



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2067 / 2-81

1/6-81
P17-81-132

И.М.Рангелов

ВЛИЯНИЕ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
КОЛЛЕКТИВИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ
ПРОНИЦАЕМОСТЬ МЕТАЛЛОВ

Направлено в "Journal of Physics F"

1981

Будем рассматривать металл как заряженную электронную жидкость в ионном остове /ИО/, делающую благодаря своему существованию этот остов устойчивым. Частицы жидкости - коллективизированные валентные электроны /КВЭ/. Мерой индивидуальности КВЭ служит их закон дисперсии - иногда весьма сложная зависимость энергии от квазиимпульса. Энергетический спектр КВЭ определяет число и поведение электронов проводимости /ЭП/ под действием внешних полей, т.е. электромагнитные и оптические свойства металла, а вместе со спектром фононов - его упругие и тепловые свойства. Для построения последовательной теории металлического состояния необходимо учесть как взаимодействие КВЭ с периодическим самосогласованным потенциалом кристаллической решетки /СПКР/, так и взаимодействие КВЭ друг с другом. Причем учет межэлектронного взаимодействия КВЭ не затрагивает характера их стационарных состояний в периодическом СПКР.

Автором было показано¹, что СПКР благодаря колебаниям ИО и сильному взаимодействию между КВЭ и внутренними электронами ИО /ВЭИО/, сильно сглажен, а благодаря большой плотности КВЭ - сильно экранирован и локализован в малой области около центра ИО. Известно, что КВЭ взаимодействует между собой классическими кулоновскими /КК/ и обменными квантово-механическими кулоновскими /ОКК/ силами. В реальных металлах концентрация КВЭ велика, но не настолько, чтобы можно было использовать приближение высокой плотности². Поэтому вопрос о влиянии межэлектронного взаимодействия КВЭ на их поведение остается открытым. Хотя утверждается³, что влияние ОКК взаимодействия /ОККВ/ между КВЭ на диэлектрическую проницаемость металлов /ДПМ/ хорошо определено⁴⁻⁷, нам кажется, что все эти результаты - грубые приближения. Цель настоящей работы - получить более близкие, хотя и интерполяционные формулы, точнее описывающие влияние ОККВ на ДПМ, чем существующее многообразие приближений.

С самого начала своего развития теория металлов основывалась на простейших моделях, в которых ЭП рассматривались как идеальный газ свободных частиц. Поэтому естественно, что теория Друде, позднее строго сформулированная с помощью классической механики и статистической физики Лорентцом, давала только некоторые качественные объяснения. Применение квантовой статистики Зоммерфельдом и квантовой механики Блохом, Френкелем, Бете и Пайерлсом, смогло намного улучшить совпадение теоретических результатов с результатами эксперимента. Слабость СПКР,

в котором движутся КВЭ, их большая средняя кинетическая энергия и проявление принципа Паули свидетельствуют о неэффективности влияния СПКР на поведение КВЭ. Экспериментально определенные поверхности Ферми /ПФ/ КВЭ ^{8,9} показывают, что все они /ПФ КВЭ/ могут быть получены путем слабой деформации ферми-сферы /ФС/ ^{10,11}. Поэтому можно предположить, что поведение КВЭ можно описать в приближении свободных электронов /ПСЭ/ с помощью плоских волн /ПВ/.

$$\phi_j(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(ik_j r). \quad /1/$$

Среднее распределение плотности КВЭ в состоянии j, рассматриваемой с точки зрения квантовой механики

$$\rho_j(r) = |\phi_j(r)|^2 = (\Omega)^{-1}, \quad /2/$$

оказывается независимым от этого состояния. Поэтому вместо плотностей в различных состояниях $\rho_j(r)$ можем просто написать ρ_0 , и тогда средняя плотность $\rho(r)$ всех N КВЭ будет соответствовать их классической плотности, так как

$$\rho(r) = N\rho_0 = N/\Omega. \quad /3/$$

С помощью такого соотношения выражение для энергии ККВ двух КВЭ приобретает вид

$$C_{j\ell} = C_{10} = \rho_0^2 e^2 \iint \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad /4/$$

Полная энергия ККВ всех КВЭ выражается следующим образом:

$$C = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \rho_0^2 e^2 \iint \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad /5/$$

Энергию ОККВ КВЭ можно найти, если многоэлектронную систему описать не в приближении Хартри /ПХ/, а в приближении Хартри-Фока /ПХФ/. В ПХФ полная волновая функция /ВФ/ всех N КВЭ $\Phi(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)$ имеет вид детерминанта Слэтера:

$$\Phi(X_1 X_2 X_3 \dots X_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(X_1) & \phi_1(X_2) & \phi_1(X_3) & \dots & \phi_1(X_N) \\ \phi_2(X_1) & \phi_2(X_2) & \phi_2(X_3) & \dots & \phi_2(X_N) \\ \phi_3(X_1) & \phi_3(X_2) & \phi_3(X_3) & \dots & \phi_3(X_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(X_1) & \phi_N(X_2) & \phi_N(X_3) & \dots & \phi_N(X_N) \end{vmatrix} \quad /6/$$

где $X = (\sigma, r)$. С помощью полной ВФ /6/ можно показать, что полная энергия всех N КВЭ в ПХФ равна ¹²⁻¹⁵:

$$E = - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \int \phi_j^*(r) \Delta \phi_j(r) d\vec{r} + \sum_j \int U(r) |\phi_j(r)|^2 d\vec{r} + \frac{e^2}{N(N-1)} \sum_{j\ell} \left\{ \int \frac{|\phi_j(r_1)|^2 |\phi_\ell(r_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \int \frac{\phi_j^*(r_1) \phi_\ell^*(r_2) \phi_j(r_2) \phi_\ell(r_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right\}. \quad /7/$$

Последний дополнительный член в /7/ учитывает энергию ОККВ. Он появляется вследствие запрета Паули двум КВЭ находиться в одном и том же состоянии. В ПХ такого запрета нет, и поэтому в ПХ ОККВ между КВЭ не учитывается. Специальный вид полной ВФ /6/ многоэлектронной системы N КВЭ учитывает запрет Паули /детерминант Слэтера не может иметь двух одинаковых столбцов/, и поэтому в ПХФ ОККВ между КВЭ учитывается. Для того, чтобы показать, как ОККВ уменьшает энергию ККВ между КВЭ с параллельными спинами, и чтобы обосновать наше дальнейшее исследование, введем выражения для плотности одного КВЭ, двух КВЭ и т.д. из совокупности N КВЭ. Если многоэлектронная ВФ /6/ N КВЭ $\Phi(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)$ описывает поведение всех N КВЭ, то мы можем ввести первый и второй порядок матрицы плотности /ПМ/, используя обозначение Левдина ¹⁶. Так, одночастичная МП имеет вид ^{17,18}

$$\Gamma(r_1) = N \sum_{\sigma} \int |\Phi(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)|^2 dX_2 dX_3 \dots dX_N, \quad /8a/$$

а одночастичная МП перехода /МПП/ /МП Дирака/ - вид

$$\Gamma(r_1' | r_1) = N \sum_{\sigma} \int \Phi^*(X_1', X_2, X_3, \dots, X_N) \Phi(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N) dX_2 dX_3 \dots dX_N, \quad /8b/$$

Двухчастичная МП записывается в виде

$$\Gamma(r_1, r_2) = \frac{N(N-1)}{2} \times \quad /9a/$$

$$\times \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int |\Phi(X_1, X_2, X_3, X_4, \dots, X_N)|^2 dX_3 dX_4 \dots dX_N,$$

а двухчастичная МПП - в виде

$$\Gamma(r_1', r_2' | r_1, r_2) = \frac{N(N-1)}{2} \times \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int \Phi^*(X_1', X_2', X_3, X_4, \dots, X_N) \Phi(X_1, X_2, X_3, X_4, \dots, X_N) dX_3 dX_4 \dots dX_N. \quad /9b/$$

Так как X включает как координату r КВЭ, так и проекцию его спина σ , то суммирование идет по всем состояниям в детерминанте Слэтера /6/. В случае, когда многоэлектронная ВФ $\Phi(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)$ имеет вид детерминанта Слэтера /6/, а одноэлектронные ВФ $\phi_k(r)$ взаимно ортогональны, то из /86/ для одночастичной МПП следует:

$$\Gamma(r_1 | r_1) = 2 \sum_k \phi_k^*(r_1) \phi_k(r_1), \quad /10а/$$

а для ее диагонального элемента - одночастичной МП,

$$\Gamma(r_1) = 2 \sum_k |\phi_k(r_1)|^2. \quad /10б/$$

Двухчастичная МП в этом представлении выражается следующим образом:

$$\Gamma(X_1; X_2) = \Gamma(X_1) \Gamma(X_2) - \frac{1}{2} |\Gamma(X_1 | X_2)|. \quad /11/$$

Функция $\Gamma(X)$ описывает зарядовую плотность КВЭ и зависит от его координат. Двухчастичная МП $\Gamma(X_1; X_2)$ пропорциональна вероятности найти один КВЭ в точке X_1 , если другой КВЭ находится в точке X_2 . С помощью этих функций плотностей КВЭ их полную энергию можно представить в виде /12, 17, 18/:

$$E = \int \frac{p_1^2}{2m} \Gamma(X_1' | X_1) \delta(X_1' - X_1) dX_1' dX_1 + \int U(X_1) \Gamma(X_1' | X_1) \delta(X_1' - X_1) dX_1' dX_1 + \frac{e^2}{2} \int \frac{\Gamma(X_1; X_2)}{|r_1 - r_2|} dX_1 dX_2. \quad /12/$$

Последний член в /12/ представляет сумму двух членов:

$$\frac{e^2}{2} \int \frac{\Gamma(X_1) \Gamma(X_2)}{|r_1 - r_2|} dX_1 dX_2 - \frac{e^2}{4} \int \frac{|\Gamma(X_1 | X_2)|^2}{|r_1 - r_2|} dX_1 dX_2. \quad /13/$$

т.е. сумму члена, описывающего ККВ между КВЭ, и члена, описывающего ОККВ между КВЭ. Если учесть /10/, то можно видеть, что запись /13/ совпадает с записью последних двух членов в /7/. В ПСЭ ВФ КВЭ есть ПВ, и тогда, на основе /10а/ и /1/, для МПП получаем:

$$\Gamma(r_1 | r_2) = \frac{2}{\Omega} \sum_{|k| < k_F} \exp(ik(r_2 - r_1)). \quad /14/$$

Суммирование в /14/ производится по всем значениям волнового вектора K внутри ФС. Если число КВЭ N достаточно велико, то эту сумму можно заменить интегралом, приводящим к выражению /12, 15, 19, 20/:

$$\Gamma(r_1 | r_2) = \frac{3N}{\Omega} \left(\frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right), \quad /15/$$

где $r = r_1 - r_2$, а k_F - радиус ФС КВЭ ($\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{\Omega} = \frac{Z}{\Omega_0}$). Тогда выражение /13/ принимает вид /12/:

$$\frac{e^2}{2} \frac{N(N-1)}{\Omega} \int \frac{g(r_1 - r_2)}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad /16/$$

где

$$g(r) = \frac{N}{\Omega} \left[1 - \frac{9}{2} \left\{ \frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right\}^2 \right]. \quad /17/$$

Подставляя /17/ в /16/, первый член в /13/ можно представить следующим образом:

$$\frac{e^2}{2} \frac{N(N-1)}{\Omega^2} \iint \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|r_1 - r_2|}. \quad /18/$$

Так как он совпадает с /5/, то значит, он действительно описывает ККВ между КВЭ. После подстановки /17/ в /16/, второй член в /13/ записывается в виде /21/:

$$- \frac{9e^2}{4} \frac{N(N-1)}{\Omega} \int \left\{ \frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right\}^2 \frac{d\vec{r}}{|r|}. \quad /19/$$

Этот член описывает ОККВ между КВЭ. Действительно, если проинтегрируем в /19/ по ϕ и θ , то получим /21/:

$$-A = \frac{9e^2}{4} \frac{N(N-1)}{\Omega} \int_0^\infty \left\{ \frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right\}^2 \frac{4\pi r^2 dr}{r} = \frac{\pi e^2}{4} \left(\frac{3\rho}{\pi} \right)^{4/3} \Omega. \quad /20/$$

Выполненное исследование показывает, что в ПСЭ, когда поведение КВЭ описывается ПВ /1/, ККВ между КВЭ можно определить с помощью потенциала

$$(e^2 / r), \quad /21/$$

а ОККВ между двумя КВЭ с параллельными спинами - посредством потенциала

$$\frac{9e^2}{r} \left\{ \frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right\}^2. \quad /22/$$

Поэтому, если формфактор ККВ между двумя КВЭ имеет вид

$$\tilde{V}_0(q) = \frac{4\pi e^2}{\Omega_0} \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{(qr)} \frac{r^2 dr}{r} = \frac{4\pi e^2}{\Omega_0 q^2}, \quad /23/$$

то формфактор ОККВ между двумя КВЭ должен иметь вид

$$\tilde{V}_{00}(q) = -\frac{36\pi e^2}{\Omega_0} \int_0^\infty \left[\frac{\sin(k_F r) - (k_F r) \cos(k_F r)}{(k_F r)^3} \right]^2 \frac{\sin(qr)}{(qr)} r dr. \quad /24/$$

Ради удобства в дальнейших вычислениях мы вводим обозначение.

$$V_{об.}(q) = -\frac{4\pi e^2 Z^2}{\Omega_0 q^2} F(q) = -V_0(q) F(q). \quad /25/$$

Введенная нами вспомогательная функция $F(q)$ представляет фурье-компоненту плотности обменной дырки /ПОД/ ^{15/} и записывается следующим образом:

$$F(q) = 18\eta \int_0^\infty \left[\frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \right]^2 \sin(2\eta x) dx, \quad /26/$$

где $\eta = q/2k_F$ и $x = rk_F$. Вместо настоящей функции ПОД

$$f(x) = 9 \left[\frac{\sin x - x \cos x}{x^3} \right]^2 \quad /27/$$

иногда можно пользоваться приближенной функцией ПОД

$$f_1(x) = \exp(-\gamma x^2). \quad /28/$$

Можно подумать, что коэффициент затухания γ необходимо определять исходя из требования равенства зарядов ^{15/}:

$$\frac{4\pi Z e}{2\Omega_0 k_F^3} \int_0^\infty f(x) x^2 dx = \frac{2\pi e k_F^3}{3\pi^2 k_F^3} \int_0^\infty f_1(x) x^2 dx = e. \quad /29/$$

В результате получили бы $\gamma^{-1} = 4,836$. Однако нам кажется, что правильнее будет, если коэффициент затухания γ определим с помощью равенства

$$\frac{e^2 N N_0 Z}{4N_0 \Omega_0 k_F^2} \int_0^\infty e^{-\gamma x^2} \frac{4\pi x^2 dx}{x} = \frac{\pi e^2}{4} \left(\frac{3\rho}{\pi} \right)^{4/3} \Omega. \quad /30/$$

Условие /30/ означает, что полная энергия ОККВ между всеми КВЭ в этом приближении должна совпадать с полной энергией ОККВ

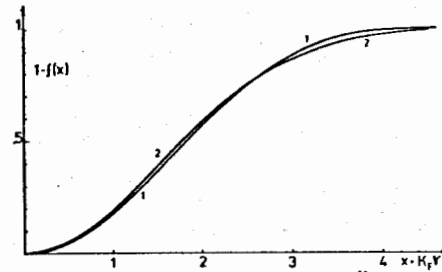


Рис. 1

точного описания. Так, получаем, что $\gamma = 2/9$, которое не удовлетворяет равенству $29/$ /заряд приближенной ОД $e_1 = 0,9e$ /. На рис. 1 графически показаны обе функции ПОД: настоящая функция ПОД $f(x)$ /27/ представлена кривой 1, а приближенная функция ПОД $f_1(x)$ /28/ - кривой 2. Из рисунка видно, что разность между обеими функциями незначительна. Поэтому иногда ради удобства вместо функции

/27/ можно пользоваться функцией /28/. Но так как приближенная функция ПОД $f_1(x)$ /28/ меньше точной функции ПОД $f(x)$ /27/ при малых x , то формфактор $F_1(q)$ должен быть меньше формфактора $F(q)$ при больших q и, наоборот, больше при малых q . Необходимо отметить, что Глик и Ферел ^{22/} использовали функцию $f_2(x)$, в которой $\gamma_1^{-1} = 2,77 = 11/4$. Позднее Шоу предложил $\gamma_2 = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \approx 23/70$.

Чтобы освободить интеграл /26/ от расходимости при малых x , необходимо провести многократное интегрирование по частям. После этого интеграл /26/ берется точно и имеет значение:

$$5F(q) = 33\eta^2 + 6\eta^4 + 6\eta(1-5\eta^2) \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| - 6\eta^4(5-\eta^2) \ln \left| \frac{1-\eta^2}{\eta^2} \right|. \quad /31/$$

Для малых q , когда $\eta \ll 1$, из /31/ можно получить

$$F(q) \approx 9\eta^2 - 10\eta^4 - 12\eta^4 \ln \left(\frac{1}{\eta} \right) + \frac{62}{25} \eta^6 + \frac{12}{5} \eta^6 \ln \left(\frac{1}{\eta} \right). \quad /32/$$

Разложение /32/ показывает, что нельзя представить формфактор и вспомогательную функцию в виде разложения по степеням η^2 , так как коэффициент перед η^4 зависит от $\ln(\frac{1}{\eta})$, который при малых η растет неограниченно. Для больших q , когда $\eta \gg 1$, из /31/ можно получить

$$F(q) \approx 1 + \frac{1}{10\eta^2} + \frac{9}{350\eta^4} + \frac{1}{105\eta^6}. \quad /33/$$

Если вместо точной функции ПОД $f(x)$ /27/ в /26/ подставим приближенную функцию ПОД $f_1(x)$ /28/, то вместо /26/ необходимо вычислить интеграл

$$F_1(q) = 2\eta \int_0^\infty e^{-\gamma x^2} \sin(2\eta x) dx = 2b \int_0^\infty e^{-y^2} \sin(2by) dy. \quad /34/$$

Здесь введено обозначение $\sqrt{2} b = 3\eta$. Так как функция $\tilde{F}_1(b) = \frac{F_1(b)}{2b}$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\frac{d\bar{F}_1(b)}{db} + 2b\bar{F}_1(b) = 1, \quad /35/$$

то для $\bar{F}_1(b)$ получаем /23/:

$$\bar{F}_1(b) = b \int_0^1 e^{-b^2(1-y^2)} dy. \quad /36/$$

Интеграл /36/ берется точно, в результате получаем:

$$F_1(b) = 2b^2 \int_0^1 \frac{e^{-b^2 y^2} y dy}{\sqrt{1-y^2}} = 2b^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-2b^2)^{n-1}}{(2n-1)!!}. \quad /37/$$

При $b^2 \ll 1$ из /37/ имеем:

$$F_1(b) \approx 2b^2 - \frac{4b^4}{3} + \frac{8b^6}{15} = 9\eta^2 - 27\eta^4 + \frac{243}{5}\eta^6. \quad /38/$$

При больших b из /37/ следует:

$$F_1(b) \approx 1 + \frac{1}{b^2} + \left(\frac{b^2}{2} - 2 - \frac{1}{b^2}\right) e^{-b^2} = 1 + \frac{2}{9\eta^2} + \left(\frac{9\eta^2}{4} - 2 - \frac{2}{9\eta^2}\right) e^{-\frac{9\eta^2}{2}}. /39/$$

Итак, мы вычислили формфактор $V_{06}(q)$ ОККВ и его вспомогательную функцию $F(q)$. Необходимо определить, где должен стоять вспомогательный множитель /фурье-компонента ПОД/ в формуле для ДПМ. Именно таким образом определялось до сих пор влияние ОККВ между КВЭ на ДПМ.

Самосогласованный дополнительный потенциал, в котором движутся КВЭ, после внесения в металл внешнего возмущения

$$W_0(r) = W_0(q) e^{iqr} \quad /40/$$

можно определить с помощью системы алгебраических уравнений:

$$W^+(q) = W_0(q) + V_0(q) (n^+(q) + n^-(q)) - V_0(q) F(q) n^+(q), \quad /41a/$$

$$W^-(q) = W_0(q) + V_0(q) (n^+(q) + n^-(q)) - V_0(q) F(q) n^-(q). \quad /41б/$$

При учете только ККВ между КВЭ самосогласованный потенциал определяется уравнением:

$$W(q) = W_0(q) + V_0(q) n(q). \quad /41в/$$

Знаки "+" означают самосогласованный потенциал и модуляцию плотности КВЭ со спином вверх /+/ или вниз /-/. Поэтому

$$n^+(q) + n^-(q) = n(q). \quad /42/$$

Последний член в /41а,б/ учитывает ОККВ между модуляциями КВЭ при наличии внешнего возмущения /40/. Дальше вместо равенства

$$n(q) = \chi_0(q) W(q) \quad /43в/$$

необходимо написать равенства:

$$n^+(q) = \chi^+(q) W^+(q) \quad \text{и} \quad n^-(q) = \chi^-(q) W^-(q). \quad /43а,б/$$

связывающие функцию отклика $\chi^\pm(q)$ КВЭ с самосогласованным потенциалом $W^\pm(q)$ и самосогласованной модуляцией плотности КВЭ $n^\pm(q)$. После подстановки /43а,б/ в /41а,б/ получаем:

$$W^+(q) = W_0(q) + V_0(q) (1 - F(q)) \chi^+(q) W^+(q) + V_0(q) \chi^-(q) W^-(q), \quad /44а,б/$$

$$W^-(q) = W_0(q) + V_0(q) (1 - F(q)) \chi^-(q) W^-(q) + V_0(q) \chi^+(q) W^+(q).$$

После подстановки /43в/ в /41в/ имеем:

$$W(q) = W_0(q) + V_0(q) \chi_0(q) W(q). \quad /44в/$$

Если пренебречь влиянием магнитного поля на спиновое распределение КВЭ, то вследствие равенства /42/ должно выполняться равенство

$$\chi^+(q) = \chi^-(q) = \chi_0(q)/2, \quad /45/$$

где

$$\chi_0(q) = -\frac{3N}{4\epsilon_F} \left[1 + \frac{(1-\eta^2)}{2\eta} \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| \right] \quad /46/$$

есть функция отклика Линдхарда. В этом приближении из /44а,б/ получаем:

$$W^\pm(q) [1 - V_0(q) (1 - F(q)/2) \chi_0(q)] = W_0(q) \quad /47а,б/$$

вместо

$$W(q) [1 - V_0(q) \chi_0(q)] = W_0(q). \quad /47в/$$

Конечно, можно самосогласованным образом получить решение системы /44а,б/. Для этого необходимо определить самосогласованный потенциал $W^-(q)$, в котором находится КВЭ со спином вниз / $n^-(q)$ / из /44б/

$$W^-(q) [1 - V_0(q) (1 - F(q)) \chi^-(q)] = W_0(q) + V_0(q) \chi^+(q) W^+(q), \quad /48а/$$

затем $W^-(q)$ из /48а/ необходимо подставить в /44а/. Тогда получим:

$$W^+(q) = \frac{W_0(q)(1+V_0(q)\chi^-(q)F(q))}{[1-V_0(q)(\chi^+(q)+\chi^-(q))(1-F(q))-V_0^2(q)F(q)(2-F(q))\chi^+(q)\chi^-(q)]}$$

Аналогично из /44а/ можно получить: /49а/

$$W^+(q)[1-V_0(q)(1-F(q))\chi^+(q)] = W_0^+(q) + V_0(q)\chi^-(q)W^-(q), \quad /48б/$$

а потом и

$$W^-(q) = \frac{W_0(q)(1+V_0(q)F(q)\chi^+(q))}{[1-V_0(q)(\chi^+(q)+\chi^-(q))(1-F(q))-V_0^2(q)F(q)(2-F(q))\chi^+(q)\chi^-(q)]} \quad /49б/$$

Так как коэффициент ДПМ определяется с помощью равенства

$$W(q) = W_0(q)/\epsilon(q), \quad /50/$$

то из /49/ следует, что

$$\epsilon^+(q) = 1 - V_0(q)(2-F(q))\chi^+(q) + \frac{V_0(q)(\chi^+(q) - \chi^-(q))}{1 + V_0(q)F(q)\chi^-(q)}, \quad /51а/$$

$$\epsilon^-(q) = 1 - V_0(q)(2-F(q))\chi^-(q) + \frac{V_0(q)(\chi^-(q) - \chi^+(q))}{1 + V_0(q)F(q)\chi^+(q)}. \quad /51б/$$

В ПХ коэффициент ДПМ $\epsilon(q)$ имеет вид

$$\epsilon(q) = 1 - V_0(q)\chi_0(q). \quad /51в/$$

Из /51а,б/ и /47а,б/ следует, что в приближении, когда выполняются равенства /45/, коэффициент ДПМ запишется в виде

$$\epsilon^\pm(q) = 1 - V_0(q)(1 - F(q)/2)\chi_0(q). \quad /52/$$

Аналитическое представление ДПМ $\epsilon(q)$ /52/ известно, только для вспомогательной функции $F(q)$ разные авторы предлагают различные выражения. Так, например, Хаббард /4/ предложил выражение

$$F_x(q) = q^2(q^2 + k_F^2)^{-1} = 4\eta^2(1 + 4\eta^2)^{-1}. \quad /53а/$$

Харрисон /3/ считает целесообразным выбрать

$$F_b(q) = 3q^2(3q^2 + 4k^2)^{-1} = 3\eta^2(1 + 3\eta^2)^{-1}. \quad /53б/$$

Шэм /7/, Хейне и Абаренков /6/ предлагают

$$F_{\text{шэм}}(q) = q^2(q^2 + k_F^2 + \frac{2k_F}{\pi a_0})^{-1} = 4\eta^2(1 + 4\eta^2 + \frac{2}{\pi k_F a_0})^{-1}, \quad /53в/$$

С учетом того, что для металлов $\pi k_F a_0 \approx (1 \div 4)$, из /53в/ следует, что исправление Шэма переводит выражение Хаббарда в выражение Харрисона. Шоу /23/ предложил экспоненциальную зависимость фактора $F(q)$ от η^2 .

$$F_{\text{ш}}(q) = 1 - \exp(-2.135\eta^2). \quad /54в/$$

Представленные примеры показывают, что существует большое разнообразие в представлении фактора $\Gamma(q)$. Все они имеют необходимый коротковолновый предел $\lim_{\eta \rightarrow \infty} \Gamma(\eta) = 1$. Длинноволновый предел зависит от степени учета ОККВ между КВЭ и от рассматриваемой модели.

Чтобы разобраться в существующем многообразии вариантов, мы показали на рис. 2 разные аналитические представления. Так, кривая 1 изображает вспомогательный множитель $F_b(q)$ Харрисона /53б/, кривая 2 - фактор $F_x(q)$ Хаббарда /53а/, кривая 3 - множитель

$$F_p(q) = 9\eta^2(1 + 9\eta^2)^{-1}, \quad /53г/$$

который интерполирует полученный нами результат /31/. Кривая 4 на всех рисунках /2÷5/ изображает точное значение вспомогательного множителя /31/. Нам кажется, что выбор знаменателя во всех представленных выражениях неправилен, так как везде разложение ограничивалось только квадратичными членами. Поэтому мы предлагаем новые аналитические представления. Так, кривая 1 на рис. 3 описывает фактор Харрисона /53б/, кривая 2 - экспоненциальный фактор

$$F_{2б}(q) = 1 - \exp(-3\eta^2). \quad /54б/$$

Кривая 3 изображает усложненное выражение

$$F_{3б}(q) = (3\eta^2 + 20\eta^4)(1 + \eta^2 + 20\eta^4)^{-1}. \quad /55б/$$

На рис. 4 представлена вторая серия приближенных выражений. Кривая 1 описывает фактор Хаббарда $F_x(q)$ /53а/, кривая 2 - фактор экспоненциального вида

$$F_{2x}(q) = 1 - \exp(-4\eta^2), \quad /54а/$$

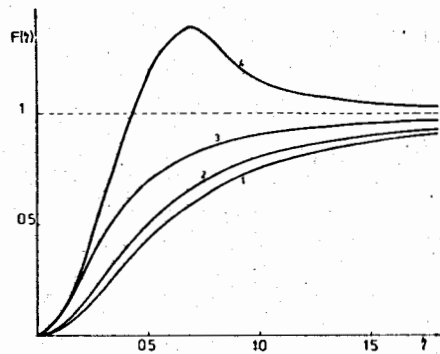


Рис. 2

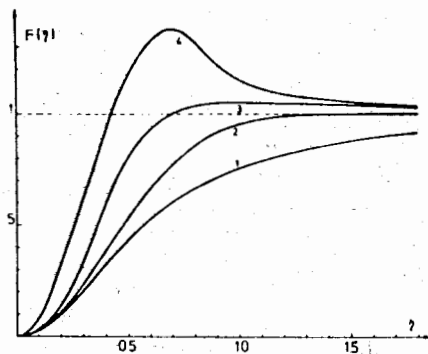


Рис. 3

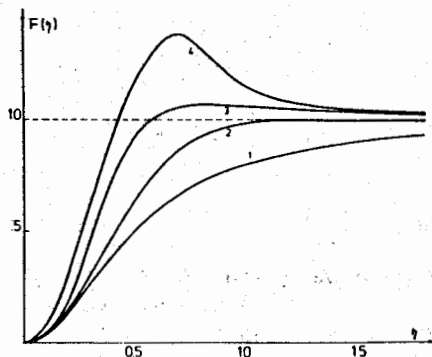


Рис. 4

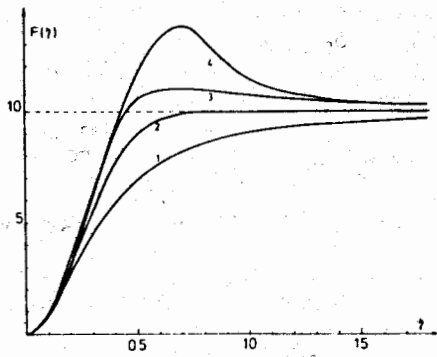


Рис. 5

кривая 3 - усложненное выражение

$$F_{3x}(q) = (4\eta^2 + 30\eta^4)(1 + \eta^2 + 30\eta^4) - 1. \quad /55a/$$

На рис. 5 представлены выражения, подогнанные к длинноволновому пределу предложенного нами вспомогательного множителя /31/. Кривая 1 описывает фактор /53г/, кривая 2 - фактор экспоненциального вида

$$F_{2p}(q) = 1 - \exp(-9\eta^2), \quad /54г/$$

кривая 3 - усложненное выражение

$$F_{3p}(q) = (9\eta^2 + 50\eta^4)(1 + 4\eta^2 + 50\eta^4) - 1. \quad /55г/$$

Из рис. 3-5 видно, что кривые 3, изображающие зависимости /55/, точнее описывают интерполяционные значения вспомогательного множителя /31/. Из рис. 2 видно, что в области длинных волн интерполяционный фактор описывается членом $9\eta^2$. Такой же длинноволновый предел имеет и выражение

$$F(a) = 1 + (5.6\eta^2 - 1)e^{-3.4\eta^2}, \quad /56a/$$

которое точнее всех представляет фурье-компоненту ПОД /31/ в интервале $0 \leq \eta \leq 1.2$. В более широком интервале удобно использовать выражение

$$F(q) = (9\eta^2 + 30\eta^4)(1 + 2\eta^2 + 30\eta^4) - 1. \quad /56б/$$

Однако нам кажется, что для приближенного описания интерполяционного фактора /31/ удобнее и правильнее пользоваться выражением /55г/. Поэтому на рис. 6, где представлена разность $1 - F(q)/2$, для $F(q)$ использовались: для вычисления кривой 1 - выражение /55а/, кривой 2 - выражение Хаббарда /53а/, для кривой 3 - выражение /55г/, кривой 4 - /53г/. Кривая 5 вычислена с помощью точного выражения для фурье-компоненты /31/.

С помощью табл. 1 можно почувствовать влияние фактора $F(q)$ на константы ДПМ. Во второй колонке таблицы не учитывалось влияния ОККВ между КВЭ на ДПМ, в третьей колонке использовалось $F_x(q)$ /53а/, четвертая колонка вычислялась с помощью фактора /55г/, а пятая - с помощью точного выражения фактора /31/. Из таблицы видно, что учет ОККВ между КВЭ при определении ДПМ необходим везде, но самое большое влияние он имеет при $\eta < 2$.

В заключение необходимо ответить на возможное возражение: почему автор принимает, что ОККВ между КВЭ описывается кулоновским потенциалом ОД /22/ и формфактором /24/? Наверное, это слишком грубо, и, очевидно, есть более точное выражение!

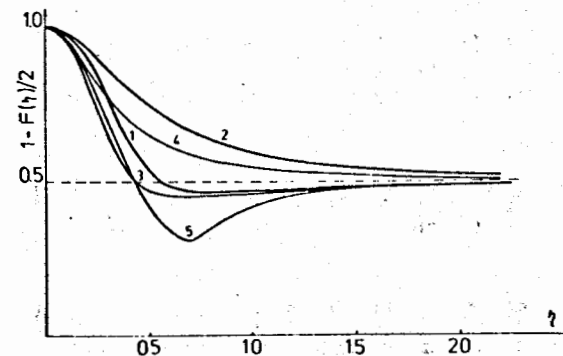


Рис. 6

Поэтому необходимо показать, что именно можно получить с помощью известных принципов.

Введение внешнего периодического потенциала /40/ приводит к появлению дополнительного члена в ВФ КВЭ. Тогда вместо ПВ /1/ ВФ КВЭ $\phi_j(r)$

Таблица 1. Значения ДПМ $\epsilon(q)$ при разных $F(q)$ при $k_F a_0 = 2$

$F(q)$	$F(q) = 0$	$F(q) = 0.1$	$F(q) = 0.2$	$F(q) = 0.3$	$F(q) = 0.4$	$F(q) = 0.5$	$F(q) = 0.6$	$F(q) = 0.7$	$F(q) = 0.8$	$F(q) = 0.9$	$F(q) = 1.0$	$F(q) = 1.1$	$F(q) = 1.2$	$F(q) = 1.3$	$F(q) = 1.4$	$F(q) = 1.5$	$F(q) = 1.6$	$F(q) = 1.7$	$F(q) = 1.8$	$F(q) = 1.9$	$F(q) = 2.0$
0,05	200,83	199,83	198,66	198,26	0,95	1,329	1,200	1,152	1,135												
0,10	50,833	49,886	48,568	48,682	1,00	1,250	1,150	1,116	1,107												
0,15	22,659	21,771	20,447	20,695	1,05	1,268	1,159	1,125	1,114												
0,20	13,332	12,491	11,144	11,399	1,10	1,267	1,156	1,126	1,119												
0,25	8,731	8,048	6,778	7,120	1,15	1,260	1,150	1,123	1,117												
0,30	6,386	5,673	4,532	4,727	1,20	1,250	1,143	1,119	1,114												
0,35	4,911	4,268	3,293	3,397	1,25	1,239	1,136	1,113	1,110												
0,40	3,953	3,376	2,577	2,592	1,30	1,228	1,129	1,108	1,106												
0,45	3,283	2,772	2,138	2,066	1,40	1,206	1,115	1,098	1,097												
0,50	2,824	2,368	1,867	1,758	1,50	1,186	1,102	1,090	1,088												
0,55	2,474	2,071	1,682	1,552	1,60	1,167	1,091	1,081	1,080												
0,60	2,208	1,851	1,550	1,412	1,70	1,151	1,081	1,074	1,073												
0,65	1,999	1,685	1,452	1,324	1,80	1,137	1,073	1,067	1,066												
0,70	1,833	1,557	1,376	1,257	1,90	1,125	1,066	1,061	1,061												
0,75	1,697	1,455	1,315	1,229	2,00	1,114	1,060	1,055	1,055												
0,80	1,584	1,374	1,265	1,202	2,10	1,104	1,055	1,051	1,051												
0,85	1,488	1,307	1,223	1,179	2,20	1,096	1,050	1,047	1,047												
0,90	1,405	1,250	1,186	1,158	2,30	1,090	1,046	1,044	1,044												

должна иметь следующий вид:

$$\tilde{\phi}_j(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} (a_0(k_j) + a_q(k_j) e^{iqr}) e^{ik_j r} \quad /57/$$

Исходя из /10/, для МПП можно получить:

$$\Gamma(r_1 | r_2) = \sum (a_0^*(k) a_0(k)) \times \\ \times (1 + \frac{a_q(k)}{a_0(k)} e^{iqr_2} + \frac{a_q^*(k)}{a_0^*(k)} e^{-iqr_1} + \frac{|a_q(k)|^2}{|a_0(k)|^2} e^{iq(r_2-r_1)}) e^{ik(r_2-r_1)} \quad /58/$$

Если учесть, что

$$a_q(k) = \frac{a_0(k) \langle k+q | W | k \rangle}{(E - \langle k | W | k \rangle - E^0(k+q))}, \quad /59/$$

где

$$E = \langle k | W | k \rangle + \frac{[E^0(k+q) + E^0(k)]}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{E^0(k+q) - E^0(k)}{2}\right]^2 + |W(q)|^2}, \quad /60/$$

то из /58/ следует

$$\Gamma(r_1 | r_2) = \\ = \sum (1 + \frac{(W(q) e^{iqr_2} + W^*(q) e^{-iqr_1})}{(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + |W(q)|^2})} + \frac{|W(q)|^2 e^{iq(r_2-r_1)}}{(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + |W(q)|^2})^2}) |a_0(k)|^2 e^{ik(r_2-r_1)}, \quad /61/$$

где $2\alpha = E^0(k+q) - E^0(k)$ и $W(q) = \langle k+q | W | k \rangle$. Ради упрощения выражения /61/ необходимо учесть, что

$$|a_0(k)|^2 = \frac{(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + W^2})}{2(\pm \sqrt{\alpha^2 + W^2})}. \quad /62/$$

Тогда из /61/ получим

$$\Gamma(r_1 | r_2) = \\ = \sum (1 + \frac{(W(q) e^{iqr_2} + W^*(q) e^{-iqr_1})}{2(\pm \sqrt{\alpha^2 + W^2})} + \frac{|W(q)|^2 (e^{iq(r_2-r_1)} - 1)}{2(\alpha^2 + W^2 \pm \alpha \sqrt{\alpha^2 + W^2})}) e^{ik(r_2-r_1)}. \quad /63/$$

Из /63/ можно найти знакомое выражение для МП КВЭ:

$$\Gamma(r) = \Gamma(r|\Gamma) = \frac{2}{\Omega} \sum (1 + \frac{W(q) e^{iqr} + W(q) e^{-iqr}}{2(\pm \sqrt{\alpha^2 + W^2})}) = n_0 + n_q e^{iqr} + n_{-q} e^{-iqr} \quad /64/$$

Если подставить МП $\Gamma(r)$ из /64/ в первый член выражения /13/, то будем иметь другое знакомое выражение:

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{2} \int \frac{n_0 n_0}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \frac{e^2}{2} \int \frac{(n_q e^{iqr_1} + n_{-q} e^{-iqr_1})(n_q e^{iqr_2} + n_{-q} e^{-iqr_2})}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ & = E_0 + \frac{4\pi e^2 Z^2}{\Omega_0 q^2} n_q n_{-q} \Omega^2 \quad /65/ \end{aligned}$$

Выражение /65/ показывает, что при внесении внешнего периодического потенциала /40/ возникают периодические модуляции плотности КВЭ /64/, ККВ между которыми описываются законом Кулона. Чтобы описать ОККВ между модуляциями КВЭ, необходимо подставить выражение /63/ во второй член выражения /13/. Тогда получим:

$$\begin{aligned} & -\frac{e^2}{2\Omega^2} \sum \left\{ \int \frac{e^{i(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)}}{|r_1 - r_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \frac{1}{2} \int \frac{|W(q)|^2 e^{i(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)}}{(\pm \sqrt{\alpha_1^2 + W^2})(\pm \sqrt{\alpha_2^2 + W^2})} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|r_1 - r_2|} \right\} - \\ & -\frac{e^2}{4\Omega^2} \sum \int \frac{|W(q)|^2 (e^{i(k_1 + q - k_2)(r_1 - r_2)} - e^{i(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)})}{(\alpha_1^2 + W^2 \pm \alpha_1 \sqrt{\alpha_1^2 + W^2})} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|r_1 - r_2|} - \\ & -\frac{e^2}{4\Omega^2} \sum \int \frac{|W(q)|^2 (e^{i(k_1 - q - k_2)(r_1 - r_2)} - e^{i(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)})}{(\alpha_2^2 + W^2 \pm \alpha_2 \sqrt{\alpha_2^2 + W^2})} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|r_1 - r_2|} - \\ & -\frac{e^2}{4\Omega^2} \sum \int \frac{|W(q)|^4 \sin^2(\frac{q(r_1 - r_2)}{2}) e^{i(k_1 - k_2)(r_1 - r_2)}}{(\alpha_1^2 + W^2 \pm \alpha_1 \sqrt{\alpha_1^2 + W^2})(\alpha_2^2 + W^2 \pm \alpha_2 \sqrt{\alpha_2^2 + W^2})} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|r_1 - r_2|}, \quad /66/ \end{aligned}$$

где $2\alpha_1 = E^0(k_1 + q) - E^0(k_1)$ и $2\alpha_2 = E^0(k_2 + q) - E^0(k_2)$. Необходимо отметить, что в /66/ опущены члены 1-го и 3-го порядка по $|W(q)|$, которые исчезают при интегрировании по $d\frac{(r_1 - r_2)}{2}$. Из /66/ можно опустить член 4-го порядка. После интегрирования по координате $d\frac{(r_1 - r_2)}{2}$ и учета равенства

$$\int \frac{e^{iqr}}{|r|} d\vec{r} = \frac{4\pi}{q^2}$$

/67/

из /66/ следует:

$$\begin{aligned} & -\frac{\pi e^2}{4} \left(\frac{3\rho}{\pi}\right)^{4/3} \Omega - \frac{\pi e^2}{\Omega} \sum \frac{|W(q)|^2}{(\pm \sqrt{\alpha_1^2 + W^2})(\pm \sqrt{\alpha_2^2 + W^2})(k_1 - k_2)^2} - \\ & -\frac{\pi e^2}{\Omega} \sum \frac{|W(q)|^2}{(\alpha_1^2 + W^2 \pm \alpha_1 \sqrt{\alpha_1^2 + W^2})} \left\{ \frac{1}{(k_1 + q - k_2)^2} - \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} \right\} - /68/ \\ & -\frac{\pi e^2}{\Omega} \sum \frac{|W(q)|^2}{(\alpha_2^2 + W^2 \pm \alpha_2 \sqrt{\alpha_2^2 + W^2})} \left\{ \frac{1}{(k_1 - q - k_2)^2} - \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} \right\}. \end{aligned}$$

Взаимная замена $k_1 \leftrightarrow k_2$ в последнем члене переводит его в 3-й член. Но дальнейшее упрощение невозможно. Поэтому и невозможно представить полную энергию ОККВ между модуляциями плотности КВЭ при наличии внешнего периодического потенциала /40/ в виде, аналогичном виду полной энергии ККВ между этими же модуляциями /65/. Но это означает, что нельзя применить метод вычисления, используемый при вычислении ДПМ в ПХ, где учитывается только ККВ между модуляциями КВЭ. Именно поэтому автор вынужден интерполировать "потенциал" ОККВ между КВЭ в однородном ферми-газе /кулоновский потенциал ОД/ для описания ОККВ между модуляциями КВЭ, порожденными внешним периодическим потенциалом /40/. Автор считает, что если прямое представление полной энергии ОККВ между модуляциями КВЭ не имеет ничего общего с представлением полной энергии ККВ между этими же модуляциями КВЭ, то еще в самом начале необходимо признать, что все дальнейшее описание ОККВ между модуляциями КВЭ будет приближенным и интерполяционным. Почему же тогда еще в самом начале не произвести разумной интерполяции? Известно, что Слэтер²⁴ интерполировал результат, полученный для описания полной энергии ОККВ между КВЭ в однородном ферми-газе, для описания ОККВ между КВЭ и ВЗИО, т.е. там, где МП ВЗИО быстрее меняется в пространстве, чем МП КВЭ при наличии внешнего периодического потенциала /40/. Сначала Гаспар²⁵, а потом Кон и Шэм²⁶ показали, что "потенциал" ОККВ совпадает с "потенциалом" Слэтера с точностью до множителя 2/3. Поэтому было предложено определять множитель α вариационным методом. Сейчас метод αX используется везде²⁷, где необходимо приближенно учесть вклад ОККВ при определении среднего самосогласованного поля многоэлектронной системы, в котором движется отдельный КВЭ. Автору кажется и он надеется, что сделанная интерполяция

правомерна и должна давать хорошие результаты при вычислении ДПМ. Так как сам "потенциал" ОККВ между КВЭ интерполируется при учете ОККВ между модуляциями КВЭ, порожденными внешним периодическим потенциалом, то для приближенного учета влияния ОККВ на ДПМ можно пользоваться приближенным выражением для вспомогательного множителя $F_{3p}(q)/55г/$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рангелов Й.М. ФММ, 1978, 46, с.1127.
2. Gell-Mann M., Brueckner K.A. Phys.Rev., 1957, 106, p.364.
3. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. "Мир", М., 1968.
4. Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1958, A243, p.330.
5. Nozieres P., Pines D. Phys.Rev., 1958, 111, p.442.
6. Heine V., Abarenkov I. Phil.Mag., 1964, 9, p.451.
7. Sham L.J. Proc.Roy.Soc., 1965, A283, p.33.
8. Займан Дж. Электроны и фононы. ИЛ, М., 1962.
9. Крэккнелл А., Уонг К. Поверхность Ферми. Атомиздат, М., 1978.
10. Gold A.V. Phil.Trans.Roy.Soc., 1958, A251, p.85.
11. Harrison W.A. Phys.Rev., 1959, 116, p.555.
12. Зейтц Ф. Современная теория твердого тела. Изд-во ТТЛ, М.-Л., 1949.
13. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. "Наука", М., 1967.
14. Харрисон У. Теория твердого тела. "Мир", М., 1972.
15. Маделунг О. Теория твердого тела. "Мир", М., 1980.
16. Lowdin P.O. Phys.Rev., 1955, 97, p.1474.
17. Brooks H. Nuovo Cim.Suppl., 1958, 7, p.165.
18. Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. "Мир", М., 1969.
19. Wigner E.P., Seitz F. Phys.Rev., 1933, 43, p.804.
20. Реймс С. Теория многоэлектронных систем. "Мир", М., 1976.
21. Гомбаш П. Статистическая теория атома и ее применение. ИЛ, М., 1951.
22. Glick A.J., Ferrell R.A. Ann.Phys., 1960, 11, p.359.
23. Shaw R.W. Journ.Phys., 1970, 3, p.1140.
24. Slater J.C. Phys.Rev., 1951, 81, p.385.
25. Gaspar R. Acta Phys.Acad.Sci.Hung., 1954, 3, p.263.
26. Sham L.J., Kohn W. Phys.Rev., 1965, A140, p.1133.
27. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. "Мир", М., 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 февраля 1981 года.