

Глава 20

Микроскопическая теория e - e
взаимодействия.

Часть 4

Оглавление

| | |
|--|----------|
| 20 Микроскопическая теория e-e взаимодействия. | |
| Часть 4 | 1 |
| 20.1 Спектр квазичастиц в приближении Хартри-Фока | 4 |
| 20.2 Линейный отклик взаимодействующей электронной жидкости | 6 |
| 20.2.1 Диэлектрическая проницаемость и функция реакции плотность-плотность | 13 |
| 20.2.2 Линдхардовское экранирование зависящее от частоты | 16 |
| 20.2.3 Приближение хаотических фаз (RPA) | 17 |
| 20.2.4 Статическое диэлектрическое экранирование | 20 |
| 20.3 Плазменные колебания и парные возбуждения в приближении RPA | 24 |
| 20.4 Энергия основного состояния в RPA | 25 |
| 20.4.1 Парная функция распределения | 27 |
| 20.5 Свойства квазичастиц в приближении RPA | 28 |
| 20.6 Корреляционные функции в жидкости | 31 |
| 20.7 Задачи к Лекции 20-4 | 34 |

В этой Лекции вначале повторяются и более подробно излагаются сведения из Лекций 20.2 и 20.3 по теории экранирования и линейного отклика.

20.1 Спектр квазичастиц в приближении Хартри-Фока

/Этот раздел был упущен в Лекции 20.3 и он далее понадобится./

С помощью приближения HF можно найти свойства квазичастиц. Для этого используем основное уравнение для энергии HF (Лекция 20.3) и дифференцируем его для определения параметров теории Ландау

$$\varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}^{\text{HF}} = \frac{\partial E_0^{\text{HF}}}{\partial n_{\mathbf{p}\sigma}} = \varepsilon_{\mathbf{p}\sigma}^{(0)} + \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'}^{(0)} V_0 - \sum_{\mathbf{p}'\sigma'} n_{\mathbf{p}'\sigma'}^{(0)} V_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (20.1)$$

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'}^{\text{HF}} = \frac{\partial^2 E_0^{\text{HF}}}{\partial n_{\mathbf{p}\sigma} \partial n_{\mathbf{p}'\sigma'}} = V_0 - V_{\mathbf{p}'-\mathbf{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (20.2)$$

Для примера рассмотрим электронную жидкость, в которой член $V_0 = 0$. Если квазичастицы находятся на ПФ, то $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ зависит только от $x = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' / p_F^2$. Тогда

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'}^{\text{HF}}(x) = -\frac{2\pi e^2}{p_F^2(1-x)} \delta_{\sigma\sigma'} = f_{\text{HF}}(x) \quad (20.3)$$

Симметричная и антисимметричная по спину части $f_{\text{HF}}(x)$ равны друг другу (см. (18.23) из Лекции 19.1)

$$f_{\text{HF}}^s(x) = f_{\text{HF}}^a(x) = \frac{f_{\text{HF}}}{2} = -\frac{\pi e^2}{p_F^2(1-x)} \quad (20.4)$$

Вспоминая результаты из теории ферми-жидкости (Лекция 19.1-2) с помощью приведенных там формул для $f_{pp'}$ (18.23), (18.24), а также рассмотрения теплоемкости, сжимаемости, скорости звука, и спиновой восприимчивости сразу получаем точные выражения для сжимаемости, спиновой восприимчивости и удельной теплоемкости в НФА

$$\frac{\kappa^0}{\kappa} = \frac{1 + F_0^s}{1 + \frac{F_1^s}{3}} = 1 + N^{(0)}(0) \int_{-1}^{+1} dx f^s(x)(1-x) \quad (20.5)$$

$$\frac{\chi_P^0}{\chi_P} = \frac{1 + F_0^a}{1 + \frac{F_1^s}{3}} = 1 + N^{(0)}(0) \int_{-1}^{+1} dx [f^a(x) - x f^s(x)] \quad (20.6)$$

$$\frac{C_0}{C} = \frac{m}{m^*} = \frac{1}{1 + \frac{F_1^s}{3}} = 1 - N^{(0)}(0) \int_{-1}^{+1} dx x f^s(x) \quad (20.7)$$

Добавим, что в первой формуле $\frac{\kappa^0}{\kappa} = \frac{s^2}{s_0^2}$, а $N^{(0)}(0)$ - плотность состояний 3D системы невзаимодействующих частиц с одним направлением спина:

$$N^{(0)}(0) = \frac{3}{4} \frac{N}{\varepsilon_F^0} = \frac{p_F m}{2\pi^2} \quad (20.8)$$

Используя (20.4) и (20.8) находим из (20.6) и (20.7) линейную зависимость

$$\frac{s_{\text{HF}}^2}{s_0^2} = \frac{\chi_P^0}{\chi_P^{\text{HF}}} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi}, \quad (20.9)$$

тогда как удельная теплоемкость в НФА логарифмически расходится.

Безразмерная константа $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ для 3D систем, $\alpha = 1/\sqrt{2}$ - для 2D систем.

(В таких терминах $k_F = 1/\alpha_d r_s a_B$, a_B -радиус Бора, а $\varepsilon_F = 1/\alpha_d^2 r_s^2 \text{ Ry}$).

Расходимость опять обусловлена большим радиусом кулоновского взаимодействия, что приводит к обращению в нуль

плотности состояний в приближении НФ. Это есть недостаток приближения НФ. По той же причине нужно с большой осторожностью использовать теорию Ландау в случае кулоновского взаимодействия. Например, коэффициенты F_0^a и F_0^s также логарифмически расходятся, однако в сжимаемость и восприимчивость входит их комбинация, так что расходимость не возникает. Это понятно, потому что сжимаемость и восприимчивость следуют прямо из энергии основного состояния, в которой нет расходимости.

Если бы F_1^s действительно расходился, то удельная теплоемкость изменялась бы пропорционально $T \ln T$, в противоречии со вторым началом и с экспериментом, который показывает зависимость $C \propto T$. Однако, еще Бардин в 1936г. показал [2], что учет членов более высокого порядка в разложении по теории возмущений делает взаимодействие квазичастиц экранированным и расходимости снимаются.

Мы увидим в следующих разделах, что самосогласованное описание электронного газа в первом порядке можно получить используя приближение RPA.

20.2 Линейный отклик взаимодействующей электронной жидкости

Функции линейного отклика содержат информацию о физических свойствах систем многих тел. Для электронной жидкости, например, функция отклика “плотность–плотность” обеспечивает основу для понимания различных явлений, таких как статическое экранирование, эффективное взаимодействие, коллективные моды, спектры энергетических потерь электронами (неупругое рассеяние электронов) и спектры комбина-

ционного рассеяния (неупругое рассеяние фотонов). Функция отклика спин-спин несет соответствующую информацию для спина.

Как мы видели, приближение HF описывает каждый электрон как независимый; частица движется в самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными электронами. В этом приближении нет корреляции между этим самосогласованным полем и мгновенным положением электрона.

Однако, в реальности, когда электрон движется, он воздействует на окружающие электроны, вызывая коллективное возмущение, которое в конечном итоге отражается на его собственном движении. Для изучения этих эффектов необходимо, прежде всего, узнать, как электронная жидкость как целое реагирует на возмущения, вызванные зарядом, спином и током одного электрона.

Теория линейного отклика обеспечивает естественную основу для описания. Строго говоря, линейные функции отклика описывают поправки к плотности электронов, спина или тока в ответ на управляемые извне поля. Однако, теорию линейного отклика можно обобщить и на случай описания самосогласованной подстройки электронной плотности к внутренним полям, создаваемым электронами внутри систем. Эта идея обеспечивает физическую основу зависящей от времени теории среднего поля.

Есть два разных, но тесно связанных подхода к проблеме вычисления функций линейного отклика взаимодействующей системы многих тел. Первый из них основан на представлении о том, что эффекты многих тел могут быть в принципе точно описаны в терминах эффективного локального потенциала, действующего на каждую частицу независимо. Это будет ос-

новой темой рассмотрения вначале. Второй подход основан на разложении в ряд по теории возмущений для функции отклика. В простейшем варианте мы его будем рассматривать, но в терминах диаграммной техники этот подход выходит за рамки нашего рассмотрения.

Наиболее известным и наиболее успешным приближением первого класса является зависящее от времени приближение Хартри, которое широко известно (по историческим причинам) как приближение случайных фаз (RPA). В этой теории предполагается, что электроны реагируют на внешнее поле плюс зависящий от времени потенциал Хартри. Чтобы понять простыми словами физику лежащую в основе RPA, полезно сначала вернуться к простому упражнению, для невзаимодействующей системы, обобщив его затем на случай взаимодействующих электронов. Проблема расчета функции отклика плотность-плотность также может быть выполнена в этом случае простым способом, используя понятие жесткости.

В качестве введения, на первом шаге рассмотрим систему в основном состоянии. По определению, если среднее значение физической величины $\langle B \rangle$ отклоняется от своего значения в основном состоянии на величину b , то зависимость внутренней энергии от этого параметра будет иметь квадратичный вид (понятно, что линейного члена быть не может при отклонении энергии от равновесия):

$$E(b) \approx E_0 + \frac{\alpha_b}{2} b^2 \quad (20.10)$$

где E_0 - энергия основного состояния, а $\alpha_b = \partial^2 E(b) / \partial b^2|_b = 0$ - мера жесткости. Приложим теперь к системе внешнее поле, линейно связанное с величиной b , и такое что энергия связи равна ϵb , где ϵ - положительна и может быть сделана произ-

вольно малой. В этом случае энергия принимает вид

$$E_\epsilon(b) \approx E_0 + \frac{\alpha_b}{2}b^2 + \epsilon b. \quad (20.11)$$

Минимизация $E_\epsilon(b)$ дает равновесное значение $b = -\epsilon/\alpha_b$ и равновесное значение энергии

$$E_\epsilon(b)_{eq} \approx E_0 - \frac{\epsilon^2}{2\alpha_b}. \quad (20.12)$$

Физическая ситуация вполне ясна: линейная связь с внешним возмущением приводит к новому основному состоянию с меньшей полной энергией, в котором среднее значение b отклоняется от своего первоначального значения на величину, прямо пропорциональную силе связи (линейный отклик) и обратно пропорциональна соответствующей жесткости α_b . Отношение b_{eq} к силе связи ϵ , в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ хорошо определено и позволяет определить **линейную функцию отклика** χ_{bb} (причина двойного индекса станет ясна в дальнейшем),

$$\chi_{bb} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{b_{eq}}{\epsilon} = -\frac{1}{\alpha_b} \quad (20.13)$$

Это отношение показывает простую связь между χ_{bb} и жесткостью α_b . В то же время изменение внутренней энергии (т. е. энергии жесткости) также может быть выражено в общем виде как

$$\delta E = -\frac{b_{eq}^2}{2\chi_{bb}} \quad (20.14)$$

Эта взаимосвязь весьма важна. Данный сценарий является общим для всех задач с линейным откликом. Чтобы проиллюстрировать это, мы обсудим ниже случай невзаимодействующего электронного газа в однородном основном состоянии.

Будем его возмущать внешним скалярным электрическим потенциалом - зонд, который напрямую связан с электронной плотностью.

В качестве второго шага упражнения рассмотрим статический внешний потенциал, связанный с гармоническим электрическим полем:

$$\langle V \rangle = \epsilon \sum_{i=1}^N \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i, \quad (20.15)$$

где вектор \mathbf{q} задает направление поля и длину волны возмущения. Величина

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) \right\rangle = \frac{1}{2} (n_{\mathbf{q}} + n_{-\mathbf{q}}),$$

где $n_{\mathbf{q}}$ - среднее значение Фурье-компоненты плотности электронов на волновом векторе \mathbf{q} - играет роль величины b в предыдущем примере (шаг 1).

Мы вычислим реакцию электронной плотности на это возмущение. В этом простом случае среднюю электронную плотность можно получить непосредственно из выражения для одночастичных волновых функций $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ по формуле (см. [Упражнение 2](#))

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} |\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 \quad (20.16)$$

Здесь функции $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ нужно вычислять в присутствии возмущения. В линейном порядке по ϵ

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) + \delta\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (20.17)$$

где $\phi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/\sqrt{L^d}$ - невозмущенная волновая функция и $\delta\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ можно получить в первом порядке по теории возмуще-

ний.

Задача: выписать $\delta\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Поскольку нас интересует только линейный отклик, то выражение для электронной плотности перепишем так

$$n(\mathbf{r}) = n^{(0)} + 2\mathcal{R}e \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} \phi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) \delta\phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (20.18)$$

где $n^{(0)}$ - значение невозмущенной плотности. Из вида $\delta\phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ (задача выше) ясно, что в линейном порядке по возмущению отклонения электронной плотности от $n^{(0)}$ есть

$$n_1(\mathbf{r}) = \epsilon \left(\frac{2}{L^d} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (20.19)$$

Отсюда получаем невозмущенное значение b :

$$b_{eq} = \frac{1}{2}(n_{\mathbf{q}} + n_{-\mathbf{q}}) = \epsilon \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (20.20)$$

Отсюда получаем функцию отклика χ_{bb} по определению как отношение b_{eq} к ϵ

$$\chi_{bb} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{b_{eq}}{\epsilon} = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (20.21)$$

Это позволяет выразить индуцированную плотность как

$$n_1(\mathbf{r}) = \epsilon \frac{2\chi_{bb}}{L^d} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (20.22)$$

Ясно, что в рассмотренном невзаимодействующем случае функция $\chi_{nn}(\mathbf{q}) = 2\chi_{bb}/L^d$ характеризует способность системы поляризоваться вследствие приложения возмущения, связанного с электронной плотностью. В общем случае в однородной системе $\chi_{nn}(\mathbf{q})$ связывает Фурье-компоненты внешнего поля и индуцированную линейную модуляцию плотности

посредством отношения $n_{\mathbf{q}} \equiv \chi_{nn}(\mathbf{q})\epsilon L^d/2$.

По этой причине χ_{nn} называют *функцией отклика плотность-плотность*.

Поупражняемся еще и теперь свяжем функцию отклика χ_{bb} с жесткостью энергии по отношению к модуляции плотности рассматриваемой системы. Очевидно, что для невзаимодействующего электронного газа единственным источником “сопротивления” такому возмущению является кинетическая энергия. Это довольно простое и поучительное упражнение (**Упражнение 1**), показать, что в этой ситуации (положительное) изменение кинетической энергии во втором порядке по ϵ определяется выражением:

$$\delta T = -\frac{\epsilon^2}{2} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F, \sigma} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (20.23)$$

Обратите внимание, что теперь знак изменения кинэнергии противоположен знаку изменения полной энергии основного состояния. Используя (20.20) и (20.21) запишем этот результат в виде

$$\delta T = -\frac{b_{eq}^2}{2\chi_{bb}}. \quad (20.24)$$

Сравнивая с (20.14) видим, что действительно, χ_{bb} связано с энергией жесткости уравнением (20.13).

Это рассмотрение можно продолжить и распространить на нестационарные возмущения, зависящие от времени. Рассмотрим линейный отклик невзаимодействующего электронного газа на простое квазипериодическое возмущение

$$\langle V(t) \rangle = \epsilon \cos(\omega t) e^{nt} \sum_{i=1}^N \cos(\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}_i) \quad (20.25)$$

Здесь введена бесконечно малая величина η просто для того, чтобы система стартовала с невозмущенного состояния при $t = -\infty$. Анализ идейно повторяется, но нужно использовать теорию возмущений зависящих от времени. Ответ будет таков:

$$n_1(\mathbf{r}, t) = \epsilon [\mathcal{R}e\chi_{nn}(\mathbf{q}, \omega) \cos(\omega t) + \mathcal{I}m\chi_{nn}(\mathbf{q}, \omega) \sin(\omega t)] \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (20.26)$$

Таким образом, возмущение, зависящее от времени, приводит к синфазному и несовпадающей по фазе на 90° компоненте отклика. В то время как синфазная компонента является просто обобщением зависящей от времени функции отклика уравнения (20.21), т. е. описывает явление динамической поляризации, что противофазная составляющая связана с поглощением энергии и, следовательно, описывает рассеяние.

20.2.1 Диэлектрическая проницаемость и функция реакции плотность-плотность

В общем случае отклик электронной системы должен описываться тензором, в котором для изотропной системы остаются лишь две независимые компоненты: продольная и поперечная. Ниже мы продолжим рассмотрение продольной реакции. Пусть в систему внесен внешний заряд $e\rho_e(r, t)$.

Мы это уже рассматривали в Лекции 20.2 в разделе про макроскопическое описание диэлектрической реакции на электрическое поле (в разделе про уравнение Ландау-Силина) и вводили внутреннее электрическое поле \mathcal{D} , которое появляется при внесении в электронную систему внешних зарядов $z\rho_e(r, t)$, создающих внутри системы электрическое поле D (предполагается, что ионы неподвижны и недеформируемы и диэлектрическая проницаемость, связанная с зарядами ион-

ных остовов, равна единице). Реакция электронной системы находится из соотношений:

$$\begin{aligned} iq\mathcal{D}(\mathbf{q}, \omega) &= 4\pi e\rho_e(\mathbf{q}, \omega) \\ \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 - 4\pi ie \frac{\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle}{\mathbf{q}\mathcal{D}(\mathbf{q}, \omega)} \quad \text{откуда получаем} \\ \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 + \frac{\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle}{\rho_e(\mathbf{q}, \omega)} \end{aligned} \quad (20.27)$$

Умножив и разделив второй член в правой части (20.27) на $V_q = 4\pi e^2/q^2$ (в трехмерном случае) и вспомнив определение функции реакции плотность-плотность, получим:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\mathbf{q}, \omega) \quad (20.28)$$

По определению, функция реакции плотность-плотность введена по отношению к внешнему возмущению. На самом деле, частицы системы должны испытывать возмущение не затратным, а экранированным потенциалом $V_q\rho_e(\mathbf{q}, \omega)/\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$. Введем функцию реакции плотность-плотность на экранированное поле:

$$\chi^{\text{scr}}(q, \omega) = \frac{\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle}{V_q\rho_e(\mathbf{q}, \omega)/\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} = \varepsilon(\mathbf{q}, \omega)\chi(q, \omega) \quad (20.29)$$

Ввиду ограниченности букв в греческом алфавите, мы здесь ввели ту же самую букву χ , что и обычно используем для спиновой восприимчивости. Но эти две величины одновременно не появляются и надеюсь, что конфузии не будет.

С помощью вновь введенной функции соотношение (20.28) можно переписать как

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^{\text{scr}}(\mathbf{q}, \omega), \quad (20.30)$$

что есть точная копия (19.82) из Лекции 19.5 /Повторим его/

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^n(\mathbf{q}, \omega), \quad (20.31)$$

если считать, что в длинноволновом пределе $\chi^{\text{scr}}(q, \omega)$ описывает функцию реакции плотность-плотность нейтральной системы с эквивалентной плотностью, с таким же взаимодействием на расстояниях, больших радиуса экранирования и спектром. В сущности, выражение (20.30) задает путь приближенного вычисления $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ для $r_s < 1$. Для этого достаточно заменить в (20.30) $\chi^{\text{scr}}(q, \omega)$ на величину функции реакции плотность-плотность системы невзаимодействующих фермионов той же массы и плотности $\chi^0(q, \omega)$. Последнюю можно вычислить следующим образом: сначала находим динамический форм-фактор по формуле (19.12) или (19.46) из Лекции 19.5, пренебрегая многопарными возбуждениями и коллективными модами, а затем вычисляем $\chi^0(q, \omega)$ по формуле (19.45) из Лекции 19.5. В результате мы получали ответ, известный как формула Линдхарда:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \frac{2\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 n_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0)}{[(\omega - i\eta)^2 - (\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0)^2]} \quad (20.32)$$

Ну, а в интегральном представлении для функции реакции $\chi(\mathbf{q})$

$$\chi(\mathbf{q}) = -e^2 \int \frac{dk}{4\pi^3} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} / m} \quad (20.33)$$

Здесь $f_{\mathbf{k}}$ - равновесная фермиевская функция для свободных электронов с энергией $\hbar^2 k^2 / 2m$, т.е.

$$f_k = \frac{2}{\exp[\beta(\hbar^2 k^2 / 2m - \mu)] + 1}$$

Когда волновой вектор мал $q \ll k_F$, то числитель подинтегрального выражения можно разложить в точке $\mathbf{q} = 0$:

$$f_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}/2} = f_{\mathbf{k}} \pm \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} \frac{\partial}{\partial \mu} f_{\mathbf{k}} + \mathcal{O}(q^2) \quad (20.34)$$

Если в этом разложении ограничиться линейным по q слагаемым, то получится результат Томаса-Ферми. Однако, когда q сравнимо с k_F , то выражение в теории Линдхрода значительно более сложно. При $T = 0$ можно получить аналитический ответ

$$\chi(\mathbf{q}) = -e^2 \left(\frac{mk_F}{\hbar^2 \pi^2} \right) \left[\frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right] \quad (20.35)$$

где $x = q/2k_F$. Величина в квадратных скобках равна 1 при $x = 0$. Она представляет собой линдхардовскую поправку в результату Томаса-Ферми. При $q = 2k_F$ диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 1 - 4\pi\chi(q)/q^2$ оказывается неаналитической. Благодаря этому в экранированный потенциал ϕ точечного заряда на больших расстояниях теперь входит член, который при $T = 0$ имеет вид

$$\phi(r) \propto \frac{1}{r^3} \cos 2k_F r. \quad (20.36)$$

20.2.2 Линдхардовское экранирование зависящее от частоты

Если плотность внешнего заряда гармонически зависит от времени как $e^{-i\omega t}$, то диэлектрическая проницаемость будет зависеть не только от волнового вектора, но и от частоты ω . В этом случае нужно использовать нестационарную теорию возмущений. Оказывается, что все изменения по сравнению со

статическим результатом (20.33) сводятся к добавлению $\hbar\omega$ в знаменатель подинтегрального выражения. В результате формула Линдхарда для диэлектрической проницаемости в нестационарном случае выглядит так

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}/m + \hbar\omega}. \quad (20.37)$$

Она переходит в формулу Друде в предположении о пространственной однородности возмущения (предел $q \rightarrow 0$) при фиксированной ω

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2},$$

где плазменная частота

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}.$$

Для χ_q в Лекции 20.2 мы получали поправку в виде множителя к результату Томаса-Ферми. Этот множитель обращается в 1 при $x \equiv q/2k_F = 0$. При $q = 2k_F$ диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 1 - 4\pi\chi/q^2$ оказывается неаналитической. Вследствие этого в экранированный потенциал точечного заряда на больших расстояниях входит член, который при $T = 0$ имеет вид

$$\phi(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r^3} \cos(2k_F r) \quad (20.38)$$

После этого повторения прежних результатов перейдем к новому разделу.

20.2.3 Приближение хаотических фаз (RPA)

Замечательное свойство физической теории (кстати, мы его неоднократно использовали) - возможность описания явления

на разных “языках”. Идея состоит в предположении о том, что можно пренебречь суммой экспонент с хаотически изменяющимися фазами по сравнению с N . Например, в тех случаях, когда в теорию входил множитель $\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ часто принималось, что

$$\rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} = \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}_i} \approx N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$$

Приближение RPA было обосновано в многочисленных работах, которые мы не рассматриваем.

Диэлектрическая проницаемость в RPA

Исходим из ур. (20.30). Если мы в нем в качестве $\chi^{scr}(q, \omega)$ приближенно используем $\chi^0(q, \omega)$ для невзаимодействующей электронной жидкости, то получим диэлектрическую функцию в RPA

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \frac{n_{\mathbf{p}\sigma}^0 (1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0) 2\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0}{(\omega + i\eta)^2 - (\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0)^2} \quad (20.39)$$

Т.о. в RPA, также как и в теории Ландау-Силина, дальнедействующая часть кулоновского взаимодействия рассматривается как стороннее поляризационное поле. Это делается для всех длин волн и предполагается, что реакция на экранированное поле, т.е. поляризуемость, соответствует реакции газа невзаимодействующих частиц.

Сравнение $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ в приближении RPA и Хартри-Фока

В последнем случае $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ получается подстановкой в (20.28) значения $\chi^0(q, \omega)$ для невзаимодействующей системы

Повторим вначале ур. (20.28)

$$(\epsilon(\mathbf{q}, \omega))^{-1} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(\mathbf{q}, \omega)$$

а затем сделаем обещанную подстановку $\chi^0(q, \omega)$:

$$(\epsilon_{\text{HFA}}(\mathbf{q}, \omega))^{-1} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (20.40)$$

Если считать величину $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ малой, то результат в RPA можно записать так:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)} &= \frac{1}{1 - (4\pi e^2/q^2)\chi^0(q, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^0(q, \omega) + \\ &+ \left(\frac{4\pi e^2}{q^2} \chi^0(q, \omega) \right)^2 + \dots \end{aligned} \quad (20.41)$$

Видно, что первый член соответствует приближению Хартри-Фока. Если ряд суммируем, то получается сходящийся результат. Можно, конечно, привести точный вывод RPA на языке вторичного квантования, но мы этого делать не будем.

В RPA взаимодействие электронов принимается во внимание только в той степени, в какой оно приводит к образованию экранированного поля $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle$. Реакция на экранированное поле характеризуется величиной χ^0 .

В частности, метод RPA позволяет найти спектр плазмонов (см Рис.20.4)

$$\omega_{\mathbf{q}} \approx \omega_p \left\{ 1 + \frac{3}{10} \left(\frac{qv_F^0}{\omega_p} \right)^2 + \dots \right\} \quad (20.42)$$

Функция отклика плотность-плотность в RPA существенно отличается от функции Линдхарда. Например, на рис. 20.1 и

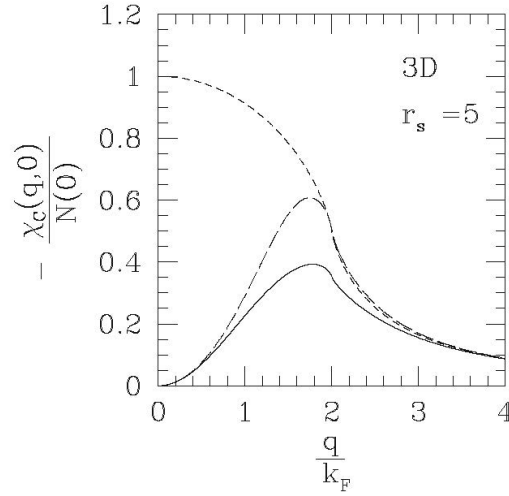


Рис. 20.1: Поведение трехмерной функции отклика статической плотности в RPA для 3D электронного газа (сплошная линия). Короткая штриховая линия - функция Линдхарда (невзаимодействующий газ). Длинная штриховая линия показывает влияние поправки локального поля, за пределами RPA, в согласии с расчетами Монте-Карло

20.2 полная линия представляет поведение $\chi_{nn}^{\text{RPA}}(q, 0)$ в статическом пределе, соответственно в 3D и 2D измерениях. Разница с функцией Линдхарда особенно заметна в пределе малых значений q , когда расходящаяся диэлектрическая функция приводит к обращению $\chi_{nn}^{\text{RPA}}(q, 0)$ в нуль $\propto q^d$ в размерности d . На обоих рисунках кривые короткими штрихами представляют собой точный результат, полученный с помощью численной интерполяции соответствующих многочастичных эффектов локального поля, вычисленных методами QMC. Это есть улучшение по сравнению с RPA.

20.2.4 Статическое диэлектрическое экранирование

Поместим примесь с зарядом $-e$ в начало координат в электронном газе и рассмотрим ее экранирование. Из рассмотре-

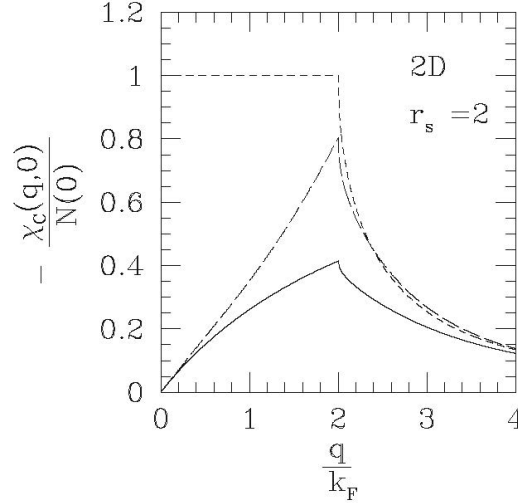


Рис. 20.2: То же самое как и на Рис.20.1, но для 2D электронного газа.

ния функции диэлектрической реакции на внешнее поле мы находим, что индуцированные флуктуации плотности в электронной системе описываются

$$\langle \rho(\mathbf{q}, 0) \rangle = -\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} + 1 \quad (20.43)$$

Изменение плотности электронного газа в точке r вызванное примесью, равно

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \langle \rho(\mathbf{q}, 0) \rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dq q \frac{\sin \mathbf{q}\mathbf{r}}{r} \left\{ \frac{\epsilon(\mathbf{q}, 0) - 1}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} \right\} \quad (20.44)$$

Для простоты, вычислим $\delta\rho$ в приближении Томаса-Ферми, в котором для $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$ справедливо

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2}$$

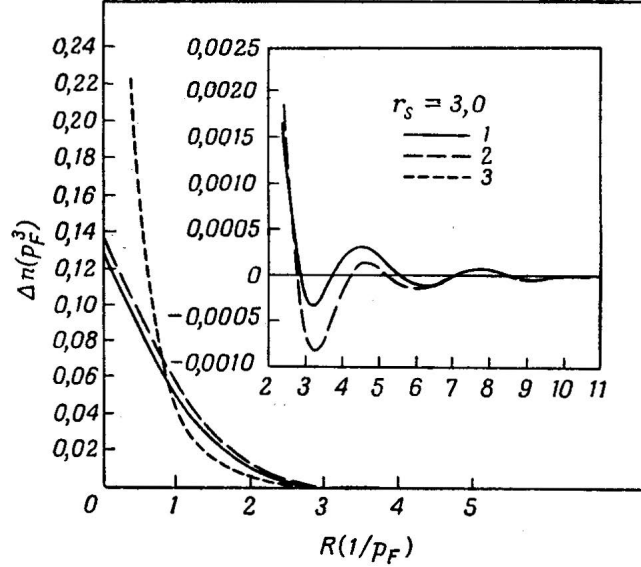


Рис. 20.3: Зависимость плотности экранированного заряда от расстояния до примеси в случае $r_s = 3$. Вычисления в приближениях: (1) RPA, (2) Хаббарда и (3) Томаса-Ферми

Тогда

$$\delta\rho_{\text{TF}}(\mathbf{r}) = \frac{q_{\text{TF}}^2}{4\pi r} e^{-q_{\text{TF}} r} \quad (20.45)$$

Этот результат нефизично расходится при малых расстояниях от примеси. Однако это и неудивительно, т.к. приближение Томаса-Ферми нельзя использовать при больших значениях q . Теория Ландау здесь также не улучшает дело. Если применить RPA, то из формулы Линдхарда для $\omega = 0$ получается

$$\epsilon_{\text{RPA}}(q, 0) = 1 + \frac{q_{\text{TF}}^2}{q^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{p_F}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4p_F^2} \right) \ln \left(\frac{q + 2p_F}{q - 2p_F} \right) \right\} \quad (20.46)$$

Подставив (20.46) в (20.44) мы приходим к сложному интегралу и его приходится вычислять приближенно.

Видно, что на малых расстояниях экранирование в прибли-

жениях RPA и Томаса-Ферми сильно различно. В RPA экранирующая плотность конечна всюду и осциллирует при удалении от примеси. Осцилляции еще раньше получил и Фридель.

Чтобы понять происхождение осцилляций заметим, что при $q = 2k_F$ функция $\epsilon_{\text{RPA}}(q, 0)$ конечна и непрерывна, но ее производная логарифмически расходится.

$$\left(\frac{\partial \epsilon(\mathbf{q}, 0)}{\partial q} \right)_{q=2p_F} = \infty \quad (20.47)$$

Вследствие этой сингулярности при больших r для $\delta\rho(\mathbf{r})$ имеем

$$\frac{\delta\rho_{\text{RPA}}(r)}{p_F^3} = -\frac{2\xi}{\pi(4+\xi)^2} \frac{\cos 2p_F r}{(p_F r)^3} \quad (20.48)$$

Здесь безразмерная величина

$$\xi = \frac{e^2 p_F}{\pi \epsilon_F^0} = \frac{2\alpha r_s}{\pi} \approx 0.33 r_s. \quad (20.49)$$

Природа сингулярности при $q = 2k_F$ проста. При $q < 2k_F$ электрон можно перевести с одного участка ПФ на другой. Спектр возбуждений электронно-дырочных пар начинается от 0 по энергии (см. Рис. 20.4). При $q > 2k_F$ для возбуждения электрона ему нужно сообщить некоторую энергию и спектр электронов начинается с конечного значения энергии. Эта сингулярность есть свойство вклада однопарных возбуждений в функцию экранирования диэлектрической реакции. Более того, при низких частотах можно пренебречь многопарными возбуждениями. Т.о. осцилляции являются точным микроскопическим свойством нормальной электронной жидкости. Они происходят из наличия четко определенной ферми-поверхности (звон).

20.3 Плазменные колебания и парные возбуждения в приближении RPA

В отсутствии затухания частота плазменных колебаний находится из дисперсионного уравнения

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}) = 0 \quad (20.50)$$

При вычислении $\omega_{\mathbf{q}}$ можно в диэлектрической функции RPA (20.39) не учитывать ограничения из принципа Паули. Тогда дисперсионное уравнение сводится к виду

$$1 = \frac{4\pi e^2}{m} \sum_{p < p_F} \frac{1}{(\omega_{\mathbf{q}} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}/m)^2 - q^4/4m^2} \quad (20.51)$$

Отсюда можно найти энергию плазмонов

$$\omega_{\mathbf{q}} \approx \left\{ 1 + \frac{3}{10} \left(\frac{qv_F^0}{\omega_p} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (20.52)$$

При увеличении q энергия плазмонов возрастает довольно медленно, а максимальная энергия электронно-дырочной пары $qv_F^0 + q^2/2m$ увеличивается гораздо быстрее. При некотором критическом значении q_c впервые станет возможным распад плазмона на электронно-дырочную пару. На Рис. 20.4 приведен спектр плазмонов и парных возбуждений в RPA для типичного металла Na с $r_s = 4$. Найдем это критическое значение q_c . Для этого решим уравнения

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}_c}) &= 0 \\ \omega_{\mathbf{q}_c} &= q_c v_F^0 + \frac{q_c^2}{2m} \end{aligned} \quad (20.53)$$

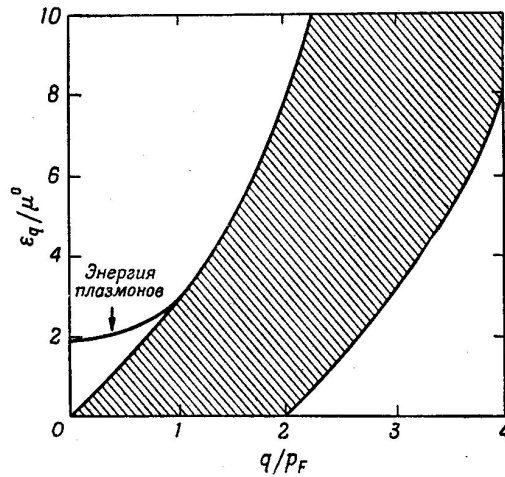


Рис. 20.4: Спектр флуктуаций плотности, вычисленный в RPA для электронной жидкости при $r_s = 4$. Парным возбуждениям соответствует заштрихованная область.

20.4 Энергия основного состояния в RPA

В приближении Хартри-Фока учитываются лишь кинематические корреляции частиц, связанные с принципом Паули. Динамические корреляции, возникающие из-за того, что у электронов есть заряд, учитываются в более точном приближении, например RPA.

Корреляции, обусловленные зарядом, должны препятствовать сближению электронов. Это приводит к дополнительному уменьшению энергии системы. Поэтому корреляционная энергия отрицательна. Корреляции более важны для электронов с антипараллельными спинами, но их относительное движение в приближении HF совсем не скоррелировано. Их умеют вычислять в вариационном методе численным способом. Из численных расчетов Вигнера возникает интерполяционная за-

ВИСИМОСТЬ

$$E_{\text{cor}} = -\frac{0.88}{r_s + 7.8} \quad \text{Ry} \quad (20.54)$$

Вычисление энергии основного состояния в рамках RPA сводится к вычислению энергии взаимодействия $E^{\text{RPA}}(\mathbf{q})$ для данного переданного импульса \mathbf{q} и последующего интегрирования по импульсам. Запишем $E^{\text{RPA}}(\mathbf{q})$ в явном виде

$$E_{\text{int}}^{\text{RPA}}(\mathbf{q}) = -\frac{2\pi e^2}{q^2} \left[N + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \text{Im} \chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) \right] \quad (20.55)$$

где

$$\chi_{\text{RPA}} = \frac{\chi^0}{1 - (4\pi e^2/q^2)\chi^0} \quad (20.56)$$

При интегрировании используют аналитические свойства $\chi(\mathbf{q}, \omega)$

$$\int_0^\infty \text{Im} \chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty d\omega \chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, i\omega) \quad (20.57)$$

Тогда энергия основного состояния

$$E_{\text{RPA}} = \frac{3}{5}\varepsilon_F^0 + \sum_{\mathbf{q}} \left\{ -\frac{2\pi e^2}{q^2} + \frac{1}{4\pi N} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\chi^0(q, i\omega)}{1 - (4\pi\alpha/q^2)\chi^0(q, i\omega)} \right\} \quad (20.58)$$

Этот результат согласуется с энергией в RPA вычисленной Гелл-Маном и Бракнером. Структура их результата, полученного по теории возмущений суммированием фейнмановских диаграмм, такова

$$a \ln r_s + b + cr_s + \dots \quad (20.59)$$

где константы a и b вычислены в пределе большой плотности ($r_s \ll 1$):

$$E_{\text{RPA}} = \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + 0.622 \ln r_s - 0.142 \right) \quad \text{Ry} \quad (20.60)$$

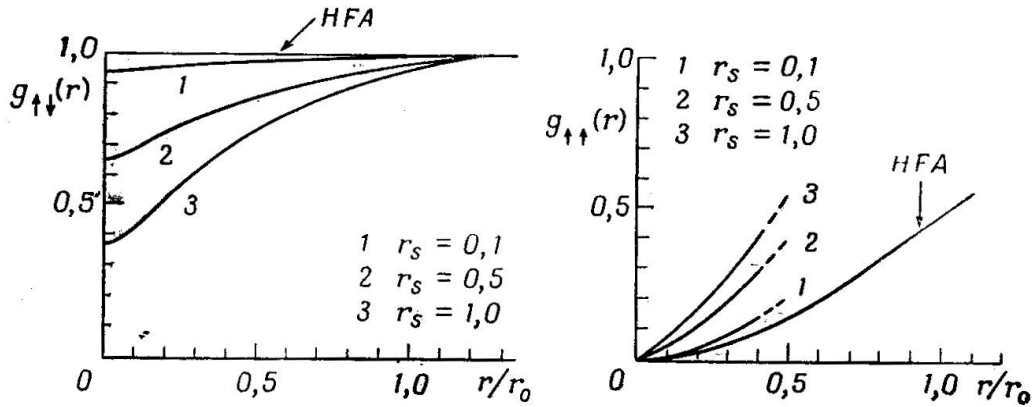


Рис. 20.5: Парная функция распределения, вычисленная в RPA.

Похожие результаты впоследствии были получены и другими способами, напр. разложением по теории возмущений.

20.4.1 Парная функция распределения

(см. Приложение 1)

Из Рис. 20.5 видно, что есть заметные корреляции между электронами с антипараллельными спинами, причем корреляции растут при уменьшении плотности (росте r_s). Так, при $r_s = 0.1$ значения $g(r)$ полученные в RPA и HF мало отличаются, а при $r_s = 1$ отклонения значительны.

В обоих приближениях электроны с параллельными спинами значительно больше сторонятся друг друга, чем с антипараллельными. Другими словами, кинетические (связанные со спином) корреляции более важны чем динамические (связанные с зарядом). При $r_s = 2$ вычисленная g_{RPA} становится отрицательной, что нефизично и указывает на неприменимость RPA в этой области r_s .

20.5 Свойства квазичастиц в приближении RPA

Вычисленную в теории RPA энергию основного состояния $E_{\text{RPA}}^{(0)}$ можно продифференцировать по n_p и $n_{p'}$ и получить $f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{\text{RPA}}$. Затем, используя исходные формулы теории ферми-жидкости, можно получить характеристика квазичастиц. Вместо этого честного пути, воспользуемся приближенным выражением [1]

$$f_{\mathbf{p}\sigma, \mathbf{p}'\sigma'} = -\frac{4\pi e^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2 + q_{\text{TF}}^2} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (20.61)$$

Из (20.61) имеем

$$f^s(x) = f^a(x) = -\frac{\pi e^2}{p_F^2} \frac{1}{1 - x + 2\alpha r_s/\pi} \quad (20.62)$$

Подставляя (20.62) в (20.6) и (20.7) получаем

$$\frac{C}{C_0} = \frac{m^*}{m} \approx \frac{1}{1 + (\alpha r_s/2\pi)[\ln(\pi/\alpha r_s) - 2]} \quad (20.63)$$

Подставляя (20.62) в (20.6) и (20.7) находим сжимаемость (или скорость звука) и спиновую восприимчивость:

$$\frac{\kappa_0}{\kappa} = \frac{s^2}{s_0^2} = \frac{\chi_P^0}{\chi_P} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi} - \frac{\alpha^2 r_s^2}{\pi^2} \ln r_s + \dots \quad (20.64)$$

Нот этот результат фактически соответствует результату в приближении HF. Если например вычислить сжимаемость без упрощения (??), то получаем

$$\frac{\kappa_0}{\kappa_{\text{RPA}}} = \frac{s_{\text{RPA}}^2}{s_0^2} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi} - \frac{\alpha^2 r_s^2}{\pi^2} (1 - \ln 2) \ln r_s \quad (20.65)$$

Вот этот коэффициент $(1 - \ln 2)$ появляется в RPA в отличие от HFA. Подобное вычисление RPA для спиновой восприимчивости дает

$$\frac{\chi_P^0}{\chi_P^{\text{RPA}}} = 1 - \frac{\alpha r_s}{\pi} - \frac{\alpha^2 r_s^2}{2\pi^2} \ln r_s + \dots \quad (20.66)$$

Уместно напомнить соотношения из макроскопической теории Ландау

$$\frac{C}{C_0} = \frac{m^*}{m} = \frac{m_b}{m} \left(1 + \frac{F_1^s}{3} \right) \quad (20.67)$$

$$\frac{\chi_P}{\chi_P^0} = \frac{m_c}{m} \left(\frac{1 + F_1^s/3}{1 + F_0^a} \right) \quad (20.68)$$

Здесь C_0 и χ_P^0 - удельная теплоемкость и спиновая восприимчивость невзаимодействующего электронного газа, а m^* - термодинамическая (“тепловая”) эффективная масса, определяемая из энтропии или теплоемкости, m_b - голая зонная масса, которую можно выразить через поток, переносимый квазичастицей

$$\mathbf{j}_p = \frac{\mathbf{p}}{m_b} \quad (20.69)$$

Время жизни возбужденных квазичастиц

Если квазичастица находится вне ПФ, то она будет рассеиваться на квазичастицах, находящихся внутри ПФ, поскольку такой процесс ведет к уменьшению энергии. То же самое происходит и с дырками. Конечное время жизни определяется мнимой частью собственной энергии квазичастицы.

Физсмысл RPA состоит в рассмотрении электрона, окруженного поляризационным облаком. В процессе рассеяния электрон с импульсом \mathbf{p} ($p > p_F$) переходит в некоторое другое

состояние $\mathbf{p} + \mathbf{q}$, отличающееся по энергии на величину

$$-\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0 = \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^0$$

При этом имеет место динамическое экранирование, уменьшающее взаимодействие в $\epsilon(-\mathbf{q}, -\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^0)$ раз. Далее нужно рассмотреть все возможные процессы рассеяния и вычислить τ^{-1} используя теорию возмущений второго порядка.

В результате мы получаем в пределе большой плотности ($r_s < 1$)

$$\frac{1}{\tau} \approx \frac{\pi^2 \sqrt{3}}{128} \omega_p \left(\frac{\varepsilon_p^0 - \mu^0}{\mu^0} \right)^2 \quad (20.70)$$

Это выражение для времени жизни квазичастицы справедливо, когда она находится вблизи ПФ. -----

Приложение 1

Это повтор из Лекции 1 “Введение в конденсированное состояние” для 3го курса.

20.6 Корреляционные функции в жидкости

Рассмотрим систему из N идентичных частиц. Пусть r_j ($j = 1, 2, \dots, N$) обозначает положения этих частиц. Тогда плотность числа частиц в точке \mathbf{r} дается

$$n^{(1)}(\mathbf{r}) = \langle n(\mathbf{r}) \rangle \quad \text{где} \quad n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \delta(r_j - \mathbf{r}), \quad (20.71)$$

где $\langle \rangle$ означает усреднение (это может быть, например, квантовомеханическое ожидаемое значение, среднее по времени или по ансамблю). $n^{(1)}(\mathbf{r})$ это одночастичная плотность. Аналогично, “двухчастичная плотность”

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \sum_{j \neq k} \delta(r_j - \mathbf{r}) \delta(r_k - \mathbf{r}') \rangle,$$

описывает корреляцию в плотности при \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

Запишем $n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в ином виде:

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n^{(1)}(\mathbf{r}) n^{(1)}(\mathbf{r}') g(\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r}),$$

и назовем $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})$ - парная функция распределения. Для изотропной жидкости или газа $\langle n \rangle = n^{(1)}(\mathbf{r})$ с хорошей точностью постоянная, кроме как вблизи стенок, поэтому можно записать

$$n^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle n \rangle^2 g(R), \quad R = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|.$$

Здесь введена $g(R)$ - радиальная функция распределения.

Рентгеновская дифракция дает информацию о статическом распределении молекул. Рассеяние нейтронов дает информацию о динамических корреляциях между молекулами. Рентгеновское рассеяние зависит также от устройства самих молекул, поэтому для простоты лучше рассматривать жидкости из простых молекул, однородные и равновесные.

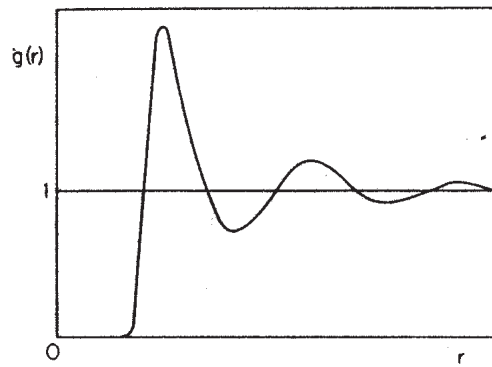


Рис. 20.6: Типичная зависимость радиальной функции распределения от расстояния

Рентгеновское рассеяние чувствительно только к радиальной функции распределения $g(R)$, которая связана с функцией распределения пар $n^{(2)}(r, r')$ так что

$$n^{(2)}(r) = n^2 g(R),$$

где n - плотность.

Функция распределения пар $n^{(2)}(r)$ представляет собой вероятность нахождения двух молекул на относительном расстоянии r . Для однородной и изотропной системы эта вероятность зависит только от величины r и приближается к n^2 при $r \rightarrow \infty$. Следовательно, асимптотика $g(r)$ такова: $g(r) \rightarrow 1$, ($r \rightarrow \infty$).

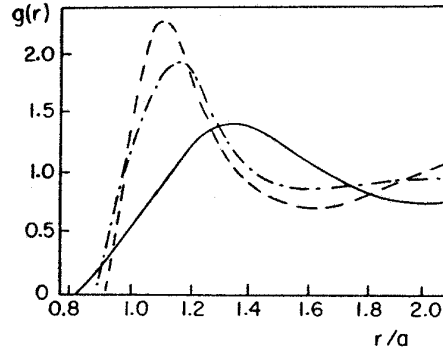


Рис. 20.7: Радиальная функция распределения для трех жидкостей при малых r . Сплошная кривая - жидкий ${}^4\text{He}$ при 2К; пунктирная кривая - Ne при 35К; штрих-пунктирная кривая - Ar при 163К.

Отклонения $g(r)$ от 1 описывают межмолекулярные корреляции. Для данного расстояния r число молекул в сферической оболочке толщиной dr и радиусом r равно

$$ng(r)4\pi r^2 dr.$$

Как любая статистическая величина, парная функция распределения должна быть нормализована:

$$V \int n^{(2)}(r) dr = N(N - 1),$$

где V - объем жидкости и N - число молекул в ней. Если число молекул флуктуирует, то надо брать средние значения $\langle N(N - 1) \rangle$.

20.7 Задачи к Лекции 20-4

1. Кинетическая жесткость.

Используя статическую теорию возмущений во втором порядке вывести выражение (20.23) для увеличения кинетической энергии невзаимодействующего электронного газа при наличии статического периодического потенциала (20.15).

2. Зависящий от времени отклик первого порядка в плотности.

Вывести линейный отклик плотности /формула (20.26)/ из нестационарной теории возмущений в первом порядке.

3. Низкочастотная проводимость изоляторов.

Используйте основополагающие соотношения классического электромагнетизма в макроскопических средах, чтобы доказать, что динамическая проводимость изотропного изоляционного материала должна исчезать в нуль как $\sigma(\omega) \sim 4\pi i\omega\epsilon$, при $\omega \rightarrow 0$, где ϵ – статическая диэлектрическая проницаемость вещества.

Литература

- [1] J. J. Quinn, R. A. Ferrell, Phys. Rev. **112**, 812 (1958).
- [2] J. Bardeen, Phys. Rev. **50**, 1098 (1936).
- [3] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах*, М., Мира, 1965. [D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, N.Y. 1963]
- [4] Р. Пайерлс, *Квантовая теория твердых тел*, пер. с англ. М., Изд. Ин.Лит, 1956ю
- [5] D. R. Hartree, Proc. Cambr. Phil. Soc. **24**, 89 (1928).
- [6] V. A. Fock, Zs. Phys. **61**, 126 (1930.)
- [7] Ф. Зейц (F. Seitz), *Современная теория твердого тела*, М. -Л. (1949).
- [8] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М., Физматлит, 1962.
- [9] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid*, Cambridge University Press, 2005. ISBN-13 978-0-521-52796-5

- [10] G. D. Mahan, *Many particle physics*, Kluwer/Plenum 3rd edition (2000). ISBN 0-306-46338-5 (2004).
- [11] Блохинцев, Введение в квантовую механику, М., 1976.
- [12] Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, М., Наука, 1967