

ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛЬНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ У ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННИХ КОРЕЛЯЦІЙ

М. В. Ваврух, С. П. Коваль, Н. Л. Тишко

*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики,
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 17 листопада 2000 р.)

Запропоновано просту схему врахування короткосяжних кореляцій у вироджених системах зі взаємодією Кулона, що ґрунтується на використанні слабких далекосяжних модельних потенціалів взаємодії типу квантового пакета. Обмотивовано застосування модельних потенціалів для опису міжелектронних й електрон-йонних кореляцій. Ефективність запропонованого методу доведено шляхом розрахунку енергетичних, структурних і діелектричних характеристик моделі електронної рідини в широкій ділянці параметра неідеальності.

Ключові слова: фермі-системи, короткосяжні кореляції, модель виродженої електронної рідини, електрон-йонні взаємодії.

PACS number(s): 05.30.Fk

I. ВСТУП

Як відомо, наближення хаотичних фаз є універсальним методом урахування далекосяжних кореляцій у системах фермі-частинок, зокрема у вироджених електронних системах зі взаємодією Кулона. Загальноприйнятим методом урахування короткосяжних кореляцій у сучасній теорії фермі-систем є концепція локального поля. Хоч поправка на локальне поле для систем зі взаємодією Кулона в загальних рисах достатньо вивчена, досі немає цілком достовірних даних про цю функцію [1]. У такій ситуації становить інтерес пошук альтернативних методів урахування кореляцій на коротких відстанях між частинками.

Один із простих і перспективних підходів до розв'язання цієї проблеми може базуватися на ідеї моделювання взаємодій у вироджених фермі-системах частинок, що взаємодіють за законом Кулона. Відзначимо, що певною мірою це еквівалентно моделюванню поправки на локальне поле або ж обґрунтуванню концепції локального поля не з формального математичного, а з чисто фізичного боку. Ефективний самоузгоджений потенціал взаємодії між частинками, який визначає двочастинкову кореляційну функцію (але не енергію системи), слід вибрати так, щоб він був слабким на малих відстанях і мав асимптотику $\epsilon^2 r^{-1}$ — на великих. На перший погляд, такий підхід здається парадоксальним, але аргументування цієї ідеї легко зробити за допомогою співвідношення невизначеностей Гайзенберга. Для означеності будемо розглядати модель електронної рідини. Оскільки невизначеність імпульсу окремого електрона в сильно виродженій системі має порядок $\hbar k_F$ (де $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ — хвильове число Фермі, N — число частинок в об'ємі V), то невизначеність його положення має порядок k_F^{-1} . Кожний електрон можна розглядати як просторово розподілену частинку, що займає ділянку з лінійними розмірами k_F^{-1} .

Потенціал взаємодії таких частинок подібний до потенціалу квантового пакета $v_{ee}(r) = \frac{\epsilon^2}{r} \{1 - e^{-\gamma r k_F}\}$, де параметр γ має порядок одиниці. Варто зауважити, що саме на такому ефективному потенціалі взаємодії між електронами побудовані діаграми теорії збурень у модифікованому методі зміщень [2]. У невиродженій системі невизначеність координати електрона має порядок довжини теплової хвилі де-Бройля λ_D , тому ефективний потенціал взаємодії, що зображається виразом $v_{ee}(r) = \frac{\epsilon^2}{r} \{1 - e^{-\gamma \frac{r}{\lambda_D}}\}$, незначно відрізняється від потенціалу Кулона.

Метою цієї роботи є побудова простої схеми розрахунку характеристик вироджених електронних систем шляхом використання слабого модельного потенціалу взаємодії, що має зміст самоузгодженого.

II. НАБЛИЖЕННЯ ХАОТИЧНИХ ФАЗ ІЗ МОДЕЛЬНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ У ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

Потенціал $v_{ee}(r)$ є слабким, через те в найпростішому варіанті розрахунку двочастинкової кореляційної функції $\mu_2(r)$ обмежимося наближенням хаотичних фаз:

$$\mu_2(r) = N^{-2} \beta^{-1} \sum_{\nu, \mathbf{q}} \mu_2(x, -x) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (1)$$

$$\mu_2(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \left\{ 1 + \frac{\nu_{ee}(q)}{V} \mu_2^0(x, -x) \right\}^{-1}.$$

Тут $\mu_2^0(x, -x)$ — спектральне зображення двочастинкової кореляційної функції ідеальної системи ферміонів у змінних $x \equiv (\mathbf{q}, \nu)$, де \mathbf{q} — хвильовий вектор, $\nu = 2\pi n \beta^{-1}$ — частота Мацубари, β — обернена температура [3], $\nu_{ee}(q)$ — зображення Фур'є модельного

потенціалу. У цьому наближенні ми розраховали кореляційну енергію моделі

$$E_c = (2\beta V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \nu} V_q \times \int_0^1 \{ \mu_2^\lambda(x, -x) - \mu_2^0(x, -x) \} d\lambda, \quad (2)$$

де $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$ — зображення Фур'є потенціалу Кулона, $\mu_2^\lambda(x, -x)$ — парна кореляційна функція моделі з потенціалом взаємодії $\lambda \cdot \nu_{ee}(q)$. На рис. 1 показано залежність кореляційної енергії від параметра неідеальності r_s (параметр Вігнера-Бракнера) у різних наближеннях: кружечки відповідають результатам методу Монте-Карло (МК) [4], трикутники — найкращій статичній поправці на локальне поле [5], нижня крива — наближенню хаотичних фаз із потенціалом Кулона, верхня пунктирна крива — наближенню (1) з потенціалом $\nu_{ee}(r)$ при $\gamma = 1$, нижня штрихпунктирна — $\gamma = 1.5$. Жирна суцільна крива, яка в області металів дуже близька до результатів методу МК, відповідає $\gamma = 1.25$. В області проміжних r_s вона відтворює результати МК ліпше, ніж поправка на локальне поле [5]. Поведінку кореляційної енергії в ширшій області r_s передає рис. 2. З умови, щоб кореляційна енергія в наближенні (1) точно збігалась із результатами МК, впливає залежність параметра γ від r_s (рис. 3), що свідчить про недостатньо високе наближення, використане для розрахунку кореляційної енергії.

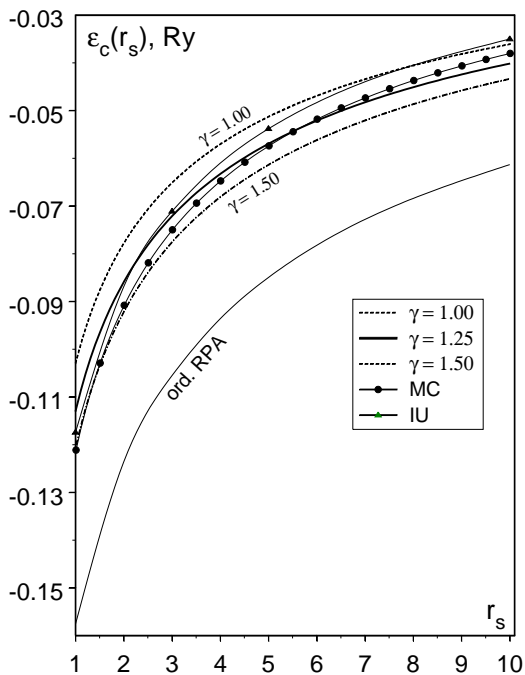


Рис. 1. Кореляційна енергія основного стану моделі електронної рідини у різних наближеннях.

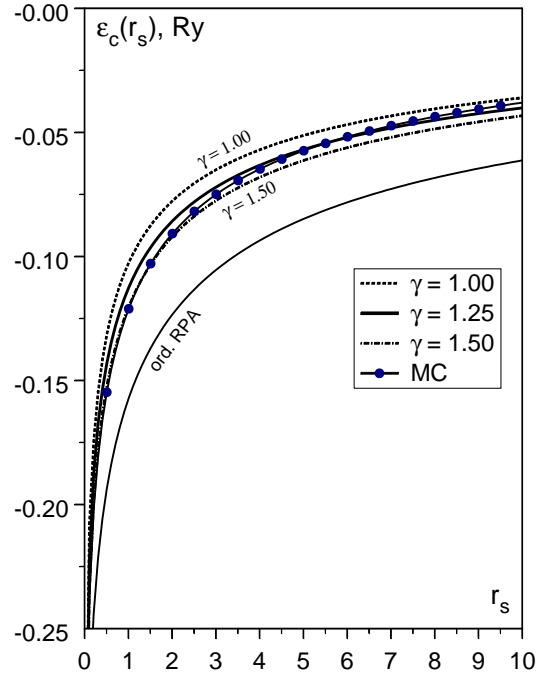


Рис. 2. Кореляційна енергія моделі електронної рідини в ділянці параметра неідеальності $0 < r_s \leq 10.0$.

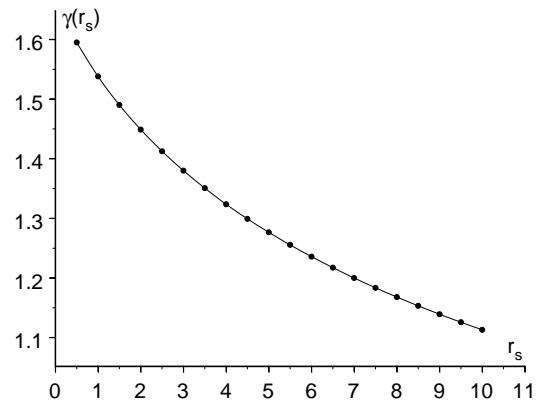


Рис. 3. Залежність параметра потенціалу γ , який у наближенні (1) забезпечує збіжність енергії моделі з результатами МК, від параметра неідеальності r_s .

Цей висновок підтверджується також розрахунком інших характеристик. На рис. 4 зображено бінарну функцію розподілу $F_2(r)$ моделі електронної рідини в межах $1 \leq r_s \leq 5.0$, розраховану в наближенні (1). Як видно з рисунка, при постійному значенні параметра $\gamma = \frac{5}{4}$ це наближення забезпечує додатність бінарної функції розподілу лише в межах $0 \leq r_s \leq 3.5$.

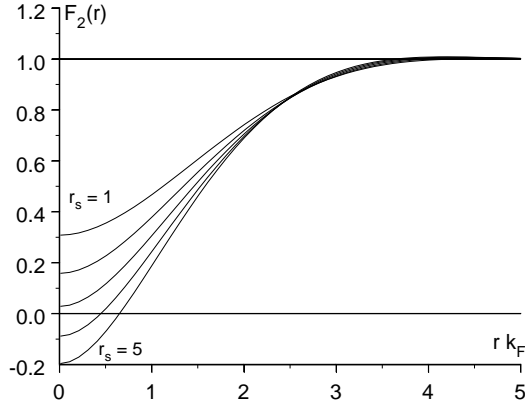


Рис. 4. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні хаотичних фаз (1) з модельним потенціалом (при $\gamma = 5/4$).

У наближенні локального поля стандартної теорії збурень

$$\begin{aligned} \mu_2(x, -x) &= \mu_2^0(x, -x) \\ &\times \left\{ 1 + \frac{V_q}{V} \mu_2^0(x, -x) [1 - G(x)] \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (3)$$

де $G(x)$ — динамічна поправка на локальне поле [1]. Наближення (1) еквівалентне традиційній теорії збурень на потенціалі Кулона із поправкою на локальне поле

$$G_0(x) \equiv G_0(q) = q^2 \{\gamma^2 + q^2\}^{-1}, \quad (4)$$

де $q \equiv |\mathbf{q}|k_F^{-1}$. Як відомо (див. [1]), у статичному випадку поправка на локальне поле має таку довгохвильову асимптотику: $G(q) \rightarrow g \cdot q^2 + \dots$, де $\frac{1}{4} \leq g \leq \frac{1}{3}$. Отже, при $1.0 \leq \gamma \leq 1.5$ функція $G_0(q)$ приймає завищені значення в ділянці малих хвильових векторів. Це приводить до неправильної поведінки стисливості λ , визначеної через $G(x)$. Оскільки

$$\begin{aligned} \lambda &= 3V(2N\varepsilon_F)^{-1} \left\{ 1 - \frac{6\pi e^2 N}{V\varepsilon_F k_F^2} g \right\}^{-1}, \\ \varepsilon_F &= \hbar^2 k_F^2 / 2m, \end{aligned} \quad (5)$$

стисливість є додатною функцією параметра r_s в межах $0 \leq r_s \leq r_s^0$, де $r_s^0 = 3^{3/2}(\pi/4)^{4/3}\gamma^2$. При $\gamma = 1.5$ маємо $r_s^0 \simeq 3.4$, тоді як розрахунки на основі середньої енергії приводять до значення $r_s^0 \simeq 5.25$ [6].

Щоб забезпечити коректність усіх характеристик моделі в широкій ділянці параметра r_s , вийдимо за рамки наближення хаотичних фаз (1) при використанні модельного потенціалу, замінюючи у (3) V_q на $\nu_{ee}(q)$, а $G(x)$ — на $G^M(x)$.

III. НАЙПРОСТІШЕ НАБЛИЖЕННЯ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ В ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

Поправку на локальне поле $G^M(x)$ розрахуємо в найпростішому наближенні — у першому порядку теорії збурень за модельним потенціалом:

$$\begin{aligned} G_1^M(x) &= -[2\beta\nu_{ee}(q)]^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} \\ &\times \sum_{x_1} \nu_{ee}(q_1) \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1), \end{aligned} \quad (6)$$

що відповідає наближенню слабконейдеальних систем. Тут $\mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1)$ — чотиричастинкова кумулянтна динамічна кореляційна функція ідеальної системи [3]. Відзначимо, що поправка на локальне поле $G_1^M(x)$ відмінна від поправки на локальне поле традиційної теорії збурень на потенціалі Кулона $G_1(x)$, зокрема вони мають різну короткохвильову асимптотику: $G_1(x) \rightarrow \frac{1}{3}$, а $G_1^M(x) \rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \left[1 + \left(\frac{q}{\gamma} \right)^2 \right]$ і є від'ємною. Ці дві функції пов'язані між собою таким співвідношенням:

$$G_1(x) = 1 - \left[1 + \left(\frac{q}{\gamma} \right)^2 \right]^{-1} \cdot [1 - G_1^M(x)]. \quad (7)$$

Методика розрахунку поправки на локальне поле з довільним локальним потенціалом відштовхування наведена в працях [1,7]. При використанні циліндричної системи координат у випадку абсолютного нуля температури чисельний розрахунок $G_1^M(x)$ зводиться до обчислення безрозмірного двократного інтеграла:

$$\begin{aligned} G_1^M(x) &= \frac{1}{32} (\gamma^2 + q^2) q^2 \gamma^{-2} \{I_{2,0}(q, u)\}^{-2} \\ &\times \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} dz_1 dz_2 \sigma_1 \sigma_2 F_u \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}; z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2} \right) \\ &\times \{A_{\sigma_1, \sigma_2}(s_1^2; 1 - z_1^2; 1 - z_2^2) - A_{\sigma_1, \sigma_2}(s_2^2; 1 - z_1^2; 1 - z_2^2)\}, \\ F_u(z_1; z_2) &= (z_1 - z_2) \{z_1^2 z_2 - u^2(2z_1 + z_2)\} \\ &\times (z_1^2 + u^2)^{-2} (z_2^2 + u^2)^{-1}; \\ A_{\sigma_1, \sigma_2}(s^2; a; b) &= \frac{1}{2} \{W(s^2; a; b) - s^2 - a - b\} \\ &+ a \ln \frac{W(s^2; a; b) + s^2 + b - a}{2s^2} \\ &+ b \ln \frac{W(s^2; a; b) + s^2 + a - b}{2s^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Тут $I_{2,0}(q, u) = 2\varepsilon_F(3N)^{-1}\mu_2^0(x, -x)$, $u = \frac{\nu}{q}$, $s_1^2 = \{(z_1 + \sigma_1 q/2) - (z_2 + \sigma_2 q/2)\}^2$, $s_2^2 = \gamma^2 + s_1^2$.

Рис. 5 ілюструє властивості функцій $G_1^M(x)$ та $G_1(x)$ у статичному випадку. При значенні параметра потенціалу $\gamma = 2.5$ коефіцієнт g в довгохвильовій асимптотіці $G_1(x)$ близький до $1/3$, що дає $r_s^0 \simeq 5.0$ і забезпечує правильну поведінку стисливості. Залежність кореляційної енергії в цьому наближенні при $\gamma = 2.5$ від r_s ілюструє рис. 6: кружечками показані результати МК [4], пунктирна крива відповідає наближенню (1), жирна крива — наближенню локального поля (2) при заміні V_q на $\nu_{ee}(q)$, а $G(x)$ — на $G_1^M(x)$. Середнє відхилення від результатів МК становить 8% в межах $0 \leq r_s \leq 10.0$, тоді як середнє відхилення в наближенні (1) — 24%. Бінарна функція розподілу в цьому наближенні має коректну поведінку в межах $0 \leq r_s \leq 5.5$ (рис. 7).

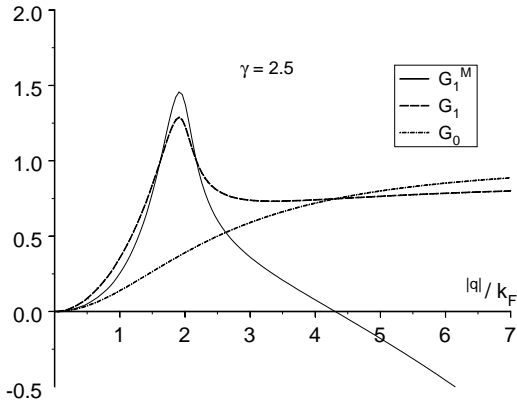


Рис. 5. Різні варіанти статичної поправки на локальне поле моделі електронної рідини (при $\gamma = 2.5$).

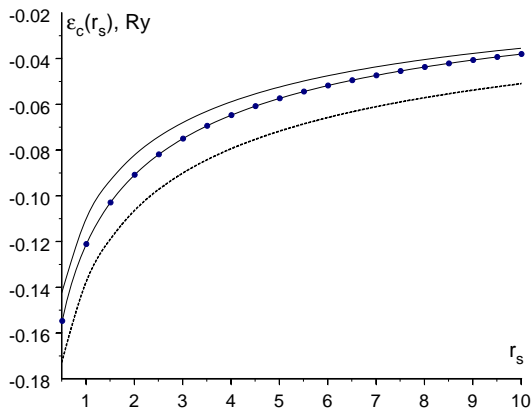


Рис. 6. Кореляційна енергія моделі електронної рідини: результати методу МК, наближення хаотичних фаз із модельним потенціалом та найпростішого наближення локального поля з модельним потенціалом при $\gamma = 2.5$.

Таким чином, застосування модельного потенціалу взаємодії типу потенціалу квантового пакета дозво-

ляє розвинути просту й ефективну схему розрахунку сукупності енергетичних, структурних і діелектричних характеристик моделі електронної рідини.

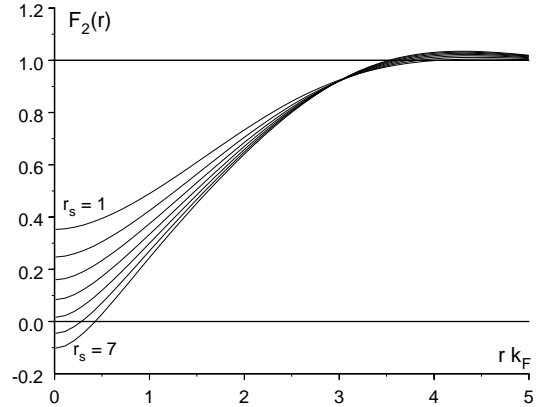


Рис. 7. Бінарна функція моделі електронної рідини в наближенні локального поля в ділянці параметра неідеальності $1 < r_s \leq 7.0$ при значенні параметра потенціалу $\gamma = 2.5$.

IV. МОДЕЛЬНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ДЛЯ ЕЛЕКТРОН-ЙОННИХ ТА ЕЛЕКТРОН-ПРОТОННИХ ВЗАЄМОДІЙ

Модельні потенціали можуть бути використані також у теорії електрон-йонних та електрон-протонних взаємодій у металічній фазі з метою поліпшення теорії збурень. Неявно це вже використовували в теорії металів. Покажемо тут, що врахуванню короткосяжних кореляцій у дуже грубому вигляді відповідає потенціал пустого остова Ашкрофта [8]

$$V_A(r) = \begin{cases} -ze^2r^{-1}, & \text{при } r \geq R_c, \\ 0, & \text{при } r < R_c, \end{cases} \quad (9)$$

де z — валентність йона. Виявляється, що параметр цього потенціалу R_c звичайно більший за радіус йона $\rho_0 a_0$. Для наближеного знаходження останнього скористайтесь методом праці [9]. Розгляньмо обернену задачу визначення потенціалу йона, в полі якого знаходиться валентний електрон, використовуючи спектроскопічні значення енергій відповідних станів електрона. Хвильову функцію основного стану валентного електрона виберімо у вигляді

$$\Psi(\mathbf{r}) = C\rho^\delta \exp \left\{ - \left[\sqrt{\varepsilon_i} \rho + \frac{\alpha}{\rho} + \frac{\beta}{\rho^2} \right] \right\}, \quad (10)$$

де α, β, δ — невідомі параметри, C — постійна нормування, а ε_i — енергія йонізації. Із рівняння для радіальної функції знаходимо потенціал йона. Невідомі коефіцієнти α, β, δ визначімо з умови, щоб знайдений

потенціал на великих відстанях від йона прямував до потенціалу Кулона точкового йона, а добавки до нього мали б короткосяжний характер, тобто мали б порядок r^{-4} , r^{-5} і т. д. Таким чином, знаходимо потенціал валентного електрона в полі йона у вигляді

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{a_0} \left\{ -\frac{z}{\rho} + \sum_{n=4}^6 \frac{C_n}{\rho^n} \right\}. \quad (11)$$

Тут $\rho = |\mathbf{r}|a_0^{-1}$, де a_0 — радіус Бора. Коефіцієнти C_n — додатні функції, які визначаються енергією йонізації відповідного йона:

$$\begin{aligned} C_4 &= \frac{1}{8} \delta^2 (1 + \delta) \cdot (5\delta - 1) \varepsilon_i^{-1}, \\ C_5 &= \frac{1}{4} \delta^3 (1 + \delta)^2 \varepsilon_i^{-3/2}, \\ C_6 &= \frac{1}{8} \delta^4 (1 + \delta)^2 \varepsilon_i^{-2}, \quad \delta = z \varepsilon_i^{-1/2} - 1. \end{aligned} \quad (12)$$

Енергією ε_i визначаються й коефіцієнти α та β :

$$\alpha = \frac{1}{2} \delta (1 + \delta) \varepsilon_i^{-1/2}; \quad \beta = \frac{1}{4} \delta^2 (1 + \delta) \varepsilon_i^{-1}. \quad (13)$$

Для оцінки точності знайденої хвильової функції ми скористалися числовими розрахунками атомних функцій багатоелектронних атомів праці [10]. Як видно з порівняння радіальної густини ймовірності для валентних електронів простих металів, знайдена апроксимація (10) дає дуже добру збіжність із числовими розрахунками в широкій ділянці змінної ρ — практично аж до вузла, що розташований поблизу значення α^{-1} .

На рис. 8 наведено криві знайденого потенціалу для низки простих металів. У ділянці від'ємних значень цей потенціал подібний до потенціалу Ашкрофта, але є більш фізичним й описується плавною функцією. Безрозмірний радіус йона ρ_0 , визначений умовою $V(\rho_0 a_0) = 0$, для низки простих металів зображено чорними трикутниками на рис. 9. Чорними кружечками показано значення ρ_0 , знайдені за допомогою хвильової функції (10) з умови, щоб в ділянці $r > \rho_0 a_0$ знаходилося 0.985 заряду валентного електрона. Світлі квадратики відповідають функції $\rho_0 + (2k_F a_0)^{-1}$, яка дорівнює сумі радіусів йона і хвильового пакета. Світлим кружечками позначено найбільш широко вживані значення параметра потенціалу Ашкрофта низки простих металів. Оскільки параметр R_c близький до $\rho_0 + (2k_F a_0)^{-1}$, то фактично потенціал Ашкрофта враховує не тільки розмір йона, але й короткосяжну електронну кореляцію. Зірочкою позначено величину $(2k_F a_0)^{-1}$ для

металевої фази водню ($r_s = 1.65$), в описі якої, згідно з ідеєю нашого підходу, слід було б використати модельний потенціал електрон-протонної взаємодії $\nu_{ei}(r) = -\frac{e^2}{r} [1 - \exp(-2\gamma r k_F)]$, а в гіршому випадку — потенціал Ашкрофта з відповідним параметром $R_c = (2k_F a_0)^{-1}$, а не звичайний потенціал Кулона, що поліпшило б теорію збурень за степенями потенціалу електрон-протонної взаємодії.

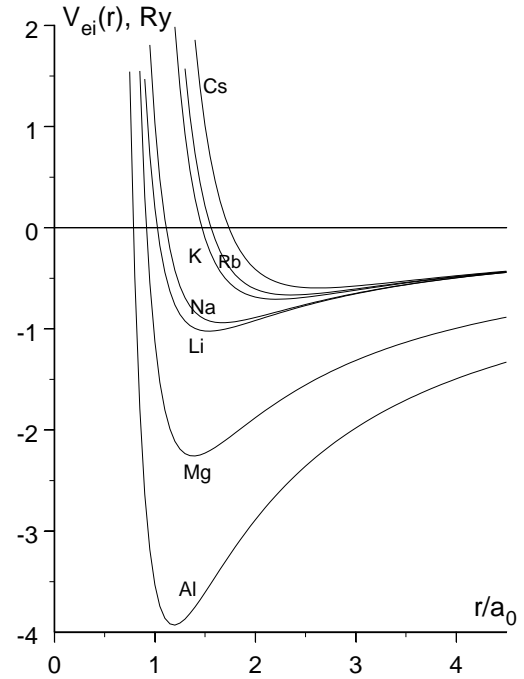


Рис. 8. Ефективний потенціал електрон-йонної взаємодії для низки простих металів.

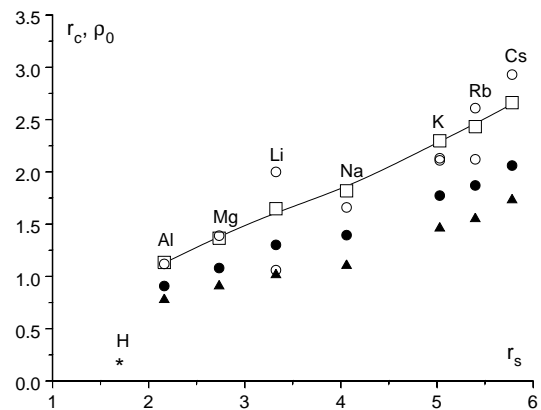


Рис. 9. Залежність радіуса йона, параметра потенціалу Ашкрофта й радіуса локалізації електрона для низки простих металів від параметра неідеальності r_s .

- [1] М. В. Ваврух, Физ. низк. темп. **22**, 1005 (1996).
[2] М. В. Ваврух, Я. В. Куштай, В. Б. Солов'ян, Журн. фіз. досл., **2**, 23 (1998).
[3] М. В. Ваврух, Т. Е. Крохмальский, Укр. фіз. журн., **32**, 621 (1987).
[4] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett., **45**, 566 (1980).
[5] S. Ichimaru, K. Utsumi, Phys. Rev. B, **24**, 7385 (1981).
[6] M. V. Vavruk, T. E. Krokhmalkii, Phys. Status Solidi B **169**, 451 (1992).
[7] M. V. Vavruk, V. N. Paslavskii, Phys. Status Solidi B **208**, 91 (1998).
[8] N. W. Ashcroft, Phys. Lett., **23**, 48 (1966).
[9] М. В. Ваврух, Т. Е. Крохмальский, препринт ИТФ-82-58Р (1982).
[10] F. Herman, S. Skillman *Atomic Structure Calculations* (Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1963).

MODEL POTENTIALS APPLICATION IN THE ELECTRON CORRELATION THEORY

M. V. Vavruk, S. P. Koval', N. L. Tyshko
*Department of Astrophysics, Ivan Franko National University of Lviv,
8 Kyrylo i Mefodii Str., Lviv, UA-79005, Ukraine*

A simple scheme for accounting short-range correlations in degenerated electron systems falling back on model interaction potentials such as the potential of a quantum package is offered. The efficiency of the offered method is shown in calculating the energetic, structural and dielectric characteristics of the electron liquid model in a wide range of the coupling parameter.