УДК 537.2,537.9

О СТАТИЧЕСКОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЫ В ДЛИННОВОЛНОВОМ ПРЕДЕЛЕ

В. Б. Бобров[1], С. А. Тригер[1,2]

На основе точных предельных соотношений получено общее выражение для статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(q,0)$ кулоновской системы в области малых волновых векторов q. Полученное соотношение описывает функцию $\epsilon(q,0)$ как в "металлическом", так и в "диэлектрическом" состоянии кулоновской системы. На этой основе введено понятие "истинного" диэлектрика и обсуждено определение "истинного" радиуса экранирования. Получены точные соотношения для функции $\epsilon(q,0)$ в области малых волновых векторов q в рамках приближения хаотических фаз при произвольном вырождении.

Ключевые слова: диэлектрическая проницаемость, кулоновская система, приближение хаотических фаз, функция Грина.

1. Рассмотрим статическую диэлектрическую проницаемость $\epsilon(q,0)$ однородной и изотропной кулоновской системы, которая определяется как коэффициент пропорциональности между потенциалом полного электростатического поля в среде $U^{\mathrm{tot}}(q,0)$ и потенциалом внешнего поля $U^{\mathrm{ext}}(q,0)$ [1],

$$U^{\mathrm{tot}}(q,0) = \frac{U^{\mathrm{ext}}(q,0)}{\epsilon(q,0)}. \tag{1}$$

Согласно [2, 3], функция $\epsilon(q,0)$ связана с поляризационным оператором $\Pi(q,0)$, который определяет отклик системы на экранированное внешнее поле, соотношением

$$\epsilon(q,0) = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\Pi(q,0), \tag{2}$$

$$\Pi(q,0) = \sum_{a,b} z_a z_b e^2 \Pi_{ab}(q,0), \tag{3}$$

[1] Объединенный институт высоких температур РАН.

[2] Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН.

где $z_a e$ – заряд частиц сорта a, характеризующихся массой m_a, средней плотностью числа частиц n_a и химическим потенциалом μ_a при температуре T. Предполагается, что рассматриваемая кулоновская система квазинейтральна, т.е. выполняется соотношение

$$\sum_a z_a e n_a = 0. \tag{4}$$

Функции $\Pi_{ab}(q,0)$ являются парциальными поляризационными операторами частиц сортов a и b. С точки зрения вычисления в рамках диаграммной техники [2, 3] функции $\Pi_{ab}(q,0)$ представляют собой неприводимые по одной линии кулоновского взаимодействия в q-канале части соответствующих функций Грина "плотность-плотность" $\chi_{ab}(q,0)$, определяющих отклик системы на внешнее поле.

В отличие от функций Грина $\chi_{ab}(q,0)$ кулоновских систем поляризационные операторы $\Pi_{ab}(q,0)$ не имеют особенностей и являются гладкими функциями в области малых волновых векторов q (по крайней мере, для случая нормальных систем). Таким образом, функции $\Pi_{ab}(q,0)$ при малых волновых векторах q можно представить в виде

$$\Pi_{ab}(q,0) \simeq \pi_{ab}^{(0)} + \pi_{ab}^{(2)} q^2, \tag{5}$$

$$\pi_{ab}^{(0)} = \lim_{q\to 0} \Pi_{ab}(q,0), \ \ \pi_{ab}^{(2)} = \lim_{q\to 0} \frac{\Pi_{ab}(q,0) - \lim_{q\to 0}\Pi_{ab}(q,0)}{q^2}. \tag{6}$$

В [4, 5] было показано, что

$$\pi_{ab}^{(0)} = -\left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_b}\right)_T, \tag{7}$$

где μ_b – химический потенциал компоненты b. Соотношение (7) является обобщением для многокомпонентной кулоновской системы известного результата [6] для модельного случая однокомпонентной электронной жидкости, который принято называть правилом сумм для сжимаемости [7],

$$\pi_{ee}^{(0)} = -\left(\frac{\partial n_e}{\partial \mu_e}\right)_T = -n_e^2 K_T^e, \ \ K_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T, \tag{8}$$

где V – объем, P – давление, K_T – изотермическая сжимаемость кулоновской системы. В свою очередь, для двухкомпонентной кулоновской системы, состоящей из электронов (индекс – e) и ядер (индекс – c), на основе (8) можно получить [4, 5] предельные соотношения для статических структурных факторов $S_{ab}(q)$, непосредственно измеряемых в экспериментах по рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей [8],

$$\lim_{q\to 0} S_{cc}(q) = n_c T K_T, \ \ \lim_{q\to 0} S_{cc}(q) = \frac{n_c}{n_e}\lim_{q\to 0} S_{ee}(q) = \left(\frac{n_c}{n_e}\right)^{1/2}\lim_{q\to 0} S_{ec}(q). \tag{9}$$

Подставляя (5),(6) в (2),(3), получаем для диэлектрической проницаемости $\epsilon(q,0)$ кулоновской системы произвольного состава при малых волновых векторах q

$$\epsilon(q,0) \simeq \epsilon_0^{st} + \frac{\kappa^2}{q^2},\ \kappa^2 = -4\pi \sum_{a,b} z_a z_b e^2 \pi_{ab}^{(0)} = 4\pi \sum_{a,b} z_a z_b e^2 \left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_b}\right)_T, \tag{10}$$

$$\epsilon_0^{st} = 1 + 4\pi\alpha,\ \ \alpha = -\sum_{a,b} z_a z_b e^2 \pi_{ab}^{(2)}. \tag{11}$$

Очевидно, что все входящие в соотношения (10), (11) коэффициенты ϵ_0^{st}, κ^2, α являются функциями термодинамических параметров кулоновской системы. С использованием большого канонического ансамбля нетрудно убедиться [9], что

$$T\left(\frac{\partial n_a}{\partial \mu_b}\right)_T = \frac{1}{V}\langle \delta N_a \delta N_b \rangle,\ \ \delta N_a = N_a - \langle N_a \rangle, \tag{12}$$

где $n_a = \langle N_a \rangle / V$, N_a – оператор полного числа частиц сорта a, угловые скобки $\langle ... \rangle$ обозначают усреднение по большому каноническому ансамблю. Подставляя (12) в (10) и учитывая условие электронейтральности (4), получаем для кулоновской системы при произвольных термодинамических параметрах

$$\kappa^2 = \frac{4\pi}{T}\frac{\langle Z^2 \rangle}{V} \geq 0,\ \ Z = \sum_a z_a e N_a. \tag{13}$$

Отметим, что знакоопределенность величины α, определяемой соотношением (11), на данный момент не установлена. Нетрудно убедиться, что величина κ в соответствующих предельных случаях совпадает с волновыми векторами Дебая и Томаса–Ферми.

Как видно из (10), величина κ^{-1} характеризует глубину проникновения электростатического поля в вещество [1]. В предельном случае, когда

$$\frac{4\pi}{TV}\langle Z^2 \rangle = 0, \tag{14}$$

глубина проникновения стремится к бесконечности. Таким образом, когда выполняется условие (14), кулоновская система ведет себя как "истинный" диэлектрик, изменяя только амплитуду электростатического поля на величину ϵ_0^{st} (10), (11), которую, в этом смысле, можно считать статической диэлектрической постоянной вещества. Соответственно, величину α (11) можно считать поляризуемостью вещества.

Здесь необходимо отметить следующее обстоятельство. Как и в случае "традиционного" рассмотрения перехода "металл-диэлектрик" на основе анализа проводимости (см., напр., [10], [11]), можно утверждать, что разделение веществ на “металлы” и “диэлектрики” носит условный характер, поскольку все известные диэлектрики обладают ненулевой проводимостью при $T \neq 0$. Аналогичное утверждение можно сделать и в отношении глубины проникновения электростатического поля в вещество, определяемой величиной, обратной величине $\langle Z^2 \rangle / V$. В “металлах” глубина проникновения очень мала, в то время как у “диэлектриков” может быть одного порядка с макроскопическими параметрами системы.

В качестве иллюстрации рассмотрим воздействие точечного внешнего заряда на неограниченную однородную кулоновскую систему. Тогда с учетом (1) в r-пространстве получаем

$$\frac{U^{\rm tot}(r)}{U^{\rm ext}(r)} = \frac{2}{\pi} \int\limits_0^\infty \frac{dq}{q} \frac{\sin(qr)}{\epsilon(q,0)}. \tag{15}$$

В пределе $r \to \infty$ из (10), (15) непосредственно следует

$$\frac{U^{\rm tot}(r)}{U^{\rm ext}(r)} \to \frac{1}{\epsilon_0^{st}} \exp(-r/R_{\rm scr}), \;\; R_{\rm scr} = \left(\frac{\epsilon_0^{st}}{\kappa^2} \right)^{1/2}, \tag{16}$$

где $R_{\rm scr}$ – длина проникновения электростатического поля в вещество, или, согласно терминологии, принятой в теории неидеальной плазмы (см., напр., [12]), – радиус экранирования. Отметим, что при выполнении условия (14) для “истинного” диэлектрика

$$R_{\rm scr} \to \infty. \tag{17}$$

Таким образом, можно утверждать, что представление статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(q,0)$ в области малых волновых векторов q в виде (10) носит универсальный характер и может быть использовано при описании кулоновской системы как в “металлическом”, так и в “диэлектрическом” состояниях. Косвенное подтверждение этому можно найти в [3], где развито обобщенное приближение хаотических фаз для вычисления поляризационного оператора $\Pi(q,0)$, позволяющее учесть связанные состояния электронов и ядер.

2. Покажем теперь, что величина ϵ_0^{st} при последовательном учете квантовых эффектов отлична от единицы даже при использовании приближения идеального газа для вычисления поляризационного оператора $\Pi(q,0)$. Поэтому величина $R_{\rm scr}$, определяемая соотношением (16), отлична в соответствующих приближениях и от радиуса Дебая, и от радиуса Томаса–Ферми. По-видимому, впервые на это обстоятельство было обращено внимание в работах [13], [14], посвященных вычислению термодинамических

функций слабонеидеальной плазмы. Следуя авторам работы [14], будем далее называть величину $R_{\rm scr}$ "истинным" радиусом экранирования.

Для иллюстрации сказанного выше рассмотрим статическую диэлектрическую проницаемость $\epsilon(q,0)$ в приближении хаотических фаз (RPA) для электронного газа в компенсирующем положительном фоне. Тогда [3]

$$\epsilon^{\rm RPA}(q,0) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi^{\rm RPA}(q,0), \tag{18}$$

$$\Pi^{\rm RPA}(q,0) = 2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{f(p-q/2)-f(p+q/2)}{\epsilon(p-q/2)-\epsilon(p+q/2)} = \tag{19}$$

$$= -\frac{m}{\pi^2\hbar^2 q}\int\limits_0^\infty pf(p)\ln\left|\frac{2p+q}{2p-q}\right|dp \le 0,$$

$$\epsilon(p) = \frac{\hbar^2p^2}{2m},\ f(p) = \left\{\exp\left(\frac{\epsilon(p)-\mu}{T}\right)+1\right\}^{-1},\ n = 2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}f(p). \tag{20}$$

Легко проверить, что из (19), (20) непосредственно следует (8). В двух предельных случаях: сильного вырождения (DEG) и в квазиклассическом приближении (QCL) интеграл в (19) может быть вычислен точно (см., напр., [3]). В частности,

$$\Pi^{\rm DEG}(q,0) = -\frac{3n}{2\epsilon_F}\left\{\frac{1}{2}+\frac{k_F}{2q}\left(1-\frac{q^2}{4k_F^2}\right)\ln\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|\right\}, \tag{21}$$

где $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ – волновой вектор Ферми, $\epsilon_F = \hbar^2k_F^2/2m$ – энергия Ферми. Из (21) с учетом (10), (11) нетрудно получить

$$\kappa^2 = k_{TF}^2,\ \epsilon_0^{st} = 1-\frac{\gamma r_s}{3\pi},\ k_{TF} = \left(\frac{6\pi n e^2}{\epsilon_F}\right)^{1/2},\ \gamma = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}. \tag{22}$$

Здесь k_{TF} – волновой вектор Томаса–Ферми, $r_s = (4\pi n/3)^{-1/3}/a_0$ – известный параметр [7], определяемый как отношение среднего расстояния между частицами к радиусу Бора $a_0 = \hbar^2/me^2$. Отметим, что мы намеренно не обсуждаем вопрос об осцилляциях Фриделя (см., напр., [7]).

Для квазиклассического случая с использованием распределения Максвелла имеем

$$\Pi^{\rm QCL}(q,0) = -\frac{n}{T}F_{1.1}\left(1,\ \frac{3}{2},\ -\frac{\hbar^2q^2}{8mT}\right), \tag{23}$$

$$\kappa^2 = k_D^2,\ \epsilon_0^{st} = 1-\frac{k_D^2\lambda^2}{8},\ k_D = \left(\frac{4\pi n e^2}{T}\right)^{1/2},\ \lambda = \left(\frac{\hbar^2}{mT}\right)^{1/2}. \tag{24}$$

Здесь $F_{1,1}(\alpha,\beta,z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция, k_D – волновой вектор Дебая, λ – тепловая длина волны де Бройля.

Таким образом, как отмечено выше, с учетом отличия ϵ_0^{st} от единицы "истинный" радиус экранирования $R_{\rm scr}$ (16) отличается от традиционно используемых в теории слабонеидеальных кулоновских систем.

При численном исследовании различных свойств кулоновских систем довольно часто возникает необходимость в общих соотношениях для различных параметров при произвольном вырождении электронов. В рассматриваемом случае речь идет об определении величин κ и ϵ_0^{st} (или $\pi_{ee}^{(0)}$ и $\pi_{ee}^{(2)}$ в соответствии с (5), (6)). Такая задача актуальна, например, при исследовании поверхностных свойств жидких металлов [15].

Для решения этой задачи необходимо выполнить разложение по степеням малого волнового вектора q под знаком интеграла в соотношении (19). Отметим, что такое разложение носит асимптотический характер. В рамках соотношения (19) такое разложение для определения интересующих нас величин выполнить не удается ввиду появления расходимостей при вычислении интеграла в области малых волновых векторов p. Поэтому используем в (19) интегрирование по частям. В результате получаем

$$\Pi^{\rm RPA}(q,0)=\frac{1}{2\pi^2 q}\int\limits_0^\infty\left\{\left(p^2-\frac{q^2}{4}\right)\ln\left|\frac{2p+q}{2p-q}\right|+qp\right\}\frac{\partial f(p)}{\partial\epsilon(p)}pdp. \qquad (25)$$

Из соотношения (25) уже нетрудно получить интересующие нас результаты с помощью разложения по степеням малого волнового вектора q под знаком интеграла. В итоге,

$$\pi_{ee}^{(0)}=2\int\frac{\partial f(p)}{\partial\epsilon(p)}\frac{d^3}{(2\pi)^3}=-2\int\left(\frac{\partial f(p)}{\partial\mu}\right)_T\frac{d^3p}{(2\pi)^3}=-\left(\frac{\partial n}{\partial\mu}\right)_T, \qquad (26)$$

$$\pi_{ee}^{(2)}=-\frac{1}{12\pi^2}\int\limits_0^\infty\frac{\partial f(p)}{\partial\epsilon(p)}dp=\frac{1}{12\pi^2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}\right)_T,\ \varphi(\mu,T)=\int\limits_0^\infty f(p)dp. \qquad (27)$$

Здесь функция $f(p)$ определяется соотношением (20). В соответствующих приближениях для функции распределения $f(p)$ соотношения (26), (27) переходят в результаты (22), (24). При этом величина α, определяемая соотношением (11), отрицательна при произвольном вырождении электронов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] А. А.Рухадзе, В. П.Силин, *Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред* (Госатомиздат, Москва, 1961).

[2] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. И. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (ГИФМЛ, Москва, 1962).

[3] В.-Д. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Репке, *Квантовая статистика систем заряженных частиц* (Мир, Москва, 1988).

[4] В. Б.Бобров, Н. И. Ключников, С. А. Тригер, ТМФ **89**, 263 (1991).

[5] V. B. Bobrov, N. I. Klyuchnikov, and S. A. Trigger, Physica **A181**, 150 (1992).

[6] Е. С. Фрадкин, Труды ФИАН **29**, 7 (1965).

[7] Д. Пайнс, Ф. Нозьер, *Теория квантовых жидкостей* (Мир, Москва, 1967).

[8] Н. Марч, М. Паринелло, *Коллективные эффекты в твердых телах и жидкостях* (Мир, Москва, 1986).

[9] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, ч.1* (Наука, Москва, 1976).

[10] В. А. Алексеев, Е. Г. Максимов, Я. Г. Пономарев, Д. И. Хомский, УФН **112**, 173 (1974).

[11] А. А.Ликальтер, УФН **170**, 831 (2000).

[12] В. Е. Фортов, И. Т. Якубов, *Неидеальная плазма* (Энергоатомиздат, Москва, 1994).

[13] A. N. Starostin, V. C. Roerich, and R. M. More, Contrib.Plasma Phys. **43**, 369 (2003).

[14] А. Н. Старостин, В. К. Рерих, ЖЭТФ **127**, 186 (2005).

[15] Н. П. Коваленко, Ю. П. Красный, С. А. Тригер, *Статистическая теория жидких металлов* (Наука, Москва, 1990).

Поступила в редакцию 27 октября 2009 г.