

电子系统的统计理论*

刘大乾 冷忠昂 陈春先 潘少华

(中国科学院物理研究所)

提 要

本文用统计微扰理论的模拟法来计算热力学平衡电子系统的热力学量。利用 Feynman 图形的分析及最发散图形求和的概念, 计算了热平衡电子系统(包含有点电荷的不均匀情况)由于相互作用所引起的热力学势的改变和比热等。把所计算的结果用介电常数表示出来, 并进行了一定的讨论。

§1. 引 言

电子气体统计理论的研究和金属电子论中很多问题有密切的关系。由于库仑作用的长程性, 电子气体统计理论遇到了比处理一般非理想气体更大的困难。用一般方法计算维里展开引至发散的結果。Debye 和 Hückel^[1] 在处理强电解质时引入了“离子云”对电荷起屏蔽作用的图象, 并建立了决定有效势的自治方法。这是经典电子气体理论中最早的正确结果。最近在电子系统的量子力学理论上有很大的进展, Bohm 和 Pines^[2] 系统地分析了由长程作用引起的屏蔽效应和等离子区振荡, 使问题的物理图象基本清楚了。1957 年以来, Gell-Mann 和 Brueckner^[3] 等人的一系列的工作引用了量子场论中的计算方法(主要是 Feynman 图分析法), 得出了处理高密度电子气体在数学上严格的理论。这里的关键是用最发散图形求和的概念, 有效地消除了长程作用带来的发散困难(红外发散), 同时阐明了这种数学方法的实质在于正确估计了屏蔽效应和等离子区振荡。这些成果为建立电子气统计理论提供了良好的基础。Montroll 和 Ward^[4] 发展了一种量子统计的微扰计算方法, 它是 Mayer 经典非理想气体相連图展开方法的推广。他得到结论: Debye 和 Hückel, 以及 Gell-Mann 和 Brueckner 的结果是按 e^2 作微扰展开在高温经典近似与绝对零度高密度近似的两种极限情况。Montroll 和 Ward 所用的方法极为繁复, 而物理图象和数学上近似程度都不够清楚。

在[5]中提供了一种统计微扰理论的模拟方法: 对任一热力学平衡系统可以设计一个相应的模拟系统, 并证明模拟系统基态能量的改变等于真实系统由于相互作用所引起的热力学势的变化。一般多体系统的能谱非常复杂, 我们很难准确求得, 因此根据能谱计算配分函数是非常困难的。上述的模拟法把这个问题简化为一般量子力学多体系统问题。这样, 很多量子场论中的方法就可以直接用来处理统计问题。在 §2 中, 我们用模拟法计算了电子气的热力学函数。在计算中, 我们采取了 Feynman 图形求和的概念, 写出了所谓“顶链”图形对热力学函数的贡献的积分表达式。在 §3 中算出了强退化电子气的比热和状态方程。在 §4 中得出了在高温低密度情况下的自由能的改变。除了完全均匀的电子

* 1959 年 10 月 23 日收到。

气外, 还考虑了存在点电荷引起的不均匀分布的效应。这种情况与金属中杂质原子的作用有一定的联系。在模拟系统中存在一组元激发, 其中包括个别激发 $E_k(T)$ 与频率为 $\omega_p(T)$ 的等离子区振荡。在高温极限情况中, $\omega_{p1}(T)$ 计算的结果与等离子区理论中的结果相符。为了使物理图象更清楚, 我们引用了[6]中介电常数的概念, 把主要结果通过介电常数表示出来。

§ 2. 热力学函数的计算

设多体系统的哈密顿量为

$$H = H_0 + H_I, \quad H_0 = \sum_{k,s} \epsilon(k) a_{k,s}^+ a_{k,s}, \quad (2.1)$$

其中 H_I ——粒子间相互作用能; $a_{k,s}^+, a_{k,s}$ ——动量为 k 、自旋为 s 的费米算符; $\epsilon(k)$ ——粒子在 k 态时的动能。今设计一模拟系统, 其哈密顿量为

$$H^I = H_0^I + H_I, \quad H_0^I = \sum_{k,s} \epsilon(k) (c_{k,s}^+ c_{k,s} - b_{k,s}^+ b_{k,s}), \quad (2.2)$$

其中 b, c ——新的费米算符, 它们与 a^+, a 有如下关系:

$$\left. \begin{aligned} a_{k,s} &= (1 - f_k)^{1/2} c_{k,s} + f_k^{1/2} b_{k,s}^+; \\ a_{k,s}^+ &= (1 - f_k)^{1/2} c_{k,s}^+ + f_k^{1/2} b_{k,s}. \end{aligned} \right\} \quad (2.3)$$

其中 $f_k = (1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)})^{-1}$; $\beta = (kT)^{-1}$; k ——波尔兹曼常数; T ——绝对温度; μ ——系统的化学势。

据根[5]所证明的定理,

$$\Omega = \Omega_0 + \Delta E^I, \quad (2.4)$$

其中 ΔE^I —— H^I 系统基态能量的改变; $\Omega = -kT \ln \text{sp}[e^{-\beta H}]$; $\Omega_0 = \Omega|_{H_I=0}$ 。这样, 对于热力学势的计算就归结为求 ΔE^I 。为此, 我们将采用 Feynman 图形求和的方法,

$$\Delta E^I = \frac{i}{2\pi\delta(0)} \langle \phi_F | S | \phi_F \rangle_c \quad H_0^I | \phi_F \rangle = 0, \quad (2.5)$$

c ——表示求和时只取连接图。

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n T [H_I(\tau_1) H_I(\tau_2) \cdots H_I(\tau_n)]. \quad (2.6)$$

电子气哈密顿量中的相互作用部分为

$$H_I = \sum_{k,k',q} \frac{v(q)}{2V} a_{k+q,s}^+ a_{k'-q,s}^+ a_{k',s} a_{k,s}, \quad (2.7)$$

其中 $v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$; V ——系统的体积。由于 $v(q)$ 在 $q=0$ 时存在奇点而使得在微扰级数中的一些项(或所对应的 Feynman 图形)对 q 积分时是发散的。这给计算带来很大的困难。Gell-Mann 和 Brueckner^[3] 证明了在绝对零度与高密度的情况下只有一组图形(即所谓“项鍊”图形如图 1)起主要作用。由于动量守恒定律, 这类图形每一根作用线的 q 相同, 因此在同级图形中, 这类图形的被积式含有 q 的最高负幂次(积分最发散)。 n 级“项鍊”图形对应的被积式含有因子 q^{-2n} 。虽然这些图形的贡献就每一个而言都是发散的, 但通过无穷级数求和得到的总贡献是一有限值。

运用上述的模拟法,我们可以立即把这种思想推广到温度不为零的情况中,即计算出所有“项鍊”图形对热力学函数的贡献。在一般情况下,这种贡献总是重要的,而在两种极限情况下,其他图形的贡献可以忽略。电子统计理论中含有 e^2, m, T, \hbar, n 等五个参量

(其中 e ——电子的电荷, m ——电子的质量, \hbar ——普朗克常数, n ——电子密度), 用它们可以构成三个独立长度, 即电子间平均距离 $r_0 \left(n^{-1} = \frac{4\pi}{3} r_0^3 \right)$; 波尔半径 $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$; 相应于电子平均热运动的德布洛依波长 $\lambda = \left(\frac{\hbar^2}{2mkT} \right)^{1/2}$ 。根据因次分析, 一切算符的

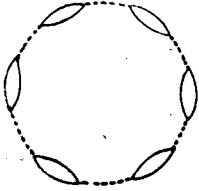


图 1.

展开式中, 实际上只与无因次量 $r, \varphi(\lambda^2 r_0^2)$ 有关。 $r_s = \frac{r_0}{a_0}$ 为电子

气在 $T = 0$ 时的无因次参量, $\varphi(x)$ 为一未定函数。在低温情况下(强退化电子气), $\varphi(x)$ 接近常数, 而 $f(\epsilon_k)$ 和绝对零度时系统在基态的分布很接近, 因此[3]中关于各类图形贡献与 r_s 的关系的分析均可引用。对于高温经典近似由于 \hbar^2 必须不再出现, 故 $\varphi(x) \sim x$, 即无因次参量为 $r_s \lambda^2 r_0^2 \sim (\lambda_D^{-1} r_0)^2$, 即 Debye 和 Hückel 近似的参量。其中 $\lambda_D = \left(\frac{4\pi e^2 n}{kT} \right)^{-1/2}$ 为德拜长度。在讨论高温低密度近似时, 我们将说明“项鍊”图形给出展开式中最主要的项。必须强调图 1 的选择主要决定于库仑作用的长程性, 即在 $q \sim 0$ 时, 积分的红外发散, 其他条件的影响则是次要的。

模拟系统“项鍊”图形求和的具体计算与 Gell-Mann 和 Brueckner 的计算类似, 所不同的是在这里真空态 $1\phi_F\rangle$ 与温度有关, 因此自由格林函数必须作如下修正:

$$\overline{a_{k,s}(t)a_{k,s}^\dagger(t')} = [\theta(t-t')(1-f_k) + \theta(t'-t)f_k] \cdot e^{-i\epsilon(k)(t-t')}, \quad (2.8)$$

其中 $\overline{a_{k,s}(t)a_{k,s}^\dagger(t')} = \langle |T[a_{k,s}(t)a_{k,s}^\dagger(t')] | \rangle$ 称为自由格林函数, n 级“项鍊”图形的贡献为

$$E_{nf} = \frac{i}{2\pi\delta(0)} A_n \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n \sum_q Q(q, \tau_1 - \tau_2) Q(q, \tau_2 - \tau_3) \cdots \\ \cdots Q(q, \tau_n - \tau_1) \left(\frac{v(q)}{2V} \right)^n, \quad (2.9)$$

$$A_n = \frac{i^n}{2^n} 2^n.$$

其中 $Q(q, \tau - \tau') = \sum_{k,s} \overline{a_{k,s}(\tau)a_{k,s}^\dagger(\tau')} \overline{a_{k+q,s}(\tau')a_{k+q,s}^\dagger(\tau)}$ 为电子空穴对的自由格林函数。通过 Fourier 变换, 立即求得一切 E_{nf} 的和:

$$\Delta E^{st} = \sum_{n=2}^{\infty} E_{nf} = -\frac{1}{4\pi i} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_q \left[iQ(q, \omega) \frac{v(q)}{V} \right]^n d\omega = \\ = \frac{1}{4\pi i} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \ln \left[1 - iQ(q, \omega) \frac{v(q)}{V} \right] + iQ(q, \omega) \frac{v(q)}{V} \right\} d\omega, \quad (2.10)$$

$$Q(q, \omega) = -i \sum_{k,s} \left[\frac{1}{\omega - \omega(k, q) + i\alpha_{a \rightarrow 0}} - \frac{1}{\omega + \omega(k, q) - i\alpha_{a \rightarrow 0}} \right] f_k, \quad (2.11)$$

其中 $\omega(k, q) = \epsilon(k+q) - \epsilon(k)$, 因而

$$\Delta Q(\mu) = \frac{1}{4\pi i} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \ln \left[1 - \frac{v(q)}{V} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k, q)}{\omega^2 - \omega^2(k, q)} f_k \right] + \frac{v(q)}{V} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k, q)}{\omega^2 - \omega^2(k, q)} f_k \right\} d\omega. \quad (2.12)$$

以上所得的 ΔQ 中包含有参数 μ , 需要通过热力学公式 $-\left(\frac{\partial Q}{\partial \mu}\right)_{V,T} = N$ 定出 $\mu = \mu(N, T)$ 来. 根据[7]的证明, $\Delta Q(\mu_0) = \Delta F$, 其中 μ_0 为自由系统的化学势. 在 $T = 0$ 时 $\mu_0 = \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$, 由(2.12)式可见, 基态能量改变与[3]符合.

§ 3. 强退化电子气

若只保留 $\delta\mu (= \mu - \mu_0)$ 的零次项和一次项, 则系统的内能为

$$E = E_0 + \Delta Q(\mu_0) + T\Delta S, \quad (3.1)$$

其中 $E_0 = \sum_{k,s} f_k(\mu_0) \epsilon_k$ 是自由系统的内能; $\Delta S = -\left(\frac{\partial \Delta Q(\mu_0)}{\partial T}\right)$. 从(3.1)式明显看出, E 通过自由电子分布函数 $f_k(\mu_0)$ 与温度联系起来, 因而既不是自由电子能量的平均, 也不是独立元激发能量之和, 而是 f_k 的泛函数. 这与一般气体模型(即认为系统是一组独立元激发组成的气体)有很大的差别, 而与 Ландау 的费米液体理论的假设^[8]很相似. 在[7]中进一步证明了

$$\frac{\partial \Delta Q(\mu_0)}{\partial f_k} = -M(k, \mu_0), \quad (3.2)$$

正好是系统元激发的修正, 即 $E(k) = \epsilon_k + M(k, \mu_0)$. 这可以认为是 Ландау 基本假设的微观意义.

在低温近似下, 可用[9]中的方法来简化我们的计算. 热容量

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = \left(\frac{\partial E_0}{\partial T}\right)_{N,V} - T \left[\frac{\partial^2}{\partial T^2} (\Delta Q(\mu_0)) \right]_{N,V}. \quad (3.3)$$

在低温下(强退化电子气) ΔS 可以只保留到 T 的线性项. 作了这种近似后,

$$C_v = \left(\frac{\partial E_0}{\partial T}\right)_{N,V} - \sum_k \left(\frac{\partial \Delta Q(\mu_0)}{\partial f_k(\mu_0)}\right) \left(\frac{\partial f_k}{\partial T}\right)_{N,V}. \quad (3.4)$$

将(3.2)式代入上式, 得

$$C_v = \sum_k (\epsilon_k + M(k, \mu_0)) \frac{\partial f_k(\mu_0)}{\partial T}. \quad (3.5)$$

对于强退化电子气 $T \neq 0$ 的元激发可以通过 $T = 0$ 时单个粒子元激发能量来表达, 即把 $M(k, \mu_0)$ 中 $f(k, \mu_0)$ 换为 $f(k, \mu_0)|_{T=0}$. 对比热作这种近似在只取 T 的线性项的前提下是合理的(因为 $M(k, \mu_0)$ 的修正项比例于 T^2). 这种近似, 相当于我们只考虑激发电子与大量非激发电子之间的相互作用, 而忽略了激发电子间的相互作用. 这与[10]的

1) 对 ω 的积分路线按(2.10)的方式理解.

假设一致。这样，比热的公式就和费米气体模型基本相同了。事实上，以上公式可以改写为：

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty n(\epsilon) f(\epsilon, \mu_0) \epsilon d\epsilon, \quad (3.6)$$

其中 $n(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_k - M(k, \mu_0^0))$ ——态密度； $\mu_0^0 = \mu_0|_{T=0}$ ；经过适当处理后得到

$$C_v = \frac{\pi^2}{3} k^2 T \left\{ n[\epsilon(\epsilon)] \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \epsilon} \right)^2 + \epsilon n[\epsilon(\epsilon)] \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \epsilon^2} + \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial n[\epsilon(\epsilon)]}{\partial \epsilon} - \frac{n[\epsilon(\epsilon)]}{n(\epsilon)} \frac{\partial n(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \right\}_{\epsilon=\mu_0^0}, \quad (3.7)$$

其中 $n(\epsilon)$ 为没有相互作用时的态密度； ϵ 为系统元激发能量。在高密度近似下，化为一般气体模型公式

$$C_v = \frac{\pi^2}{3} k^2 T n[\epsilon(\epsilon)]_{\epsilon=\mu_0^0}. \quad (3.8)$$

在绝对零度时，由态密度公式求出的 C_v 结果与[10]符合。由(3.7)得到低温时状态方程为

$$PV = -V \left(\frac{\partial E^0}{\partial V} \right)_T + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 V \left(\frac{\partial n'(\epsilon)}{\partial V} \right)_T, \quad (3.9)$$

E^0 ——绝对零度时的内能。

$$n'(\epsilon) = \left\{ n[\epsilon(\epsilon)] \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \epsilon} \right)^2 + \epsilon n[\epsilon(\epsilon)] \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \epsilon^2} + \epsilon \frac{\partial \epsilon}{\partial \epsilon} \left(\frac{\partial n[\epsilon(\epsilon)]}{\partial \epsilon} - \frac{n[\epsilon(\epsilon)]}{n(\epsilon)} \frac{\partial n(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) \right\}_{\epsilon=\mu_0^0}. \quad (3.10)$$

现在考虑空间有局部不均匀性(点电荷 Ze) 的情况¹⁾。点电荷与电子相互作用哈密顿量

$$H_i = - \sum_{k,q} \frac{v(q)Z}{V} a_{k+q,s}^\dagger a_{k,s}. \quad (3.11)$$

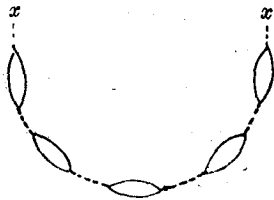


图 2.

模拟系统总的哈密顿量为

$$H^s = H_0^s + H_i + H_i'. \quad (3.12)$$

高温低密度和低温高密度条件下与对均匀电子系统的分析相似，可以证明，只须考虑图 2 所表示的最发散图对 ΔE^s 的贡献，其他图形根据同样理由可以忽略。因此由点电荷所引起的真正系统的热力学势的改变等于

$$\Delta Q'(\mu) = - \sum_q N' \left(\frac{Zv(q)}{V} \right)^2 \sum_{k,s} \frac{f_k(1-f_{k+q})}{\omega(k,q)} \left[1 + \frac{2v(q)}{V} \sum_{k,s} \frac{f_k(1-f_{k+q})}{\omega(k,q)} \right]^{-1}. \quad (3.13)$$

1) 当工作完成时，作者得知 B. D. Silverman 和 P. R. Weiss (*Phys. Rev.* 114 (1959), 989) 作了同样的计算。该文内容为本节对点电荷问题讨论的一个特殊情形。

根据上式可以算出绝对零度高密度条件下有点电荷存在时, 电子的比热与自由电子的比热之比:

$$\frac{c}{c_F} = \left\{ 1 + \frac{1}{3} \frac{N'}{N} \frac{Z^2(r, \alpha)^{1/2}}{\pi^{1/2}} + \frac{r, \alpha}{2\pi} \left(\ln \left(\frac{\pi}{r, \alpha} \right) - 2 \right) \right\}^{-1}. \quad (3.14)$$

其中 c_F ——自由电子的比热; N ——总电子数; N' ——点电荷个数 ($N \gg N'$). 这个结果可以和最近发表的有关杂质对某些金属比热影响的实验联系起来^[1]. 实验中的一部分数据显然表明杂质对比热的贡献中含有与 Z 符号无关的项. 在我们近似情况下得出的修正项正是这样. 但由于采用“项链”图形近似不能实用于金属中的电子密度, 因而这种比较是没有说服力的.

§ 4. 高温低密度近似

在高温低密度条件下, 可以近似地认为屏蔽后的有效作用势力程 $r_{\max} \cong \lambda_D = (\beta^4 \pi n e^2)^{-1/2}$, 仿照[3]中关于 Feynman 图形分析方法, 得到

$$\Delta E'' \sim N \beta^{-1} (\beta e^2 / r_0)^{2/3} \times [\text{常数} + (\lambda / \lambda_D)^2 \text{的一次项和高次项}].$$

完全与[3]中的讨论相似, 除掉最发散的“项链”图有很大的贡献外, 其他图形的贡献可以忽略. 因而 $\Delta E''$ 就等于(2.12)式, 不过 f_k 已过渡到波尔兹曼分布 ($e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$). 在 $\Delta E''$ 的积分式中, ω 的奇点都集中在实轴上, 考虑到被积函数的解析性质, 我们将积分路线转换到虚轴上去. 于是

$$\begin{aligned} \Delta E'' = & -\frac{1}{4\pi} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \ln \left[1 + \frac{v(q)}{V} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k, q)}{u^2 + \omega^2(k, q)} f_k \right] - \right. \\ & \left. - \frac{v(q)}{V} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k, q)}{u^2 + \omega^2(k, q)} f_k \right\} du. \end{aligned} \quad (4.1)$$

当 $\beta \rightarrow 0$ 时, 德布洛依波长 $\lambda \rightarrow 0$, 经过变数代换,

$$k'^2 = \lambda^2 k^2; \quad u' = \beta u;$$

$$\begin{aligned} \Delta E'' = & -\frac{1}{4\pi} kT \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \ln \left[1 + (q\lambda_D)^{-2} \frac{1}{N} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k', q)}{u'^2 + \omega^2(k', q)} f_{k'} \right] - \right. \\ & \left. - (q\lambda_D)^{-2} \frac{1}{N} \sum_{k,s} \frac{2\omega(k', q)}{u'^2 + \omega^2(k', q)} f_{k'} \right\} du', \end{aligned} \quad (4.2)$$

$\beta \rightarrow 0$ 时, $\omega(k', q) \rightarrow 0$. 在 $u' = 0$ 附近被积函数有显著的极大, 因此可分出主要贡献. 令

$$\psi(q, u') = (q\lambda_D)^{-2} \frac{1}{N} \sum_{k',s} \frac{2\omega(k', q)}{u'^2 + \omega^2(k', q)} f_{k'}, \quad (4.3)$$

于是有以下的近似式:

$$\Delta E'' = -\frac{1}{4\pi} kT \sum_q \left\{ \frac{\ln [1 + \psi(q, 0)]}{\psi(q, 0)} - 1 \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q, u') du', \quad (4.4)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q, u') du' = 2\pi (q\lambda_D)^{-2}, \quad \mu = \mu_0; \quad \psi(q, 0) = (q\lambda_D)^{-2}, \quad \mu = \mu_0.$$

$$\therefore \Delta F = \frac{V}{12\pi} kT \lambda_D^{-3}. \quad (4.5)$$

这就是 Debye 和 Hückel 的经典结果^[1]. 从这里可以得出一切相应的热力学量. 要得到比 Debye 和 Hückel 更精确的结果还有待于对所取的近似作进一步的分析.

点电荷所带来的自由能变化在同样近似条件下得到

$$\Delta F' = -\frac{Z^2 N'}{8\pi N} V k T \lambda_D^{-3}. \quad (4.6)$$

§ 5. 物理图象的分析

现在已很清楚, 由于电荷之间的长程库仑作用, 电子系统存在两种基本性质——屏蔽效应和等离子区振荡. 在通常温度下, 热平衡系统不出现等离子区振荡, 而屏蔽效应对电子系统的影响很大. 由于存在屏蔽效应, 电子系统中电荷之间的有效相互作用不再是库仑作用. 由于电子有一定的惯性, 有效相互作用就不可能是瞬时的, 它不仅与电荷之间的距离有关, 而且与电荷的运动状态有关, 同时还决定于周围电子的密度以及热运动速度. 文献[1]中已得出在经典情况下的有效作用势. 对 $T = 0$ 时电子系统中的极化过程最近也有很多研究^[12]. 证明了电子气理论最近的发展是由于正确估计了极化效应, 因此各种基本量都可以通过介电常数表示^[6]. 把这些结果推广到 $T \neq 0$ 时有一定的困难, 有待详细研究. 我们根据[6]中的观点来分析上面所得的结果.

根据 Dybois^[12] 的工作, 极化过程通过 Feynman 图中的“极化图”(polarization diagram) 来描述. “极化图”表示一种过程, 它吸收 q 并加以传播, 然后又放出 q . 引入

$$Q(q, \omega) = \sum_{(i)} Q(q, \omega)_i. \quad (5.1)$$

$Q(q, \omega)$ 见图 3. (5.1) 式中的 (i) 指求和时只取不可约极化图 (即不能因切断一根作用线而变成两个更简单的极化图). 根据[12], 纵向介电常数可表为

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - v(q)Q(q, \omega). \quad (5.2)$$

不难看出, 前面的计算只估计了最简单的不可约极化图[图 3 中的(a)类]. 在这种近似下,

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{v(q)}{V} \sum_{k, s} f_k (1 - f_{k+q}) \frac{2\omega(k, q)}{\omega^2 - (\omega(k, q) + i\alpha)^2}. \quad (5.3)$$

以上的量都是在模拟系统中定义的. 可以证明, $\epsilon(q, 0)$ 就是系统平衡态静电介电常数. 当我们只考虑“项鍊”图形时, $\epsilon(q, \omega) = 0$ 就是决定能谱的本征值方程 (证明可参照[6]). 除了个别粒子类型 (费米支) 的激发外, 还存在相应于等离子区振荡的解. 在高温低密度长波近似下为

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{3kT}{m} q^2. \quad (5.4)$$

这与经典等离子区理论中所得的色散关系相符合. 在低温时, 色散关系与绝对零度时的相差不大.

电子间有效相互作用可定义为库仑作用加上一切极化过程修正项 $\Delta v(q)$:

$$\bar{v}(q, \omega) = v(q) + \Delta v(q, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 - \epsilon(q, \omega)}. \quad (5.5)$$

在高温低密度近似下,

$$\bar{v}(q, 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda_D^{-2}}, \quad (5.6)$$

和德拜势符合。一般情况下, $\bar{v}(q, \omega)$ 的结构是相当复杂的。运用 Nozières 和 Pines^[6] 的公式得热力学势:

$$\Delta Q = \int_0^{e^2} \frac{de'^2}{e'^2} \sum_q \left[\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \text{Im} \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} d\omega - \frac{2\pi e^2 n}{q^2} \right]. \quad (5.7)$$

当我们把(5.3)代入上式时所得到的就是(2.12)式。当点电荷存在时, 一般说来, 出现高次效应(如束缚态等)。但是如果只取相互作用的二级近似, 则热力学势的改变也可以通过介电常数表示如下:

$$\Delta Q' = \left\{ Z^2 \sum_q \frac{2\pi e^2}{Vq^2} N' \left[\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 \right] \right\}. \quad (5.8)$$

不难看出, $\Delta Q'$ 是被点电荷极化了的电子系统的自能的改变。以上的讨论证明: 本文所计算的 ΔQ 事实上只考虑了极化图象中最简单但是最重要的过程。

赵凯华、张绮香同志曾参加部份计算工作。李蔭远、陈式刚、陈咸亨同志参加了工作的讨论, 作者对他们表示感谢。

参 考 文 献

- [1] Debye & Hückel, *Phys. Zs.* **24** (1923), 185.
- [2] Pines, D., *Solid State Physics* **1** (1955), 367.
- [3] Gell-Mann, M. & Brueckner, K. A., *Phys. Rev.* **106** (1957), 367.
- [4] Montroll, E. W. & Ward, J. C., *Physics of Fluids* **1** (1958), 55.
- [5] Чэнь Чунь-сянь (陈春先), *ЖЭТФ* **35** (1958), 1518.
- [6] Nozières, P. & Pines, D., *Phys. Rev.* **113** (1959), 1254.
- [7] 陈式刚和陈春先, (待发表).
- [8] Ландау, Л., *ЖЭТФ* **30** (1956), 1058.
- [9] Абрикосов, А. А., Халатников, И. И. М., *УФН* **66** (1958), 117.
- [10] Gell-Mann, M., *Phys. Rev.* **106** (1957), 369.
- [11] Guthrie, G. L., *Phys. Rev.* **113** (1959), 793.
- [12] Dubois, D. F., *Annals of Physics* **7** (1959), 174.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Лю Да-цянъ Лэн Цзун-ан

Чэнь Чунь-сянь Пэн Шао-хуа

(Физический институт, Академии Наук Китая)

Резюме

Термодинамические свойства электронного газа рассматриваются с помощью метода статистического модельного гамильтониана. Точно вычислены вклады в термодинамические функции от специального класса диаграмм Феймана, соответствующих инфракрасной расходимости высшего порядка/по Гелл-Манну-Брукнеру/. Приближение может обосновано в двух предельных случаях: сильно вырожденный электронный газ высокой плотности и классический газ малой плотности. Рассмотрено также влияние локальных неоднородностей/примесных центров/на термодинамические свойства системы. Обсуждаются физические следствия полученных результатов.