cection solvers of tusins ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЕФИ-ТФ-6 (72)

И.И.Гольдман, Ян Ши

ТЕОРИИ «СИЛЬНО СЖАТОГО ВЕШЕСТВА

1972



EPEBAH

b P b 4 C b

EPEBAHCKHÄ OUSUSECKKÄ MHCTHTYT

УДК-539.124.16: 539.2 ЕФИ-ТФ-6(72)

NU HR , HAMAJAROT.N.N

к теории сильно слатого вещества

NII HR, HAMILLOT. N. N.

K TEOPNU CUILHO CKATOFO BENECTRA

Рассчитано зависящее от кристаллической структу—
ры слагаемое в энергии сильно скатого вещества. Поправка
имеет такой же порядок величины как и члены, рассчитанные
при предположении равномерно распределенного положитель—
но заряда.

Препринт Ереванского физического института. Ереван 1972.

PATTURES WIDENED WARREN WITCH !!

I.I.GOLDMAN, C.YANG

ON THE THEORY OF STRONGLY COMPRESSED MATTER

A crystal structure dependent term of the energy of strongly compressed matter is calculated. The correction is of the same order of magnitude as the terms calculated on an assumption of a uniformly distributed background of positive charge.

Preprint of Yerevan Physical Institute
Yerevan, 1972

І. Введенка

В работах $\begin{bmatrix} 1,2 \end{bmatrix}$ приведены разультаты расчета кудоновой энергии различных решеток. Малая разница между энергиями наиболее смиметричных решеток (оцк, гцк, гцу) приводит к необходимости рассмотреть следующий член разложения энергии по малону параметру $\rho = z_o/\alpha_o$ (z_o^{-3} — плотность числа ядер, $\alpha_o = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус). Часть членов, этого порядка, которые не зависят от типа решетки, были вычислены в ряде работ $\begin{bmatrix} 3-5 \end{bmatrix}$ в модели равномерно распределенного положительного заряда. В более разлистической модели (ядра образурт периодическую структуру) за счет взаимодействия электронов с ядрами возникают члены того же порядка, но зависящие от типа решётки.

Настоящая работа посвещена вычислению этих членов. Трудность такого расчета заключается, во-нервых, в необходимости учесть пересенение поверхности Ферми с границами зон Бриллюэна (и соответствующие деформации поверхности Ферми), и во-вторых, в плохой сходимости возникающих суми по узлаи обратной решётки. В п.2 показано, что первая трудность несущественна при вычислении членов рассматриваемого порядка в трехмерном случае, так, как пересечение поверхности Ферми приводит лишь к поправкам в следующих членах разлошения (вида ~ ССР). Что касается суми по обратной решётке, то они вычисляются в п.5 с помощью техники

приведения к интегралам (см. [1,2]). Результаты численного расчета приведены в п. 4.

2. Пересечение поверхности Ферми с границами вон Брилиюна

ЕСЛИ НЕ ПРИНИМАТЬ ВО ВНИМЕНИЕ ПЕРВСЕЧЕНИЯ ПОВЕРЖНОСТИ ФЕРМИ С. 1°СВИИЦЕМИ ВОН БРИЛЛЮЗНЕ, ТО ВКЛАД В ЭНЕРГИЮ ОСНОВНОГО СОСТОЯ—
НИЯ С. 1° ВВЗИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С ПОЛЕМ РЕШЕТКИ В РАСЧЕТЕ НА
ОДИО ЯДРО ВО ВТОРОМ ПОРЯДКЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ МОЖНО ЗАПИСАТЬ В
ВИДЕ

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N} \sum_{f \neq o} \frac{|U_f|^2}{p \leq p_+} \frac{|U_f|^2}{\varepsilon_{p+f}^{(o)} + \varepsilon_{f}^{(o)}}$$
(1)

где $U_{\underline{I}}$ — матричный элемент потенциала взаймодействия электронов с решеткой $U(\underline{z}) = Ze^2 \sum_i |\underline{z} - \underline{R}_i|^{-1}$, N = число ядер в кристалле, $\mathcal{E}_{\underline{L}}^{(o)} = p^2/2m$ — невозмущенная одночастичная энергия электрона , $p_{\underline{L}} = p^2/2m$ — фермиевский импульс.

Формула (I) может быть получена другим-способом, именно: найдем поправну к одночастичной энергии электрона за счет периоди —
ческого поленциала решетки и затем просуммируем энергии женятых
одночастичных состояний. Этот способ удобен тем, что позволяет
учесть эффект пересечения повержности Ферми с границами зон Бриллюзна. Рассмотрим для простоты одномерную модель движения электрожа в периодическом поле.

Вдали от границы зоны одночастичная энергия дается формулой

$$\mathcal{E}_{p} = \mathcal{E}_{p}^{(0)} - \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \neq 0}} \frac{|U_{k}|^{2}}{\mathcal{E}_{p+k}^{(0)} - \mathcal{E}_{p}^{(0)}}, \qquad (2)$$

 $f = \pi n/a$, а - период потенциала, n - целое MUCHO. Вблизи границы зоны $\phi \approx f_4/2$ одночастичная энергия имеет ВИД

$$\varepsilon_{p} = \varepsilon_{p}^{(0)} + \frac{\varepsilon_{p+1}^{(0)} - \varepsilon_{p}^{(0)}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\varepsilon_{p+1}^{(0)} - \varepsilon_{p}^{(0)}\right)^{2} + 4 \left| U_{q_{1}} \right|^{2}}$$
(3)

(Для простоты считаем отдичным от нуля один матричный элемент U_{ℓ_1}). Для поправки к полной энергии системы, суммируя одночастичные энергыи, получаем следующее выражение

$$\delta E = -\frac{\left|\bigcup_{l_1}\right|^2}{2\varepsilon_{l_1}^{(0)}} \ln \left|\frac{f_1 + 2f_1}{f_1 - 2f_1}\right| \tag{4}$$

для случая, когда фермиевский импульс 🔭 вдали от границы воды: $|P_F - f_1/2| \gg m |U_{f_1}|/f_1$. Выражение (4), как следовамо онидать, совпадает с результатом стандартной теории возмущений (I). Однано, если $ho_{
m F} pprox
ho_1/2$, то результат суммирования одночастичных энергий существенно отличается:

$$\delta E \approx -\frac{|U_{k_i}|^2}{2\varepsilon_{k_i}^2} \ell_{\lambda} \left| \frac{\varepsilon_{k_i}^{\circ \circ}}{|U_{k_i}|} \right|. \tag{5}$$

Таким образом, близость фермиевского импульса к границе зоны приводит и тому, что поправку и энергии нельзя вычислять по стандартной теории возмущений.

К счастью, аналогичный, но более громоздкий расчет в трехмерном случее (как и в двухмерном) показывает, что близость (или пересечение) повержности Ферми с границами зон Бриллюэна приводит к поправне и энергии в более высоком порядке теории возмущений. При этом формула (1) приобретает дополнительный иножитель BEER

$$\left| \frac{1}{1+\epsilon'} \frac{U_{\ell}}{\varepsilon_{\ell}^{\bullet}} \right| \left| \frac{\varepsilon_{\ell}^{\bullet}}{U_{\ell}} \right|$$

в трехмерном случае и множитель вида

в двужмерном (< и < = некоторые численные множители).

3. Преобразование сумы по обратной решетке:

В интеграл

В трехмерном случае из формулы (1) имеем

$$E_{\eta A-pew} = -\frac{Ze'm}{\gamma^2 6\pi^2 \pi^2} \sum_{\underline{\beta} \neq 0} g f\left(\frac{\pi \beta}{f_E}\right), \qquad (6)$$

где

$$f(x) = \frac{1}{x^2} \left(1 + \frac{1 - x^2}{2x} \left(x + \frac{1 - x^2}{x} \right) \right), \tag{7}$$

$$q = \left| \sum_{\mathbf{z}'} \exp\left(2\pi \mathbf{i} \, \underline{\boldsymbol{\theta}} \, \underline{\boldsymbol{z}'}\right) \right|^2 \tag{8}$$

THE RESIDENCE AND CONTRACTOR OF THE PARTY OF

Здесь Z — атомный номер, V — число атомов в элемен арной лиейке, ε — радиус — вектор атома внутри элементарной ячейки, ε — вектор обратной решётки , ε = $\pi(3ZV/\pi v)^{V3}$, v —объём элементарной нуейки.

Для вычисления величины (6) воспользуемся методикой преобравования суммы по обратной решётке в интеграл (см. [1,2]). Для этого будем рассматривать величину (6) как энергию парного взаимодействия в пространстве обратной решётки с "потенциалом взаимодействия" ф (т в / р) и преобразуем "потенциал" ф (х) в интеграл вида

$$f(\omega) = \int_{0}^{\infty} \psi(t) \exp(-x^{2}t) dt \qquad (9)$$

Функция f(x) аналитична при |x| > 1. Поэтому интегральное преобразование (9) (которое является модифицированным вариантом преобразования Лапласа) существует лишь при |x| > 1. Представляя f(x) в виде ряда по x и почленно совершея интегральное преобразование (9), получаем

где F(α,β;t) - вырожденная гипергеометрическая функция.
Таким образом, рассматриваемую сумму можно представить в виде:

$$\sum_{n \neq 0} gf(n) = \sum_{n \neq 0} gf(n) + \iint_{\mathbb{R}} \sum_{n} ge^{-n^{2}t} - \sum_{n \neq 0} ge^{-n^{2}t} \Big] \psi(t) dt,$$
(II)

где $x = \pi 6/4$, а $\sum_{i=1}^{n}$ означает суммирование по кекоторой области I, содержещей начало координат x = 0, которая определяется тем, чтобы интеграл (II) сходижоя (для этого область I, по ирайней мере, должна содержать целиком область $||x|| \le 1$).

Сумыу по обратной решетке

ножно выразить через комбинации Θ -функций, аналогично тону, что было сделано в [1,2]. Ниже приведем выражения S(t) для разных решёток.

Простая ортогональная релётка

Это — ревётка Брава,
$$g = y = 1$$
, $\chi \ge (\alpha n^2 + \beta m^2 + \gamma \ell^2) (\pi/3Z)^{2/3}$, (I2)

$$\Sigma(t) = \omega(\varkappa_{1}t) \omega(\varkappa_{2}t) \omega(\varkappa_{3}t),$$

$$(13)$$

$$\Sigma_{A0} \quad \varkappa_{1} = \frac{\alpha}{\pi} \left(\frac{\pi}{3Z}\right)^{2/3}, \quad \varkappa_{2} = \frac{\beta}{\pi} \left(\frac{\pi}{3Z}\right)^{2/3}, \quad \varkappa_{3} = \frac{\beta}{\pi} \left(\frac{\pi}{3Z}\right)^{2/3}, \quad a$$

$$\omega(z) = \Theta(0, z)$$

Гранецентрированная ортогональная решетка

Обратная решётка— это объёмноцентрированная ортоговальная решётка с пермодами 2/с , 2/с , Её можно рассматры— вать как совокупность двух простых решёток, вдвинутых одна в другую. Отовда

$$S(t) = \omega(\varkappa_i t) \omega(\varkappa_i t) \omega(\varkappa_i t) + 3(\varkappa_i t) 3(\varkappa_i t) 3(\varkappa_i t), \qquad (14)$$

$$TAO \quad \mathcal{H}_1 = \frac{4\omega}{\pi} \left(\frac{\pi}{12Z}\right)^{2/3} = \mu \cdot \Gamma_0 A_1 - 3(2) \equiv 2^{-1/2} \Theta(\sqrt{2}, \sqrt{2}).$$

Гексагональная решётка (простая)

Обратная решётка - гексагональная. Это совокупность двук простых ортогональных решёток с периодами

$$\frac{2}{a}$$
, $\frac{2}{\sqrt{3}a}$, $\frac{1}{c}$

И

$$S(t) = \omega(x_1 t) \omega(x_2 t) \omega(x_3 t) + Z(x_1 t) Z(x_2 t) \omega(x_3 t), \qquad (15)$$

THE
$$\mathcal{H}_1 = \frac{L_{\lambda}}{\pi} \left(\frac{\pi}{2\sqrt{3}}\right)^{2/3}$$
, $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1/3$, $\mathcal{H}_3 = 1/\mathcal{H}_1\mathcal{H}_2$, $\lambda = (c/\alpha)^{2/3}$.

Ромбоздрическай решётка

Обратная решетка — тоже ромбоздрическая решетка. Это — совокупность мести простых ортогональных решеток. В этом случае

$$S(t) = \omega(x_{1}t)\omega(x_{2}t)\omega(x_{3}t) + \frac{1}{2}(x_{1}t)\frac{1}{2}(x_{2}t)\omega(x_{3}t) + \frac{1}{2}(x_{2}t)\omega(x_{3}t) + \frac{1}{2}(x_{3}t)\omega(x_{3}t) + \frac{1}{2}(x_{3}t)\omega(x_{3$$

Гоксагональная решётка типа плотной упаковки

В этом случае в элементарной ячейке содержится два этома с радмус-венторами $c_o' = (o, o, o)$ и $c_a' = (o, -\frac{a}{\sqrt{3}}, \frac{c}{2})$. Имеем p = 2, $g = 2 \left[1 + \cos 2\pi \left(n/3 + n/3 + \ell/2\right)\right]$. Непосредственное вычисление даёт

$$S(t) = 2 \left\{ \omega(x_i t) \omega(x_i t) \omega(x_i t) + 3(x_i t) 3(x_i t) \omega(x_i t) + + (x_i t) \beta(x_i t) \beta(x_i t) - 2\alpha(x_i t) \alpha(x_i t) \beta(x_i t) \right\},$$
(17)

TAB
$$\beta(z) = \theta(\frac{1}{3}, z)$$
, $d(z) = -\frac{1}{2} \left[\rho(\frac{z}{4}) - \rho(z) \right]$, $\mathcal{R}_1 = \frac{4\lambda}{3} \left(\frac{3}{2\pi} \frac{1}{2^2} \right)^{1/3}$, $\mathcal{R}_2 = \mathcal{R}_1 / 3$, $\mathcal{R}_3 = 1 / \mathcal{R}_1 \mathcal{R}_2$, $\lambda = (c/a)^{1/3} (3^{1/3}/2)$, $2(z) = \theta(1/2, z)$.

При вичислении интеграла в превой части формули (II) резобым интеграл на две части: от 0 до некоторого числе \le и от \le до ∞ . Затем в интеграле от 0 до \le совержии замену переменних $t = 1/\tau$ и воспользуемся свойствами Θ -функций. В результате получаем

$$\int_{0}^{\infty} \left(\sum g e^{-x^{2}t} - \sum_{i} g e^{-x^{2}t} \right) \psi(t) dt = \int_{0}^{\infty} \sum_{i} g e^{-x^{2}/t} \psi(\sqrt{t}) d\tau / \tau^{2} - \frac{1}{3} dt$$

$$-\int \sum_{i} g e^{-x^{2}t} \psi(t) dt + \int \left(\sum_{i} g e^{-x^{2}t} \sum_{i} g e^{-x^{2}t}\right) \psi(t) dt . \tag{18}$$

Первый интеграл с учетом известных свойств Θ - јункций можно преобразовать к удобному для вычисления виду.
Для разных решёток имеем

$$3Z_{\text{FF}} \int_{S}^{\infty} \left[\omega(\frac{\pi}{2\epsilon_0}) \omega(\frac{\pi}{2\epsilon_0}) \omega(\frac{\pi}{2\epsilon_0}) - 1 \right] \varphi(\frac{1}{\epsilon}) \frac{d\epsilon}{\epsilon_0} + \Box$$
(19)

 $\frac{Z_{47}}{2} \int_{1/2}^{\infty} (\omega(\frac{\pi}{2})\omega(\frac{\pi}{2})) + 2(\frac{\pi}{2}) \cdot 2(\frac{$

-дан гранецентрарованной ортоговальной режётки

$$\frac{3 Z_{\text{eff}}}{2} \left\{ \left[\omega(\frac{\pi}{2}) \omega(\frac{\pi}{2}) + 2 \left(\frac{\pi}{2}\right) 2 \left(\frac{\pi}{2}\right) \right] \omega(\frac{\pi}{2}) - 2 \right\} \Psi(\frac{1}{2}) \stackrel{\text{def}}{\rightleftharpoons} \mp \Gamma$$
 (21)

Новешено проводи на безора (просода)

$$\frac{Z_{\overline{2}}}{\sqrt{2}} \int_{V_{S}} \left[\omega(\tilde{\xi}_{2}) \omega(\tilde{\xi}_{2}) + 2(\tilde{\xi}_{2}) 2(\tilde{\xi}_{2}) \right] \omega(\tilde{\xi}_{2}) + 2[\omega(\tilde{\xi}_{2}) 2(\tilde{\xi}_{2}) + 2(\tilde{\xi}_{2}) 2(\tilde{\xi}_{2})] 2(\tilde{\xi}_{2}) - 6 \right] \psi(\frac{1}{7}) \frac{d\tau}{\sqrt{\epsilon}} + \Gamma$$
(22)

Ночоврической раборической раборической

$$6\mathbb{Z}_{m} \int_{V_{s}} \left\{ \left[\omega(\frac{\pi}{2}_{s}) \omega(\frac{\pi}{2}_{s}) + 2(\frac{\pi}{2}_{s}) 2(\frac{\pi}{2}_{s}) \right] \omega(\frac{\pi}{2}_{s}) + \left[\sqrt{2} \left(\frac{\pi}{2}_{s} \right) 2(\frac{\pi}{2}_{s}) + 2(\frac{\pi}{2}_{s}) \right] \right\} \left(\frac{\pi}{2}_{s} \right) - 2 \left[\sqrt{2} \left(\frac{\pi}{2}_{s} \right) 2(\frac{\pi}{2}_{s}) - 2 \right] \left[\sqrt{2} \left(\frac{\pi}{2}_{s} \right) 2(\frac{\pi}{2}_{s}) - 2 \right] \left[\sqrt{2} \left(\frac{\pi}{2}_{s} \right) - 2 \right] \left[\sqrt{$$

-дия гексагональной ремётки типа плотной упаковки.

Вдесь
$$1 = 3 Z \sqrt{\eta} \int_{\sqrt{2}}^{\pi} \psi(\frac{1}{\tau}) \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} = 12 Z \sqrt{\eta} \sum_{K \geqslant 2}^{\infty} \frac{5^{k-1/2}}{(2k-3)(2k-1)^2 \kappa!}$$

$$-\beta(z) = z^{-1/2} d(1/z), \zeta(z) = \Theta(1/6, z).$$
(24)

Заметим, что все интегралы, приведенные выме, сходятся очень корошо на верхнем пределе.

Величина \mathcal{L} выбирается так, чтобы обеспечить заданную точность вычисления при использовании данного числа членов в рядах
для Θ -функций. Ясно, что результат вычисления в пределах точ \mathfrak{L} ности, не должен зависеть от \mathcal{L}

4. Результати численного расчета

Безравыерный пареметр 🙏 , карактеризующий решётку, определяется следующими соотношениями:

Ма таблицы I видно, что относительным максимумам энергия $\Xi_{\rm an.\,pem.}$ соответствуют простая кубическая решетка, объёмно-центрированная кубическая решетка и гексагональная решетка с плотнейшей упаковкой ($\lambda=1$). Заметим, что гранецентрированная кубическая решетка (объёмно-центрированная квадратная решетка при $\lambda=2^{1/3}$) не соответствует относительному максимуму.

Мавастно, что главний вилад в зависимость полной энергии симьно статого вещества от его структури вносит кулонова энер-гиа ядер, которая минимальна для наиболее симметричных решёства (ощи и гцк). Таким образом, энергия взаимодействия электрошов с решёткой, вообще говоря, несколько псглаживает указанную

вависимость полной энергии от структуры.

В таблице 2 приведены значения — $E_{\text{эл-рем}}$ (относительные ощебки $\leq 10^{-6}$) при разных Z для трех наиболее симметричных решёток (оци, гцк и гцу). Из этой таблицы видно, что в большинстве случаев (за исключением гелия) энергия взанмодействия электронов с оци решёткой больше, чем с решёткой гцк. При этом разность между оцк и гцк решётками составляет $\sim 10^{-3} Z^2$ (в единицах $e^4 m/\hbar^2$). Поскольку разность в кулоновой энергии ядер между решётками гцк и оцк порядка $40^{-4} Z^2/\rho$ [1,2], то при $\rho \sim 10^{-1}$ эти две развести в энергиях могут скомпенсировать ся и вопрос об устойчивой структуре скатого вещества должен рашаться следующими членами разложения по ρ .

Рукопись поступила 4-го ная 1972 года.

<u>Таблица I</u>

Энергия взаимодействия электронов с решёткой — Е_{эл-реш}

(в одиницах e^4m / h^2 , Z=1)

пораметр	Простан кнадратная режетка	Объёмноцентр. квадратная решетка	Генсатональная ремётка типа плотной упаков-
0,80	0,163326	0,102060	0,085722
0,85	0,144855	0,095308	0,079144
0,90	0,131097	0,092046	0,073254
0,95	0,121262	0,090699	0,068158
I,00	0,II5I73	0,090386	0,066169
I,05	0 , 119567	ບ,090555	0,066878
I,IO	0,126620	0,090865	0,071434
I,15	0,137016	0,091127	0 , 0805II
J ,20	0,150761	0,091270	0,089961
I,25	0,167887	0,091307	0,101301
I,30	0,188487	0,091314	0,114867
T,35	0,212708	0,091414	0,130874
I,40	0,240737	0,091867	0,149515

Таблица 2

Величина — $E_{\text{эл.реш.}}$ для трех наиболее симметричных решеток при разных Z (в единицах $Z^2 e^4 m / \hbar^2$).

	объённоцентр. Дуб.	гранецентр. куб.	гексагонань- ная с плот- нейшей упаков- кой
Водород	0,090386	0,091307	0,066169
Гелий	0,224488	0,219672	0,189904
Угдерод	0,47348I	O,47487I	0,435366
"(елезо	1,034330	I,0366II	0,989050

JUTEPATYPA

- I. I.I.Goldman, Phys. Lett. 34 A, 339 (1971).
- 2. Н.М.Гольдман, <u>гом</u>—15—8(70), Ереван 1970. 1971.
- 3. M.Gell-Mann and K.Brueckner, Phys. Rev. 106, 364 (1957).
- K.Sawada , Phys. Rev. 106, 72 (1957).
- 5. Д.Пайно, Ф.Новьер, "Теория квантовенных хидкостей", Москва 1968.

in national and the complete property of the second of the

Редактор Л.П.Мукани Тех.редактор К.О.Миракны

<u>Заказ 1234 Т-07810 Тираж 300</u>

Подписано к печати 5/УІ-72г. І.О учыхдыл. Цена 7 коп.

Ераванский физический институт, Ераван—36, пер. Царкаряна 2

