

各向異性高压物質的电子能譜*

郝柏林 霍崇儒

(中国科学院)

提 要

本文以高压物质作为一种简单的各向异性金属模型,研究了靜晶格場、电子间庫仑相互作用和通过声子場的相互作用对单粒子元激发譜的影响。讨论了周期場中电子格林函数的微扰论级数,原则上解决了用微扰论求周期場中費米系統能譜的問題。具体计算了面心立方和体心立方高压物質的費米面和态密度,给出了数值结果。

一、引 言

近几年来,关于金属电子性質的大量实验研究表明,自由电子近似^[1]能相当好地描述非过渡族正常金属的电子能譜。費米面的几何尺寸(綫度、截面积等)与自由电子近似符合甚佳,而各种微分量(費米速度,有效质量,态密度等)則相差較多。对于各向同性金属模型,这些結果是容易理解的。实验所测的乃是費米液体的准粒子費米球,它的体积等于自由粒子費米球,一切相互作用只能影响元激发的能譜,而不影响費米球的半径。各向异性情况下,虽然准粒子費米面內的总体积不变^[2],但其形状首先受周期場影响,而多体作用原則上也可以通过各向异性直接影响几何尺寸。这是十分值得探討的問題。然而实际金属中无論是晶格位势本身,还是給定位势中的单电子問題,都不易确切地解析处理,多体問題的解决就更难些。因此选取某种各向异性的金属模型,同时考虑多体作用和晶格位势的影响,是有现实意义的。

实验結果与自由电子近似地符合,以及正交化平面波方法的最近发展^[3],都說明非过渡族正常金属中的晶格位势可以做为微扰处理。最簡單的可以将位势視为微扰的模型,就是高压物質。这是因为电子系統的高压(高密度)条件与庫仑势作为微扰的条件一致:

$$\frac{e^2}{\hbar v} \ll 1,$$

式中 v 是电子的費米速度。以后令 $\hbar = 1$,并引入无綱参量 $\lambda = \frac{e^2}{\pi v}$ 。本文的目的就在于利用簡單的高压物質模型,将周期場和多体作用視为微扰(即以自由电子而不是 Bloch 电子作出发点),同时考虑周期場、电声子相互作用和庫仑相互作用对电子能譜的影响。我們着重討論各向异性的貢獻。由于充分意識到实际金属中的晶格势与高压物質中的庫仑势相去甚远,如何选取更为现实的晶格势,并相应地改进电声子作用頂角,以便与实际金属作直接比較,留待以后解决。

* 1964 年 6 月 8 日收到。

本文只限于討論温度 $T = 0^\circ\text{K}$ 的情形。由費米液体理論熟知,元激发能譜的温度修正是很小的,而元激发衰減的温度修正是重要的^[4]。我們求得的电子能譜实际上在整个高于超导轉变温度但远低于德拜温度的范围内都是适用的。

1960年 Д. А. Киржниц^[5] 和 А. А. Абрикосов^[6] 曾先后指出,高压物质电子全部离化后,原子核应排成某种密堆砌晶格。后者^[7]曾进一步討論了金属氫的电子能譜,但忽略了周期場的影响,仍用了各向同性的模型。本文同时也是这一理論的推广。

本文第二节中引入周期場中的电子格林函数,給出处理周期場問題时自由电子格林函数的一种比較方便的表示,原則上解决了用微扰論求各向异性高压物质电子能譜的問題。第三节中引入电子間庫仑相互作用和通过声子場相互作用的頂角部分,考虑庫仑屏蔽和总頂角部分的一些性質,計算了对角自能部分。第四节討論非对角自能部分,发展与单电子理論簡并微扰論对应的图形求和法。第五节以 $Z = 1$ 的立方晶体为例,給出費米面和态密度的数值計算結果。

二、周期場中的电子格林函数

考虑 N 个电荷为 Ze 的正离子和 NZ 个电子组成的高压物质,其体积为 V 。离子排成晶格,并可在平衡位置附近振动。电子系統的总哈密頓量为

$$H - \mu N = H_0 - \mu N + H_{\text{int}},$$

$$H_0 = \int \psi^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

在相互作用表象中有 [x 代表四維坐标 (\mathbf{r}, t)]

$$H_{\text{int}}(t) = \int \psi^+(x) U(x) \psi(x) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \psi^+(x) \psi^+(x') v(x-x') \psi(x') \psi(x) d\mathbf{r} dx', \quad (1)$$

式中 $\psi(x)$, $\psi^+(x)$ 是电子場算符; $U(x)$ 是晶格位势(其中包括了声子場算符); $v(x-x') = \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta(t-t')$ 是电子間的庫仑作用势。我們不明显写出自旋角标,只在必要处計入来自对自旋求和的因子 2。将 $U(x)$ 按离子偏离平衡点的位移 $\varphi(\mathbf{R}_{i_0}, t) = \sqrt{\rho}(\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{R}_{i_0})$ 展开

$$U(x) = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{r}|} = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\mathbf{R}_{i_0} - \mathbf{r}|} +$$

$$+ \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{\sqrt{\rho}} \varphi_a(\mathbf{R}_{i_0}, t) \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{1}{|\mathbf{R}_{i_0} - \mathbf{r}|} + \dots, \quad (2)$$

这里从位移矢量中分出了密度 $\rho = NM/V$, M 是离子質量。展开式(2)的第一項是与時間无关的靜晶格場,晶格对称就反映在对 i 求和的方式上。第二項將給出单声子頂角,其中 $\varphi_a(\mathbf{R}_{i_0}, t)$ 在二次量子化表象中起着声子場算符的作用。

考虑到平移对称性,准确电子格林函数的傅里叶变换可写成

$$G(x, x') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \int_{\Omega_B} d\mathbf{k} \sum_{n,m} G_{nm}(\mathbf{k}, \varepsilon) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_n)\mathbf{r}-i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_m)\mathbf{r}'} e^{-i\varepsilon(t-t')}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{K}_n 为倒格矢。对 \mathbf{k} 的积分限制在第一布里渊区 Ω_B 内,以后 Ω_B 也代表該区的体积

$(2\pi)^3 N/V$. 动量表示中的格林函数 $G_{nm}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ 已是角标 n, m 的矩阵. n, m 是能带编号 (或与之相应的) 量子数.

暂时将静晶格场并入 H_0 , 讨论无相互作用的 Bloch 电子的格林函数

$$G^{(0)}(x, x') = -i \langle T(\psi^{(0)}(x) \psi^{(0)+}(x')) \rangle. \quad (4)$$

将场算符按 Bloch 波展开, 得如下之动量表示:

$$G_{nm}^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \sum_p \frac{U_{p\mathbf{k}}(\mathbf{K}_n) U_{p\mathbf{k}}^*(\mathbf{K}_m)}{\varepsilon - \xi_p(\mathbf{k}) + i\delta \text{sign} \xi_p(\mathbf{k})}, \quad (5)$$

其中 $U_{p\mathbf{k}}(\mathbf{K}_n)$ 是 Bloch 波函数周期因子 $U_{p\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 的傅里叶系数, $\xi_p(\mathbf{k}) = \varepsilon_p(\mathbf{k}) - \varepsilon_F$ 是从费米能量 ε_F 算起的单电子能量. 对于自由电子, 我们取与 Bloch 波相当的表示, 即

$$\left. \begin{aligned} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_n)\mathbf{r}}, \\ \varepsilon_n(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{K}_n)^2. \end{aligned} \right\} \mathbf{k} \in Q_B \quad (6)$$

$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 显然具有“周期性”: $\varepsilon_n(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m) = \varepsilon_{n+m}(\mathbf{k})$. 令 $n=0$ 得 $\varepsilon_m(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)$. 这就是 Harrison^[1] 画各向异性自由电子等能面的作图规则: 在各个倒格结点作等能球, 其被 Q_B 截出部分组合成各套等能面. 对于波函数式(6), $U_{n\mathbf{k}}(\mathbf{K}_n) = \delta_{nm}$, 于是

$$G_{nm}^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon) = G_n^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon) \delta_{nm} = \frac{\delta_{nm}}{\varepsilon - \xi_n(\mathbf{k}) + i\delta \text{sign} \xi_n(\mathbf{k})}. \quad (7)$$

注意

$$\sum_n \int_{Q_B} d\mathbf{k} f(\mathbf{k} - \mathbf{K}_n) = \int_{\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}),$$

我们就回到了通常的自由电子表示

$$\left. \begin{aligned} G^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon) &= G_0^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_n, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \xi_0(\mathbf{p}) + i\delta \text{sign} \xi_0(\mathbf{p})}, \\ \xi_0 &= \frac{p^2}{2m} - \mu_0, \quad \mu_0 = \frac{p_0^2}{2m}, \quad p_0 = \left(\frac{3\pi^2 ZN}{V} \right)^{1/3}. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

今后将视方便而定, 兼用(7)和(8)两种表示.

加入相互作用后, $H_0 - \mu N$ 中的化学势 $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$. 决定各向同性费米系统元激发谱时, 只须从自能部分 $M(p, \varepsilon)$ 中舍去化学势移动 $M(p_0, 0)$, 就无须考虑 $\Delta\mu$, 仍从 $H_0 - \mu_0 N$ 出发. 各向异性情形下, 等能面变形, 准粒子在动量空间中再分布, 也引起化学势的移动. 总的化学势移动已不能简单地得出, 必须借助准粒子费米面内体积的不变性^[2], 由体积的归一条件确定. 但是实际计算中仍然可以在 $G_n^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ 中采用从 μ_0 算起的单粒子能量, 因为在坐标表示中有准确关系式

$$G_\mu(x, x') = e^{i\Delta\mu(t-t')} G_{\mu_0}(x, x')$$

成立, 微扰论的任何一级图中都出现一个只与两端时间差有关的共同因子. 对时间作傅里叶变换, 在能量表示中得

$$\left. \begin{aligned} G_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) &= G_{\mu_0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon + \Delta\mu), \\ M_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon) &= M_{\mu_0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \varepsilon + \Delta\mu). \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

等等, 即整个计算中都可用 μ_0 , 只须在最终结果中作 $\varepsilon \rightarrow \varepsilon + \Delta\mu$ 代换.

計入周期場和多体作用以后,准确格林函数的 Dyson 方程是

$$G_{nm}(\mathbf{k}, \varepsilon) = G_n^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon)\delta_{nm} + \sum_p G_n^{(0)}(\mathbf{k}, \varepsilon)M_{np}(\mathbf{k}, \varepsilon)G_{pm}(\mathbf{k}, \varepsilon), \quad (10)$$

其中自能部分 M_{nm} 也是矩陣. 将 G_{nm} 和 M_{nm} 都分成对角部分 G_n, M_n 与非对角部分 $\tilde{G}_{nm}, \tilde{M}_{nm}$, 方程(10)可改写成

$$\left. \begin{aligned} G_n &= G_n^{(0)} + G_n^{(0)}M_nG_n + \sum_p G_n^{(0)}\tilde{M}_{np}\tilde{G}_{pn}, \\ \tilde{G}_{nm} &= G_n^{(0)}\tilde{M}_{nm}G_m + G_n^{(0)}M_n\tilde{G}_{nm} + \sum_p G_n^{(0)}\tilde{M}_{np}\tilde{G}_{pm}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

可見 G_n 从零級項开始, 而 \tilde{G}_{nm} 至少从一級項开始. 将(11)式作迭代, 可得只包含有 $G_n^{(0)}$ 的微扰展开式

$$G_n = \hat{G}_n + \sum_{p_1} \hat{G}_n\tilde{M}_{np_1}\hat{G}_{p_1}\tilde{M}_{p_1n}\hat{G}_n + \sum_{p_1p_2} \hat{G}_n\tilde{M}_{np_1}\hat{G}_{p_1}\tilde{M}_{p_1p_2}\hat{G}_{p_2}\tilde{M}_{p_2n}\hat{G}_n + \dots, \quad (12)$$

其中 \hat{G}_n 是一切对角自能部分求和的結果

$$\hat{G}_n = G_n^{(0)} + G_n^{(0)}M_n\hat{G}_n \quad \text{或} \quad \hat{G}_n = \frac{1}{(G_n^{(0)})^{-1} - M_n}. \quad (13)$$

(12)式中对 p_i 的求和, 除了須确保 $\tilde{M}_{p_i p_k}$ 为非对角 ($p_i \neq p_k$) 外, 別无其它限制. 特殊地说, 某些 p_i 可能取等于 n 的值. 如果将这些項分出来, 重新組合, 就可以将(12)写成封閉形式

$$G_n = \hat{G}_n + \hat{G}_n N_n G_n \quad \text{或} \quad G_n = \frac{1}{(G_n^{(0)})^{-1} - M_n - N_n}, \quad (14)$$

其中不可約自能部分 N_n 本身已是无穷項之和

$$N_n = \sum_{p_1 \neq n} \tilde{M}_{np_1}\hat{G}_{p_1}\tilde{M}_{p_1n} + \dots + \sum_{\substack{p_i \neq n \\ (i=1,2,\dots,m)}} \tilde{M}_{np_1}\hat{G}_{p_1}\tilde{M}_{p_1p_2}\dots\hat{G}_{p_m}\tilde{M}_{p_m n} + \dots. \quad (15)$$

从 $G_{nm}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ 的譜表示可知, 为了决定其极点, 只須考虑对角函数 $G_n(\mathbf{k}, \varepsilon)$. 然而不可約自能部分 M_{nm} (或 M_n, N_n) 还包含着准确格林函数 G_{nm} . 如果在一定近似下将它们算出来, 那么方程(13)和(14), 再加上体积归一定 μ 的条件, 就在原則上解决了求周期場中費米系統能譜的問題. 計算 N_n 时要遇見特殊方向上最发散图形的求和, 这将在第四节中处理.

我們將看到, 准确到二級小量, 高压物質的对角自能部分 M_n 由各向同性多体作用决定, 而 \tilde{M}_{nm} 乃是靜晶格势

$$\tilde{M}_{nm} = U(\mathbf{K}_{n-m}) \quad (n \neq m), \quad (16)$$

$U(\mathbf{K}_n)$ 就是(2)式第一項的傅里叶分量, 它等于 $-4\pi Z e^2 N / V K_n^2$.

这样, 上述作法就正好与通常周期場中費米系統能譜問題的提法相反: 不是先解决单体能帶問題, 再从 Bloch 波出发計入多体作用(这种計算还没有人实际完成过), 而是从自由电子出发, 先考虑多体作用, 最后算周期場的影响. 当周期場可以当作微扰时, 后一种作法是合理的, 可以实现的.

这里須說明“二級小量”的涵义. 理論中已有两个小参量, $\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}$ 和 λ , 它們滿足不

等式

$$\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} \ll \lambda^{1/2}, \quad (17)$$

这是因为要使晶格稳定，电子与离子间的平均库仑位能就必须大于晶格振动能量，即 $\frac{Ze^2}{a} \gg \omega_0$ (晶格常数 $a \sim \rho_0^{-1}$ ，离子的等离子振荡频率 ω_0 见第三节)。实际上 $\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}$ 远小于 1。一切数量级等于或小于 $\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} \lambda^{1/2}$ 的项我们皆忽略之[例如，双声子过程对自能贡献的数量级就是如此，这可由(2)式下一级展开项估计得到]。各向异性还带来某种几何小参量，例如自由粒子费米球与布里渊区边界的距离或费米面偏离球面的程度，它须为每个具体情况定义。我们将相应的无纲参量记为 σ 。所谓准确到二级小量，即准确到 λ 和 σ 的平方项。

三、顶角部分和库伦屏蔽

考虑两个电子交换一个声子的过程，得到最简单的电子通过声子场相互作用的顶角

$$\Gamma_{02}(x, x') = \left(\frac{Ze^2}{\sqrt{\rho}}\right)^2 \sum_{i,j=1}^N D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{R}_{i0} - \mathbf{R}_{j0}, t - t') \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{1}{|\mathbf{R}_{i0} - \mathbf{r}|} \frac{\partial}{\partial x'_\beta} \frac{1}{|\mathbf{R}_{j0} - \mathbf{r}|},$$

其傅里叶变换^[7]为

$$\Gamma_{02}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m, \mathbf{k} - \mathbf{K}_n, \omega) = 4\pi e^2 \omega_0^2 D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)_\alpha (\mathbf{k} - \mathbf{K}_n)_\beta}{(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)^2 (\mathbf{k} - \mathbf{K}_n)^2}, \quad (18)$$

式中 $\omega_0 = (4\pi Z^2 e^2 N / MV)^{1/2}$ 是离子的等离子振荡频率， $D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$ 是零级声子格林函数

$$D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{R}_{i0} - \mathbf{R}_{j0}, t - t') = -i \langle T(\varphi_\alpha(\mathbf{R}_{i0}, t) \varphi_\beta(\mathbf{R}_{j0}, t')) \rangle$$

的傅里叶分量，即

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega_B} \sum_{i=1}^N \int dt e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i0} + i\omega t} D_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{R}_{i0}, t) = \\ &= \sum_s \frac{v_\alpha(\mathbf{k}, s) v_\beta^*(\mathbf{k}, s)}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}, s) + i\delta}, \end{aligned} \quad (19)$$

$v_\alpha(\mathbf{k}, s)$ 为第 s 支声子的单位极化矢量的 α 分量， $\omega_0(\mathbf{k}, s)$ 是自由声子频率。它们来自声子场算符的展开式

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha(\mathbf{R}_{i0}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, s} \frac{1}{\sqrt{2\omega_0(\mathbf{k}, s)}} (v_\alpha(\mathbf{k}, s) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i0} - i\omega_0(\mathbf{k}, s)t} b_{\mathbf{k}s} + \\ &+ v_\alpha^*(\mathbf{k}, s) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i0} + i\omega_0(\mathbf{k}, s)t} b_{\mathbf{k}s}^\dagger). \end{aligned} \quad (20)$$

推得(18)式时还会利用了如下关系：

$$\sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i0}} = \Omega_B \sum_m \delta(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m).$$

如果每个元胞内不只一个原子，则上式求和符号下还要出现结构因子 $s_m = \sum_{j=1}^s e^{i\mathbf{K}_m \delta_j}$ ，其中 s 为元胞内原子数目， δ_j 为第 j 个原子相对于 $\delta_1 = 0$ 的坐标。我们今后只讨论 $s = 1$

的立方密堆积晶格,故 $s_m = 1$.

(18)式中包括了声子谱各支与电子的相互作用. 零级近似(对 λ 而言)下的高压物质,乃是浸在负电子背景中的离子气体,离子运动就是频率为 ω_0 的纵振动. 计入库仑屏蔽后,长波部分将出现另外两支含有纵成分的振动,它们对电子自能的贡献比例于 λ^2 . 这不难在弹性力学近似下证明,此处从略. 短波部分的情形更为复杂. 我们今后只考虑电子和纵波的相互作用. 声子波矢应在 $\min\{k_D, 2p_0, |\mathbf{K}_n|\}$ 处截断. 对于立方晶体,诸量中以德拜波矢 k_D 最小,所以各向同性的德拜截断是比较合理的.

$\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_n = 0$ 的电声子顶角[图 1(a)]和熟知的库仑顶角 $\Gamma_{01} = 4\pi e^2/k^2$ [图 1(b)]构成总顶角部分:

$$\Gamma_0 = \Gamma_{01} + \Gamma_{02} = \frac{4\pi e^2}{k^2} \left(1 + \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\delta} \right). \quad (21)$$

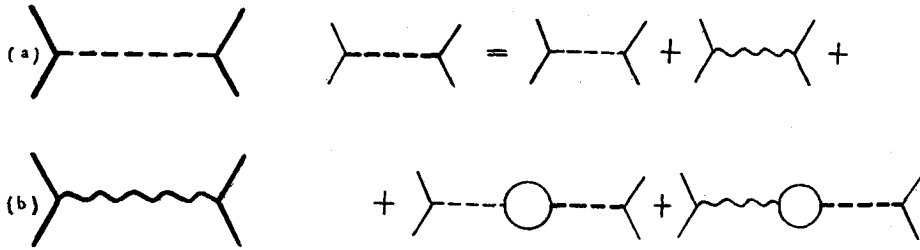


图 1

图 2

在 $k \rightarrow 0$ 时具有奇异性. 因此应将一切相互作用线上贯穿着极化环的图加起来. 这个重整化过程的意义就是计入库仑屏蔽¹⁾. 这样引入的总顶角部分 Γ 的方程如图 2 所示,其解析表达式为

$$\Gamma = \frac{\Gamma_0}{1 + \Pi\Gamma_0} = \frac{4\pi e^2}{k^2 + 4\pi e^2\Pi(k, \omega)} \left(1 + \frac{\Omega^2(k, \omega)}{\omega^2 - \Omega^2(k, \omega) + i\delta} \right), \quad (22)$$

其中

$$\Omega^2(k, \omega) = \frac{\omega_0^2 k^2}{k^2 + 4\pi e^2\Pi(k, \omega)}, \quad (23)$$

上式中 Π 是声子极化环. 最简单的极化环[图 3(a)].

$$\Pi(k, \omega) = \frac{2i}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p}_1 d\omega_1 G^{(0)}(\mathbf{p}_1, \omega_1) G^{(0)}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}_1, \omega_1 + \omega).$$

可以准确算出来²⁾

$$\begin{aligned} \Pi(k, \omega) = & \frac{mp_0}{2\pi^2} \left[1 + \frac{p_0^2 - p_+^2}{2kp_0} \ln \left| \frac{p_0 + p_+}{p_0 - p_+} \right| - \frac{p_0^2 - p_-^2}{2kp_0} \ln \left| \frac{p_0 + p_-}{p_0 - p_-} \right| \right] + \\ & + \frac{im \operatorname{sign} \omega}{4\pi k} [(p_0^2 - p_-^2)\theta(p_0^2 - p_-^2) - (p_0^2 - p_+^2)\theta(p_0^2 - p_+^2)], \quad (24) \end{aligned}$$

1) 文献[7]中考虑屏蔽时所加的图形是错误的,只是借助外加声子谱才凑出了正确的最终表达式,而声子谱本应得自顶角部分的极点.

2) 此式实部已由陈春先和周世勋算出(见文献[8]第(12)式,该处 Z 相当于本文的 $2m\omega/\lambda p_0^2$).

其中

$$p_{\pm} = \frac{m\omega}{k} \pm \frac{k}{2}, \quad \theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0; \\ 0 & x < 0. \end{cases}$$

考虑(24)在两个极限情形下的表达式。当 $k \ll p_0$ 时有

$$\begin{aligned} \Pi(k, \omega) = & \frac{mp_0}{\pi^2} \left(1 - \frac{\omega}{2vk} \ln \left| \frac{\omega + vk}{\omega - vk} \right| - \frac{v^2 k^2}{12m(\omega^2 - v^2 k^2)^2} \right) + \\ & + i \frac{m^2 |\omega|}{2\pi k} \theta(v^2 k^2 - \omega^2), \end{aligned} \quad (25a)$$

当 $\omega \ll vk$ 时有

$$\begin{aligned} \Pi(k, \omega) = & \frac{mp_0}{2\pi^2} \left[1 + \left(\frac{p_0}{k} - \frac{k}{4p_0} - \frac{m\omega^2}{vk^3} \right) \ln \left| \frac{2p_0 + k}{2p_0 - k} \right| - \frac{4m^2 \omega^2}{k^2(4p_0^2 - k^2)} \right] + \\ & + i \frac{m^2 |\omega|}{2\pi k} \theta(2p_0 - k). \end{aligned} \quad (25b)$$

(25)式的零级项是简并等离子体理论和电声子作用理论中熟知的^[9]。我们写出了展开式的下一项，以备计算高级自能修正时应用。从(25a)式得 $4\pi e^2 \Pi = \chi^2 = 4e^2 p_0 m / \pi$ ($\omega \ll vk$)，或者 $4\pi e^2 \Pi = -\omega_p^2 k / \omega^2$ ($\omega \gg vk$)。这里引入了德拜屏蔽波矢 χ 和电子的等离子振荡频率 $\omega_p = (4\pi e^2 Z / mV)^{1/2}$ 。由此看出，总顶角部分(22)的极点对应系统中的玻色型元激发： $\omega \ll vk$ 时是声子， $\omega \gg vk$ 时是等离子振荡。

本文中遇到的微扰论积分，对能量的极点都集中在电子和声子格林函数内。只要积分的收敛性有了保证，就可以立即完成对能量的积分。根据极点的各种分布方式引入 θ 函数的乘积，可将积分结果写成统一表达式。这些 θ 函数正好规定了剩下的动量积分限。积分(24)就是这样算出来的。本文附录中积分的计算也是如此。

总顶角部分 Γ (或 Γ_0) 有一个重要特性：如果参与相互作用的两个电子都十分靠近费米面，则它们交换的声子能量也很小，这时顶角部分中库仑作用和电声子作用两部分贡献有明显的相互抵消的趋势。正是基于这种原因，当 $|\varepsilon| \ll \omega_0$ 时，

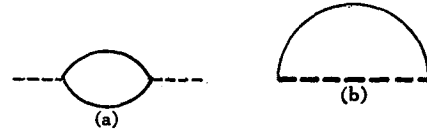


图 3

如果在电子自能[图 3(b)]中只考虑未屏蔽的 Γ_{01} 和 Γ_{02} 的贡献，它们的对数奇异性已恰好彼此消去。具体说， Γ_{01} 的贡献是熟知的

$$M_{01} = -2\lambda\mu_0 \left(1 + \frac{p_0^2 - p^2}{2pp_0} \ln \left| \frac{p + p_0}{p - p_0} \right| \right) \approx -2\lambda\mu_0 + \lambda\xi_0(p) \ln \frac{2p_0 v}{|\xi_0(p)|}. \quad (26)$$

Γ_{02} 对应的自能部分是

$$M_{02} = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p}_1 d\varepsilon_1 G^{(0)}(\mathbf{p}_1, \varepsilon_1) \Gamma_{02}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1, \varepsilon - \varepsilon_1). \quad (27)$$

在附录(A2)式中令 $K = 0$ 即得此积分。结果

$$\begin{aligned} \text{Re } M_{02} = & \frac{\lambda\omega_0}{2} \left[\ln \frac{k_D}{|p_0 - p|} \ln \left| \frac{\varepsilon - \omega_0}{\varepsilon + \omega_0} \right| + \text{sign}(p - p_0) \int_0^{|p-p_0|} \frac{dk}{k} \ln \left| \frac{\omega_0 - vk}{\omega_0 + vk} \right| + \right. \\ & \left. + \int_0^{k_D} \frac{dk}{k} \ln \left| \frac{\varepsilon - \xi_0(p-k) + \omega_0}{\varepsilon - \xi_0(p+k) - \omega_0} \right| \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

(28)式第二个积分已利用 $k \ll p_0$ 化简,并可再对 $\frac{vk}{\omega_0} \ll 1$ 展开. 第三个积分只给出化学势修正,其数量级为 $\left(\frac{Zm}{3M}\right)^{1/2} \lambda^{3/2}$,可略而不计. 将(28)与(26)合并,得到 ($|\epsilon| \ll \omega_0$, $\epsilon \approx \xi_0(p)$)

$$\text{Re}(M_{10} + M_{20}) = -\lambda \xi_0(p) \left(1 - \ln \frac{2p_0}{k_D}\right) - 2\lambda \mu_0. \quad (29)$$

这与利用重整化总顶角部分 Γ 算得的结果全同. 计算表明,直到 λ^2 项,库仑作用和电子作用的屏蔽修正都是互相抵消的[这时要用到(25a)式].

四、非对角自能部分和简并微扰论

讨论由(15)式定义的不可约自能部分,它来自非对角自能部分 \tilde{M}_{nm} . 为简明起见,先不考虑多体作用,只研究静晶格场对元激发谱的影响. 静晶格顶角在图中用“×”符号表示,它对应位势的傅里叶系数 $U(\mathbf{K}_n)$,只引起格林函数(7)中能带编号的改变. 因此本节格林函数中只写一个角标,同时将 $U(\mathbf{K}_n)$ 简记为 $U(n)$. 不可约自能部分 N_n 中的 m 级项为(图 4(a))

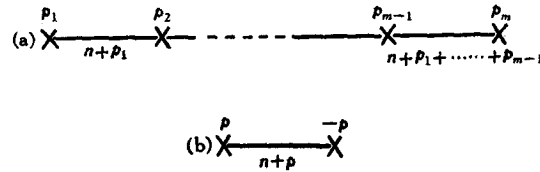


图 4

$$N_n^{(m)} = \sum'_{p_1+p_2+\dots+p_m=0} U(p_1)G_{n+p_1}^{(0)}U(p_2)\dots G_{n+p_1+\dots+p_{m-1}}^{(0)}U(p_m). \quad (30)$$

求和号上的一撇表示不取 $U(p_i)$ 中 $p_i = 0$ 的项,这是因为与等离子体理论一样, $\mathbf{K} = 0$ 的图由于电中性条件和相应的电子图相抵消. 在 \mathbf{k} 的某些方向上,(30)式中可能有些格林函数满足条件

$$\xi_n(\mathbf{k}) = \xi_{n+p_i}(\mathbf{k}) \quad i = 1, 2, \dots, l(\mathbf{k}), \quad (31)$$

因而在 $\epsilon = \xi_n(\mathbf{k})$ 附近有奇异性. 这时必须把相应的发散图全部加起来. 这些方向正好是布里渊区的面,稜和顶点(对于较低的能带,它们通常对应二,三和四度简并),我们将称之为特殊方向. 设(31)式只有一个解 p , 则如图 4(b) 所示的二级图是发散的,将全部发散图形加起来,就得到

$$G_n(\mathbf{k}, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \xi_n(\mathbf{k}) - \bar{N}_n^{(1)}(\mathbf{k}, \epsilon)}, \quad (32)$$

其中不可约“自能”部分为 ($U(-p) = U^*(p)$)

$$\bar{N}_n^{(1)}(\mathbf{k}, \epsilon) = |U(p)|^2 G_{n+p}^{(0)}(\mathbf{k}, \epsilon), \quad (33)$$

$\bar{N}_n^{(1)}$ 上的横线表示这是特殊方向上的“自能”部分,而右上角标则强调它给出正比于 λ 的一次修正项 [非特殊方向上的 N_n 至少从 λ^2 开始,见(15)式]. 决定元激发谱的方程 $\epsilon - \xi_n(\mathbf{k}) - \text{Re} \bar{N}_n^{(1)}(\mathbf{k}, \epsilon) = 0$ 乃是

$$\varepsilon - \xi_n(\mathbf{k}) - \mathcal{P} \frac{|U(p)|^2}{\varepsilon - \xi_{n+p}(\mathbf{k})} = 0, \quad (34)$$

主值符号 \mathcal{P} 保证了乘法运算是合理的,从而得到熟知的二度简并久期方程。

考虑 $l(\mathbf{k}) = 2$ 的情形。这时不可约“自能”部分来自四个无穷序列的求和。这四个序列示于图 5 中,求和结果

$$\bar{N}_n^{(1)} = \frac{|U(p_1)|^2 G_{n+p_1}^{(0)} + |U(p_1)|^2 G_{n+p_2}^{(0)} + 2|U(p_1)U(p_1-p_2)U(p_2)| G_{n+p_1}^{(0)} G_{n+p_2}^{(0)}}{1 - |U(p_1-p_2)|^2 G_{n+p_1}^{(0)} G_{n+p_2}^{(0)}}.$$

不难验证,由此得到的极点方程,就是三度简并久期行列式的展开式。

当 $l(\mathbf{k}) > 1$ 时,求最发散诸不可约“自能”部分和,得出能谱的一级修正,这是因为格林函数的“危险”分母,抵消了相应的位势。如果要计算该特殊方向上静晶格场的二级修正,则除了应将二级不可约“自能”部分考虑无遗外,还应当计入一切有一个不“危险”因子的高级图。

$$\begin{aligned} & \overset{p_1}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} + \overset{p_1}{\times} \text{---} \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} + \dots \\ & \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_2}{\times} + \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} \text{---} \overset{-p_2}{\times} + \dots \\ & \overset{p_1}{\times} \text{---} \overset{p_2-p_1}{\times} \text{---} \overset{-p_2}{\times} + \overset{p_1}{\times} \text{---} \overset{p_2-p_1}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{p_2-p_1}{\times} \text{---} \overset{-p_2}{\times} + \dots \\ & \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} + \overset{p_2}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{p_2-p_1}{\times} \text{---} \overset{p_1-p_2}{\times} \text{---} \overset{-p_1}{\times} + \dots \end{aligned}$$

图 5

以上加图过程完全等价于能带论自由电子近似中的简并微扰论。用格林函数语言的好处,是便于同时考虑多体作用。根据第二节所得结果,这时应将以上诸式中的 $G_n^{(0)}$ 换成 \hat{G}_n ,而 $U(n-m)$ 代以非对角自能部分 $\tilde{M}_{n,m}$ 。

非对角自能部分还可能来自与多体作用有关的项,两个最简单的这种项示于图 6(a) 和 (b) 中。图 6(a) (相互作用线上的小圈代表“非对角”性:从 \mathbf{k} 变到 $\mathbf{k} - \mathbf{K}_p$) 对应表达式

$$\tilde{M}(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{K}_p; \varepsilon) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p}_1 d\varepsilon_1 G^{(0)}(\mathbf{p}_1, \varepsilon_1) \Gamma_{02}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{K}_p, \varepsilon - \varepsilon_1). \quad (35)$$



图 6

与(27)式不同,此积分已无对数奇异性。它的数量级是 $\lambda \xi_0 \sigma$, 其中 $\sigma = \left(1 - \frac{K}{2p}\right)$ 是反映费米面接近布里渊区边界程度的小几何参量(估计见附录)。图 6(b) 的数量级为 $\lambda^2 \xi_0(p)$ 。由于 $\xi_0(p)$ 本身正比于 $(p - p_0)$, 而 $U(\mathbf{k}_p) \sim \lambda \mu_0$, 这两个图都可以略而不计。这就证实了第二节中的论断(16)。

同理,对角自能部分中与静晶格势有关的最简图形[图 6(c) 和 (d)], 在我们所取的近似下也应忽略。

综上所述,如果我们关心的是二度简并特殊方向 \mathbf{K}_n 附近第 m 支电子能谱的变化,则准确到二级小量时,除了来自各向异性多体作用的 $M_m(\mathbf{k}) = M_0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)$ [见(29)式]以

外,还应在(15)式中保留以下諸項:

$$\bar{N}_m^{(2)} = \tilde{M}_{mn} \hat{G}_n \tilde{M}_{nm} + \Sigma_{mm} + \tilde{M}_{mn} \hat{G}_n \tilde{\Sigma}_{nm} + \Sigma_{mn} \hat{G}_n \tilde{M}_{nm} + \tilde{M}_{mn} \hat{G}_n \Sigma_{nm} \hat{G}_n \tilde{M}_{nm}, \quad (36)$$

其中为不含“危险”分母的求和引入了符号

$$\Sigma_{pq} = \sum_{\substack{l \neq n \\ l \neq m}} \tilde{M}_{pl} \hat{G}_l \tilde{M}_{lq} \quad (p, q = m, n). \quad (37)$$

在我們所取的模型和近似下, $\tilde{M}_{mn} = \tilde{M}_{nm}$, $\Sigma_{pq} = \Sigma_{qp}$, 而且还应进一步取

$$\hat{G}_l \approx G_l^{(0)} |_{\epsilon = \epsilon_m(\frac{K_n}{2})}.$$

极点方程

$$(\hat{G}_m)^{-1} - \Sigma_{mm} - \hat{G}_n (\tilde{M}_{mn}^2 + 2\tilde{M}_{mn} \Sigma_{nm}) - \hat{G}_n^2 \tilde{M}_{mn} \Sigma_{nm} = 0 \quad (38)$$

中出现了 \hat{G}_n^2 项, 使它成为 ϵ 的三次方程. 为求得原来两支解的修正, 应利用准确到一次项的极点方程 $(\hat{G}_m)^{-1} = \hat{G}_n \tilde{M}_{mn}^2$ 将其降阶. 最終結果

$$\begin{aligned} \epsilon = \frac{1}{2} \{ & \epsilon_m + \epsilon_n + M_m + M_n + \Sigma_{mm} + \Sigma_{nn} \pm \\ & \pm [(\epsilon_m + M_m + \Sigma_{mm} - \epsilon_n - M_n - \Sigma_{nn})^2 + \\ & + 4(\tilde{M}_{mn}^2 + 2\tilde{M}_{mn} \Sigma_{nm} + \Sigma_{mn} \Sigma_{nm})]^{1/2} \}. \end{aligned} \quad (39)$$

其它方向上的极点方程, 亦可仿照以上方式写出.

五、立方晶体电子能譜的数值解

我們在第二至四节中, 原則上解决了用微扰論計算各向异性高压物质电子能譜的問題. 然而这样得到的定元激发譜的方程中还包含着参数 μ , 它要由体积归一条件定出. 为此須选取一定的几何模型, 完成体积积分. 这正是实际計算中的困难之处. 为了清楚地看出多体作用和靜晶格場对电子能譜的影响, 我們以 $Z = 1$ 的立方晶体为例, 具体运用以上諸节中所得公式, 直到算出数值結果.

采用 Ziman^[10] 討論貴金属輸运性质时引入的几何模型, 只考虑距布里渊区边界最近的 q 个等价特殊方向附近的能譜(对于面心立方晶体 $q = 8$, 体心立方晶体 $q = 12$). 設特殊方向为 \mathbf{K}_n . 引入以 p_0 为单位的无網量和以 \mathbf{K}_n 为軸的柱坐标

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= p_0(\xi, \zeta, Z), & \rho^2 &= \xi^2 + \zeta^2; \\ \mathbf{K}_n &= \alpha p_0 \frac{\mathbf{n}}{n}, & \alpha &= n \left(\frac{8\pi}{3s} \right)^{1/3}; \\ \epsilon &= \frac{\epsilon}{\mu_0}. \end{aligned}$$

无網矢量 \mathbf{n} 代表三个整数 (n_1, n_2, n_3) , 其长度記为 $n = |\mathbf{n}|$. s 为每个晶格元胞中的原子数目. $\alpha/2$ 乃是布里渊区中心到最近表面的无網距离.

注意(39)式中 M_n 与(29)式中 M_0 的关系为 $M_n(\mathbf{k}) = M_0(\mathbf{k} - \mathbf{K}_n)$, 将(39)式中 Σ_{pq} , \tilde{M}_{mn} 諸量具体化, 并換成无網量, 可以将含有未知量 μ 的元激发譜写成(取能量較低的那支解)

$$\epsilon + \frac{\mu}{\mu_0} = (1 - \lambda\beta)\rho^2 + f(x), \quad (40)$$

其中

$$f(z) = (1 - \lambda\beta) \left[\left(\frac{\alpha}{2} - z \right)^2 + \left(\frac{\alpha}{2} \right)^2 - \alpha \sqrt{\left(\frac{\alpha}{2} - z \right)^2 + \Lambda^2 (1 + \lambda\beta)^2 + \frac{2}{\alpha} n^6 \Lambda^3 S_2} \right] - n^6 \Lambda^2 S_1 - \lambda(2 - \beta), \quad (41)$$

$$\Lambda = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{\alpha} \right)^3 \lambda, \quad \beta = 1 - \frac{2}{3} \ln 2.$$

(41)式中还有两个晶格和

$$S_1 = \sum_{\mathbf{l} \neq 0, \mathbf{n}} \frac{1}{l^4 (l^2 - \mathbf{l} \cdot \mathbf{n})},$$

$$S_2 = \sum_{\mathbf{l} \neq 0, \mathbf{n}} \frac{1}{l^2 (\mathbf{l} - \mathbf{n})^2 (l^2 - \mathbf{l} \cdot \mathbf{n})},$$

式中对 \mathbf{l} 的求和方式由晶格对称决定。

在(40)式中令 $\epsilon = 0$, 就得到准粒子费米面的方程。为了完成体积归一, 我们将整个立体角分为 q 份, 沿每个等价特殊方向作圆锥。设圆锥顶夹角为 2θ , 则 $\cos \theta = 1 - \frac{2}{q}$, 圆锥面方程为

$$\rho^2 = \operatorname{tg}^2 \theta x^2.$$

图 7

要求圆锥内体积等于自由粒子费米球体积的 $1/q$, 得体积归一条件

$$\left. \begin{aligned} \frac{4}{q} &= \operatorname{tg}^2 \theta x^3 + (1 + \lambda\beta) \int_x^{y^*} \left(\frac{\mu}{\mu_0} - f(z) \right) dz, \\ y^* &= \min \left\{ y, \frac{\alpha}{2} \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

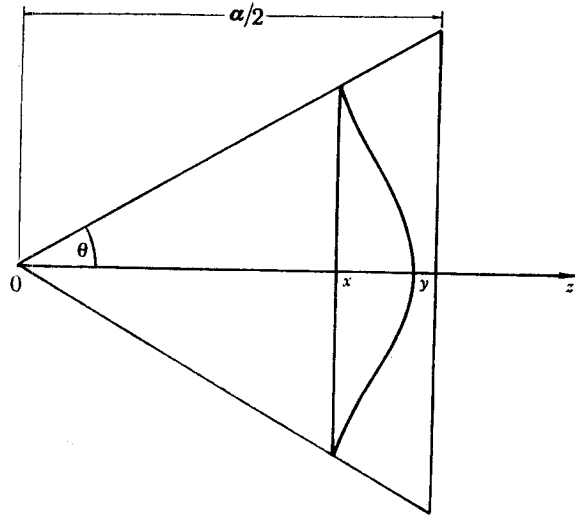
上式中 x, y 的几何意义见图 7, 其定义为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mu}{\mu_0} &= (1 - \lambda\beta) \operatorname{tg}^2 \theta x^2 + f(x), \\ \frac{\mu}{\mu_0} &= f(y) \quad \left(y < \frac{\alpha}{2} \right). \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

(42)和(43)式是决定 x, y 和 μ/μ_0 的完备方程组。这个超越方程组最好用数值方法求解, 因为用小参数展开所得的结果过于累赘, 反而不如数值解清楚。

作为微分物理量的例子, 可以考虑准粒子费米面上的态密度。注意到沿特殊方向的轴对称, 以自由粒子态密度 $V m P_0 / \pi^2$ 为单位的无纲态密度可表示为

$$n = \frac{q}{2} \int_x^{y^*} \frac{dz}{\left| \frac{\partial \epsilon}{\partial \rho^2} \right|} = \frac{q}{2} (1 + \lambda\beta) (y^* - x), \quad (44)$$



态密度的最終結果只准确到一級小量。这是因为多体作用中我們未計入的高次項如 $\lambda^2 \xi_0(p)$ 者,微分后也給出二級貢獻。

我們利用 104 型电子数字計算机將 $\mu/\mu_0, x, y, n$ 等量作为 λ 的函数求出, 同时算出了对应不同 λ 值的費米面族。計算公式中的各种参数完全由晶格对称决定, 它們的数值列如下表:

	面心立方	体心立方
S	4	2
n	$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$
α	2.216	2.280
S_1	0.4610	2.003
S_2	0.3196	1.430

数值計算可借助簡單的牛頓迭代程序完成, 初始值取 $\lambda = 0$ 时的自由电子参数。唯一須注意之处, 是随着 λ 增大, 費米面將接触布里淵区边界; $y = \alpha/2$ 是方程組的一个奇点, 計算时須适当跳过此点, 才能保証迭代过程的收敛。

图 8—图 10 中給出了部分計算結果。面心立方高压物质对应不同 λ 值的費米面族示于图 8 中(只画出了一个錐面內的截迹, 见图 7), 橫軸下是考虑了多体作用的结果, 而橫軸上是只計入靜晶格势的结果。这里应注意費米面与布里淵区边界的接触, 在实际金属中

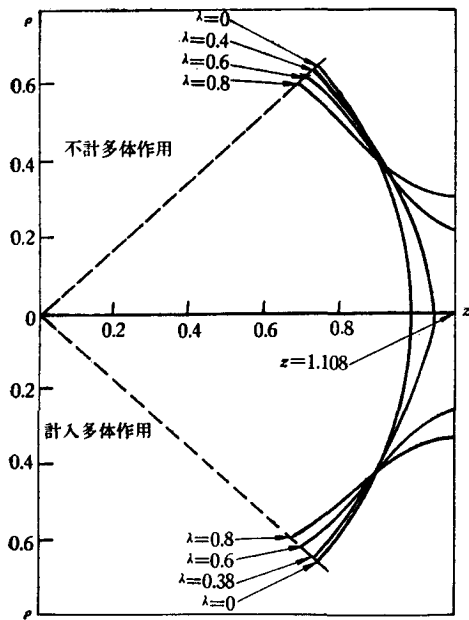


图 8 面心立方高压物质的費米面

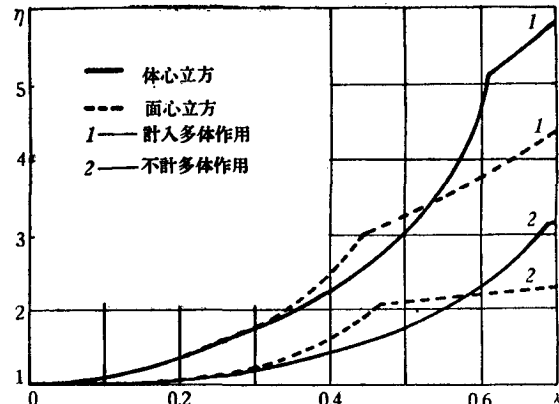


图 9 費米面上的态密度

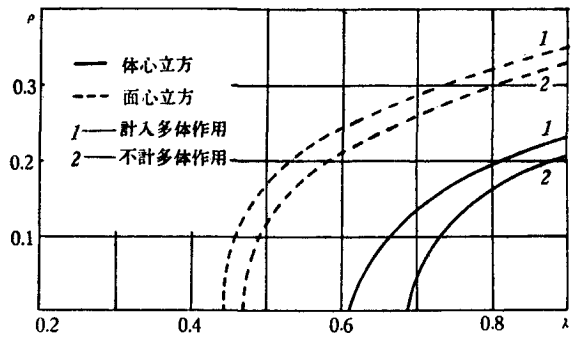


图 10 費米面与布里淵区接触部分的半径

这导致复连通的开放费米面。多体作用使接触发生在较小的 λ 值处。对体心立方晶体也得到了类似的结果,但接触发生得晚得多,分别在 $\lambda = 0.61$ (有多体作用)和 $\lambda = 0.69$ (无多体作用)处。为了更细致地反映各向异性情形下两类物理量(即引言中提到的几何量和微分量)受多体作用影响的差异,我们画出了两种立方晶体费米面上的态密度与 λ 的关系(图 9),以及费米面在布里渊区表面上截出部分(准确到二级小量时为圆形)的半径 ρ 与 λ 的关系。显而易见,各向异性情形下多体作用既改变几何尺寸,又使态密度增加,但对后者影响更大。这正与预期相符。

虽然与实际金属比较,不是本文的任务。我们仍不妨在这里列举个别立方金属的实验结果。从面心立方铜、银、金的晶格常数算得的 λ 值分别为 0.441, 0.501, 和 0.499, 由 de Haas-van Alphen 效应^[11]测得的接触区域半径分别等于 0.199, 0.137 和 0.177。体心立方金属(Li, Na, K 的 λ 值分别为 0.534, 0.654, 0.823)的实验结果很少,但已知数据都说明费米面未与布里渊区接触。

只有考虑了反映各种金属个性的晶格位势,才能与实验作直接比较。但从本节的定量结果中可以得出一个有益的定性结论:决定金属费米面几何学的首先是晶格对称,其次是晶格位势,再次是多体作用,而对于微分物理量,看来多体作用和晶格位势至少是同样重要的。

工作过程中多次与于淦、霍裕平、陈春先等同志讨论。作者之一(郝柏林)曾向吉林大学李岳生同志请教过有关程序设计的知识,并在工作初期与 A. A. Абрикосов 进行过有益的讨论。我们一并在此致谢。

附 录

我们来估计非对角自能部分(35),并借以演示此类积分的计算。讨论积分

$$\tilde{M}(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{K}; \varepsilon) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{p}_1 d\varepsilon_1 G^{(0)}(\mathbf{p}_1, \varepsilon_1) \Gamma_{\omega}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{K}, \varepsilon - \varepsilon_1). \quad (\text{A.1})$$

对于任意的 \mathbf{p} , 这个积分十分复杂。为了估计其贡献,我们取 \mathbf{p} 平行 \mathbf{K} , \mathbf{p} 的方向稍微偏离 \mathbf{K} 时, \tilde{M} 不会发生数量级的改变。在 (A.1) 中完成对能量的积分;再引入新变量

$$k = |\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}| \text{ 以代替 } \mathbf{p}_1 \text{ 和 } \mathbf{p} \text{ 的夹角变量,同时令 } \xi_1 = \frac{p_1^2}{2m} - \mu_0, \text{ 得}$$

$$\begin{aligned} \tilde{M} = & \frac{\lambda\omega_0 p_0}{2p} \int_0^{k_D} \frac{dk}{k} \int_{\xi_0(p-k)}^{\xi_0(p+k)} d\xi_1 \frac{\sigma k^2 - \frac{Km}{p}(\xi_0(p) - \xi_1)}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2 - \frac{2mK}{p}(\xi_0(p) - \xi_1)} \times \\ & \times \left[\frac{\theta(\xi_1)}{\varepsilon - \xi_1 - \omega_0 + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_1)}{\varepsilon - \xi_1 + \omega_0 - i\delta} \right]. \quad (\text{A.2}) \end{aligned}$$

(A.2) 中引入了几何参量 $\sigma = 1 - \frac{K}{2p}$. θ 函数的定义与正文(24)式中相同。

(A.2) 式对 ξ_1 的积分中重要的分别是 $\xi_1 = \varepsilon \pm \omega_0$ 附近。我们只关心积分在 $p \approx p_0$, $\varepsilon \approx \xi_0(p)$ 附近的值。注意

$$\frac{2m}{pk} \omega_0 \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} \lambda^{1/2} \ll 1,$$

因此有

$$\frac{\sigma k^2 - \frac{Km}{p}(\xi_0(p) - \varepsilon \pm \omega_0)}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2 - \frac{2mK}{p}(\xi_0(p) - \varepsilon \pm \omega_0)} \approx \frac{\sigma k^2}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2},$$

于是从积分下分出因子 σ , 则

$$\tilde{M} \simeq \frac{\lambda\sigma\omega_0}{2} \int_0^{k_D} \frac{k dk}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2} \int_{\xi_0(p-k)}^{\xi_0(p+k)} d\xi_1 \left[\frac{\theta(\xi_1)}{\varepsilon - \xi_1 - \omega_0 + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_1)}{\varepsilon - \xi_1 + \omega_0 - i\delta} \right].$$

根据 θ 函数的要求确定出 $p > p_0$, 及 $p < p_0$ 时的积分限完成对 ξ_1 的积分时, 须注意

$$\frac{1}{x \pm i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x),$$

主值符号 \mathcal{P} 要求在积分结果的诸对数中取绝对值。省略掉高次项后得

$$\begin{aligned} \text{Re } \tilde{M} \simeq \frac{\lambda\sigma\omega_0}{2} \left[\ln \left| \frac{\varepsilon - \omega_0}{\varepsilon + \omega_0} \right| \int_{|p-p_0|}^{k_D} \frac{k dk}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2} + \right. \\ \left. + \text{sign}(p - p_0) \int_0^{|p-p_0|} \frac{k dk}{(2\sigma - 1)k^2 + K^2} \ln \left| \frac{\omega_0 - vk}{\omega_0 + vk} \right| \right]. \end{aligned}$$

不必继续计算, 即知 $\varepsilon \ll \omega_0$ 时 $\text{Re } \tilde{M} \sim \lambda\sigma\xi_0(p)$.

参 考 文 献

- [1] Harrison, W. A., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1190.
- [2] Luttinger, M. J., *Phys. Rev.*, **119** (1960), 1153.
- [3] Harrison, W. A., *Phys. Rev.*, **131** (1963), 2433.
- [4] Элиашберг, Г. М., *ЖЭТФ*, **42** (1962), 1658.
- [5] Киржниц, Д. А., *ЖЭТФ*, **38** (1960), 501.
- [6] Абрикосов, А. А., *ЖЭТФ*, **39** (1960), 1797.
- [7] Абрикосов, А. А., *ЖЭТФ*, **41** (1961), 569.
- [8] Чэнь Чунь-сянь (陈春先), Чжоу Си-пинь (周世勋), *ЖЭТФ*, **34** (1958), 1566.
- [9] А. А. 阿布里柯索夫, Л. П. 戈尔可夫, И. Е. 加洛辛斯基, “统计物理学中的量子场论方法”, 第196, 212页, 科学出版社, 1963.
- [10] Ziman, J. M., *Advances in Phys.*, **10** (1961), 1.
- [11] Shoenberg, D., *Phil. Trans. Roy. Soc. (London)*, **A255** (1962), No. 1052, 85.

ELECTRONIC ENERGY SPECTRUM OF ANISOTROPIC HIGHLY COMPRESSED MATTER

HAO BAI-LIN HO ZHUNG-RU

(*Academia Sinica*)

ABSTRACT

In this article, the highly compressed matter has been considered as a model for simple anisotropic metals. A perturbation method was set up to determine the energy spectrum of a Fermi system in a periodic field. By taking account of the static potential of ion lattice, the Coulomb interaction and interaction via phonon fields, the spectrum of single particle excitations was studied. Detailed calculations of the Fermi surfaces and the density of states have been carried out for f.c.c. and b.c.c. lattices, with the numerical results presented in Fig. 8—Fig. 10.