Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 2 — 1970

УДК 531.19

Г. И. БИГУН

КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ЭНЕРГИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В МЕТОДЕ СМЕЩЕНИЙ И КОЛЛЕКТИВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Учтены поляризационные эффекты для взаимодействующего электронного газа в рамках метода смещений и коллективных переменных. Вычислены корреляционная энергия и теплоемкость вырожденной системы электронов вблизи абсолютного нуля.

Метод смещений и коллективных переменных [1, 2] позволяет с помощью единого аналитического аппарата рассматривать квантовую систему заряженных ферми-частиц при любых температурах. В этом методе статистический оператор exp $(-\beta H)$ представлен в виде произведения функции exp U на оператор σ. Роль оператора σ существенна лишь в случае статистического вырождения системы, т. е. при низких температурах. Поэтому высокотемпературные характеристики системы могут быть получены в этом методе при учете лишь нескольких первых порядков теории возмущений в операторе σ [3]. Однако вблизи абсолютного нуля пренебрежение высшими членами не оправдано. Полученное таким способом выражение для корреляционной энергии электронного газа [4] содержит дробные степени параметра плотности r_s[1] ($r_s^{-3/4}$, $r_s^{1/4}$) и является нефизическим.

В данной работе показано, что при учете бесконечного ряда теории возмущений в методе смещений и коллективных переменных можно получить результат, согласующийся с известными ранее и не содержащий дробных степеней r_s.

Оператор эффективного двухфермионного взаимодействия [2]

$$V_{\text{вз}} = \int_0^\beta \int_0^\beta d\beta_1\, d\beta_2 \sum_{\vec{p}_1 \vec{p}_2 \vec{q}} \frac{(\vec{p}_1\vec{q})(\vec{p}_2\vec{q})}{4m^2N} v_{\vec{q}}(\beta_1, \beta_2)\, \tilde{a}^{+}_{\vec{p}_1-\vec{q}}(\beta_1)\, \tilde{a}_{\vec{p}_1}(\beta_1)\, \tilde{a}^{+}_{\vec{p}_2+\vec{q}} \times$$
$$\times (\beta_2)\, \tilde{a}_{\vec{p}_2}(\beta_2) \tag{1}$$

[1] Параметр r_s есть отношение среднего рассеяния между частицами к боровскому радиусу: $\frac{4}{3}\pi (r_s a_Б)^3 = \frac{V}{N}$, где $\frac{N}{V}$ — плотность частиц.

содержит потенциал

$$v_{\vec q}(\beta_1, \beta_2) = \frac{1}{2}\frac{\alpha^2-1}{\alpha}\{\theta(\beta_1-\beta_2)\exp[-\alpha E_{\vec q}(\beta_1-\beta_2)] + \\ + \theta(\beta_2-\beta_1)\exp[-\alpha E_{\vec q}(\beta_2-\beta_1)]\}, \tag{2}$$

который имеет запаздывающий характер вследствие учета обмена виртуальными плазменными квантами между электронами. Здесь $\theta(\beta_1-\beta_2)$ — ступенчатая функция, $\alpha = \left[1 + \left(\frac{\hbar\omega_0}{E_{\vec q}}\right)^2\right]^{1/2}$, $\omega_0 = \left(\frac{4\pi e^2}{m}\frac{N}{V}\right)^{1/2}$ — ленгмюровская частота колебаний плотности, $E_{\vec q} = \frac{q^2}{2m}$, β — обратная температура.

Термодинамический потенциал Ω выражается в виде суммы связанных замкнутых диаграмм оператора $V_{вз}$

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}\langle T\exp V_{вз} - 1\rangle_{св}, \tag{3}$$

где символ T обозначает «хронологическое» упорядочение.

Разложим потенциал (2) в ряд Фурье. С точностью, достаточной при низких температурах, можем записать

$$v_{\vec q}(\beta_1, \beta_2) = \frac{1}{\beta}\sum_m e^{-i\omega_m(\beta_1-\beta_2)} v_{\vec q}(\omega_m), \tag{4}$$

где $\omega_m = \frac{2\pi m}{\beta}$,

$$v_{\vec q}(\omega_m) = \frac{1}{2}\frac{\alpha^2-1}{\alpha}\left(\frac{1}{\alpha E_{\vec q} + i\omega_m} + \frac{1}{\alpha E_{\vec q} - i\omega_m}\right). \tag{5}$$

Воспользуемся известными правилами для диаграммной техники в импульсно-частотном представлении [5], учитывая соответствующие видоизменения, связанные с наличием в (1) скалярных произведений. Как известно, в задачах с кулоновским взаимодействием особую роль играют поляризационные диаграммы, состоящие из петель, соединенных линиями взаимодействия, причем каждой линии взаимодействия соответствуют одинаковые импульс q и частота ω_m. Обозначая вклад от таких диаграмм символом $\Delta\Omega'$, можем записать

$$\Delta\Omega' = -\frac{1}{2\beta}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\sum_{\vec q, \omega_m}\left\{-\frac{4}{\beta}v_{\vec q}(\omega_m)\sum_{\vec q, \omega_l} G_{\vec p}(\omega_l) \times \right. \\ \left. \times G_{\vec p+\vec q}(\omega_m+\omega_l)\frac{(\vec p\vec q)(\vec p+\vec q, \vec q)}{4m^2N}\right\}^n, \tag{6}$$

причем

$$G_{\vec p}(\omega_l) = \frac{1}{i\omega_l - E_{\vec p} + \mu}, \quad \omega_l = (2l+1)\frac{\pi}{\beta}, \tag{7}$$

μ — химический потенциал.

Не составляет трудностей провести суммирование по нечетным частотам ω_l. Вводя в рассмотрение поляризационный оператор [5]

$$z_{\vec{q}}(\omega_m) = \frac{2}{V}\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}\left[\frac{1}{i\omega_m + E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}}} + \frac{1}{-i\omega_m + E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}}}\right], \tag{8}$$

содержащий функцию распределения $n_{\vec{p}} = [1 + \exp(E_{\vec{p}} - \mu)\beta]^{-1}$, можно привести формулу (6) после суммирования по n к виду

$$\Delta\Omega' = \frac{1}{2\beta}\sum_{\vec{q},\omega_m} \ln\left\{1 - v_{\vec{q}}(\omega_m)E_{\vec{q}} + \frac{1}{2}\frac{V}{N}(E^2_{\vec{q}} + \omega^2_m)\,v_{\vec{q}}(\omega_m)\,z_{\vec{q}}(\omega_m)\right\}. \tag{9}$$

Чтобы получить полное выражение для термодинамического потенциала, надо еще прибавить к (9) вклад от бозевской ветви спектра [2], равный

$$\Delta\Omega'' = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}} E_{\vec{q}}(\alpha - 1) - \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}}\frac{N}{V}\frac{4\pi e^2}{\vec{q}^{\,2}}. \tag{10}$$

Учитывая (5) и выделяя интегрирование по константе взаимодействия, получаем окончательно

$$\Omega = \Omega_0 + \frac{1}{2\beta}\int_0^{e^2}\frac{d(e^2)}{e^2}\sum_{q,\omega_m}\frac{4\pi e^2}{q^2}z_q(\omega_m)\left[1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}z_q(\omega_m)\right]^{-1} - \frac{1}{2}\sum_q \frac{N}{V}\frac{4\pi e^2}{q^2}. \tag{11}$$

Эта формула совпадает с известными ранее результатами, полученными другими методами [5, 6]. Точность ее соответствует приближению хаотических фаз (RPA). Величина

$$\varepsilon(q, \omega_m) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} z_q(\omega_m) \tag{12}$$

играет роль диэлектрической проницаемости электронного газа и описывает эффекты экранирования в системе [7]. В квазистатическом приближении ($\omega \to 0$) и малых q ($q \ll \hbar k_F$)

$$\varepsilon(q, 0) = 1 + \frac{q^2_{FT}}{q^2},$$

где $q_{FT} = \left(\frac{6\pi e^2}{\varepsilon_F}\frac{N}{V}\right)^{1/2}$ — обратный радиус экранирования Томаса—Ферми[1].

Вычислим корреляционную энергию основного состояния электронного газа, которая следует из (11) при $\beta \to \infty$. Переходя в этом случае от суммирования по частотам к интегрированию: $\sum_{\omega_m} \to \frac{\beta}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega$, заме-

---

[1] Здесь k_F и $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ — импульс и энергия Ферми.

няя функцию распределения $n_{\vec{p}}$ ступенчатой функцией и переходя к безразмерным переменным интегрирования, получим для корреляционной энергии в ридбергах

$$\varepsilon_{\text{кор}} = \frac{3}{8\pi}\frac{1}{\gamma^2 r_s^2}\int_0^\infty q\,dq\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\left[\ln\left(1+\frac{2\gamma r_s}{\pi q^2}z(q,\omega)\right)-\frac{2\gamma r_s}{\pi q^2}z(q,\omega)\right], \tag{13}$$

где $\gamma = (4/9\pi)^{1/3} = 0{,}520$. Функция

$$z(q,\omega) = \frac{2}{\pi}\int d\vec{p}\,n_{\vec{p}}\left(1-n_{\vec{p}+\vec{q}}\right)\frac{(\vec{p}+\vec{q})^2-\vec{p}^2}{\omega^2+[(\vec{p}+\vec{q})^2-\vec{p}^2]^2} \tag{14}$$

пропорциональна[1] поляризационному оператору (8). В явном виде

$$z(q,\omega) = 1+\frac{4q^2-q^4+\omega^2}{8q^3}\ln\left|\frac{4q^2\left(1+\frac{q}{2}\right)^2+\omega^2}{4q^2\left(1-\frac{q}{2}\right)^2+\omega^2}\right| -$$

$$-\frac{\omega}{2q}\left[\operatorname{arctg}\frac{2q}{\omega}\left(1+\frac{q}{2}\right)+\operatorname{arctg}\frac{2q}{\omega}\left(1-\frac{q}{2}\right)\right]. \tag{15}$$

Для вычисления физических характеристик электронного газа (например, теплоемкости) надо знать спектр элементарных возбуждений квазичастичного типа. Энергию квазичастицы в ридбергах $W(p)$ как функцию безразмерного импульса p найдем функциональным дифференцированием полной энергии по $n_{\vec{p}}$

$$W(p) = \frac{p^2}{\gamma^2 r_s^2}+\frac{1}{2\pi^2\gamma r_s}\int\frac{d\vec{q}}{q^2}\left[\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\left(1+\frac{2\gamma r_s}{\pi q^2}z(q,\omega)\right)^{-1}\times\right.$$

$$\left.\times\frac{\delta}{\delta n_{\vec{p}}}z(q,\omega)-1\right], \tag{16}$$

причем функциональная зависимость $z(q,\omega)$ от $n_{\vec{p}}$ задается соотношением (14).

Рассмотрим случай высокой плотности, ограничиваясь в энергии и теплоемкости членами, не исчезающими в предельном переходе $r_s\to 0$. Аппроксимируем в формуле (13) функцию $z(q,\omega)$ ее приближенным выражением при малых q

$$z(q,\omega)|_{q<1} \simeq 2R\left(\frac{\omega}{2q}\right) = 2\left[1-\frac{\omega}{2q}\operatorname{arctg}\frac{2q}{\omega}\right]. \tag{17}$$

Тогда

$$\varepsilon_{\text{кор}} = \frac{12}{\pi^3}\int_{-\infty}^{\infty} du\int_0^1\frac{dq}{q}\left(\frac{4\gamma r_s}{\pi q^2}\right)^{-2}\left[\ln\left(1+\frac{4\gamma r_s}{\pi q^2}R(u)\right)-\right.$$

$$\left.-\frac{4\gamma r_s}{\pi q^2}R(u)\right]+\delta, \tag{18}$$

---

[1] Имеет место соотношение

$$z_{\vec{q}}(\omega) = \frac{k_F^3}{4\pi^2\varepsilon_F}z(k_F q,\ \varepsilon_F\omega).$$

где величина δ является поправочным членом, связанным с принятой аппроксимацией, которая конечна при $r_s \to 0$ и после интегрирования по частотам может быть записана в виде интеграла по импульсам. Мы увидим, что (18) в точности совпадает с известным результатом Гел-Манна и Бракнера [8].

С помощью (16) можно уточнить формулу для теплоемкости, полученную в методе смещений и коллективных переменных с учетом только первого порядка теории возмущений [9]. Для этого в случае высокой плотности достаточно в знаменателе (16) положить $z(q, \omega) = z(0, 0) = 2$. Если для отношения теплоемкости к ее зоммерфельдовскому значению c_0 воспользоваться формулой

$$\left(\frac{c}{c_0}\right)^{-1} = \frac{\gamma^2 r_s^2}{2} \frac{d}{dp}\Big|_{p=1} W(p), \tag{19}$$

то после несложных операций получим

$$\left(\frac{c}{c_0}\right)^{-1} = 1 + \frac{\gamma r_s}{\pi} \int\limits_{-1}^{1} \frac{x\,dx}{2(1-x)} \left[1 + \frac{4\gamma r_s}{\pi} \frac{1}{2(1-x)}\right]^{-1}, \tag{20}$$

или окончательно

$$\left(\frac{c}{c_0}\right)^{-1} = 1 + \frac{\gamma r_s}{2\pi}\left(-\ln r_s + \ln\frac{\pi}{\gamma} - 2\right), \tag{21}$$

что совпадает с известным результатом [10].

В заключение автор выражает благодарность И. Р. Юхновскому за руководство работой, а также В. П. Олейникову, В. Д. Озрину, И. Вакарчуку и С. Латий за полезные дискуссии и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юхновский И. Р. «Укр. физ. журн.», **9**, 702, 827, 1964.
2. Юхновский И. Р. «Укр. физ. журн.», **12**, 1674, 1967.
3. Юхновский И. Р., Блажиевский Л. Ф. «Укр. физ. журн.», **11**, 936, 1966.
5. Юхновский И. Р., Цыганенко В. В., Вавpух М. В. «Укр. физ. журн.», **10**, 135, 1965.
5. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский Н. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Физматгиз, 1962.
6. Фрадкин Е. С. В сб.: «Квантовая теория поля и гидродинамика». М., «Наука», 1965.
7. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М., «Мир», 1965.
8. Gell-Mann M., Brueckner K. A. Phys. Rev., **106**, 364, 1957.
9. Бигун М. М., Бигун Г. И. «Укр. физ. журн.», 14, № 2, 1969.
10. Gell-Mann M. Phys. Rev., **106**, 369, 1957.

Поступила в редакцию
28.5 1969 г.

Кафедра
квантовой статистики