Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1968

УДК 539.2(054)

В. П. ОЛЕЙНИКОВ

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДВУХВРЕМЕННОГО ТЕМПЕРАТУРНОГО ФОРМАЛИЗМА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ В ФЕРМИ-СИСТЕМЕ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Метод двухвременных запаздывающих температурных функций Грина используется для исследования системы частиц с кулоновским взаимодействием. Предложенная процедура расцепления приводит к известным выражениям для коллективных эффектов и термодинамического потенциала. Найдено затухание плазмонов при низких температурах. Исследовано поведение чисел заполнения вблизи поверхности Ферми и найдена основная асимптотика в разложении их скачка на поверхности Ферми.

§ 1. Несмотря на известную традиционность исследований, посвященных системам с кулоновским взаимодействием, экспериментальное определение зависимости частоты коллективных возбуждений от волнового числа удалось осуществить лишь в самое последнее время [6]. В связи с этим целесообразно еще раз рассмотреть основные динамические и термодинамические эффекты в такой системе методом, не ограниченным областью только нулевой или очень высокой температуры. Для этой цели естественно использовать формализм двухвременных запаздывающих и опережающих температурных функций Грина, который позволяет получить описание динамических эффектов и их характеристик при всех значениях температуры. Кроме того, с помощью таких функций можно просто вычислить термодинамический потенциал и все термодинамические характеристики системы. Метод причинных функций Грина был успешно применен к этой проблеме В. Л. Бонч-Бруевичем и Ш. М. Коганом [3], получившими все основные результаты в данной области. Более подробные ссылки на ранние исследования можно найти в работах [3, 10], снабженных обширной библиографией.

Рассмотрим пространственно-однородную систему нерелятивистских электронов, взаимодействие которых между собой осуществляется по закону Кулона и не зависит от спинов частиц. Для обеспечения термодинамической устойчивости системы необходимо ввести положительный компенсирующий заряд решетки, который мы будем считать равномерно размазанным по всему объему V. Гамильтониан такой системы запишем в виде [1]

$$H = \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{q' \neq 0} \nu(q') (\rho_{q'} \rho_{-q'} - N), \quad (1)$$

где a_p^+ и a_p — ферми-операторы рождения и уничтожения, $E_p = \frac{p^2}{2m} - \mu$ — кинетическая энергия электрона, $\rho_{q'} = \sum_p a_{p+q'}^+ a_p$ — оператор фурье-компонента плотности числа частиц, $\nu(q') = 4\pi e^2 \hbar^2 / q'^2$ — фурье-компонент потенциала взаимодействия $\varphi(r) = e^2/r$, $N = \sum_p a_p^+ a_p$ — полное число частиц в системе. Индекс p включает суммирование по спину, индекс q' — нет. Условие $q' \neq 0$ возникает вследствие учета взаимодействия частиц с фоном и фона с самим собой.

Теоретические исследования 50-х годов (см. обзор литературы в [10]), выполненные рядом авторов на основе различных формализмов, показали фундаментальную роль операторов фурье-компонента плотности числа частиц в формировании специфических для газа заряженных частиц коллективных эффектов. Поэтому в качестве операторов, определяющих динамическую структуру функции Грина, естественно выбрать именно их. Уравнение для такой функции в энергетическом представлении [2, 3, 4] имеет вид

$$EG(\rho_q, \rho_{-q}; E) = \sum_p (E_p - E_{p+q})\, G(a_{p+q}^+ a_p, \rho_{-q}; E). \tag{2}$$

Для получения интересующих нас результатов этого уравнения явно недостаточно, так как оно не содержит никакой информации о кулоновском взаимодействии в системе. Рассмотрим поэтому уравнение для второй функции Грина, появившейся в правой части уравнения (2)

$$(E + E_p - E_{p+q})\, G(a_{p+q}^+ a_p, \rho_{-q}; E) = n_{p+q} - n_p +$$

$$+ \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \{G(a_{p+q}^+ a_{p+q'} \rho_{q'}, \rho_{-q}; E) - G(\rho_{q'} a_{p+q-q'}^+ a_p, \rho_{-q}; E)\}, \tag{3}$$

где $n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle$ — средние числа заполнения.

Ограничимся этими двумя уравнениями цепочки и, аппроксимируя функции Грина третьего порядка, замкнем систему уравнений. Благодаря входящему во второе уравнение фактору $\nu(q)$ даже при самой грубой аппроксимации в какой-то мере сохранится учет кулоновского взаимодействия в системе. Известно [5, 8], что ограничиться для исследования таких систем только первым порядком теории возмущений недостаточно, так как последующие порядки содержат гораздо более сильные вклады. Главные члены в каждом порядке соответствуют тем случаям, когда все входящие в данный порядок факторы $\nu(q) \sim q^{-2}$ имеют один и тот же аргумент. Поэтому при проведении аппроксимации желательно сохранить неизменным выбранное значение q и обеспечить формальную возможность проведения итераций до бесконечного порядка. Для этого необходимо сохранить целиком комплекс $\rho_q \rho_{-q}$, не разбивая его на спаривания отдельных операторов рождения и уничтожения. Подобный метод расцепления цепочки рассматривался в [11]. При проведении частичных спариваний (по процедуре, аналогичной известной теореме Вика) усреднение будем подразумевать таким же, как и при вычислении искомой функции $G(\rho_q, \rho_{-q}; E)$. Таким образом, наша аппроксимация может быть выражена как замена следующего типа:

$$G(a_{p+q}^+ a_{p+q'} \rho_{q'}, \rho_{-q}; E) \to n_{p+q} \Delta(q - q')\, G(\rho_q, \rho_{-q}; E),$$

где средние числа заполнения будем в дальнейших вычислениях полагать равными средним числам заполнения для идеального ферми-газа. Такая аппроксимация опускает поправки к характеристикам движения отдельных частиц, корректное рассмотрение которых было проведено В. Д. Озриным [9].

Из полученной системы уравнений легко получить интересующую нас запаздывающую функцию Грина:

$$G_q^r(E) = \frac{V}{\nu(q)} \frac{\Pi(q, E)}{1 - \Pi(q, E)}, \tag{4}$$

где поляризационный оператор имеет вид [11]

$$\Pi(q, E) = A + iB = \frac{\nu(q)}{V} \sum_q \frac{n_p - n_{p+q}}{E - E_{p+q} + E_p + i\varepsilon}.$$

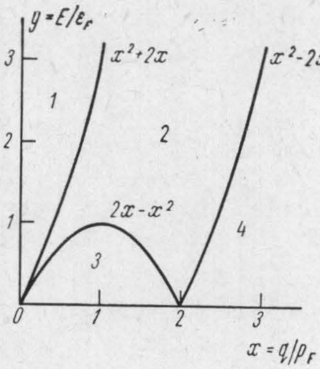

Рис. 1

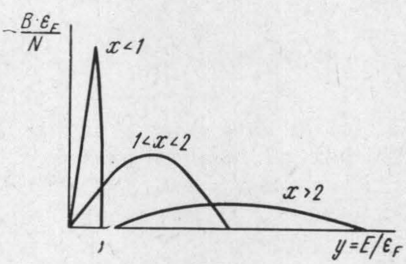

Рис. 2

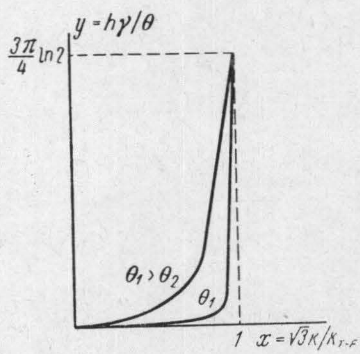

Рис. 3

§ 2. В силу специфической зависимости $\nu(q) \sim q^{-2}$ главную роль в нашем рассмотрении играют малые q, такие, что $q \ll p_0$, где p_0 — импульс обрезания. Считая также $qp_0 \ll mE$, получим для действительной части поляризационного оператора выражение, справедливое во всем интервале температур

$$A = \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{E^2} \left(1 + \frac{2q^2}{mE^2} \cdot \frac{\mathscr{E}}{N} + \ldots \right),$$

где $\omega_0 = \sqrt{\dfrac{4\pi e^2 n}{m}}$ — плазменная частота, $\mathscr{E}/N$ — средняя кинетическая энергия частицы в нулевом приближении. Мнимая часть вычисляется без каких-либо приближений и имеет вид

$$B = -\frac{\alpha r_s \theta}{y^3 \varepsilon_F} \ln \left(\frac{1 + e^{-\frac{\varepsilon_F}{\theta}\alpha_1}}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_F}{\theta}\alpha_2}} \right),$$

где

$$y = \frac{q}{p_F}, \quad \alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}, \quad u = \frac{mE}{qp_F}, \quad \alpha_1 = \left(u - \frac{y}{2}\right)^2 - \frac{\mu}{\varepsilon_F},$$

$$\alpha_2 = \left(u + \frac{y}{2}\right)^2 - \frac{\mu}{\varepsilon_F}, \quad r_s = \frac{r_0}{a_0},$$

μ — химический потенциал системы.

Полюса функции Грина (4), определяющие спектр элементарных возбуждений, в нашем случае соответствуют корням уравнения $A + iB = 1$. Считая энергию в первом приближении действительной, получим для частоты плазменных колебаний

$$\omega = \omega_0 \left(1 + y^2 \cdot \frac{9\pi}{40\alpha\, r_s} \cdot \frac{\mathscr{E}}{\mathscr{E}_0} + \ldots\right). \tag{5}$$

Условия, при которых было получено использованное выражение для A, приводят к следующим ограничениям для y:

$$y \ll \frac{p_F}{p_0} \sqrt{\frac{4\alpha r_s}{3\pi}},$$

причем степень вырождения системы не сказывается на виде дисперсионной кривой, а лишь изменяет коэффициент при y^2 и пределы применимости полученного выражения. Из него следует, что учет температурных поправок в вырожденном газе и квантовых в классическом увеличивает наклон дисперсионной кривой, что качественно соответствует результатам работ [6].

Учитывая, что затухание плазмонов в нашем приближении описывается выражением $\gamma = -\frac{\omega_0}{2} B(E = \hbar\omega_0)$, легко получить при малых y и $\theta \ll \varepsilon_F$:

$$\frac{\gamma}{\omega_0} = \frac{\alpha r_s \theta}{2y^3 \varepsilon_F} \exp\left[-\frac{\varepsilon_F}{\theta}\left(\frac{y_1^2}{y^2} - 1\right)\right], \tag{6}$$

где $y_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2\varepsilon_F}$ — граница плазменной ветви в первом приближении. При подходе к ней затухание имеет вид

$$\frac{\gamma}{\omega_0} = \frac{\alpha r_s \theta}{2y_1^3\, \varepsilon_F}\left[\ln 2 + \frac{\varepsilon_F}{\theta}\left(\frac{y}{y_1} - 1\right)\right], \quad \left|\frac{y}{y_1} - 1\right| \ll \frac{\theta}{2\varepsilon_F}. \tag{7}$$

Отсюда видно, что максимальное значение затухания пропорционально температуре. Поэтому условие существования плазменных колебаний $\frac{\gamma_{\max}}{\omega_0} = \frac{3\pi \ln 2}{4} \cdot \frac{\theta}{\hbar\omega_0} \ll 1$ выполняется для достаточно низких температур. При вычислении формулы (7) использовалось неравенство $\theta \ll \hbar\omega_0 \ll \varepsilon_F$, которое приводит к условию $r_s \ll 1$. Крутизна роста затухания при подходе к границе непрерывного спектра равна $\frac{\alpha r_s}{2y_1^3} \sim \frac{1}{\sqrt{r_s}}$, т. е. очень велика и не зависит от температуры. В классическом случае легко получить из общего выражения уточненную формулу Ландау [3].

Другим проявлением коллективных свойств электронного газа является экранировка им электростатического поля внесенных зарядов. Воспользовавшись теоремой о вариациях средних значений [4], получим после простых вычислений [3]

$$\widetilde{\varphi}(q) = \frac{4\pi Ze\,\hbar^2}{q^2(1 - A(E=0))}.$$

При малых q $A(E=0) = -\frac{\nu(q)}{V} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mu}$ и эффективный потенциал имеет вид

$$\widetilde{\varphi}(r) = \frac{Ze}{r} e^{-\varkappa r}, \tag{8}$$

где $\varkappa^2 = \frac{4\pi e^2}{V} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mu}$. Ограничение случаем малых $q \ll p_0$ указывает на область применимости полученного выражения (8) по $r : r \gg \frac{\hbar}{p_0}$. Так как $\frac{p_0^2}{2m} \sim \frac{\mathscr{E}}{N}$, то это неравенство сводится к следующему: $r \gg r_0\sqrt{\varepsilon_0/\varepsilon}$ (с точностью до некоторого коэффициента). Отсюда видно, что степень вырождения системы снова сказывается лишь на границах применимости полученного выражения. Для выяснения вида потенциала на малых расстояниях [3] сделаем приближение по большим q в

$$A(E=0) : A(E=0) = -\frac{4mN}{q^2}.$$

В координатном представлении получим

$$\widetilde{\varphi}(r) = \frac{Ze}{r} e^{-\varkappa r}\cos\varkappa r, \tag{9}$$

где $\varkappa^4 = 4\pi e^2 mn/\hbar^2$. В данном случае условие $r \ll \frac{\hbar}{p_0}$ сводится к следующему: $\varkappa r \ll r_s^{1/4}\sqrt{\mathscr{E}_0/\mathscr{E}}$.

§ 3. Запишем известное выражение для термодинамического потенциала с помощью функции (4)

$$F = F_0 - \frac{N}{2V}\sum_q \nu(q) - \frac{1}{2\pi}\sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{e^{E/\theta} - 1} \cdot \operatorname{arctg}\frac{B}{1-A}.$$

Отсюда при $\theta = 0$ легко получить, разлагая в ряд по e^2, поправку на обменное взаимодействие и корреляционную энергию. Для последней полученное выражение

$$\Delta E_{\text{корр}} = -\frac{1}{2\pi}\sum_q \int_0^{\infty} dE\left(\operatorname{arctg}\frac{B}{1-A} - B\right)$$

изменением контура интегрирования можно свести к результату работы [5], полученному суммированием кольцевых диаграмм. Отношение первой поправки, т. е обменной энергии к кинетической, пропорционально r_s. Поэтому полученные результаты справедливы при выполнении условия $\frac{e^2N}{r_0\mathscr{E}} \ll 1$, которое в случае вырожденного газа приводит к требованию $r_s \ll 1$, классического-к $(r_0k_D)^2 \ll 1$.

Полагая в общем выражении для свободной энергии $\theta = 0$ и варьируя его по E_p, легко получить в рассматриваемом приближении также и поведение средних чисел заполнения по импульсам вблизи поверхности Ферми. Считая $\frac{p-p_F}{p_F} \ll r_s$, получим

$$n(p) = \sqrt{\frac{3\alpha r_s}{4\pi}} \left(\frac{p-p_F}{2p_F}\right) \ln\left|\frac{p-p_F}{2p_F}\right| + \begin{cases} 1 + \frac{\alpha r_s}{4\pi} \ln\frac{\alpha r_s}{\pi} - \frac{\alpha r_s}{4\pi^2} c, & p < p_F, \\ -\frac{\alpha r_s}{4\pi} \ln\frac{\alpha r_s}{\pi} + \frac{\alpha r_s}{4\pi^2} c, & p > p_F, \end{cases}$$

где постоянная

$$c = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2+1} \ln(1 - \omega \operatorname{arctg} 1/\omega) \cong 6{,}76$$

вычислена в работе [7]. Отсюда скачок чисел заполнения на поверхности Ферми равен

$$n(p_F - 0) - n(p_F + 0) = \frac{\alpha r_s}{2\pi} \ln\frac{\alpha r_s}{\pi} - \frac{\alpha r_s}{2\pi^2} c.$$

Необходимо отметить, что в окончательном результате работы [7], посвященной этому же вопросу, утерян член с $r_s \ln r_s$, который представляет собой главную асимптотику в разложении скачка чисел заполнения по параметру r_s. Член такого вида, как это неоднократно отмечалось ранее, необходимо возникает при разложении в ряд по e^2 любой величины, характерной для кулоновского газа (например, корреляционная энергия). Отличие же в коэффициентах при члене, описывающем зависимость чисел заполнения от импульса (коэффициент в данной работе составляет лишь часть коэффициента в [7] и меньше его примерно в полтора раза), не является существенным и обусловлено, по-видимому, различием в конкретных путях расчетов.

В заключение автор выражает благодарность И. А. Квасникову, под руководством которого была выполнена эта работа, а также Н. Н. Боголюбову (мл.), Б. И. Садовникову и В. Д. Озрину за полезные дискуссии и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н. Н. Лекции по квантовой статистике. Киев, «Наукова думка», 1949.
2. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. ДАН СССР, **126**, 53, 1959.
3. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., Физматгиз, 1961; Бонч-Бруевич В. Л., Коган Ш. М. «Физика твердого тела», **1**, 1221, 1959.
4. Зубарев Д. Н. «Успехи физич. наук», **71**, 71, 1960.
5. Gell-Mann M., Brueknег K. Phys. Rev., **106**, 364, 1957.
6. Gerard, Hoven. Phys. Rev. Lett., **17**, 4, 169, 1966; Derfler H., Simonen T. C. Phys. Rev. Lett., **17**, 4, 172, 1966; Malmberg J. H., Wharton C. B. Phys. Rev. Lett., **17**, 4, 175, 1966.
7. Кулик И. О. ЖЭТФ, **40**, 1343, 1961.
8. Montroll E. W., Ward J. C. Phys. Fluids, **1**, 55, 1958.
9. Озрин В. Д. Дипломная работа. МГУ, 1968.
10. Пайнс Д. Проблема многих тел. М., ИЛ, 1963.
11. Тябликов С. В., Бонч-Бруевич В. Л. Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина, ротапринт, МИАН СССР и МГУ, 1962.

Поступила в редакцию
6.9 1967 г.

Кафедра
квантовой статистики