

## О ЗНАКЕ СТАТИЧЕСКОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ

*О.В. Долгов, Е.Г. Максимов*

Показано, что статическая диэлектрическая проницаемость  $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$  простых металлов может иметь отрицательные значения. Это обстоятельство связано с большим отрицательным по знаку вкладом точечных ионов в поляризуемость металла.

1. Как известно [1], фурье-компонента взаимодействия двух зарядов в среде может быть выражена с помощью диэлектрической проницаемости этой среды  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$

$$V(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \quad (1)$$

При некоторых предположениях (см. подробнее монографию [1]) эффективное межэлектронное взаимодействие в металлах также может быть записано в виде (1). При этом  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$  — полная диэлектрическая проницаемость металла, включающая в себя поляризуемость как электронной так и ионной подсистем.

Полное межэлектронное взаимодействие складывается из прямого кулоновского отталкивания с константой  $\mu$  и эффективного притяжения, обусловленного обменом фононами (экситонами) с константой связи  $\lambda$ . В работах [2, 3] было показано, что между константами  $\mu$  и  $\lambda$  существует простая связь

$$\mu - \lambda = N(0) \int_0^{2k_F} dq / q \epsilon(\mathbf{q}, \omega). \quad (2)$$

2. От эффективного межэлектронного взаимодействия существенным образом зависят многие свойства металлов и, в частности, критическая температура сверхпроводящего перехода  $T_c$ .

В работе [2] были получены формулы, связывающие значения  $T_c$  с константами  $\mu$  и  $\lambda$ . Было показано [2, 3], что возникают очень существенные ограничения на возможные максимальные значения  $T_c$ , если в металле кулоновская константа  $\mu$  больше чем  $\lambda$ . Как видно из форму-

лы (2), соотношение между величинами  $\mu$  и  $\lambda$  полностью определяется знаком статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$ .

3. Вопрос о знаке статической диэлектрической проницаемости среды обсуждался неоднократно [3 - 5]. В частности, в книге Пайнса и Нозьера [4] имеется утверждение, что условие  $\epsilon(\mathbf{q}, 0) > 0$  является критерием устойчивости системы относительно образования волн плотности заряда (ВЗП). В работе Киржница [5] было однако показано, что фактическим условием устойчивости системы относительно образования ВЗП является следующее:  $\epsilon(\mathbf{q}, 0) > 1$  или  $\epsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$ . Таким образом была доказана возможность существования систем с отрицательной диэлектрической проницаемостью. После этой работы [5], оставался, однако, открытым вопрос о реальном существовании таких сред. В этой статье мы покажем, что системы с отрицательной диэлектрической проницаемостью реально существуют в природе и не являются сколь-нибудь экзотическими. В частности, будет показано, что примером системы, в которой  $\epsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$ , могут быть простые металлы.

3. Обратная диэлектрическая проницаемость металла  $\epsilon^{-1}(x, x')$ , как показано в работах [1, 6], может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(x, x_1) = & \epsilon_{el}^{-1}(x, x_1) + \sum_{n, n'} \int dx_2 dx_3 \epsilon_{el}^{-1}(x, x_2) \nabla_{\alpha} \Phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_n^{\circ}) \times \\ & \times D_{nn'}^{\alpha\beta}(t_2 - t_3) \nabla_{\beta} \Phi(\mathbf{r}_3 - \mathbf{R}_{n'}^{\circ}) \frac{\nabla_{\alpha}^2 \mathbf{r}_3}{4\pi e^2} \epsilon_{el}^{-1}(x_3, x_1). \end{aligned} \quad (3)$$

В этой формуле  $\epsilon_{el}^{-1}(x, x')$  - обратная диэлектрическая проницаемость электронов в жесткой решетке,  $\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^{\circ})$  - псевдопотенциал взаимодействия электрона с ионом в точке  $\mathbf{R}_n^{\circ}$ ,  $D_{nn'}^{\alpha\beta}(t)$  - функция Грина ионных смещений.

При переходе в импульсное пространство функция  $\epsilon^{-1}(x, x')$  превращается в матрицу  $\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega)$  по векторам обратной решетки  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}'$ . В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением диагонального матричного элемента  $\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, \omega)$ . Как известно [7], макроскопическая диэлектрическая проницаемость системы  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$  выражается через функцию  $\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, \omega)$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1/\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, \omega). \quad (4)$$

4. Для простых металлов можно вообще пренебречь [1] недиагональными матричными элементами  $\epsilon_{el}^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega)$  с  $\mathbf{K} \neq \mathbf{K}' \neq 0$ . В этом случае, переходя к импульсному представлению, можно выразить макроскопическую диэлектрическую проницаемость для направлений высокой симметрии в следующем виде:

$$1/\epsilon(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)} \left[ 1 - \frac{\Omega_{pl}^2}{\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) \omega_{||}^2(\mathbf{q})} \left( \frac{\Phi(\mathbf{q})}{V_c(\mathbf{q})} \right)^2 \right], \quad (5)$$

где  $\Omega_{pl} = \sqrt{4\pi Z^2 e^2 N/M}$  — ионная плазменная частота,  $\omega_{\parallel}(\mathbf{q})$  — частота продольных фононов,  $V_c(\mathbf{q}) = 4\pi Z e^2/q^2$  — кулоновский ионный потенциал.

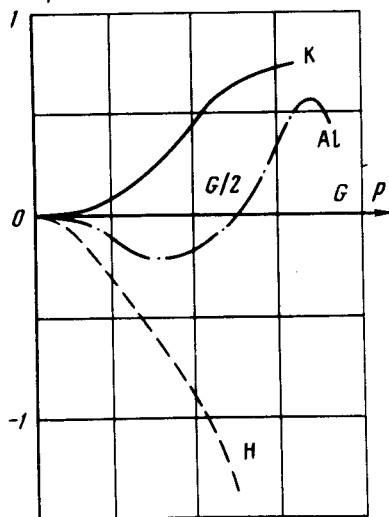
В изотропной бесструктурной модели "желе", где  $\Phi(\mathbf{q}) = V_c(\mathbf{q})$  и  $\omega_{\parallel}^2(\mathbf{q}) = \Omega_{pl}^2/\epsilon_{el}(\mathbf{q},0)$ , происходит полная компенсация электронного и ионного вкладов в эффективное взаимодействие, и  $1/\epsilon(\mathbf{q},0) = 0$  при всех импульсах  $\mathbf{q}$ . Совершенно иная ситуация возникает в кристалле, где кроме продольных существуют и поперечные колебания ионов.

В частности, для кулоновской системы, (например металлического водорода), где  $V_c(\mathbf{q}) \equiv \Phi(\mathbf{q})$ , можно написать правило сумм

$$\omega_{\parallel}^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_{pl}^2}{\epsilon_{el}}(\mathbf{q},0) - \sum_{\lambda_{\perp}} \omega_{\perp}^2(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} \left[ \frac{1}{\epsilon_{el}}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) - \frac{1}{\epsilon_{el}}(\mathbf{K}, 0) \right] \quad (6)$$

Отсюда видно, что в кристалле уже вполне возможна ситуация, что  $\omega_{\parallel}^2(\mathbf{q}) < \Omega_{pl}^2/\epsilon_{el}(\mathbf{q},0)$ . В этом случае очевидно из формулы (5), что макроскопическая диэлектрическая проницаемость такого кристалла будет отрицательной. Расчеты  $\epsilon(\mathbf{q},0)$  для металлического водорода с использованием вычислений  $\omega_{\lambda}(\mathbf{q})$ , проведенных в работе [8] показаны на рисунке. Видно, что в металлическом водороде  $\epsilon(\mathbf{q},0)$  отрицательна при всех значениях  $\mathbf{q}$ .

$\epsilon^{-1}(\rho,0)$



Полная обратная макроскопическая диэлектрическая проницаемость для Al, K и металлического водорода ( $r_s = 1$ , ГЦК решетка).  $\rho$  — импульс в расширенной зоне Бриллюэна в направлении  $(1,0,0)$  (G — ближайший вектор обратной решетки в этом направлении)

Для простых металлов, где электрон-ионный псевдопотенциал не является чисто кулоновским возможны различные ситуации в зависимости от соотношения между  $\Phi(\mathbf{q})$  и  $V_c(\mathbf{q})$ . Расчеты макроскопической диэлектрической проницаемости для K и Al с использованием реальных фононных спектров и псевдопотенциалов этих металлов [9], приведены тоже на рисунке.

Таким образом видно, что  $\epsilon(\mathbf{q},0)$  в простых металлах может иметь любой знак в том числе и быть отрицательной. Это обстоятельство, в основном, обусловлено сильной поляризуемостью точечных ионов. Мы не будем здесь касаться вопросов, связанных с влиянием отрицательных  $\epsilon(\mathbf{q},0)$  на сверхпроводимость металла.

В заключение авторы искренне благодарны Д.А.Киржницу и В.Л.Гинзбургу за интерес к работе и помощь.

Физический институт им. П.Н.Лебедева  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
24 марта 1978 г.

### Литература

- [1] "Проблема высокотемпературной сверхпроводимости" под ред. В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница. М., изд. Наука, 1977.
  - [2] Д.А.Киржниц, Е.Г.Максимов, Д.И.Хомский. Препринт ФИАН, 108, 1970
  - [3] M.L.Cohen, P.W.Anderson. "Superconductivity of  $d$ - and  $f$ -Band Metals" AIP Conference Rochester 1971, New York 1972, p.17.
  - [4] Д.Пайнс, Ф.Нозьер. "Теория квантовых жидкостей", М., изд.Мир, 1967.
  - [5] Д.А.Киржниц. УФН, 119, 357, 1976.
  - [6] А.Е.Каракозов, Е.Г.Максимов. ЖЭТФ, 74, 681, 1978
  - [7] Ф.Платцман, П.Вольф. Волны и взаимодействия в плазме твердого тела, М., изд. Мир, 1975.
  - [8] C. Vesck, D.Straus. Helv. Phys. Acta, 48, 655, 1975.
  - [9] Е.Г.Бровман, Ю.М.Каган. УФН, 112, 369, 1974.
-