Фока, а  $\epsilon_c$  — энергия корреляции. В области значений плотности, соответствующих реальным металлам, Нозьер и Пайнс [15] получили следующую интерполяционную формулу:

$$\epsilon_c \approx (-0,115 + 0,031 \ln r_s) Ry. \quad (6.78)$$

Тем, кто интересуется деталями, следует обратиться к оригинальной работе.

Поучительно, воспользовавшись (6.77) и (6.78), оценить энергию сцепления простого металла, а именно энергию, необходимую, чтобы разделить кристалл на отдельные нейтральные атомы. Удобным для рассмотрения примером служит натрий, поскольку в нем эффективная масса электрона  $m^*$  близка к массе свободного электрона  $m$  и можно пренебречь различием между  $m^*$  и  $m$ . Взяв значение  $r_s = 3,96$ , получим

$$\epsilon_0 = (0,14 - 0,23 - 0,07) Ry, \quad (6.79)$$

где числа в скобках расположены в той же последовательности, что и в формуле (6.77) и имеют тот же смысл. Однако, как мы уже отмечали в гл. 5, энергия  $\epsilon_0$  вычислена для однородного фона положительных зарядов. Если же положительный заряд распределен дискретно и локализован в виде положительных ионов, то в правую часть выражения для  $\epsilon_0$  следовало бы добавить член, который в формуле (5.77) был обозначен через  $\epsilon_2$ . Величина  $\epsilon_2 = 1,2/r_s Ry$  есть собственная энергия однородного распределения электронов в  $s$ -й сфере, для натрия эта энергия имеет величину  $0,30 Ry$ . Заметим, что  $\epsilon_2$  стремится скомпенсировать обменную и корреляционную энергии.

Решение для  $k=0$  задачи об одноэлектронном периодическом потенциале в случае натрия дает  $\epsilon(k=0) \approx -0,60 Ry$ ; выполненные расчеты описаны в работах, которые цитируются в гл. 13. По величине эта энергия сравнима с  $\epsilon_I = -0,38 Ry$ , т. е. с энергией ионизации нейтрального атома натрия. Таким образом, энергия сцепления  $\epsilon_{сц}$  металлического натрия (равная энергии, требующейся для разделения кристалла на нейтральные атомы) равна

$$\begin{aligned} \epsilon_{сц} &= -\epsilon_I + \epsilon(k=0) + \epsilon_0 + \epsilon_2 = \\ &= 0,38 - 0,60 - 0,16 + 0,30 = -0,08 Ry = -1,1 эв, \end{aligned} \quad (6.80)$$

т. е. очень близка к экспериментально найденному значению, равному  $-1,13 эв$ .

### Электрон-электронное взаимодействие

Поскольку гамильтониан электрон-электронного взаимодействия имеет недиагональную часть, электрон, рассматриваемый как квазичастица и находящийся, скажем, в состоянии  $k$ ,

может оказаться выведенным в результате рассеяния из этого исходного состояния. Средняя длина свободного пробега электрона вблизи поверхности Ферми довольно велика. Сечение рассеяния электрона, находящегося на уровне Ферми электронного газа при температуре  $T$ , приближенно описывается формулой

$$\sigma \approx \sigma_0 \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2, \quad (6.81)$$

где  $\sigma_0$  — сечение рассеяния для случая экранированного кулоновского потенциала, а  $(k_B T/\epsilon_F)^2$  — статистический множитель, который учитывает, что электрон, служащий мишенью, должен обладать энергией в интервале  $2k_B T$  около уровня Ферми, а состояние, в которое он переходит после столкновения, не занято; равным образом конечное состояние падающего электрона должно быть таким, чтобы он мог занять один из свободных уровней. Таким образом, доля доступных для этого процесса состояний равна отношению  $(k_B T/\epsilon_F)^2$ .

Абрахамс [16] вычислил сечение рассеяния для экранирующего потенциала вида

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-r/l} \quad (6.82)$$

путем расчета сдвигов фаз, так как борновское приближение в этом случае не достаточно точно. Для натрия, взяв для  $l_s$  величину, найденную Пайнсом, получим  $\sigma_0 \approx 17\pi a_H^2$ , где  $a_H$  — борровский радиус. Для электрон-электронного рассеяния в натрии при  $4^\circ \text{K}$  средняя длина свободного пробега электрона, находящегося на поверхности Ферми, составляет  $2,5 \text{ см}$ ; при  $300^\circ \text{K}$  она равна  $4,5 \cdot 10^{-4} \text{ см}$ . Отсюда можно видеть, что рассеяние электрона на других электронах не является сильным. Этот замечательный факт позволяет использовать для описания низлежащих состояний электронного газа приближение квази-частиц.

Другой, относящийся к этому вопросу результат был получен Квином и Ферреллом [17]. Они вычисляли для электронного газа при абсолютном нуле длину свободного пробега добавленного в систему электрона в состоянии  $\mathbf{k}$  вне поверхности Ферми ( $k > k_F$ ). Для большой плотности электронов они получили для средней длины свободного пробега  $\Lambda$  выражение

$$\Lambda k_F = \left( \frac{k - k_F}{k_F} \right)^2 \frac{3,98}{r_s^{1/2}}, \quad (6.83)$$

соответствующее предельному случаю высокой плотности. Множитель  $(k - k_F)^2/k_F^2$  имеет статистический характер и аналого-

чен множителю  $(k_B T / \epsilon_F)^2$ , с которым мы встречались при рассмотрении температурной зависимости сечения рассеяния. При  $k \rightarrow k_F$  средняя длина свободного пробега неограниченно возрастает, и это служит одной из причин, по которой мы можем говорить о резкой границе поверхности Ферми в металле; состояние, соответствующее  $k = k_F$ , оказывается действительно хорошо определенным.

### Диэлектрический формализм на языке диаграммной техники

Пользуясь диаграммной техникой, можно наглядно описать наиболее важные члены ряда теории возмущений, вносящие вклад в диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$  электронной ферми-системы при абсолютном нуле. Диаграммы, которые мы будем использовать, называют диаграммами Голдстоуна; эти диаграммы сходны с известными диаграммами Фейнмана.

Пусть в отсутствие возмущений свободный электронный газ описывается гамильтонианом  $H_0$ . В качестве возмущения мы рассмотрим рассеяние на внешнем потенциале  $v(\omega, \mathbf{q})$ , оператор которого  $H'(\omega, \mathbf{q})$  имеет вид

$$\begin{aligned} H'(\omega, \mathbf{q}) &= \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) v(\omega, \mathbf{q}) e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) + \text{к. с.} = \\ &= v(\omega, \mathbf{q}) e^{-i\omega t} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} \int d^3x \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}] + \text{к. с.} = \\ &= v(\omega, \mathbf{q}) e^{-i\omega t} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \text{к. с.} \quad (6.84) \end{aligned}$$

Из этой записи видно, что для краткости эрмитово сопряженные члены не выписаны в явной форме. Так, если бы, например, потенциал  $v(\omega, \mathbf{q})$  описывал взаимодействие с ультразвуковыми фононами, то в явной форме были бы приведены лишь те члены, которые относятся к поглощению фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и энергией  $\omega$ . Операторы рождения и уничтожения  $c^+$  и  $c$  можно, как и в гл. 5, выразить через электронные и дырочные операторы; таким образом, можно будет встретить, например, такие комбинации:  $\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}$ ,  $\beta_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} \beta_{-\mathbf{k}}^+$ ,  $\alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \beta_{-\mathbf{k}}^+$ ,  $\beta_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}}$ . Здесь первая пара операторов описывает рассеяние электрона, вторая — рассеяние дырки, третья — образование пары электрон — дырка, четвертая — рекомбинацию пары электрон — дырка.

Другим типом возмущений будет кулоновское взаимодействие между электронами системы, т. е.

$$V = \sum_{\mathbf{q}}' V(\mathbf{q}) (\rho_{\mathbf{q}}^+ \rho_{\mathbf{q}} - n). \quad (6.85)$$

Это взаимодействие стремится экранировать потенциал  $v(\omega, \mathbf{q})$ . В дальнейшем мы будем рассматривать лишь линейные относительно потенциала  $v(\omega, \mathbf{q})$  члены, однако в кулоновском взаимодействии нас будут интересовать члены всех порядков. Напомним, что оператор  $(\rho_q^+ \rho_q)$  в (6.85) представляет собой произведение четырех операторов, т. е. содержит комбинации типа

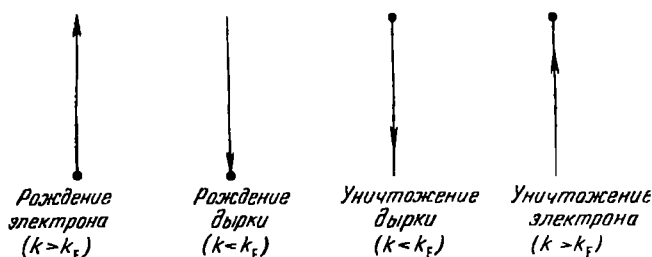


Рис. 6.2. Линии на диаграммах Голдстоуна [19].

Состояние электрона вне ферми-фона описывается стрелкой, направленной вниз; состояние дырки (внутри ферми-фона) — стрелкой, направленной вверх.

$c_{k+q}^+, c_k, c_{k-q}^+, c_k$ ; если же записать его через операторы  $\alpha$  и  $\beta$ , то окажутся возможными уже 16 различных комбинаций.

Далее, мы будем рассматривать процессы рассеяния, вызванные внешним потенциалом  $v(\omega, \mathbf{q})$ , в котором зависимость от времени имеет вид  $\exp(-i\omega t)$ , а зависимость от координат —  $\exp i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}$ . Итак, мы учитываем в гамильтониане члены возмущения двух типов: внешний потенциал  $v(\omega, \mathbf{q})$  и кулоновское взаимодействие между электронами  $V(\mathbf{q})$ . Мы сохраняем для рассмотрения только линейные по  $v(\omega, \mathbf{q})$  члены. При конструировании диаграмм, представляющих члены ряда теории возмущений, относящиеся к электронам и дыркам, мы будем пользоваться графическими обозначениями, приведенными на рис. 6.2. Для фермионов, рассматриваемых как квазичастицы, мы будем пользоваться определениями (5.55) и (5.56), введенными в гл. 5. Тогда переход вследствие рассеяния электронов с волновым вектором  $k < k_F$  в состояние вне ферми-фона будет описываться

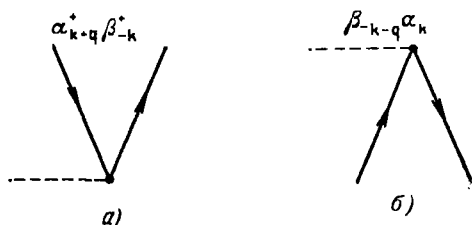


Рис. 6.3. Схема, иллюстрирующая образование (а) и рекомбинацию (б) пары электрон — дырка.

Пунктирные линии описывают взаимодействие.

диаграмм, представляющих члены ряда теории возмущений, относящиеся к электронам и дыркам, мы будем пользоваться графическими обозначениями, приведенными на рис. 6.2. Для фермионов, рассматриваемых как квазичастицы, мы будем пользоваться определениями (5.55) и (5.56), введенными в гл. 5. Тогда переход вследствие рассеяния электронов с волновым вектором  $k < k_F$  в состояние вне ферми-фона будет описываться

как образование пары электрон — дырка, что показано на рис. 6.3. Пунктирная линия, заканчивающаяся в вершине, символически описывает взаимодействие, вызывающее процесс, изображенный диаграммой. Процессы рассеяния электрона на электроне и дырки на дырке в наимизшем порядке теории возмущений изображаются диаграммами на рис. 6.4.

Из проведенного выше аналитического рассмотрения задачи об электронном газе мы знаем, что экранирование играет важную роль в ослаблении эффектов, обусловленных наличием внешнего потенциала  $v(\omega, \mathbf{q})$ . При расчетах по теории возмущений экранирование можно учесть в высших порядках, вычисляя реакцию электронного газа на внешний потенциал. Хотя при этом мы берем лишь линейные по  $v(\omega, \mathbf{q})$  члены, но по межэлектронному кулоновскому взаимодействию  $V(\mathbf{q})$  учитываются члены всех высших порядков.

Уместно поставить вопрос о величине матричного элемента оператора  $U$ , определенного в гл. 1 выражением (1.55)

$$U(0, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) V(t_2) \dots V(t_n). \quad (6.86)$$

В качестве примера мы рассмотрим матричный элемент, определяемый волновой функцией  $|i\rangle$  невозмущенной системы (один электрон в состоянии  $\mathbf{k}_i$  вне заполненного ферми-фона) и волновой функцией  $|f\rangle$  (один электрон в состоянии  $\mathbf{k}_f$  вне заполненного ферми-фона). В низшем порядке, согласно (1.63), имеем

$$\langle f | U_1(0, -\infty) | i \rangle = - \frac{\langle f | v(\omega, \mathbf{q}) | i \rangle}{\epsilon_f - \epsilon_i - \omega - i\delta} \Delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i - \mathbf{q}). \quad (6.87)$$

Для процесса электрон-электронного рассеяния можно кратко написать

$$U_{1ee}(0, -\infty) = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{v(\omega, \mathbf{q})}{\epsilon_f - \epsilon_i - \omega - i\delta} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}, \quad (6.88)$$

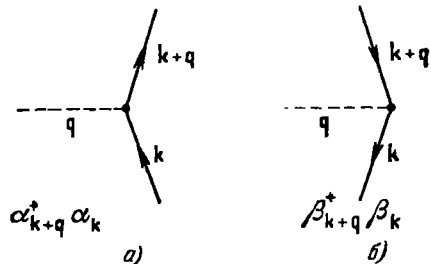


Рис. 6.4. Процессы рассеяния на внешнем потенциале  $v(\omega, \mathbf{q})$  в наимизшем порядке теории возмущений.

*а* — электрон — электрон; *б* — дырка — дырка.

где индекс  $ee$  как раз и указывает тип рассеяния. Эта часть представлена графически диаграммой на рис. 6.4, *a*. Далее мы рассмотрим член второго порядка  $U_{2ee}(0, -\infty)$  взяв его в виде (1.64). Члены, линейные относительно  $v(\omega, \mathbf{q})$ , имеют вид

$$\begin{aligned} \langle f | U_{2ee} | i \rangle = & (-i)^2 \int_{-\infty}^0 dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \times \\ & \times \left[ \sum_n \langle f | v(\omega, \mathbf{q}) | n \rangle \exp [i(\varepsilon_f - \varepsilon_n - \omega - is)t_1] \times \right. \\ & \times \langle n | V(\mathbf{q}') | i \rangle \exp [i(\varepsilon_n - \varepsilon_i - is)t_2] + \sum_m \langle f | V(\mathbf{q}') | m \rangle \times \\ & \left. \times \exp [i(\varepsilon_f - \varepsilon_m - is)t_1] \langle m | v(\omega, \mathbf{q}) | l \rangle \exp [i(\varepsilon_m - \varepsilon_l - \omega - is)t_2] \right]. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Эти члены соответствуют произведению в выражении  $(V+v)^2$ . Выписывая (6.86), мы не оговорили ограничений, накладываемых на промежуточное и конечное состояния требованием сохранения величины волнового вектора. Эти ограничения можно без труда ввести. Предположим, как и ранее, что в состоянии  $|i\rangle$  вне заполненного ферми-фона имеется лишь один электрон с волновым вектором  $\mathbf{k}_i$ .

I. Прежде всего рассмотрим случай, когда в выражении для кулоновского взаимодействия  $\mathbf{q}'=0$ . В частности, если мы имеем дело с электронным газом,  $V(0)=0$ , и член с  $\mathbf{q}'=0$  отсутствует, однако для взаимодействий более общего вида он может существовать. Тогда имеется две возможности. Для  $V(0)$  состояние  $|n\rangle$  в (6.89) может быть отождествлено с состоянием  $|i\rangle$ . В теории вторичного квантования это соответствует операторам для  $V(0)$  вида

$$\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}_i}^+ \alpha_{\mathbf{k}_i} \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^+,$$

т. е. обмен импульсами отсутствует; дырка, возникшая в ферми-фоне при некотором  $\mathbf{k}$ , аннигилирует в том же процессе. Этот член представлен графически диаграммой на рис. 6.5, *a*. Другие возможные операторы для  $V(0)$  имеют вид

$$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'}^+ \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'}^+.$$

В этом случае, как показывает диаграмма на рис. 6.5, *b*, создаются две дырки с  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , которые затем аннигилируют.

II. При  $\mathbf{q}' \neq 0$  кулоновское взаимодействие может привести к рассеянию падающего электрона, переведя его из состояния



с волновым вектором  $k_i$  в состояние с волновым вектором  $k_f$ , равным  $k_i + q'$ . Этот процесс будет сопровождаться возникно-

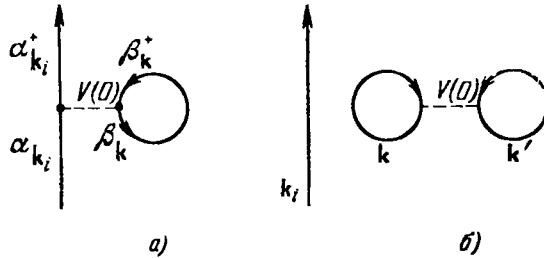


Рис. 6.5. Процессы рассеяния с нулевым волновым вектором.

Ни один из процессов не влияет на рассеяние, хотя процессы *a* изменяют энергию добавленного в систему электрона в состоянии  $k_i$ , а процессы *b* вносят вклад в энергию ферми-фона.

веннем пары электрон — дырка, что описывается операторами вида

$$\sum_k \alpha_{k-q}^+ \beta_{-k}^- \alpha_{k_i+q}^+ \alpha_{k_i}$$

Диаграмма, соответствующая этому процессу, приведена на рис. 6.6, *a*. За образованием пары электрон — дырка следует ее аннигиляция вследствие взаимодействия с внешним потенциалом возмущения  $v(\omega, q)$ . Аннигиляция описывается произведением операторов  $\alpha_{k-q} \beta_{-k}$ , где наличие  $q$  вызвано экспоненциальной зависимостью  $e^{iq \cdot x}$ , содержащейся в потенциале  $v(\omega, q)$ . Но аннигиляцию испытывает именно та пара, которая до того возникла, и поэтому волновой вектор  $q'$  должен быть равен  $q$ . Таким образом, процесс рассеяния  $k_i \rightarrow k_i + q$  в случае непрямого процесса, показанного на рис. 6.6, *a*, будет точно таким же, как и для прямого процесса, показанного на рис. 6.4, *a*. Полностью процесс рассеяния описывается оператором

$$\sum_k \alpha_{k-q} \beta_{-k} \alpha_{k-q}^+ \beta_{-k}^+ \alpha_{k_i+q}^+ \alpha_{k_i}$$

Если описывать этот процесс произведением  $v(t_1)V(t_2)$  в надлежащей временной последовательности, то, взяв по  $t_2$  интеграл того же типа, что и в выражении (6.89), получим

$$\frac{1}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_{-k} + \epsilon_{k_i+q} - \epsilon_{k_i} - i\delta} \tag{6.90}$$

Однако следующее интегрирование по  $t_1$  обеспечивает сохранение полной энергии, т. е.  $\omega = \epsilon_{k_i+q} - \epsilon_{k_i}$ , и поэтому (6.90) можно

переписать в виде

$$\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{-\mathbf{k}} + \omega - i\delta}. \quad (6.91)$$

Легко показать, что волновой вектор  $\mathbf{k} - \mathbf{q}$  должен относиться к электрону, а  $-\mathbf{k}$  — к дырке, переписав еще раз (6.91) в виде

$$\frac{f_o(\epsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})]}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{-\mathbf{k}} + \omega - i\delta}, \quad (6.92)$$

где  $f_o$  — функции распределения чисел заполнения в невозмущенном основном состоянии.

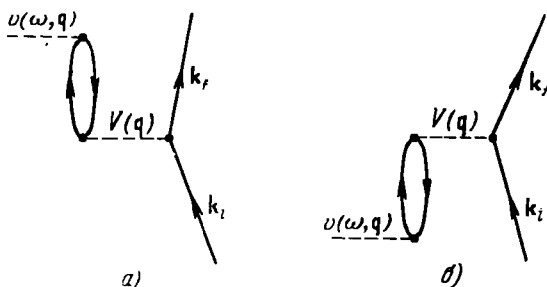


Рис. 6.6. Процессы электронного рассеяния с образованием пары электрон — дырка в промежуточном состоянии.

*a* — процесс, описываемый оператором

$$\alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ \beta_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}_i+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}_i},$$

*б* — процесс, описываемый оператором

$$\alpha_{\mathbf{k}_i+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}_i} \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \beta_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+.$$

Процесс, изображаемый диаграммой на рис. 6.6, б, соответствует оператору

$$\sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}_i+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}_i} \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \beta_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+,$$

или во временной последовательности — произведению  $V(t_1)v(t_2)$ , и поэтому интегрирование по  $t_2$  дает

$$\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{-\mathbf{k}} - \omega - i\delta} \rightarrow \frac{f_o(\epsilon_{-\mathbf{k}}) [1 - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})]}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{-\mathbf{k}} - \omega - i\delta}. \quad (6.93)$$

Учтем далее, что  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$ . Поскольку  $\mathbf{k}$  здесь немой индекс, то в (6.92) его можно заменить на  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  и переписать (6.92) в

форме

$$\frac{f_o(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) [1 - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}})]}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega - i\delta}. \quad (6.94)$$

При  $s=0$  результат интегрирования по  $t_2$  для суммы двух процессов, изображенных на рис. 6.6, можно, используя (6.93) и (6.94), записать в следующем виде:

$$M(\omega, \mathbf{q}) = \sum \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega} \{ f_o(\epsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) [1 - f_o(\epsilon_{\mathbf{k}})] \}. \quad (6.95)$$

III. Процессы рассеяния еще двух типов показаны на рис. 6.7. В обоих происходит обмен электронами. На диаграмме,

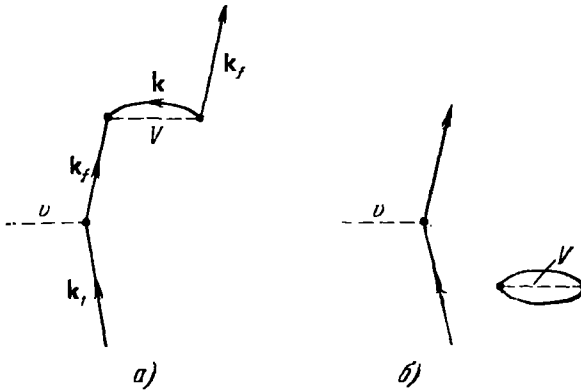


Рис. 6.7. Диаграммы процессов обмена.

приведенной на рис. 6.7, а, кулоновское взаимодействие представлено операторами

$$\alpha_{\mathbf{k}_f}^+ \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}_f},$$

описывающими рассеяние электрона в состоянии  $\mathbf{k}_f$  в результате взаимодействия с электроном ферми-фона (обмен). В случае, изображаемом на рис. 6.7, б, кулоновское взаимодействие создает пару электрон — дырка в одной вершине, тогда как в другой вершине оно же ведет к ее аннигиляции.

Процесс, изображенный диаграммами на рис. 6.6, представляет особый интерес, так как все изменения изображенных там импульсов одинаковы и в силу соображений, высказанных в приложении (в конце книги) о циклических (кольцевых) диаграммах для энергии, такие диаграммы должны быть основным

типом диаграмм для процессов рассеяния при больших значениях электронной плотности. В третьем порядке (первым по  $v$  и одновременно вторым по  $V$ ) диаграммы, аналогичные рис. 6.6, приведены на рис. 6.8. О таких диаграммах говорят, что они

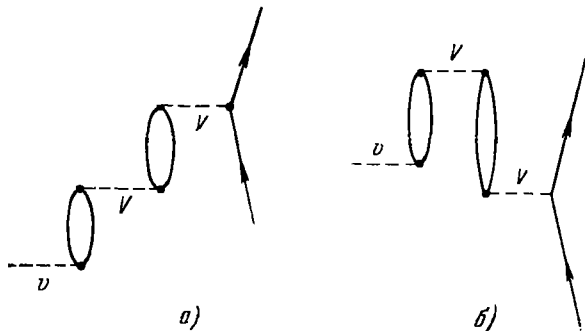


Рис. 6.8. Две диаграммы из последовательности, состоящей из 3! диаграмм, для поляризационных петель в третьем порядке.

Во всех вершинах обменное изменение импульса должно быть одинаковым.

содержат *поляризационные петли*. Примеры диаграмм, описывающих некоторые другие процессы рассеяния в третьем порядке показаны на рис. 6.9; эти процессы не относятся к процессам, описываемым чисто поляризационными петлями.

Последовательность диаграмм (во всех порядках), содержащих только поляризационные петли, может быть записана в виде ряда. В случае электрон-электронного рассеяния первый член такого ряда изображается диаграммой на рис. 6.4, а, второй член — диаграммами на рис. 6.6, третий — диаграммами на рис. 6.8. Если, соблюдая должную аккуратность, обобщить эти результаты, то последовательность диаграмм с поляризационными петлями после должного учета знаков членов и числовых коэффициентов можно записать в виде следующего ряда:

$$v(\omega, \mathbf{q}) \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} [1 - VM + (VM)^2 - (VM)^3 + \dots], \quad (6.96)$$

где  $M(\omega, \mathbf{q})$  определяется выражением (6.95). Суммирование этого ряда даст для эффективного потенциала выражение

$$v_{\text{эфф}}(\omega, \mathbf{q}) = v(\omega, \mathbf{q}) \frac{1}{1 + V(\mathbf{q})M(\omega, \mathbf{q})}. \quad (6.97)$$

Диэлектрическая проницаемость определяется, как известно, отношением

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) = \frac{v(\omega, \mathbf{q})}{v_{\text{эфф}}(\omega, \mathbf{q})} \quad (6.98)$$

и, следовательно, для  $\epsilon(\omega, \mathbf{q})$  получим

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) = 1 + V(\mathbf{q})M(\omega, \mathbf{q}), \quad (6.99)$$

что полностью соответствует результату (6.23), полученному методом самосогласованного поля. Мы видим, что в данном вопросе метод самосогласованного поля (так же, как и приближение хаотических фаз) эквивалентен диаграммному методу до тех пор, пока при вычислении диэлектрической проницаемости

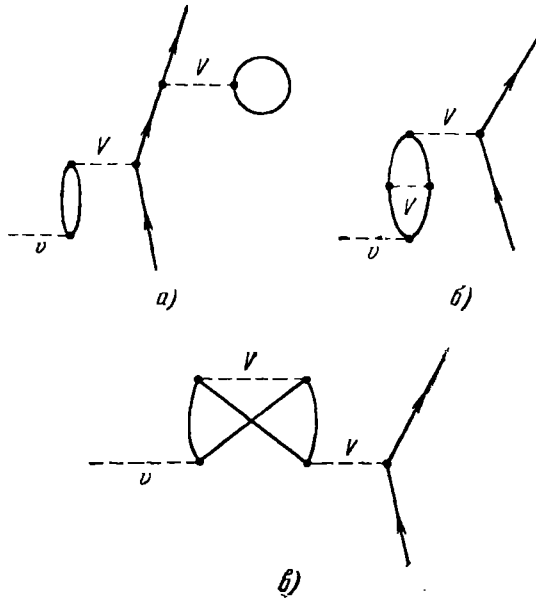


Рис. 6.9. Диаграммы, описывающие некоторые возможные процессы рассеяния в третьем порядке.

(т. е. эффективного потенциала) учитываются только те члены взаимодействия в разложении матрицы  $U$ , которые описываются диаграммами с поляризационными петлями. Эффективное, или экранированное, взаимодействие в диаграммном методе обычно изображают двойными волнистыми линиями, соединяющими вершины, а пунктирные линии по-прежнему описывают «чистое», т. е. не экранированное взаимодействие.

**Теорема о связанных диаграммах.** *Любой участок диаграммы, который не связан с остальной ее частью и не имеет внешних линий, ведущих наружу или внутрь диаграммы, называется несвязной частью. Диаграмма, не содержащая несвязных частей,*

называется *связной диаграммой*. Согласно этим определениям диаграммы, изображенные на рис. 6.3; 6.4; 6.5, *а*; 6.6; 6.7, *а*; 6.8 и 6.9, являются связными. Несвязные их части имеются только на диаграммах, приведенных на рис. 6.5, *б* и 6.7, *б*. Получим теперь знаменитую теорему о связных диаграммах теории возмущений. Для этого мы воспользуемся приближенным методом, развитым в гл. I при изложении теории возмущений, зависящих от времени.

Временная последовательность элементов любой диаграммы отражена в расположении ее связных и несвязных частей и, следовательно, влияет на области и последовательность интегрирований в выражении для  $U\Phi_0$ . Рассмотрим все диаграммы, содержащие несвязные части и отличающиеся друг от друга лишь тем, что «место» включения взаимодействия в несвязных частях располагается в диаграмме по-разному относительно остальной ее части. Однако внутри самих связных и несвязных частей последовательность включения взаимодействий считается фиксированной. Пусть времена включения взаимодействий в несвязных частях обозначены через  $t_1, t_2, \dots, t_n$  (причем  $0 > t_1 > t_2 > \dots > t_n$ ), а времена включения взаимодействий в связных частях — через  $t'_1, t'_2, \dots, t'_m$  (причем  $0 > t'_1 > t'_2 > \dots > t'_m$ ). Сумма членов, соответствующих всем этим диаграммам, или всем различным относительным расположениям связных и несвязных частей, получается путем последовательного выполнения всех интегрирований по времени с учетом одного лишь ограничения  $0 > t_1 > t_2 > \dots > t_n$  и  $0 > t'_1 > t'_2 > \dots > t'_m$ . Эта сумма, следовательно, равна произведению выражений, полученных по отдельности, от обеих (связных и несвязных) частей. Это позволяет рассматривать члены, относящиеся к несвязным частям, как некие множители. Тогда

$$U|0\rangle = (\Sigma \text{ членов от несвязных частей}) \times (\Sigma \text{ членов от связных частей}).$$

Если же мы учтем условие нормировки знаменателя

$$\langle 0|U|0\rangle = (\Sigma \text{ членов от несвязных частей})$$

(это условие выполняется, так как для диагональных элементов внешние линии дадут нуль), то получим, что

$$|0\rangle = \Sigma \text{ членов от связных частей.}$$

Теперь выполним интегрирования по времени в явном виде:

$$|0\rangle = U|0\rangle = \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n e^{iH_0 t_n} V e^{-iH_0 t_n} e^{st_n} |0\rangle =$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^0 dt_1 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \exp [i(H_0 - E_0)t_n + st_n] V |0\rangle = \\
 &= \sum_n (-i)^n \int \dots \frac{\exp [i(H_0 - E_0)t_{n-1} + st_{n-1}]}{-i(E_0 - H_0 + is)} V |0\rangle = \\
 &= \sum_n (-i)^{n-1} \int \dots \int_{-\infty}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \exp [iH_0 t_{n-1}] V \exp [-iH_0 t_{n-1}] \times \\
 &\quad \times \frac{\exp [i(H_0 - E_0)t_{n-1} + st_{n-1}]}{E_0 - H_0 + is} V |0\rangle = \sum_n (-i)^{n-1} \times \\
 &\quad \times \int \dots \int_{-\infty}^{t_{n-2}} dt_{n-1} \exp [i(H_0 - E_0 + 2is)t_{n-1}] V \frac{1}{E_0 - H_0 + is} V |0\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.100}$$

Отсюда

$$\begin{aligned}
 |0\rangle = \lim_{s \rightarrow +0} \sum_L \frac{1}{E_0 - H_0 + ins} V \frac{1}{E_0 - H_0 + i(n-1)s} V \dots \\
 \dots \frac{1}{E_0 - H_0 + is} V |0\rangle,
 \end{aligned} \tag{6.101}$$

где индекс  $L$  означает, что сумма берется *только по связным диаграммам*. Тогда можно записать точный результат в виде

$$\boxed{|0\rangle = \sum_L \left( \frac{1}{E_0 - H_0} V \right)^n |0\rangle.} \tag{6.102}$$

Точное выражение для энергетического сдвига  $\Delta E$  определяется формулой (1.45), т. е.

$$\boxed{\Delta E = \sum_{L_1} \langle 0 | V \left( \frac{1}{E_0 - H_0} V \right)^n | 0 \rangle,} \tag{6.103}$$

где вклады в сумму вносят лишь связные диаграммы без каких-либо внешних линий. Знаменатель  $\langle 0|0\rangle$  нормирован и равен единице. *Итак, связная диаграмма — это диаграмма, которая не имеет никаких внешних линий, но обладает тем свойством, что в ней можно непрерывным образом «пройти» по всем линиям, как, например, в случае диаграмм, приведенных.*

на рис. 6.10, *а* и *б*. Выражения (6.102) и (6.103) представляют собой ряды из членов, расположенных в последовательности, соответствующей порядкам теории возмущений (цепочка связанных диаграмм). Другой способ вывода этих выражений приведен в работе Блоха [20].

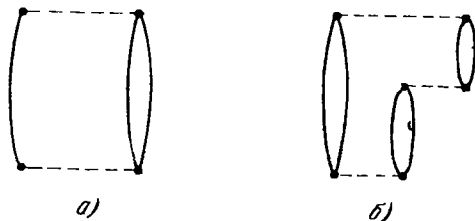


Рис. 6.10. Примеры связанных диаграмм.

В качестве тривиального примера рассмотрим гамильтониан системы бозонов  $H = \varepsilon a^+ a + \eta (a + a^+)$ , где  $\varepsilon a^+ a = H_0$ . Единственная связанная диаграмма получается при разложении выражения

$$\langle 0 | \eta a | 1 \rangle \langle 1 | \frac{1}{-H_0} | 1 \rangle \langle 1 | \eta a^+ | 0 \rangle, \quad (6.104)$$

которое описывает образование бозона и его последующее исчезновение. При этом

$$\Delta E = -\eta^2/\varepsilon \quad (6.105)$$

представляет собой точное выражение для сдвига основного уровня.

### ЗАДАЧИ

6.1. Пользуясь выражением (6.47), вычислить диэлектрическую проницаемость электронного газа в приближении Хартри. Прежде всего следует показать, что

$$\frac{1}{\epsilon_H(0, q)} - 1 = -\frac{32\pi e^2 m}{(2\pi)^3 q^2} \int_{k' < k_F} \int_{k' > k_F} d^3 k d^3 k' | \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} | \mathbf{k}' \rangle |^2 \mathcal{P} \frac{1}{k'^2 - k^2}, \quad (6.106)$$

где  $\mathcal{P}$  — символ главного значения. Оценка значений интегралов покажет, что

$$\frac{1}{\epsilon_H(0, q)} - 1 = -\frac{k_s^2}{2q^2} g(q), \quad (6.107)$$



где  $k_s = 4\pi n e^2 / \epsilon_F$ , а

$$g(\mathbf{q}) = 1 + \frac{k_F}{q} \left( 1 - \frac{q^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|. \quad (6.108)$$

Указание. При оценке интегралов сначала надо установить, что

$$\int_{\substack{k < k_F \\ k > k_F}} d^3k d^3k' \delta(\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \mathcal{P} \frac{1}{k'^2 - k^2} = 0. \quad (6.109)$$

Тогда искомый интеграл равен интегралу от той же функции, взятому по области значений  $k < k_F$ , но по *всем значениям*  $k'$ . Легко показать, что, вводя дельта-функцию, мы сразу найдем интеграл

$$\int_{k < k_F} d^3k \frac{1}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 - k^2}. \quad (6.110)$$

6.2. а. Показать, что во втором порядке энергия возмущения основного состояния системы всегда отрицательна. Следовательно, если член потенциальной энергии в гамильтониане имеет вид  $\lambda V$ , где  $\lambda$  — константа связи, то производная  $\partial^2 E_g / \partial \lambda^2$  отрицательна. Здесь  $E_g$  — энергия основного состояния.

б. Показать далее, что  $\frac{\partial \langle V \rangle}{\partial \lambda} \leq 0$ . Этот результат Феррелл [21] использовал в качестве критерия при экстраполяции выражений для энергии корреляции электронного газа.

6.3. Пусть плотность пробного заряда описывается функцией

$$e r_{\mathbf{q}} (\exp[-i(\omega t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})] + \exp[i(\omega t + \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})]). \quad (6.111)$$

Показать, что в низшем порядке теории возмущений, зависящих от времени, изменение энергии электронного газа, обусловленное внесением пробного заряда, определяется выражением

$$\frac{dW}{dt} = 2\pi\omega \left( \frac{4\pi e^2}{q^2} \right)^2 r_{\mathbf{q}}^2 |\langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 [\delta(\omega_{n0} - \omega) - \delta(\omega_{n0} + \omega)]. \quad (6.112)$$

Сопоставляя это выражение с (6.49), получим

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{8\pi e^2}{q^2} \omega r_{\mathbf{q}}^2 \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right). \quad (6.113)$$

6.4. Рассмотрим уравнение движения свободного электронного газа, частота релаксации которого  $\eta$ :

$$\ddot{x} + \eta \dot{x} = \frac{eE}{m}. \quad (6.114)$$

Показать, что поляризуемость

$$\alpha(\omega, 0) = \frac{ne x}{E} = -\frac{ne^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega^2 + i\eta\omega}, \quad (6.115)$$

и при  $\omega$ , близких к  $\omega_p$ , справедливо выражение

$$\frac{1}{\epsilon(\omega, 0)} \approx \frac{1}{2} \frac{\omega + i\eta}{\omega - \omega_p + \frac{1}{2} i\eta}. \quad (6.116)$$

Показать также, что

$$\lim_{\eta \rightarrow +0} \operatorname{Im} \left( \frac{1}{\epsilon} \right) = -\omega \rho \delta(\omega - \omega_p). \quad (6.117)$$

Если для вычисления (6.52) использован только этот полюс, то показать, что

$$E_{\text{взаим}} = \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{1}{2} \omega_p - \frac{2\pi n e^2}{q^2} \right). \quad (6.118)$$

Обратить внимание на вклад собственных нулевых плазменных колебаний в энергию основного состояния.

6.5. Пусть в единичном объеме

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^n e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i},$$

а гамильтониан имеет вид

$$H_0 = \sum_i \left[ \frac{p_i^2}{2m} + V(\mathbf{x}_i) \right].$$

Показать, что

$$\text{а) } [H_0, \rho_{\mathbf{q}}] = - \sum_i \frac{1}{m} \mathbf{q} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{q} \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i}; \quad (6.119)$$

$$\text{б) } [[H_0, \rho_{\mathbf{q}}], \rho_{-\mathbf{q}}] = - \frac{n}{m} q^2; \quad (6.120)$$

в) в представлении, в котором  $H_0$  диагонально, справедливо соотношение

$$\sum_m \omega_{m0} \{ |\langle 0 | \rho_{\mathbf{q}} | m \rangle|^2 + |\langle 0 | \rho_{-\mathbf{q}} | m \rangle|^2 \} = \frac{n}{m} q^2. \quad (6.121)$$

Этот результат представляет собой установленное Нозьером и Пайнсом правило продольных  $f$ -сумм [22]. Обычно можно написать

$$|\langle 0 | \rho_{\mathbf{q}} | m \rangle|^2 = |\langle 0 | \rho_{-\mathbf{q}} | m \rangle|^2.$$

Установить, при каких условиях справедливо это равенство.

6.6. Пользуясь (6.47) в предельном случае  $\omega \gg \omega_{p0}$  и пользуясь правилом сумм Нозьера и Пайнса, показать, что

$$\epsilon(\omega, \mathbf{q}) \approx 1 - \frac{4\pi n e^2}{m \omega^2}. \quad (6.122)$$

6.7. Пользуясь решением задачи 6.5, показать, что

$$\int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right) = -\frac{\pi \omega_p^2}{2}. \quad (6.123)$$

6.8. Зная, что  $\epsilon \equiv 4\pi i \sigma / \omega$ , показать справедливость соотношения

$$\int_0^{\infty} d\omega \sigma_1(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{8} \omega_p^2, \quad (6.124)$$

где  $\sigma = \sigma_1 - i\sigma_2$ . Этот результат представляет собой важное правило сумм. Его применение к переходу в сверхпроводящее состояние обсуждается в работах [23, 24]. Доказательство весьма просто. Принцип причинности требует, чтобы  $\epsilon$  как функция  $\omega$  была аналитической в верхней полуплоскости  $\omega$ . Далее из (6.47) следует, что на вещественной оси  $\omega\epsilon_1$  есть четная, а  $\omega\epsilon_2$  — нечетная функция  $\omega$ . Рассмотреть контурный интеграл, взяв область от  $-\infty$  до  $+\infty$  на вещественной оси и дополнив ее полуокружностью на  $\infty$  в верхней полуплоскости, используя результат задачи 6.6 (асимптотическое выражение для  $\epsilon$ ).

6.9. Пользуясь динамическим структурным фактором в том виде, как он определен выражением (6.64), показать, что для системы  $N$  частиц справедливо соотношение

$$\int_0^{\infty} d\omega \mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = N \mathfrak{S}(\mathbf{q}). \quad (6.125)$$

Полученная таким путем величина  $\mathfrak{S}(\mathbf{q})$  известна под названием структурного фактора для жидкости и равна фурье-образу парной функции корреляции

$$\rho(\mathbf{x}) = N^{-1} \langle 0 | \rho^+(\mathbf{0}) \rho(\mathbf{x}) | 0 \rangle, \quad (6.126)$$

$$\mathfrak{S}(\mathbf{q}) = N^{-1} \langle 0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^+ | 0 \rangle = \int d^3x \rho(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}. \quad (6.127)$$

6.10. Используя решение задачи 6.5, в), показать, что

$$\int_0^{\infty} d\omega \cdot \omega \mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{Nq^2}{2m}, \quad (6.128)$$

где  $m$  — масса частицы. Предполагалось, что  $\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{q}) = \mathfrak{S}(\omega, -\mathbf{q})$ .

6.11. В циклических (кольцевых) диаграммах (см. приложение в конце книги) мы имеем дело со связанными событиями, описываемыми операторами

$$A_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{q}) = \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \beta_{-\mathbf{k}}^+; \quad A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = \beta_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (6.129)$$

где  $\alpha, \alpha^+$  — электронные, а  $\beta, \beta^+$  — дырочные операторы.

Показать, что

$$[A_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{q}), A_{\mathbf{k}'}^+(q')] = 0, \quad (6.130)$$

и

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}), A_{\mathbf{k}'}^+(\mathbf{q}')] &= \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \\ &\quad - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}'} \beta_{-\mathbf{k}}^+ \beta_{-\mathbf{k}'} \approx \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}, \end{aligned} \quad (6.131)$$

поскольку в невозмущенном вакуумном состоянии электронное и дырочное числа заполнений равны нулю. Заметим, что в этом приближении для операторов  $A, A^+$  справедливы те же перестановочные соотношения, что и для бозонных операторов, поскольку пара электрон — дырка ведет себя, как бозон.

## Литература

1. Car W. J., Phys. Rev. **122**, 1437 (1961).
2. Ehrenreich H., Cohen M. N., Phys. Rev. **115**, 786 (1959).
3. Goldstone J., Gottfried K., Nuovo Cimento **13**, 849 (1959).
4. Пайнс Д., Проблема многих тел, ИЛ, 1963.
5. Gell-Mann M., Brueckner K. A., Phys. Rev. **106**, 364 (1957).
6. Pines D. в сб. «Solid State Physics», vol. 1, N. Y., 1955.
7. Sawada K., Phys. Rev. **106**, 372 (1957).
8. Steinman W., Phys. Rev. Letts **5**, 470 (1960); Z. Phys. **163**, 92 (1961).
9. Brown R. W., Wessel P., Troupson E. P., Phys. Rev. Letts **5**, 472 (1960).
10. Ferrell R. A., Phys. Rev. **111**, 1214 (1958).
11. Шифф Л., Квантовая механика, ИЛ, 1959.
12. Nozières P., Pines D., Nuovo Cimento **9**, 470 (1958).
13. Van Hove, Phys. Rev. **95**, 249 (1954).
14. Woll E. J., Kohn W., Phys. Rev. **126**, 1693 (1962).
15. Nozières P., Pines D., Phys. Rev. **111**, 442 (1958).
16. Abrahams E., Phys. Rev. **95**, 839 (1954).
17. Quinn J. J., Ferrell R. A., Phys. Rev. **112**, 812 (1958).
18. Langer J. S., Vosko S. H., J. Phys. Chem. Solids **12**, 196 (1960).
19. Goldstone J., Proc. Roy. Soc. **A239**, 268 (1957).
20. Bloch C., Nuclear Phys. **7**, 451 (1958).
21. Ferrell R. A., Phys. Rev. Letts **1**, 444 (1958).
22. Nozières P., Pines D., Phys. Rev. **109**, 741 (1958).
23. Ferrell R. A., Glover R. E., III, Phys. Rev. **109**, 1398 (1958).
24. Tinkham M., Ferrell R. A., Phys. Rev. Letts **2**, 331 (1959).