УДК 538.214:541.571.3

ВЛИЯНИЕ НЕЛОКАЛЬНОГО ОБМЕНА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

М. Н. Зубцов, В. Г. Гаврильев

(кафедра магнетизма)

Предложен метод расчета статической диэлектрической проницаемости взаимодействующего электронного газа, основанный на строгом учете нелокального обменного взаимодействия.

Одной из центральных проблем теории взаимодействующего электронного газа является вычисление диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$. Диэлектрическая проницаемость (ДП) по своему определению характеризует экранирующие свойства системы взаимодействующих электронов.

В данной работе представлен результат учета в ДП нелокального обменного взаимодействия и его влияния на изменение области допустимых значений статической ДП $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ при $\omega=0$. Проблема знака ДП неоднократно обсуждалась в литературе [1—3]. Появление отрицательных значений статической ДП обусловлено нарушением соотношения Крамерса—Кронига для $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$. В работах [3, 4] установлено, что отрицательное значение $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ возникает благодаря поправкам на локальное поле, учитывающим тем или иным способом эффекты обменного и корреляционных взаимодействий.

В обобщенном приближении хаотических фаз (учитывающем помимо прямого кулоновского только обменное взаимодействие) было найдено значение параметра Бракнера $r_s=6{,}02$, при котором возникает отрицательное значение $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ [3].

В дальнейшем на основе поправок на локальное поле и функционала плотности был вычислен ряд значений r_s, при которых возникает отрицательное значение $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$: $r_s=5{,}109$; 5,06; 5,225 и 5,145 (по [5, 6, 7 и 8] соответственно). Из этих данных видно, что учет корреляционных эффектов приводит к уменьшению r_s, а все приближения дают примерно одинаковые значения.

Альтернативным способом, свободным от введения искусственных поправок на локальное поле, при вычислении статической ДП для систем с кулоновским взаимодействием представляется описанный ниже подход. Наибольшую трудность при вычислении $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ вызывает вычисление фурье-образа полного экранированного потенциала $V(\mathbf{q})$. На основе разработанного в работе [9] метода можно вычислить полный экранированный потенциал одиночной примеси в представлении Фока. При этом удается строго учесть эффекты нелокальности обменного взаимодействия. Система уравнений, связывающих функцию Грина индуцированной примесью плотности заряда с экранированным потенциалом,

$$\eta(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \mathscr{E}) = \int d\mathbf{r}_1 G_0(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|; \mathscr{E}) V(r_1) G_0(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'|; \mathscr{E}) + \int d\mathbf{r}_1 G_0(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|; \mathscr{E}) V(r_1) \eta(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}'; \mathscr{E}),$$

$$V(r_1) = \frac{1}{r_1} - \frac{1}{\pi}\int_0^{k_F} \mathscr{E} d\mathscr{E} \int d\mathbf{r}' \frac{\operatorname{Im}\eta(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'; \mathscr{E})}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'|} + \frac{1}{2\pi}\int_0^{k_F} \mathscr{E} d\mathscr{E} \int d\mathbf{r}' \frac{\operatorname{Im}\eta(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}'; \mathscr{E})}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'|},$$

где $G_0(r; \mathscr{E}) = -\exp(i\mathscr{E} r)/2\pi r$, позволяет в линейном приближении получить выражение фурье-образа полного экранированного потенциала:

$$V(q) = 4\pi/(q^2 + f_1(q) - f_2(q) q^2).$$

Потенциал $V(q)$ содержит вклады как обычного отклика Линдхарда:

$$f_1(\mathbf{q}) = 4\pi \operatorname{Im} \int_0^{k_F} \mathscr{E} d\mathscr{E} \int d\mathbf{k} G_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}; \mathscr{E}) G_0(\mathbf{k}; \mathscr{E}),$$

так и нелокального обменного взаимодействия:

$$f_2(\mathbf{q}) = 2\pi \operatorname{Im} \int_0^{k_F} \mathscr{E} d\mathscr{E} \int_0^{1} d\mathbf{k} \frac{G_0(\mathbf{k}-\mathbf{q};\ \mathscr{E})\, G_0(\mathbf{k};\ \mathscr{E})}{k^2}.$$

Знание полного потенциала $V(q)$ позволяет вычислить статическую ДП. Численный расчет показал, что начиная с $r_s=5{,}17$ появляется область отрицательных значений статической ДП в импульсном пространстве.

Тем самым показано, что строгий учет нелокального обменного взаимодействия приводит к аналогичным результатам, как и в случае расчета статической ДП $\varepsilon(q, 0)$ при учете поправок на локальное поле для эффектов обменного и корреляционных взаимодействий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Киржниц Д. А.//УФН. 1976. **119**, № 2. С. 357. [2] Долгов О. В., Максимов Е. Г.//УФН. 1981. **135**, № 2. С. 441. [3] Долгов О. В., Максимов Е. Г.//УФН. 1982. **138**, № 1. С. 95. [4] Горобченко В. Д., Максимов Е. Г.//УФН. 1980. **130**, № 1. С. 65. [5] Von Barth V., Hedin L.//J. Phys. C. 1972. **5**, N 13. P. 1629. [6] Gunnarsson O., Lundqvist B. I.//Phys. Rev. 1976. **B 13**, N 1. P. 4274. [7] Moruzzi Y. I., Janak J. F., Williams A. K.//Calculated Electronic Properties of Metals. N. Y.: Pergamon Press, 1978. [8] Rajagopal A. K., Singhal S. P., Benerjee M., Kimball J. C.//Phys. Rev. 1978. **B 17**, N 5. P. 2262. [9] Зубцов М. Н. Препринт физ. фак. МГУ № 32/1985. М., 1985.

Поступила в редакцию
08.07.88