

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-99-18U

М.Ваврух*, В.Паславський, Н.Тишко*

Поправка на локальне поле моделі електронної рідини при
низьких температурах

*Львівський державний університет, 290005, Львів,
Кирила і Мефодія, 8

УДК: 537.31;311.31.001

PACS: 05.30.Fk

Поправка на локальне поле моделі електронної рідини при
низьких температурах

Ваврух М., Паславський В., Тишко Н.

Анотація. Динамічна поправка на локальне поле модельних фермі-систем досліджена в області температур, низьких порівняно з температурою виродження. Показано, що характер температурної залежності визначається значенням параметра неідеальності і довгохвильовою асимптотикою потенціалу двочастинкової взаємодії. Наведено результати чисельного розрахунку поправки на локальне поле моделі електронної рідини в області слабкої та проміжної неідеальності

Local-field correction function for the electron liquid model at low temperature

Vavrukh M., Paslavs'kii V., Tyshko N.

Abstract. Dynamic local-field correction function for the fermion-system model has been investigated at low temperature in the region of strong degeneration. Shown, that temperature dependence of the local-field correction function expressed by the long-wavelength asymptote of the interaction potential and the coupling parameter. This function for the electron liquid model was calculated in the weakly and middle non-ideality region.

Подається в Low Temperature Physics
Submitted to Low Temperature Physics

1. Вступ

Поправка на локальне поле є однією з фундаментальних характеристик систем взаємодіючих частинок. У традиційному варіанті вона пристосована до розрахунку інтегральних характеристик. Використання нелокальних функцій, близьких до поправки на локальне поле, а саме її варіаційних похідних, дозволяє розширити концепцію локального поля і застосовувати її до розрахунків одночастинкових характеристик [1]. Найповніше поправка на локальне поле вивчена у випадку основного стану моделі електронної рідини, що зумовлено її використанням в теорії металів [1–3]. У роботах [1,4] показано, що форма поправки на локальне поле суттєво залежить від довгохвильової асимптотики потенціала двочастинкової взаємодії, а також від значення параметра неідеальності.

Однією з невирішених задач, що становить як евристичний, так і практичний інтерес, є вивчення температурної залежності поправки на локальне поле вироджених фермі-систем. Ми дослідили цю залежність у рамках базисного підходу, використовуючи наближені інтегральні рівняння для поправки на локальне поле [1], виведені на основі спектрального зображення багаточастинкових кореляційних функцій ідеальної (базисної) системи (розділ 3). У четвертому розділі аналітично досліджена температурна залежність довгохвильової границі динамічної поправки на локальне поле слабо неідеальних систем та її зміни, зумовлені формою потенціала взаємодії або значенням параметра неідеальності. Результати чисельних розрахунків поправки на локальне поле моделі електронної рідини при відмінних від нуля температурах подані у п'ятому розділі.

2. Рівняння для поправки на локальне поле

У наближенні одно- та двокільцевих "драбинчатих" діаграм для поляризаційного оператора у роботі [1] отримано інтегральні рівняння для динамічної поправки на локальне поле фермі-системи з довільним локальним потенціалом відштовхування між частинками. У відповідності з врахуванням двох типів діаграм поправка на локальне поле представляється у вигляді суми двох доданків ($G(x) = G_1(x) + G_2(x)$), що задовільняють такій системі рівнянь:

$$G_i(x) + \sum_{x_1} \Phi_i(x, x_1) G_2(x_1) = G_i^{RPA}(x), \quad i = 1, 2. \quad (1)$$

Тут $x = (\mathbf{q}, \nu)$, де \mathbf{q} – хвильовий вектор, $\nu_n = 2\pi nT$ – парна Мацубарівська частота [5], T – температура системи. Ядра рівнянь (1) визначаються кумулянтними кореляційними функціями ідеальної системи $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$ та фур'є-образом потенціала взаємодії V_q :

$$\begin{aligned} \Phi_1(x, x_1) &= -\frac{V_{q_1} \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1)}{2\beta V_q [\mu_2^0(x, -x)]^2}, \\ \Phi_2(x, x_1) &= \frac{V_{q_1} V_0(x+x_1) [\tilde{\mu}_3^0(x, x_1, -x-x_1)]^2}{2V V_q \beta [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

де V – об'єм системи, $V_0(x)$ – потенціал, динамічно екранований у наближенні хаотичних фаз,

$$V_0(x) = V_q \{1 + L(x)\}^{-1}, \quad L(x) = V^{-1} V_q \mu_2^0(x, -x); \quad (3)$$

$G_i(x)^{RPA}$ – наближення хаотичних фаз для відповідних доданків:

$$G_i^{RPA}(x) = \sum_{x_1} \Phi_i(x, x_1) \{1 + L(x_1)\}^{-1}. \quad (4)$$

Доданок $G_1(x)$ відповідає наближенню слабо неідеальних систем. Нехтуючи $G_2(x)$ і екрануванням в $G_1(x)$, знаходимо поправку на локальне поле в границі слабо неідеальної системи

$$G_{id}(x) = \sum_{x_1} \Phi_1(x, x_1), \quad (5)$$

яка не залежить від константи взаємодії, але визначається типом потенціала V_q . У випадку кулонівського потенціала при $T = 0K$ $G_{id}(x)$ є універсальною функцією, незалежною від будь-яких параметрів. Рівняння для $G_2(x)$ – замкнуте, у випадку однорідної моделі при низьких температурах воно зводиться до двовимірного лінійного інтегрального рівняння Фредгольма II роду з симетричним додатнім ядром [1], що забезпечує існування і єдиність його додатнього нетривіального розв'язку.

3. Кореляційні функції базисної системи

Температурна залежність $G_{id}(x)$ визначається кореляційними функціями базисної системи [6]

$$\begin{aligned} \mu_n^0(x_1, \dots, x_n) &= (-1)^{n+1} T n^{-1} \delta_{\nu_1+\nu_2+\dots+\nu_n, 0} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\dots+\mathbf{q}_n, 0} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, s; \nu^*} \sum_{i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_n=1} \prod_{j=1}^n G_{\mathbf{k}-\mathbf{p}_j, s}^0(\nu^* - \omega_j), \end{aligned} \quad (6)$$

де

$$G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) = \frac{1}{i\nu^* - \varepsilon_k + \mu} \quad (7)$$

– спектральне зображення одночастинкової функції Гріна ідеальної системи ($\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, $\nu^* = (2n + 1)\pi T$), $\mathbf{p}_j = \mathbf{q}_{i_1} + \mathbf{q}_{i_2} + \dots + \mathbf{q}_{i_j}$, $\omega_j = \nu_{i_1} + \nu_{i_2} + \dots + \nu_{i_j}$. Кумулянти $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$ – дійсні симетричні функції своїх аргументів, залежні також від термодинамічних параметрів – температури та густини частинок. Зазначимо, що $\mu_2^0(x, -x)$ – поляризаційний оператор наближення хаотичних фаз – у вигляді (6) введений у роботі [7]. У випадку абсолютного нуля температури він розрахований в [8] (у змінних канонічного ансамблю). В роботах [9,10] досліджені і розраховані статичні кумулянти $\mu_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2; 0, 0, 0)$ і $\mu_4^0(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2, 0, \dots, 0)$. Динамічні кумулянти вищого порядку ($n \geq 3$) досліджені в [6,11], а $\mu_3^0(x_1, x_2, -x_1 - x_2)$, $\mu_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ розраховані для випадку $T = 0K$ і представлені в елементарних функціях. При відмінних від нуля температурах розрахунок кумулянтів набагато складніший.

Щоб скласти уявлення про температурну залежність $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$, розглянемо їх статичну довгохвильову границю, покладаючи $\mathbf{p}_j = 0$, $\omega_j = 0$ у формулі (6):

$$\tilde{\mu}_n^0(0, \dots, 0) = \lim_{x_1, \dots, x_n \rightarrow 0} \tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n) = 2 \frac{\partial^{n-1}}{\partial \mu^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}, \quad (8)$$

де $n_{\mathbf{k}} = \{1 + \exp[T^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)]\}^{-1}$ – розподіл Фермі (для частинок з фіксованою проекцією спіна) в базисній системі, μ – її хімпотенціал. Застосовуючи відомий метод Зоммерфельда (див. [12]) та враховуючи залежність хімпотенціала від температури, знаходимо, що

$$\mu_n^0(0, \dots, 0) = 3N(2\varepsilon_F)^{1-n} C_n \left\{ 1 + \frac{(\pi T^*)^2}{6} (n-1) \left(n - \frac{5}{2}\right) + \frac{(\pi T^*)^4}{288} \left(n - \frac{5}{2}\right) \left[n + \frac{21}{10} + (2n-1)(2n-3) \left(1 + \frac{7}{5}n\right) + \frac{7}{10} \right] + \dots \right\}, \quad (9)$$

де $C_2 = C_3 = 1$, $C_n = (-1)^{n-1} (2n-7)!!$ при $n \geq 4$; $T^* \equiv \frac{k_B T}{\varepsilon_F} = \frac{T}{T_F}$, $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ – енергія Фермі, N – число частинок у системі.

Підсумовуючи за змінною ν^* у формулі (6), переходячи від суми за вектором \mathbf{k} до інтеграла та інтегруючи після цього за кутівими змінними вектора \mathbf{k} , зобразимо кумулянти у вигляді однократних інтегралів Фермі:

$$\mu_2^0(x, -x) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} I_2(q; u);$$

$$\mu_3^0(x_1, x_2, x_3) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \delta_{q_1 + q_2 + q_3, 0} \delta_{\nu_1 + \nu_2 + \nu_3, 0} I_3(q_1, q_2; u_1, u_2; t);$$

$$I_2(q; u) = \int_0^\infty dk k n_{\mathbf{k}} \Gamma_2(k|q, u); \quad (10)$$

$$I_3(q_1, q_2; u_1, u_2; t_{12}) = \int_0^\infty dk k n_{\mathbf{k}} \{ \Gamma_3(k|q_1, q_2; u_1, u_2; t_{12}) + \Gamma_3(k|q_2, q_3; u_2, u_3; t_{23}) + \Gamma_3(k|q_3, q_1; u_3, u_1; t_{31}) \}.$$

Тут використано безрозмірні змінні $k \equiv |\mathbf{k}| k_F^{-1}$, $q_i \equiv |\mathbf{q}_i| k_F^{-1}$, $u_1 = \nu_i (2\varepsilon_F q_i)^{-1}$, $t_{ij} \equiv (\mathbf{q}_i \mathbf{q}_j) q_i^{-1} q_j^{-1}$ – косинуси кутів між відповідними векторами. В цих змінних $n_{\mathbf{k}} = \{1 + \exp[(k^2 - \mu^*)/T^*]\}^{-1}$, де $\mu^* = \mu \varepsilon_F^{-1}$;

$$\Gamma_2(k|q, u) = \frac{1}{2q} \ln \frac{u^2 + (k + q/2)^2}{u^2 + (k - q/2)^2};$$

$$\Gamma_3(k|q_1, q_2; u_1, u_2; t_{12}) = (q_1 q_2)^{-1} \text{Re} \left\{ \Delta_{(k)}^{-1} \ln \left[\frac{\delta_{(k)} + \Delta_{(k)} k}{\delta_{(k)} - \Delta_{(k)} k} \right] \right\},$$

$$\delta_{(k)} = k^2 t_{12} - \xi_1 \xi_2, \quad \xi_j = i u_j - \frac{1}{2} q_j; \quad j=1, 2; \quad (11)$$

$$\Delta_{(k)} = \{k^2 (t_{12}^2 - 1) + \xi_1^2 + \xi_2^2 - 2t_{12} \xi_1 \xi_2\}^{1/2}.$$

Формули (10)-(11) зручні для чисельного розрахунку кумулянтів при довільних температурах. Наближений аналітичний розрахунок їх можна виконати методом Зоммерфельда. Однак у статичному випадку або ж у випадку дуже малих частот його застосування має деякі незручності у зв'язку з тим, що в околі точок $|\mathbf{q}_i| = 2k_F$ функції $\mu_n^0(\dots)$ мають певні особливості. Хоча і в цих окремих випадках метод Зоммерфельда дозволяє аналітично дослідити функції $I_n(q_1, \dots; u_1, \dots)$.

Як приклад розглянемо двочастинкову кореляційну функцію, яка разом з поправкою на локальне поле визначає усі характеристики системи. Метод Зоммерфельда призводить до такого розкладу:

$$I_2(q; u) = I_2^{(0)}(q; u) - \frac{1}{12} (\pi T^*)^2 I_2^{(2)}(q; u) - \frac{11}{360} (\pi T^*)^4 I_2^{(4)}(q; u) + \dots;$$

$$I_2^{(0)}(q; u) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1+u^2-q^2}{4} \Gamma_2(1|q; u) - u \sum_{\sigma=\pm 1} \arctg[(1+\sigma \frac{q}{2}) u^{-1}] \right\};$$

$$I_2^{(2)}(q; u) = \frac{1}{2} \left\{ \Gamma_2(1|q; u) - \frac{1}{q} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma \left(1 + \sigma \frac{q}{2}\right) \vartheta_\sigma(q; u) \right\}; \quad (12)$$

$$I_2^{(4)}(q; u) = \frac{9}{44} \Gamma_2(1|q; u) - \frac{31}{176} \sum_{\sigma=\pm 1} \vartheta_\sigma(q; u) \left[\frac{1}{2} + \left(1 + \sigma \frac{q}{2}\right) \vartheta_\sigma(q; u) \right] -$$

$$- \frac{5}{44q} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma \vartheta_\sigma(q; u) \left[\frac{1}{8} + \left(1 + \sigma \frac{q}{2}\right) \vartheta_\sigma(q; u) + \frac{14}{5} \left(1 + \sigma \frac{q}{2}\right)^3 \vartheta_\sigma^2(q; u) \right];$$

$$\vartheta_\sigma(q; u) = [u^2 + (1 + \sigma \frac{q}{2})^2]^{-1}.$$

Порівнюючи формули (12) і (9) (при $n = 2$) бачимо, що функції $I_2^{(m)}(q; u)$ ($m = 0, 2, 4, \dots$) у статичному випадку наближаються до одиниці в границі $q \rightarrow 0$. При цьому $I_2^{(0)}(q; u)$ є додатнєвизначеною функцією з такою асимптотикою:

$$I_2^{(0)}(q; u) \rightarrow \begin{cases} 1 - \frac{q^2}{12} + \dots & \text{при } q \ll 1; \nu = 0; \\ \frac{1}{3} \left[\frac{\tilde{\nu}^2 + q^2}{q^2} \right]^{-1} + \dots & \text{при } q \ll 1; \tilde{\nu} \gg q; \\ \text{або } q \gg 1; \tilde{\nu} = 0; \tilde{\nu} \neq 0, & \end{cases} \quad (13)$$

де $\tilde{\nu} \equiv \nu(2\varepsilon_F)^{-1}$. Функція $I_2^{(2)}(q; u)$ – знакозмінна, додатня при невеликих значеннях хвильових чисел ($q \leq 2$) і від'ємна в області $q > 2$:

$$I_2^{(2)}(q; u) \rightarrow \begin{cases} 1 + \frac{1}{6} q^2 + \dots & \text{при } q \ll 1; \nu = 0; \\ \frac{[(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 - \frac{1}{12} q^2]}{[(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2 + \frac{1}{4} q^2]^3} + \dots & \text{при } q \ll 1; \tilde{\nu} \gg q; \\ \text{або } q \gg 1; \tilde{\nu} = 0; \tilde{\nu} \neq 0. & \end{cases} \quad (14)$$

Асимптотика $I_2^{(4)}(q; u)$ нагадує асимптотику $I_2^{(0)}(q; u)$:

$$I_2^{(4)}(q; u) \rightarrow \begin{cases} 1 + \frac{379}{704} q^2 + \dots & \text{при } q \ll 1; \nu = 0; \\ \frac{5}{176} \left[\left(\frac{\tilde{\nu}}{q}\right)^2 + \frac{1}{4} q^2 \right]^{-1} + \dots & \text{при } q \ll 1; \tilde{\nu} \gg q; \\ \text{або } q \gg 1; \tilde{\nu} = 0; \tilde{\nu} \neq 0, & \end{cases} \quad (15)$$

На мал. 1 подано $I_2^{(m)}(q; u)$ як функції хвильового числа при фіксованому значенні частоти $\tilde{\nu}$. Як вже зазначалось вище, розклади (12) незастосовні в околі точки $q = 2$ у статичному випадку, або ж при малих частотах. Результати чисельного розрахунку функції $I_2(q; u)$ за формулами (9)-(10) наведені на мал. 2 (статичний випадок), 3 (динамічний). Вплив температури зводиться в основному до згладжування екстремумів і особливостей функцій $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$. Це

добре помітно в статичному випадку і при малих частотах. Як відомо, при абсолютному нулі температури статичні кумулянти характеризуються особливостями в околі точок $|\mathbf{q}_i| = 2k_F$, зумовленими розривним характером функції розподілу електронів за імпульсами: $\mu_2^0(x, -x)$ має "слабу" логарифмічну особливість, $\mu_3^0(x_1, x_2, x_3)$ – логарифмічну, $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$ при $n \geq 4$ – степеневі особливості. При відмінних від нуля температурах ці особливості згладжуються і розриви відсутні. Як приклад на мал. 4, 5 наведено сім'ю кривих функції $\mu_3^0(x, -x, 0) = \frac{\partial}{\partial \mu} \mu_2^0(x, -x) = 3N(2\varepsilon_F)^{-2} I_3(q; u)$. У статичному випадку при $T = 0K$ ця функція має логарифмічний розрив, з якого при скінчених, але достатньо низьких температурах формується максимум, який зникає при $T^* \sim 1$. Зникнення розриву можна показати аналітично, розрахувавши функцію

$$I_3(q; u) = \frac{2}{T^*} \int_0^\infty dk k \Gamma_2(k|q, u) \frac{\exp[(k^2 - \mu^*)/T^*]}{(1 + \exp[(k^2 - \mu^*)/T^*])^2} \quad (16)$$

у статичному випадку в точці $q_0 = 2(\mu^*)^{1/2}$ методом Зоммерфельда: при $T^* \ll 1$

$$I_3(q, 0) = \frac{1}{2(\mu^*)^{1/2}} \left\{ \ln\left(\frac{\mu^*}{T^*}\right) + C + \ln\left(\frac{8}{\pi}\right) - \frac{\pi^2}{32} \left(\frac{T^*}{\mu^*}\right)^2 + \dots \right\}, \quad (17)$$

де $C = 0,577216$ – постійна Ейлера [13].

4. Температурна залежність асимптотики поправки на локальне поле слабо неідеальних систем

Температурну залежність асимптотики поправки на локальне поле у випадку слабо неідеальних систем вдається розрахувати аналітично. Як і в роботі [1], розглянемо модель фермі-системи з потенціалом відштовхування Юкави

$$V_q = \frac{4\pi A e^2}{q^2 + (\xi/a_0)^2}, \quad (18)$$

де e – заряд електрона, $A > 0$ – константа взаємодії, $\xi^{-1} a_0$ – радіус дії потенціала (a_0 – радіус Бора). Це дозволить нам дослідити залежність поправки на локальне поле від радіуса потенціала. Крім того, дослідивши асимптотику $G_{id}(x)$, ми використаємо отримані результати для визначення температурної залежності $G_1(x)$.

У даному наближенні використаємо вираз (6) для функції $\mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1)$. Виконуючи підсумовування за частотами Мацубари, отримуємо

$$G_{id}(x) = 2\hbar^2 [mV_q]^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) \times \\ \times (n_{\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}})(n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}) \times \\ \times \text{Re} \{ (i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}})^{-2} (i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}})^{-1} \}. \quad (19)$$

Асимптотика цієї функції для потенціала (18) при $T = 0K$ розрахована в [1]. Розглянемо тут її асимптотику при $T \neq 0K$. Короткохвильова асимптотика $G_{id}(x)$ не залежить від частоти і температури та визначається формою потенціала при $q \gg 1$

$$G_{id}(x) \rightarrow \frac{1}{2} \{ 1 - D(\xi_1) + \dots \}, \\ D(\xi_1) = \frac{1}{3} - \frac{3}{4}z + \frac{1}{8}z^2 + z^{3/2} \arctg(2z^{-1/2}) - \\ - \frac{3}{8}z^2 \left(1 + \frac{z}{12} \right) \ln[1 + 4/z], \quad (20)$$

де $z = \xi_1^2$, $\xi_1 \equiv \xi r_s / \eta$, $\eta = (\frac{9\pi}{4})^{1/3}$, r_s – параметр Бракнера. У границі $\xi = 0$, що відповідає звичайній моделі електронної рідини, $D(\xi_1) = \frac{1}{3}$, а при $\xi \rightarrow \infty$ $D(\xi_1)$ перетворюється в нуль.

Щоб знайти довгохвильову асимптотику, використаємо розклад

$$n_{k+q} = n_k + (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k) \frac{dn_k}{d\varepsilon_k} + \dots \quad (21)$$

і асимптотику функції $\mu_2^0(x, -x)$. Переходячи до безрозмірних змінних та інтегруючи в сферичній системі координат, в статичній границі знаходимо:

$$G_{id}(x) \xrightarrow{q \ll 1, \nu=0} \frac{1}{4} [q^2 + \xi_1^2] f_{\xi_1}(T^*), \quad (22) \\ f_{\xi_1}(T^*) = \left\{ \int_0^\infty dk k^2 \frac{dn_k}{d(k^2)} \right\}^{-2} \int_0^\infty \int_0^\infty dk_1 dk_2 k_1^2 k_2^2 \frac{dn_{k_1}}{d(k_1^2)} \cdot \frac{dn_{k_2}}{d(k_2^2)} \times \\ \int_{-1}^{+1} dt (1 - k_2 t / k_1) [k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 t + \xi_1^2]^{-1}.$$

У границі великих частот

$$G_{id}(x) \xrightarrow{q \ll 1, \tilde{\nu} \gg q} \frac{3}{20} [q^2 + \xi_1^2] \varphi_{\xi_1}(T^*), \\ \varphi_{\xi_1}(T^*) = 4 \int_0^\infty \int_0^\infty dk_1 dk_2 (k_1 k_2)^4 \frac{dn_{k_1}}{d(k_1^2)} \cdot \frac{dn_{k_2}}{d(k_2^2)} \times \\ \int_{-1}^{+1} dt [1 + 2t^2 - 3tk_1/k_2] [k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 t + \xi_1^2]^{-1}. \quad (23)$$

Оскільки $dn_k/d(k^2) \rightarrow -\delta(k^2 - \mu^*)$ при $T^* \rightarrow 0$, то $f_{\xi_1}(T^*)$, $\varphi_{\xi_1}(T^*) \rightarrow 1$ в границі абсолютного нуля температури у випадку моделі електронного газу ($\xi_1 = 0$). У випадку моделі з потенціалом (18)

$$f_{\xi_1}(T^*) = 1 + \frac{1}{4} z \ln \left[\frac{z + \frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z + 4} \right] + \\ + \frac{(\pi T^*)}{12} \left(1 + \frac{7}{4} z \right) \ln \left[\frac{z + \frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z + 4} \right] + \frac{(\pi T^*)^2}{24(4+z)^2} (4+3z) + \dots; \\ \varphi_{\xi_1}(T^*) = 1 - z - \frac{z(1+z)}{4} \ln \left[\frac{z + \frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z + 4} \right] + \\ + \frac{(\pi T^*)^2}{12} \left(1 + \frac{z}{4} \right) \ln \left[\frac{z + \frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z + 4} \right] + \\ + \frac{(\pi T^*)^2}{6} z \left\{ 1 + \frac{1-3z}{4(4+z)} + 2 \frac{1+z}{(4+z)^2} \right\} + \dots \quad (24)$$

В границі $T^* \rightarrow 0$ ці вирази визначають довгохвильову асимптотику $G_{id}(x)$ узагальненої моделі (18) [1]. У випадку моделі електронного газу (в границі $\xi_1 \rightarrow 0$) виникає особливість типу $(T^*)^2 \ln T^*$. Наявність такої особливості в поправці на локальне поле веде до аналогічної особливості вільної енергії, а отже, й інших характеристик. Оскільки останні можуть бути представлені у вигляді розкладів за степенями $(T^*)^2$, то зазначена особливість нефізична. Це свідчить про те, що $G_{id}(x)$ є недостатньо коректним наближенням для кулонівських систем. У випадку слабо неідеального електронного газу слід використовувати $G_1(x)$. Враховуючи екранований потенціал у наближенні Томаса-Фермі, тобто замінюючи $L(x)$ на $3NV_q(2V\varepsilon_F)^{-1}$, знаходимо границю $G_1(x)$ при $q \ll 1$:

$$G_1(x) \xrightarrow{q \ll 1} \begin{cases} \frac{1}{3} q^2 f_{\xi_1}(T^*) & \text{при } \nu = 0; \\ \frac{3}{20} q^2 \varphi_{\xi_1}(T^*) & \text{при } \tilde{\nu} \gg 1, \end{cases} \quad (25)$$

де $\xi_1^2 = 4r_s(\pi\eta)^{-1}$. В області $T^* \ll \xi_1$ функції (24) є розкладами за степенями $(T^*)^2$. Розклади (24) отримані методом Зоммерфельда і відповідають області температур $T^* \leq 0, 25$. Результати чисельного розрахунку температурної залежності довгохвильової границі функцій $G_{id}(x)$ і $G_1(x)$ для моделі електронного газу показані на мал. 6 і 7 ($r_s = 1$). При обчисленні $f_\xi(x)$, $\varphi_\xi(x)$ для функції $G_1(x)$ використано наближення Томаса-Фермі. Результати аналізу свідчать про наявність суттєвої температурної залежності поправки на локальне поле.

5. Чисельний розрахунок поправки на локальне поле

В цьому розділі наведено результати чисельного розрахунку функцій $G_{id}(x)$ і $G_1(x)$ при відмінних від нуля температурах. З метою спрощення розрахунків використовується наближення Томаса-Фермі, що дозволяє обмежитися формулою (19), замінюючи в ній $V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ фур'є-образом екранованого потенціала $4\pi e^2 \{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)^2 + \xi^2/a_0^2\}^{-1}$ при $\xi_1^2 = 4\eta(\pi r_s)^{-1}$. Для векторів \mathbf{k}_1 і \mathbf{k}_2 використовується циліндрична система координат, вісь OZ якої паралельна до вектора \mathbf{q} . Після інтегрування за кутовими змінними $G_1(x)$ зводиться до такого інтеграла:

$$G_1(x) = \frac{1}{8} I_{2,0}^{-2}(q; u) \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 dz_2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \sigma_1 \sigma_2 \times \\ \times F_u \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}, z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) T_\xi \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}, z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right). \quad (26)$$

Тут використано позначення:

$$F_u(z_1, z_2) = (z_1 - z_2) \{z_1^2 z_2 - u^2(2z_1 + z_2)\} [z_1^2 + u^2]^{-2} [z_2^2 + u^2]^{-1}; \\ T_\xi(z_1, z_2) = \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \rho_1 \rho_2 n(z_1, \rho_1) n(z_2, \rho_2) \times \\ \times \{[\rho_1^2 + \rho_2^2 + \xi_1^2 + (z_1 - z_2)^2]^2 - 4\rho_1^2 \rho_2^2\}^{-1/2}, \\ n(z, \rho) = \{1 + \exp[(z^2 + \rho^2 - \mu^*(T^*))/T^*]\}^{-1}. \quad (27)$$

У випадку абсолютного нуля температури $T_\xi(z_1, z_2)$ зображається в елементарних функціях [1]. У випадку низьких температур його

можна звести до однократного інтеграла, використовуючи тотожність

$$n(z, \rho) = n^0(z, \rho) + \{n(z, \rho) - n^0(z, \rho)\}, \quad (28)$$

в якій

$$n^0(z, \rho) = \begin{cases} 1 & \text{при } z^2 + \rho^2 \leq \mu^*(T^*), \\ 0 & \text{при } z^2 + \rho^2 > \mu^*(T^*), \end{cases} \quad (29)$$

і нехтуючи доданком, квадратичним відносно $n(z, \rho) - n^0(z, \rho)$. Таке наближення забезпечує врахування членів порядку $(T^*)^2$ без використання розкладів Зоммерфельда, а функція $G_1(x)$ зводиться до двократних і трикратних інтегралів:

$$G_1(x) = \frac{1}{8} I_{2,0}^{-2}(q; u) \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \sigma_1 \sigma_2 \left\{ \frac{1}{4} \int_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_1 \int_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_2 \times \right. \\ \times F_u \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}, z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) A_{\sigma_1, \sigma_2}(s^2; \mu^* - z_1^2; \mu^* - z_2^2) + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 \int_0^\infty \rho_2 d\rho_2 [n(z_2, \rho_2) - n^0(z_2, \rho_2)] \int_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_1 \times \\ \times F_u \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}, z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) B_{\sigma_1, \sigma_2}(s^2; \mu^* - z_1^2; \rho_2^2) + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_0^\infty \rho_1 d\rho_1 [n(z_1, \rho_1) - n^0(z_1, \rho_1)] \int_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_2 \times \\ \left. \times F_u \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}, z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) \times B_{\sigma_1, \sigma_2}(s^2; \mu^* - z_2^2; \rho_1^2) \right\}. \quad (30)$$

Тут використано такі позначення:

$$A_{\sigma_1, \sigma_2}(s^2; a; b) = \frac{1}{2} \{W(s^2; a; b) - s^2 - a - b\} + \\ + a \ln \{(2s^2)^{-1} [W(s^2; a; b) + s^2 + b - a]\} + \\ + b \ln \{(2s^2)^{-1} [W(s^2; a; b) + s^2 + a - b]\}; \quad (31) \\ B_{\sigma_1, \sigma_2} = \frac{1}{2} \ln \{(2s^2)^{-1} [W(s^2; a; b) + s^2 + a - b]\}, \\ W(s^2; a; b) = [s^4 + 2s^2(a + b) + (a - b)^2]^{1/2}; \\ s^2 \equiv s_{\sigma_1, \sigma_2}^2 = \xi_1^2 + \left[\left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2} \right) - \left(z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) \right]^2.$$

Переходу до границі абсолютного нуля температури відповідає заміна $n(z, \rho) \rightarrow n^0(z, \rho)$, $\mu^* \rightarrow 1$.

Чисельний розрахунок поправки на локальне поле за формулами (26) і (30) дає близькі результати. Вище було показано, що $G_{id}(x)$ не є досить коректним наближенням. Однак її температурна залежність представляє певний інтерес, оскільки у випадку моделі електронної рідини $G_{id}(x)$ є універсальною функцією і відображає, у загальних рисах, властивості поправки на локальне поле слабо неідеальних систем. Як бачимо з мал. 8 і 9, вплив температури призводить до суттєвої зміни $G_{id}(x)$ як у статичному, так і динамічному випадку, виражаючись у зміні висоти і форми екстремума в околі точки $q = 2k_F$.

Температурну залежність поправки на локальне поле моделі слабо неідеальної електронної рідини ілюструють мал. 10, 11, на яких представлена $G_1(x)$ при $r_s = 1$. Як і у випадку $G_{id}(x)$, температурна залежність спостерігається в широкій області змін хвильового вектора, а зростання температури від абсолютного нуля до $T^* = 0,1$ призводить до зміни $G_1(x)$ в середньому на величину порядку 10 %.

6. Висновки

Широке застосування поправки на локальне поле в теорії електронної рідини та в теорії металів визначає актуальність задачі її мікроскопічного дослідження. Властивості поправки на локальне поле моделі електронної рідини при абсолютному нулі температури в достатній мірі вивчені. У загальних рисах відомі властивості поправки на локальне поле і для інших моделей фермі-систем як з кулонівською, так і з короткодійною взаємодією при $T = 0K$. Дослідженню температурної залежності поправки на локальне поле не надавалось достатньої уваги, хоч ця задача є важливою як з евристичної, так і практичної точок зору. Нами показано, що поправка на локальне поле суттєво залежить від температури, а її розрахунок при скінчених температурах не складає принципових труднощів: він лише ненабагато складніший від аналогічного розрахунку при $T = 0K$. В цій роботі нами досліджена поправка на локальне поле у випадку слабо неідеальних систем. Результати чисельного розв'язання рівняння для доданка $G_2(x)$ при відмінних від нуля температурах і точнішого розрахунку $G_1(x)$ для моделі електронної рідини в області проміжної та сильної неідеальності будуть подані в окремій роботі.

Література

1. М.В.Ваврух. Обобщение концепции локального поля в теории ферми-жидкостей // ФНТ. - 1996. **22**. - С. 1005-1017.
2. Достижения электронной теории металлов. - П.Цише, Г.Леманн (ред.). - Москва, Мир, 1984, т. 1.
3. S.Ichimar. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerated electron liquids // Rev. Mod. Phys. - 1982. - **54**. - P. 1017-1059.
4. M.Vavrukh, V.Paslavs'kiy. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. VI. Generalized Fermi System Model. Local-Field Correction Function // Phys. stat. sol. (b). - 1998. - **208**. - P. 91-104.
5. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. - Москва, Физматгиз, 1962.
6. Ваврух М.В. Крохмальский Т.Е. Простейшие динамические кумулянты идеального электронного газа // УФЖ. - 1987. - **32**, N 4. - С. 621-625.
7. Е.Монтролл, Дж.Уорд. Квантовая статистика систем взаимодействующих частиц. В сб.: Вопросы квантовой теории необратимых процессов. - Москва, ИЛ, 1961. - С. 298-361.
8. M.Gell-Mann, K.A.Brueckner. Correlation energy of an electron gas at high density // Phys. Rev. - 1957. - **106**. - P. 364-368.
9. Е.Г.Бровман, Ю.М.Каган. Об особенностях многохвостных кольцевых диаграмм для ферми-систем // ЖЭТФ. - 1972. - **63**, вып. 5. - С. 1937-1949.
10. Е.Г.Бровман, А.Холас. Общий метод интегрирования многохвостных кольцевых диаграмм для ферми-систем // ЖЭТФ. - 1974. - **66**. - С. 1877-1894.
11. М.В.Ваврух. Базисный підхід в теорії фермі-систем взаємодіючих частинок // УФЖ. - **36**. - С. 150-157.
12. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика. - Москва, Наука, 1964.
13. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - Москва, Наука, 1971.

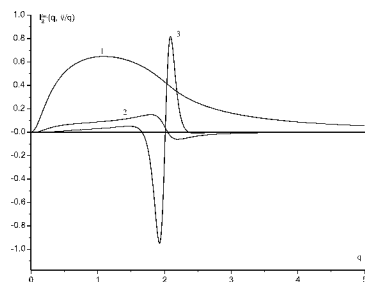


Рис. 1. Компоненти $I_2^{(m)}(q; \nu/q)$ як функції хвильового вектора при фіксованому значенні частоти $\tilde{\nu}$

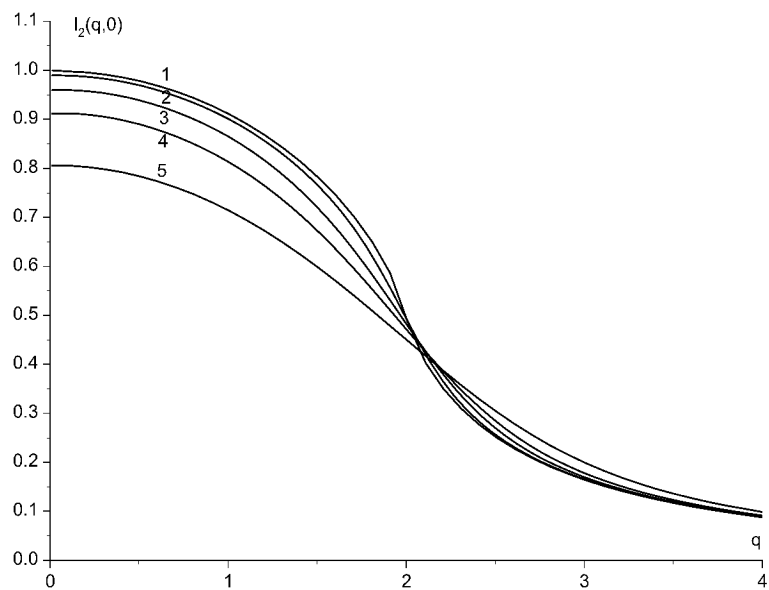


Рис. 2. Функція $I_2(q; 0)$ розрахована на основі формул (9) - (10) для випадку різних температур

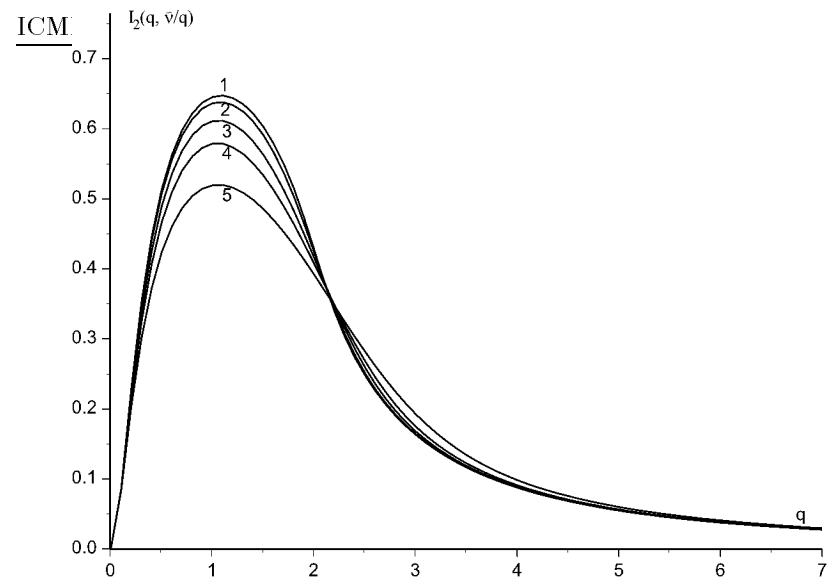


Рис. 3. Функція $I_2(q; \nu/q)$ розрахована на основі формул (9) - (10) для випадку різних температур

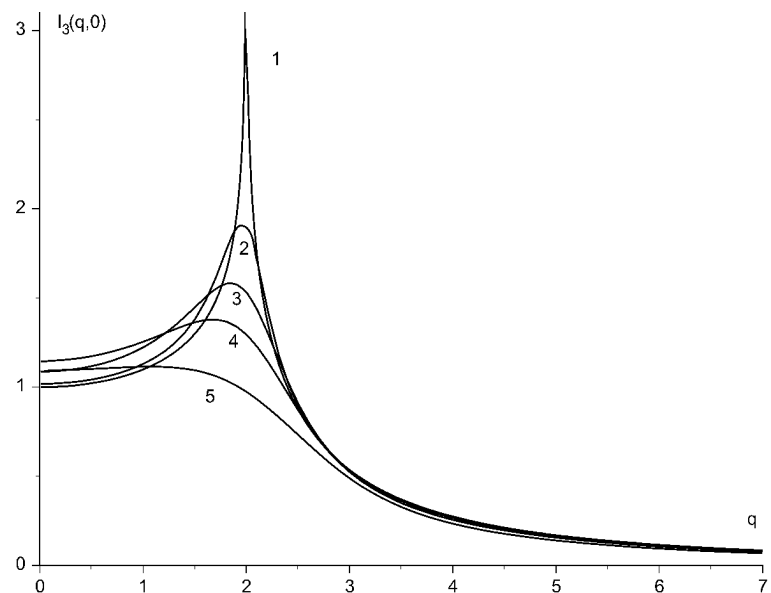


Рис. 4. Сім'я кривих функції $\mu_3^0(x, -x, 0)$ розрахованих при різних температурах для статичного випадку

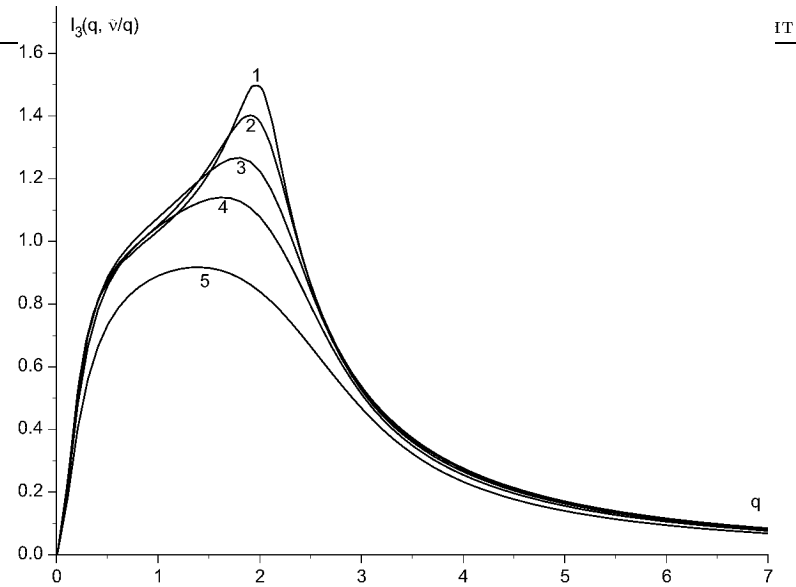


Рис. 5. Сім'я кривих функції $\mu_3^0(x, -x, 0)$ для різних температур

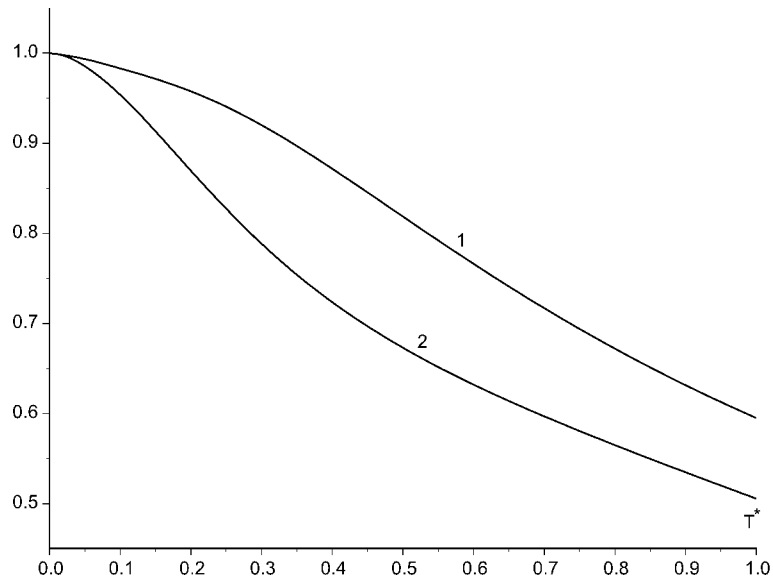


Рис. 6. Результати чисельного розрахунку температурної залежності довгохвильової границі функції $G_{id}(x)$ для моделі електронного газу. (Функції f_ξ та φ_ξ відповідно)

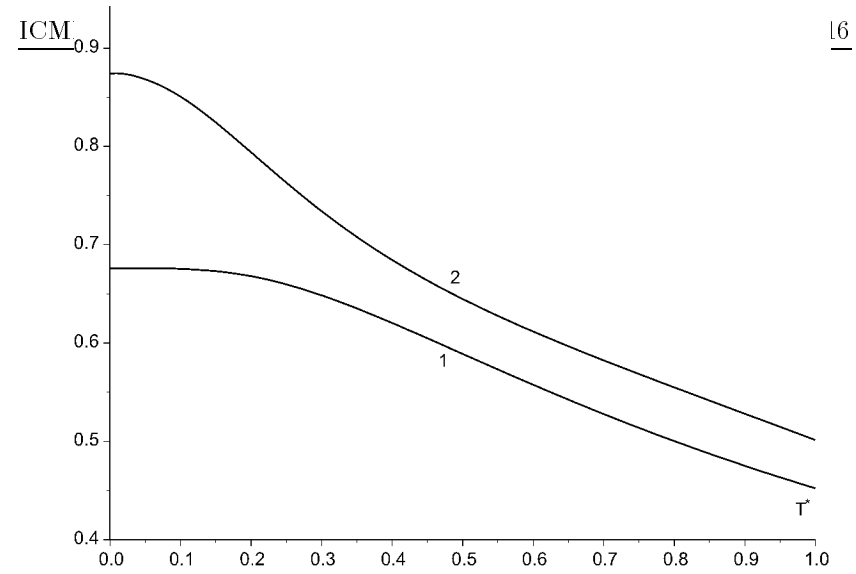


Рис. 7. Результати чисельного розрахунку температурної залежності довгохвильової границі функції $G_1(x)$ для моделі електронного газу при $(r_s = 1)$ (Функції f_ξ та φ_ξ відповідно)

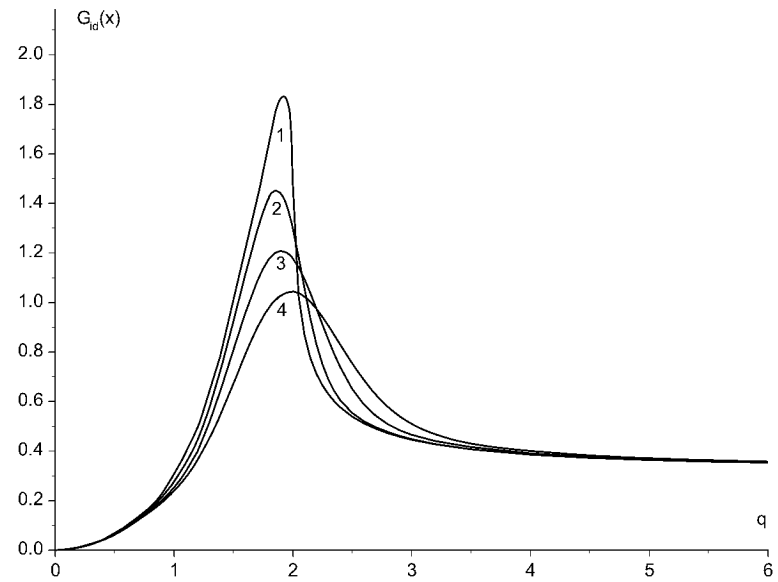


Рис. 8. $G_{id}(q, 0)$ розрахована при різних температурах 0.05, 0.1, 0.2, 0.3

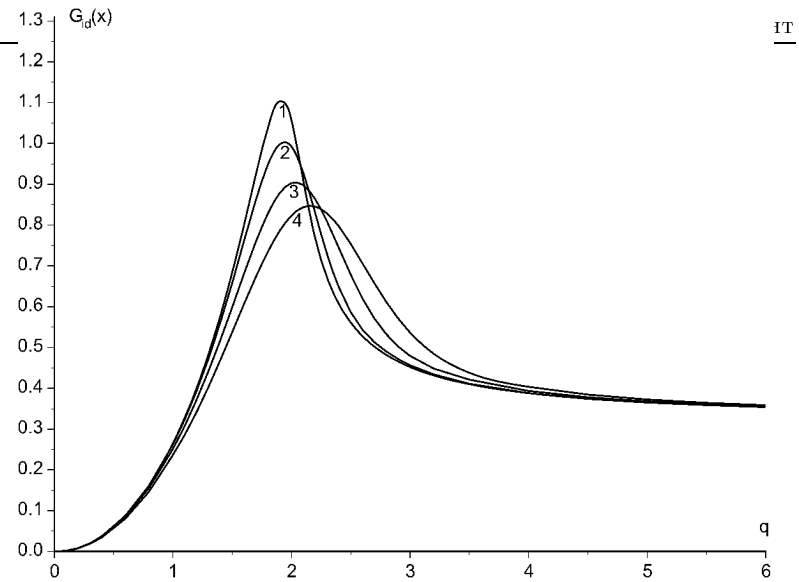


Рис. 9. $G_{id}(x)$ розрахована при різних температурах 0.05, 0.1, 0.2, 0.3 для $\nu = 0.1$

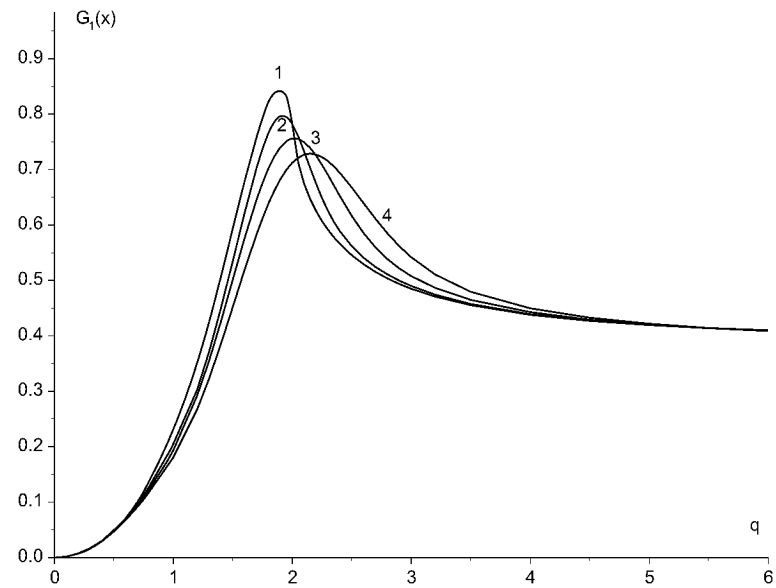


Рис. 10. Функція $G_1(q, 0)$ при $r_s = 1$ для різних температур 0.05, 0.1, 0.2, 0.3

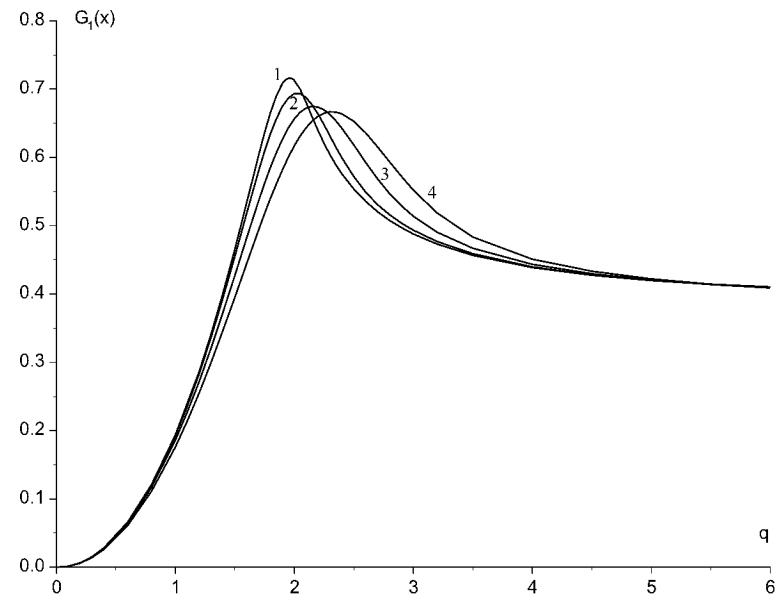


Рис. 11. Функція $G_1(x)$ при $r_s = 1$ та $\nu = 0.1$ при різних температурах 0.05, 0.1, 0.2, 0.3

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Маркіян Васильович Ваврух
Володимир Несторович Паславський
Тишко Нестор

ПОПРАВКА НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ МОДЕЛІ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ ПРИ
НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Роботу отримано 10 листопада 1999 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені