ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 4 (2000) с. 403–408

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 4 (2000) p. 403–408

ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛЬНИХ ПОТЕНЦІЯЛІВ 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 потенціялів взаємодії типу квантового пакета. Обмотивовано застосування модельних потенціялів для опису міжелектронних й електрон-йонних кореляцій. Ефективність запропонованого методу доведено шляхом розрахунку енерґетичних, структурних і діелектричних характеристик моделі електронної рідини в широкій ділянці параметра неідеальности.

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 потенціял взаємодії між частинками, який визначає двочастинкову кореляційну функцію (але не енерґію системи), слід вибрати так, щоб він був слабким на малих відстанях і мав асимптотику e^2r^{-1} — на великих. На перший погляд, такий підхід здається парадоксальним, але арґументування цієї ідеї легко зробити за допомогою співвідношення невизначеностей Гайзенберґа. Для означености 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}. Потенціял взаємодії таких частинок подібний до потенціялу квантового пакета $v_{ee}(r) = \frac{e^2}{r}\{1 - e^{-\gamma r k_F}\}$, де параметр γ має порядок одиниці. Варто зауважити, що саме на такому ефективному потенціялі взаємодії між електронами побудовані діяграми теорії збурень у модифікованому методі зміщень [2]. У невиродженій системі невизначеність координати електрона має порядок довжини теплової хвилі де-Бройля λ_D, тому ефективний потенціял взаємодії, що зображається виразом $v_{ee}(r) = \frac{e^2}{r}\{1 - e^{-\gamma\frac{r}{\lambda_D}}\}$, незначно відрізняється від потенціялу Кулона.

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

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

Потенціял $\nu_{ee}(r)$ є слабким, через те в найпростішому варіянті розрахунку двочастинкової кореляційної функції $\mu_2(r)$ обмежимось наближенням хаотичних фаз:

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

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

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 потенціялу. У цьому наближенні ми розрахували кореляційну енерґію моделі

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

де $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$ — зображення Фур'є потенціялу Кулона, $\mu_2^{\lambda}(x,-x)$ — парна кореляційна функція моделі з потенціялом взаємодії $\lambda \cdot \nu_{ee}(q)$. На рис. 1 показано залежність кореляційної енерґії від параметра неідеальности r_s (параметр Віґнера–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 потенціялом Кулона, верхня пунктирна крива — наближенню (1) з потенціялом $\nu_{ee}(r)$ 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 енерґії в ширшій області r_s передає рис. 2. З умови, щоб кореляційна енерґія в наближенні (1) точно збігалась із результатами МК, випливає залежність параметра γ від r_s (рис. 3), що свідчить про недостатньо високе наближення, використане для розрахунку кореляційної енерґії.

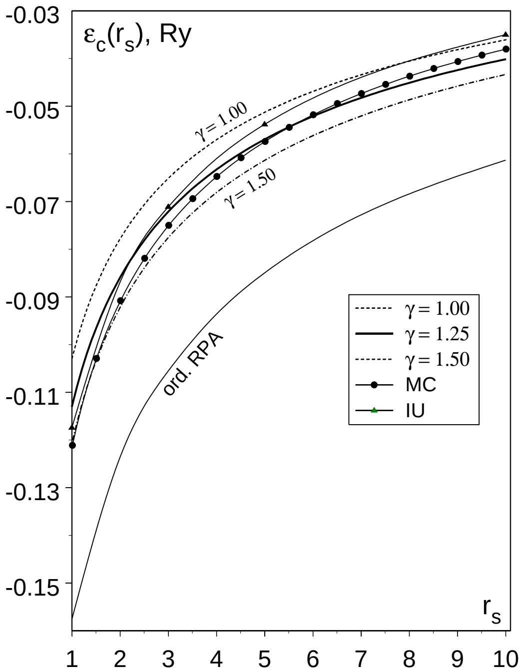

Рис. 1. Кореляційна енерґія основного стану моделі електронної рідини у різних наближеннях.

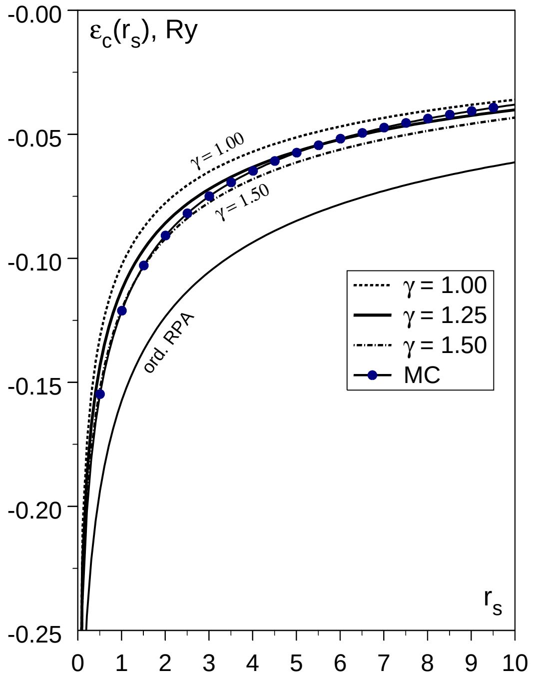

Рис. 2. Кореляційна енерґія моделі електронної рідини в ділянці параметра неідеальности $0 < r_s \leq 10.0$.

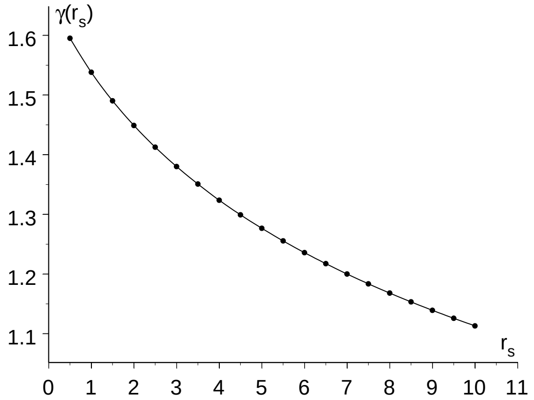

Рис. 3. Залежність параметра потенціялу γ, який у наближенні (1) забезпечує збіжність енергії моделі з результатами МК, від параметра неідеальности r_s.

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 $0 \leq r_s \leq 3.5$.

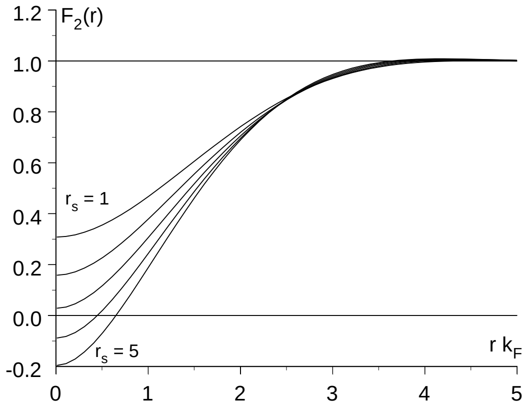

Рис. 4. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні хаотичних фаз (1) з модельним потенціялом (при $\gamma = 5/4$).

У наближенні локального поля стандартної теорії збурень

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

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

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

де $q \equiv |\mathbf{q}|k_F^{-1}$. Як відомо (див. [1]), у статичному випадку поправка на локальне поле має таку довгохвильову асимптотику: $G(q) \to g \cdot q^2 + ...$, 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

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

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 енерґії приводять до значення $r_s^0 \simeq 5.25$ [6].

Щоб забезпечити коректність усіх характеристик моделі в широкій ділянці параметра r_s, вийдім за рамки наближення хаотичних фаз (1) при використанні модельного потенціялу, 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 $G^M(x)$ розрахуймо в найпростішому наближенні — у першому порядку теорії збурень за модельним потенціялом:

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

що відповідає наближенню слабконеідеальних 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 потенціялі Кулона $G_1(x)$, зокрема вони мають різну коротхвильову асимптотику: $G_1(x) \to \frac{1}{3}$, а $G_1^M(x) \to \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\left[1 + \left(\frac{q}{\gamma}\right)^2\right]$ і є від'ємною. Ці дві функції пов'язані між собою таким співвідношенням:

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

Методика розрахунку поправки на локальне поле з довільним локальним потенціялом 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 інтеґрала:

$$G_1^M(x) = \frac{1}{32}(\gamma^2 + q^2)q^2\gamma^{-2}\{I_{2.0}(q,u)\}^{-2}$$
$$\times \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm1} \int\int_{-1}^{+1} dz_1\,dz_2\,\sigma_1\sigma_2\,F_u\Big(z_1 + \sigma_1\frac{q}{2}; z_2 + \sigma_2\frac{q}{2}\Big) \tag{8}$$
$$\times \{A_{\sigma_1,\sigma_2}(s_1^2; 1-z_1^2; 1-z_2^2) - A_{\sigma_1,\sigma_2}(s_2^2; 1-z_1^2; 1-z_2^2)\},$$
$$F_u(z_1; z_2) = (z_1 - z_2)\{z_1^2 z_2 - u^2(2z_1 + z_2)\} \times (z_1^2 + u^2)^{-2}(z_2^2 + u^2)^{-1};$$
$$A_{\sigma_1,\sigma_2}(s^2; a; b) = \frac{1}{2}\{W(s^2;a;b) - s^2 - a - b\} + a\,\ln\frac{W(s^2;a;b) + s^2 + b - a}{2s^2} + b\,\ln\frac{W(s^2;a;b) + s^2 + a - b}{2s^2}.$$

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 потенціялу $\gamma = 2.5$ коефіцієнт g в довгохвильовій асимптотиці $G_1(x)$ близький до 1/3, що дає $r_s^0 \simeq 5.0$ і забезпечує правильну поведінку стисливости. Залежність кореляційної енерґії 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 $0 \le r_s \le 10.0$, тоді як середнє відхилення в наближенні (1) — 24 %. Бінарна функція розподілу в цьому наближенні має коректну поведінку в межах $0 \le r_s \le 5.5$ (рис. 7).

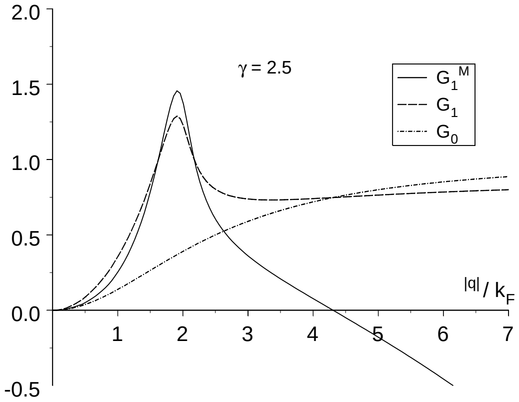

Рис. 5. Різні варіянти статичної поправки на локальне поле моделі електронної рідини (при $\gamma = 2.5$).

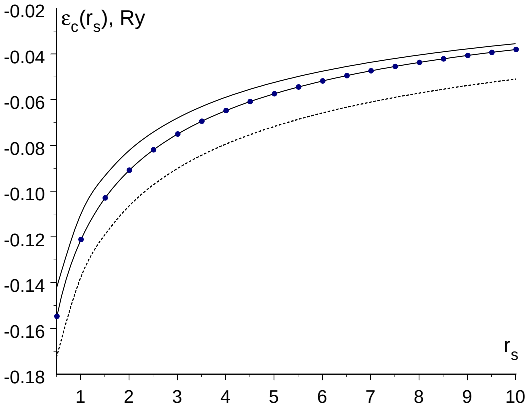

Рис. 6. Кореляційна енерґія моделі електронної рідини: результати методу МК, наближення хаотичних фаз із модельним потенціялом та найпростішого наближення локального поля з модельним потенціялом при $\gamma = 2.5$.

Таким чином, застосування модельного потенціялу взаємодії типу потенціялу квантового пакета дозволяє розвинути просту й ефективну схему розрахунку сукупности енерґетичних, структурних і діелектричних характеристик моделі електронної рідини.

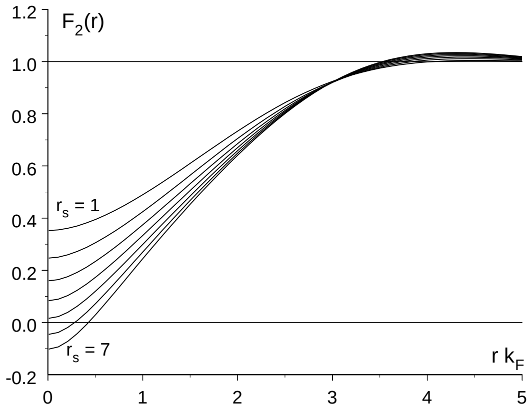

Рис. 7. Бінарна функція моделі електронної рідини в наближенні локального поля в ділянці параметра неідеальности $1 < r_s \le 7.0$ при значенні параметра потенціялу $\gamma = 2.5$.

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

Модельні потенціяли 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 потенціял пустого остова Ашкрофта [8]

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

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

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

де α, β, δ — невідомі параметри, C — постійна нормування, а ε_i — енерґія йонізації. Із рівняння для радіяльної функції знаходимо потенціял йона. Невідомі коефіцієнти α, β, δ визначімо з умови, щоб знайдений потенціял на великих відстанях від йона прямував до потенціялу 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 потенціял валентного електрона в полі йона у вигляді

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

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

$$C_4 = \frac{1}{8}\,\delta^2(1+\delta)\cdot(5\delta-1)\,\varepsilon_i^{-1},$$

$$C_5 = \frac{1}{4}\,\delta^3\,(1+\delta)^2\,\varepsilon_i^{-3/2}, \tag{12}$$

$$C_6 = \frac{1}{8}\,\delta^4\,(1+\delta)^2\,\varepsilon_i^{-2}, \qquad \delta = z\,\varepsilon_i^{-1/2} - 1.$$

Енерґією ε_i визначаються й коефіцієнти α та β:

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

Для оцінки точности знайденої хвильової функції ми скористалися числовими розрахунками атомних функцій багатоелектронних атомів праці [10]. Як видно з порівняння радіяльної густини ймовірности 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 потенціялу для низки простих металів. У ділянці від'ємних значень цей потенціял подібний до потенціялу 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. Світлими кружечками позначено найбільш широко вживані значення параметра потенціялу Ашкрофта низки простих металів. Оскільки параметр R_c близький до $\rho_0 + (2k_F a_0)^{-1}$, то фактично потенціял 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 потенціял електрон-протонної взаємодії $\nu_{ei}(r) = -\frac{e^2}{r}\left[1 - \exp\left(-2\gamma r k_F\right)\right]$, а в гіршому випадку — потенціял Ашкрофта з відповідним параметром $R_c = (2k_F a_0)^{-1}$, а не звичайний потенціял Кулона, що поліпшило б теорію збурень за степенями потенціялу електрон-протонної взаємодії.

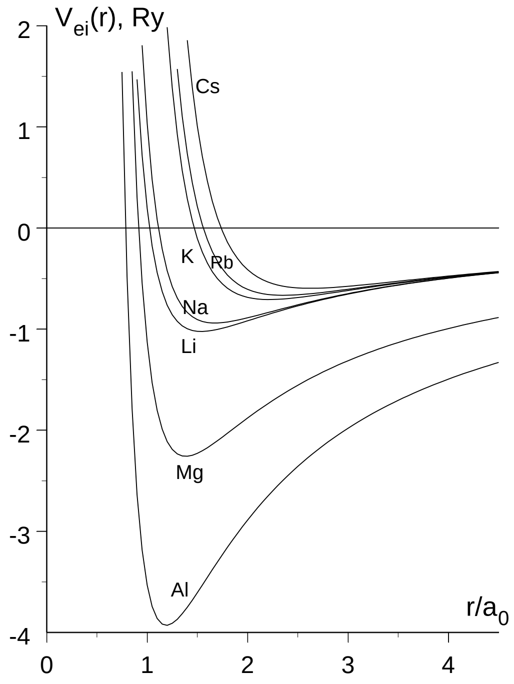

Рис. 8. Ефективний потенціял електрон-йонної взаємодії для низки простих металів.

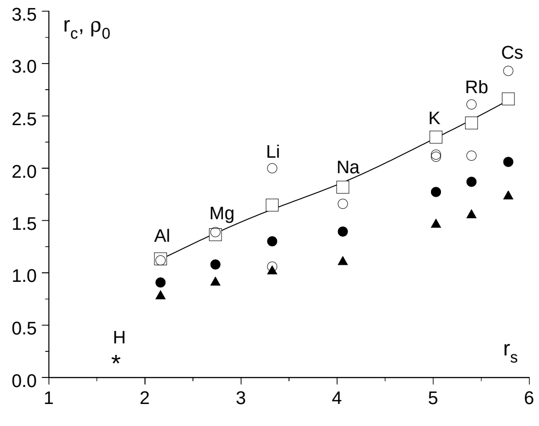

Рис. 9. Залежність радіуса йона, параметра потенціялу Ашкрофта й радіуса локалізації електрона для низки простих металів від параметра неідеальности r_s.

[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. Vavrukh, T. E. Krokhmalskii, Phys. Status Solidi B **169**, 451 (1992).
[7] M. V. Vavrukh, 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. Vavrukh, 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.