1976 г. Июнь *Том 119, вып. 2*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

537.226.2 (018)

ВСЕГДА ЛИ СПРАВЕДЛИВЫ СООТНОШЕНИЯ КРАМЕРСА—КРОНИГА ДЛЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ВЕЩЕСТВА?

Д. А. Киржниц

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ

На вопрос, вынесенный в заголовок этой статьи, в большинстве руководств по макроскопической электродинамике дается безоговорочно положительный ответ. Однако действительное положение вещей оказывается существенно более сложным. Правильный ответ на поставленный вопрос зависит от того, для какой именно величины (самой диэлектрической проницаемости (сокращенно — ДП) или обратной ей величины) и для какого диапазона длин волн записываются соотношения Крамерса — Кронига (см. [1-3]).

Важность обсуждаемого вопроса связана с тем, что ДП относится к числу фундаментальных характеристик систем с кулоновским взаимодействием, представляя собой концентрированный источник информации о внутренних свойствах системы и результатах воздействия на нее различного рода внешних агентов (см. [1, 4, 5]). Микроскопическое вычисление ДП составляет задачу исключительной трудности, поддающуюся решению лишь в простейших случаях. Поэтому значительная роль в теории конденсированных сред и плазмы принадлежит общим ограничениям на величину ДП, которые относятся к ее аналитическим свойствам, допустимым пределам изменения и т. п. и выводятся непосредственно из общих принципов (причинность, устойчивость, положительность вероятности). Важнейшим примером таких ограничений и служат соотношения Крамерса — Кронига вместе с вытекающими из них следствиями.

Одному из таких следствий, относящемуся к вопросу о допустимом знаке статической ДП (и одновременно о допустимом знаке статического

© Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», «Успехи физических наук», 1976 г.

взаимодействия между электронами) в этой статье уделено особое внимание. Рассматриваемые ниже приложения к проблеме радикального повышения критической температуры сверхпроводящего перехода показывают, что вопрос о справедливости соотношений Крамерса — Кронига далеко выходит за рамки чисто академических, а представляет немаловажный практический интерес.

Вместе с тем рассмотрение этого вопроса имеет и определенную методическую ценность, наглядно показывая, что для доказательства справедливости какого-либо соотношения между физическими величинами необходим анализ реальной осуществимости мысленных экспериментов, лежащих в основе определения таких величин.

2. СООТНОШЕНИЯ КРАМЕРСА — КРОНИГА

Начнем с определения ДП $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$, понимая под этой величиной продольную ДП однородной и изотропной системы *). Подвергнем последнюю воздействию со стороны внешнего источника, имеющего фурье-компоненту плотности заряда $\delta\rho_e(\omega, \mathbf{k})$. В результате в системе возникает индуцированный заряд $\delta\rho(\omega, \mathbf{k})$, составляющий в совокупности с $\delta\rho_e$ полное изменение заряда $\delta\rho_t = \delta\rho_e + \delta\rho$. Соответствующие значения индукции и напряженности поля определяются уравнениями Максвелла

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\delta\rho_e, \qquad \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\delta\rho_t.$$

На языке введенных величин ДП определяется любым из соотношений

$$\begin{aligned} \delta\rho_e(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon(\omega, \mathbf{k})\, \delta\rho_t(\omega, \mathbf{k}), \\ \mathbf{D}(\omega, \mathbf{k}) &= \varepsilon(\omega, \mathbf{k})\, \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}). \end{aligned} \tag{1}$$

Уточним понятие внешнего источника, к которому, по определению, относятся заряды, не входящие в состав рассматриваемой системы. Это прежде всего заряды, расположенные вне системы (например, заряды на обкладках конденсатора, между которыми находится она сама; см. рис. 1). Таким способом можно создать $\delta\rho_e$ или $\mathbf{D}$ лишь с $k \sim L^{-1} \to 0$, где L — макроскопически большой размер системы. Поэтому внешние источники рассматриваемого типа связаны лишь с длинноволновым пределом ДП $\varepsilon(\omega, 0)$.

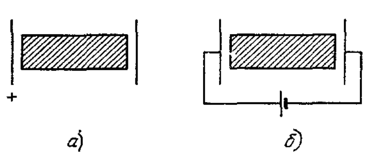

Рис. 1.

Для реализации случая $\mathbf{k} \neq 0$ необходимо поместить внешние источники внутрь самой системы ($\delta\rho_e \sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})$); их часто называют также сторонними источниками. При этом нужно зафиксировать состояние этих источников, приписав им, например, большую массу и, тем самым, исключив обратное влияние на них со стороны самой системы. В противном случае мы потеряли бы возможность различать внутренние и внешние заряды и дело свелось бы, по существу, к рассмотрению новой, более сложной системы.

Диэлектрическая проницаемость описывает реакцию (отклик) системы на внешние воздействия. Функцией отклика называется величина, устанавливающая связь между воздействием на систему и его результатом.

$$(\text{результат воздействия}) = (\text{функция отклика}) \times (\text{воздействие}). \tag{2}$$

Эта связь носит причинный характер («причина всегда предшествует по времени следствию»), причем роль следствия играет левая часть (2),

*) Впрочем, в дальнейшем будет сделан ряд замечаний, относящихся к поперечной ДП, а также к кристаллическим средам.

а причины — второй сомножитель правой части. Отсюда вытекает (см., например, [1]), что функция отклика обязательно удовлетворяет соотношению типа соотношения Крамерса — Кронига. Поэтому цель последующих рассуждений будет состоять в выяснении вопроса, какая именно из величин (ε или $1/\varepsilon$) и при каких условиях может считаться функцией отклика.

Смысл понятия внешнего воздействия, входящего в уравнение (2), также нуждается в уточнении. По определению, им называют такое воздействие на систему, которое не зависит от ее состояния и которое можно варьировать, включать и выключать по своему произволу; именно такими свойствами обязано обладать событие-причина (подробнее см. [6]). Существенно, что этому определению удовлетворяет далеко не всякое воздействие, осуществляемое внешним источником.

Под такое определение во всяком случае подпадает воздействие, исходящее от внешнего источника второго из числа рассмотренных выше типа (источник, расположенный внутри системы и свободный от ее обратного влияния). В этом случае воздействие связано с величинами $\delta\rho_e$, $\mathbf{D}$, а его результат — с $\delta\rho_t$, $\mathbf{E}$. Сравнивая (1) с (2), мы видим, что функцией отклика при всех условиях можно считать величину $1/\varepsilon\ (\omega, \mathbf{k})$. Соответственно, при всех значениях $\mathbf{k}$ *) будет справедливо соотношение Крамерса — Кронига для обратной ДП [1]:

$$\varepsilon^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = 1 + \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \frac{d\omega'^2\, \mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(\omega', \mathbf{k})}{\omega'^2 - \omega^2 - i\delta}. \tag{3}$$

Существенно, что в этих рассуждениях нельзя поменять местами $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ и соответственно считать функцией отклика саму величину ДП. Дело в том, что напряженность нельзя считать воздействием (она зависит от состояния системы), а индукцию — характеристикой результата воздействия (она, наоборот, не зависит от состояния системы).

Что же касается внешнего источника, находящегося вне системы, то он осуществляет внешнее воздействие лишь при условии, что обкладки конденсатора разомкнуты и мы управляем величиной их заряда (см. рис. 1, *а*). В этом случае мы по-прежнему можем считать функцией отклика величину $1/\varepsilon$, но при $k \to 0$. Если же обкладки замкнуты через батарею и мы управляем величиной разности потенциалов на конденсаторе (см. рис. 1, *б*), то соответствующее внешнее воздействие не связано с внешним источником (зарядом обкладок). Последний в рассматриваемых условиях сам зависит от состояния системы, подтекая к обкладкам или оттекая от них при изменении этого состояния. Внешнее воздействие определяется теперь величиной полной разности потенциалов на обкладках, т. е. напряженностью поля $\mathbf{E}$, а результат такого воздействия — величиной внешнего заряда или индукции $\mathbf{D}$. Соответственно, функцией отклика, помимо $1/\varepsilon\ (\omega, \mathbf{k})$, можно считать величину $\varepsilon\ (\omega, 0)$ и оказываются справедливыми соотношения Крамерса — Кронига для самой ДП, но только в длинноволновом пределе:

$$\varepsilon(\omega, 0) = 1 + \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \frac{d\omega'^2\, \mathrm{Im}\,\varepsilon(\omega', 0)}{\omega'^2 - \omega^2 - i\delta}. \tag{4}$$

Рассмотренными примерами исчерпываются возможные типы воздействия на систему, осуществляемые с помощью продольного поля.

*) Вопреки распространенному мнению ДП, как и первое соотношение (1), имеет точный микроскопический смысл и ею можно пользоваться и при больших k, когда понятие напряженности как среднего поля становится бессмысленным (см. [4]).

Что же касается отклика на поперечное поле, то при $k = 0$ для поперечной ДП $\varepsilon_t(\omega, \mathbf{k})$, которая в этом пределе совпадает с продольной, справедливы оба соотношения (3), (4). При $k \neq 0$ имеет силу соотношение Крамерса — Кронига для величины $[\varepsilon_t(\omega, \mathbf{k}) - (k^2c^2/\omega^2)]^{-1}$ *).

Отметим, что для вывода (3) можно использовать вместо принципа причинности так называемое условие «спектральности», связывая величину $1/\varepsilon$ с корреляцией флуктуаций $\langle E_i E_j \rangle$ [5], вводя полную промежуточную систему функций и учитывая, что соответствующие им частоты вещественны. Именно таким способом выводятся обычно соотношения Челлена — Лемана для функции Грина фотона в вакууме в квантовой теории поля, служащие прямым аналогом соотношения (3). Подчеркнем, что в силу релятивистской инвариантности функция Грина зависит от единой комбинации $\omega^2 - c^2k^2$. По этой причине соотношения Челлена — Лемана справедливы и для обратной функции Грина (аналога величины ε) при всех значениях ее аргумента [7].

3. СЛЕДСТВИЯ СООТНОШЕНИЙ КРАМЕРСА — КРОНИГА

Важнейшее следствие, только о котором и будет идти речь ниже, относится к допустимым пределам изменения статической ДП $\varepsilon(0, \mathbf{k})$. Будем исходить из соотношения

$$\operatorname{Im} \varepsilon^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2e^2}{k^2} F(\omega, \mathbf{k}), \tag{5}$$

где $F > 0$ — форм-фактор неупругого рассеяния электронов рассматриваемой системой, определяющий вероятность потери электроном энергии ω и импульса $\mathbf{k}$ [1]. Отсюда $\operatorname{Im} \varepsilon^{-1} < 0$, $\operatorname{Im} \varepsilon > 0$ и соотношения (3), (4) при $\omega = 0$ дают следующие ограничения: соотношение (3) ведет к неравенству $1/\varepsilon(0, \mathbf{k}) < 1$ или, что то же, к одному из неравенств

$$\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1, \qquad \varepsilon(0, \mathbf{k}) < 0, \tag{6}$$

а соотношение (4) — к неравенству

$$\varepsilon_0 \equiv \lim_{k \to 0} \varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1. \tag{7}$$

Как видно из полученных результатов, отсутствие соотношений Крамерса — Кронига для самой ДП при $k \neq 0$ открывает возможность отрицательных значений для статической ДП. Эта возможность обсуждалась в работе [1], но была отвергнута из-за малоубедительных качественных соображений. Ниже мы рассмотрим эти и другие аргументы в пользу необходимости положительного знака $\varepsilon(0, \mathbf{k})$ и покажем их некорректность.

Отрицательный знак статической ДП означает «переэкранировку» внешнего заряда, в результате которой его поле приобретает противоположный знак по сравнению с полем в пустоте. Более важно другое: противоположный знак по отношению к пустоте имеет и эффективное взаимодействие между частицами. В самом деле, рассмотрим энергию взаимодействия статического внешнего заряда $\delta\rho_e(0, \mathbf{k})$, создающего внутри системы поле $4\pi\delta\rho_t(0, \mathbf{k})/k^2$, с самим собой (см. (1))

$$\frac{1}{2}\sum_k \frac{4\pi}{k^2}\delta\rho_e^*(0, \mathbf{k})\,\delta\rho_t(0, \mathbf{k}) = \frac{1}{2}\sum_k \frac{4\pi}{k^2\varepsilon(0, \mathbf{k})}|\delta\rho_e(0, \mathbf{k})|^2.$$

*) Укажем, что в работе [2] содержатся более сильные утверждения, касающиеся поперечной ДП, которые, однако, представляются недостаточно обоснованными.

Отсюда видно, что фурье-образ статического взаимодействия двух частиц с зарядом e имеет вид *)

$$V(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2 \varepsilon(0, \mathbf{k})}. \tag{8}$$

Это соотношение служит очевидным обобщением известной элементарной формулы для закона Кулона в среде. Ниже мы еще вернемся к обсуждению формулы (8) и ее следствий.

Рассмотрим в заключение этого раздела вопрос о поведении величины $\varepsilon(0, \mathbf{k})$ с изменением k (см. (6), (7)). При $k = 0$ (и из соображений непрерывности, также в области относительно малых k, тем более широкой, чем меньше роль пространственной дисперсии в системе) эта величина положительна и превышает единицу. С ростом k либо эти условия продолжают выполняться, либо $\varepsilon(0, \mathbf{k})$ обращается в бесконечность, меняя при этом знак. Более адекватен язык, основанный на величине $1/\varepsilon$: в первом случае она всегда заключена между нулем и единицей (рис. 2, кривая 1), во втором — проходит через нуль (рис. 2, кривая 2).

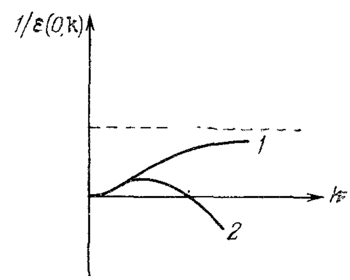

Рис. 2.

Отметим в этой связи, что приведенный в книге[8] (§ 14) вывод неравенства $\varepsilon > 1$ в действительности допускает и отрицательные значения ε, что видно после перехода к языку $1/\varepsilon$. Этот вывод основан на необходимости положительного знака изменения ε (или, что то же, отрицательного знака изменения $1/\varepsilon$) при исходном значении $\varepsilon = 1$. Но этим совсем не исключается возможность, что при своем уменьшении функция $1/\varepsilon$ пройдет через нуль, становясь отрицательной величиной. На языке ε такая возможность маскируется неизбежным обращением ε в бесконечность.

4. КРИТЕРИИ УСТОЙЧИВОСТИ СИСТЕМЫ

В этом разделе будет показано, что полученные выше неравенства (6), (7) — не что иное, как критерии устойчивости системы. Одновременно будут опровергнуть аргументы против второго неравенства (6), основанные на соображениях устойчивости.

Сформулируем проблему устойчивости в общем виде, ограничиваясь для простоты случаем нулевой температуры **). Пусть нас интересует устойчивость системы относительно вариаций некоторой физической величины — «поля» $\varphi(\mathbf{x})$; сопряженным по отношению к полю будем считать «ток» $j(\mathbf{x})$. Поставим задачу отыскать такой функционал $E\{\varphi\}$, который зависел бы от произвольной (неравновесной) функции φ и который имел бы минимум относительно φ в состоянии равновесия. Реализующая минимум функция φ определяет равновесное поле, а сами условия минимума играют роль критериев устойчивости системы.

*) Отсылая за подробностями к книге [3], подчеркнем, что (8) описывает взаимодействие именно внешних зарядов, состояние которых задано. Закон взаимодействия внутренних зарядов системы, испытывающих ее обратное влияние, отличается, вообще говоря, от (8). Однако во многих важных случаях это отличие незначительно.

**) По поводу излагаемой постановки задачи см.[9, 10]. Современная формулировка проблемы устойчивости (метод эффективного потенциала), развитая в последние годы в связи с исследованием спонтанного нарушения симметрии в квантовой теории поля и статистике, содержится, например, в работах [11].

Чтобы сделать состояние системы с произвольным φ равновесным, нужно ввести специально подобранный внешний ток j, добавляя к гамильтониану системы $\hat{\mathscr{H}}$ слагаемое $\hat{\mathscr{H}}' = \int d\mathbf{x} j \hat{\varphi}$. Обозначая $E\{j\} = \langle \hat{\mathscr{H}} + \hat{\mathscr{H}}' \rangle$, где скобки означают усреднение по состоянию с током, имеем

$$\frac{\delta E\{j\}}{\delta j(\mathbf{x})} = \langle \hat{\varphi}(\mathbf{x}) \rangle \equiv \varphi(\mathbf{x}). \tag{9}$$

Функционал $E\{j\}$ носит промежуточный характер и никакими свойствами минимальности относительно j не обладает (это видно уже из (9) при $\varphi \neq 0$). Чтобы перейти к искомому функционалу $E\{\varphi\}$, нужно вычесть из $E\{j\}$ «лишнюю» работу, связанную с внешним током, и перейти от j к аргументу φ, пользуясь (9). Дело сводится к преобразованию Лежандра

$$E\{\varphi\} = E\{j\} - \int d\mathbf{x} j \varphi = \langle \hat{\mathscr{H}} \rangle,$$

причем ток, входящий в обкладки усреднения, нужно выразить через φ. Условия минимума полученного выражения, имеющего смысл энергии системы при произвольном φ, принимают вид

$$\frac{\delta E\{\varphi\}}{\delta \varphi(x)} = -j(\mathbf{x}) = 0, \quad \frac{\delta^2 E\{\varphi\}}{\delta \varphi(\mathbf{x})\, \delta \varphi(\mathbf{x}')} = -\frac{\delta j(\mathbf{x}')}{\delta \varphi(\mathbf{x})} > 0. \tag{10}$$

Покажем теперь, что условия (6) совпадают с критериями устойчивости системы относительно спонтанного возникновения в ней волн плотности (см. следующий раздел); это отвечает выбору $\varphi = \rho$, $j = U_e$, где U_e — потенциал внешнего поля. Тогда первое условие (10) дает $U_e = 0$, а второе ведет к неравенству

$$\frac{\delta^2 E\{\rho\}}{\delta \rho(0, \mathbf{k})\, \delta \rho(0, -\mathbf{k})} = -\frac{\delta U_e(0, \mathbf{k})}{\delta \rho(0, \mathbf{k})} = -\frac{1}{\chi(0, \mathbf{k})} > 0$$

(рассматриваются равновесные статические волны плотности). Здесь мы ввели восприимчивость

$$\chi(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\delta \rho(\omega, \mathbf{k})}{\delta U_e(\omega, \mathbf{k})} = \frac{k^2}{4\pi} \left(\frac{1}{\varepsilon(\omega, \mathbf{k})} - 1 \right).$$

Очевидно, что полученный критерий точно совпадает с условием (6).

Это и неудивительно, так как спонтанному появлению волн плотности должно обязательно сопутствовать неустойчивое состояние в спектре возбуждений пространственно-однородной системы (нуль функции $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ с $\omega^2 < 0$), а это запрещено соотношением Крамерса — Кронига (3). В то же время нарушение соотношения Крамерса — Кронига для самой ДП при $k \neq 0$ означало бы появление полюсов $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ с $\omega^2 < 0$, которые не имеют прямого физического смысла. С другой стороны, неустойчивость системы ведет к прямому нарушению принципа причинности из-за невозможности отличить волну плотности, возникшую как опережающий внешнее воздействие отклик системы и как результат неустойчивости системы. Отметим, что сформулированный выше метод совпадает в рассматриваемой задаче с известным вариационным принципом квантовой теории многих тел (в последние годы его чаще называют методом функционала плотности, см., например, [12]).

Проведенное рассмотрение отвечает случаю $k \neq 0$ (волны плотности, появление которых не нарушает нормировки на фиксированный объем). Случай $k = 0$ является особым и ему отвечает исследование устойчивости относительно спонтанного изменения средней плотности системы (ее коллапса). Устойчивость требует положительной величины модуля сжатия или квадрата скорости звука s. Соотношение [1] $s^2 = \omega_p^2/k^2\,(\varepsilon_0 - 1)$, где ω_p — плазменная частота электронов, ведет к неравенству (7).

5. УСТОЙЧИВОСТЬ НА ЯЗЫКЕ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

Нам осталось критически рассмотреть аргументы против возможности отрицательного знака статической ДП, основанные на соображениях устойчивости [1,13]. Эти аргументы базируются на выражениях для полевой энергии системы

$$\frac{1}{8\pi}\sum_k \frac{|\mathbf{D}(0, \mathbf{k})|^2}{\varepsilon(0, \mathbf{k})} = \frac{1}{8\pi}\sum_k \varepsilon(0, \mathbf{k})\,|\mathbf{E}(0, \mathbf{k})|^2, \tag{11}$$

которые действительно не имеют минимума при $\varepsilon(0, \mathbf{k}) < 0$.

В книге [1] рассматривается левое выражение (11), имеющее смысл энергии бесконечно тяжелых ионов, создающих внешнее по отношению к электронам поле $\mathbf{D}$. Проявлением неустойчивости считается возникновение волны $\mathbf{D}$, т. е. перестройка ионной подсистемы. В работе [13] в основу кладется правое выражение (11) и проявлением неустойчивости при отрицательном знаке статической ДП считается возникновение волны напряженности поля.

В действительности оба эти вывода неверны, так как функционалы (11) вовсе не должны иметь минимума в состоянии равновесия. Ниже мы дадим правильное решение задачи об устойчивости системы на языке электродинамических параметров $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$, основываясь на общем методе раздела 4. В итоге рассмотрения мы снова придем к неравенствам (6), (7).

Начнем с исследования устойчивости относительно появления поля $\mathbf{E}$; соответственно $\varphi = \mathbf{E}$. В этом случае мы имеем дело с замкнутой системой, отвечающей рис. 1, *а*. Изменение энергии системы за счет воздействия внешнего тока (его роль играют заряды на обкладках) определяется известным выражением $E\{j\} = (1/8\pi)\sum_k |\mathbf{D}|^2/\varepsilon$, откуда $j = \mathbf{D}/4\pi$ и $\mathbf{E} = \mathbf{D}/\varepsilon$. Совершая преобразование Лежандра и переходя к переменной $\mathbf{E}$, получим $E\{\varphi\} = -(1/8\pi)\sum_k \varepsilon\,|\mathbf{E}|^2$. В этом выражении нужно оставить только ту его часть, которая относится к самой рассматриваемой системе. Учитывая, что в нашем мысленном эксперименте фиксированы внешние заряды, т. е. индукция $\mathbf{D}$, и выделяя соответствующее постоянное слагаемое, приходим к окончательному выражению для функционала напряженности $\mathbf{E}$, который действительно должен иметь минимум относительно $\mathbf{E}$ и который радикально отличается от правого выражения (11)

$$E\{\mathbf{E}\} = \frac{1}{8\pi}\sum_k \varepsilon(0, \mathbf{k})\,[\varepsilon(0, \mathbf{k}) - 1]\,|\mathbf{E}(0, \mathbf{k})|^2. \tag{12}$$

Вытекающее из него условие устойчивости точно совпадает с (6).

Аналогично проводится и исследование устойчивости относительно спонтанного появления индукции $\mathbf{D}$, которое отвечает схеме рис. 1, *б* (незамкнутая система) *). В этом случае $\varphi = \mathbf{D}$, $E\{j\} = -(1/8\pi)\sum_k \varepsilon\,|\mathbf{E}|^2$ (см. [8]), $j = -\mathbf{E}/4\pi$, $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$. Проводя те же действия, что и выше, находим $E\{\varphi\} = (1/8\pi)\sum_k |\mathbf{D}|^2/\varepsilon$. Это выражение формально совпадает с левой частью (11). Однако оно имеет совсем иной смысл, отвечая физически другой постановке задачи; это обесценивает, в частности, слова о перестройке ионной подсистемы (см. выше), которая невозможна уже в силу бесконечно большой массы ионов. Более важно другое — пользоваться можно лишь длинноволновой частью полученного выражения. Это следует

*) Вообще, спонтанно может возникнуть величина, которая на языке функций отклика отвечает не «воздействию», а его «результату» (см. раздел 2).

из большого размера системы (см. раздел. 2), а также из тех соображений, что в силу уравнения $\operatorname{div}\mathbf{D} = 4\pi\rho_e$ в отсутствие внешних источников внутри системы спонтанно может возникнуть лишь однородная в пространстве индукция. Учитывая это обстоятельство и вычитая, как и выше, часть, относящуюся к самим внешним источникам (теперь фиксирована разность потенциалов на обкладках, т. е. напряженность E), получаем окончательное выражение:

$$E\{\mathbf{D}\} = \frac{1}{8\pi}\,\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0^2}\,|\mathbf{D}(0, 0)|^2. \tag{13}$$

Его прямым следствием служит неравенство (7).

Отметим в заключение этого раздела, что полученные функционалы (12), (13) имеют прямой физический смысл, поскольку каждое из конкурирующих при вычислении минимума состояний может быть фактически реализовано подходящим выбором внешнего тока. Этим они отличаются от функционалов, введенных в книге [8] (§ 18), которые имеют формальный смысл и не всегда обладают минимумом в состоянии равновесия.

6. КОГЕРЕНТНАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ

Итог проведенного в последних двух разделах рассмотрения состоит в том, что условия (6), (7) играют роль условий устойчивости системы. При их нарушении система неизбежно должна перестроиться из-за неустойчивости прежнего ее состояния. Если нарушено условие (7), то, как уже указывалось, произойдет коллапс системы: она начнет неудержимо сжиматься, неограниченно увеличивая свою плотность. Более сложная и интересная картина возникает при нарушении условия (6). Выше уже упоминалось о появлении в этом случае волн плотности, означающих нарушение трансляционной инвариантности рассматриваемой системы. В этом разделе мы рассмотрим подробнее характер возникающего при такой перестройке состояния, которое было названо ранее «когерентным кристаллом» [14] *).

Такое рассмотрение в контексте этой статьи тем более оправдано, что может возникнуть следующий вопрос: имеет ли вообще смысл проведенное выше исследование устойчивости идеализированной однородной системы относительно ее перехода в неоднородное состояние, если нам заведомо известно, что такая система неустойчива (при малых температурах) относительно образования обычной кристаллической решетки? В действительности ответ на этот вопрос оказывается положительным, так как свойства обычного и когерентного кристалла радикально различаются во многих отношениях и спонтанное возникновение таких структур — две независимые моды неустойчивости однородного состояния системы.

Отсылая за подробностями к работе [14], мы кратко перечислим основные особенности, роднящие и различающие между собой структуры обычного и когерентного кристаллов:

а) оба типа структур характеризуются нарушением трансляционной симметрии — возникновением периодического в пространстве распределения плотности частиц;

б) оба типа структур обладают сдвиговой жесткостью и относятся к разряду твердых тел;

в) период обычного кристалла определяется концентрацией частиц, период когерентного кристалла — законом их взаимодействия. В послед-

*) Пионерские работы в этой области принадлежат А. А. Власову, а также А. Оверхаузеру (подробную библиографию см. в [14]).

нем случае вектор обратной решетки принадлежит диапазону k, в котором нарушены условия (6), т. е. величина $1/\varepsilon\,(0, \mathbf{k})$ больше единицы;

г) частицы обычного кристалла локализованы вблизи узлов кристаллической решетки, частицы когерентного кристалла относительно свободно движутся по всему его объему;

д) обычный кристалл представляет собой структуру, возникшую в результате многочастичных корреляций в системе. Наоборот, когерентный кристалл может рассматриваться и в рамках одночастичной картины: периодические распределения плотности и самосогласованного поля взаимно поддерживают друг друга. Это соответствует когерентной волне плотности, обязанной бозе-конденсации пар «частица-дырка» (для ферми-систем) или самих бозонов (для бозе-систем) в состоянии с определенным волновым вектором $\mathbf{k} \neq 0$ и определенной фазой.

Мы не касаемся других различий обычного и когерентного кристаллов (см. [14]), которые представляют собой в известном смысле противоположные типы периодических твердотельных структур. Широко исследуемые сейчас «квантовые кристаллы» [15] следует отнести к промежуточному типу, для которого характерны свойства обоих сопоставляемых типов кристалла.

7. ПРОСТЕЙШИЕ МОДЕЛИ

В этом разделе дается иллюстрация изложенного материала на примере простейших теоретических моделей. Общее выражение для ДП можно записать в виде

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k}) = 1 + 4\pi \sum_i \alpha_i(\omega, \mathbf{k}), \qquad (14)$$

где суммирование ведется по различным подсистемам вещества (электроны проводимости, ионы и т. д.), α_i — поляризуемость подсистемы, связанная соотношением $\Pi = -k^2\alpha$ с важнейшей ее микроскопической характеристикой — поляризационным оператором Π.

Поляризуемость электронов проводимости ($i = 1$) имеет следующие известные предельные выражения:

$$\begin{aligned} \alpha_1(\omega, \mathbf{k}) &= \frac{\varkappa^2}{4\pi k^2} \qquad \left(\frac{\omega\varkappa}{\omega_p} \ll k \ll \varkappa\right), \\ \alpha_1(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{\omega_p^2}{4\pi\omega^2} \qquad \left(k \ll \frac{\omega\varkappa}{\omega_p}\right), \end{aligned} \qquad (15)$$

где $\varkappa$ — обратный радиус дебаевского экранирования. Поляризуемость ионной подсистемы ($i = 2$) в простейшей модели «желе», в которой ионы рассматриваются как континуум свободных частиц, имеет вид

$$\alpha_2(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\omega_{pi}^2}{4\pi\omega^2}, \qquad (16)$$

где ω_{pi} — плазменная частота ионов. Отметим, что уже в рамках этой простейшей модели (непригодной, впрочем, в области малых частот) статическая ДП отрицательна (стремится к $-\infty$). В более сложной модели, в которой ионы считаются связанными и имеющими спектр «затравочных» частот $\omega_0(\mathbf{k})$,

$$\alpha_2(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{\omega_{pi}^2}{4\pi\left(\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i\delta\right)}. \qquad (17)$$

Уже последняя модель способна в принципе описать систему, в которой $\varepsilon\,(0, \mathbf{k}) < 0$. Исходя из выражения

$$\varepsilon(0, \mathbf{k}) = 1 + 4\pi\alpha_1(0, \mathbf{k}) + \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_0^2(\mathbf{k})},$$

мы видим, что для этого во всяком случае необходимо выполнение условия $\omega_0^2(\mathbf{k})<0$. Другими словами, нужна неустойчивость «затравочной» ионной подсистемы, существовавшей до включения ее взаимодействия с электронами проводимости. Однако окончательный физический спектр фононов будет стабильным при выполнении условий (6), (7). Мы приведем простейшую математическую модель для $\omega_0^2(\mathbf{k})$, удовлетворяющую всем необходимым требованиям

$$\omega_0^2(\mathbf{k})=A\omega_{pi}^2\frac{(k^2-k_1^2)(k^2-k_2^2)}{(k_1^2-k_2^2)^2},\qquad A<4.$$

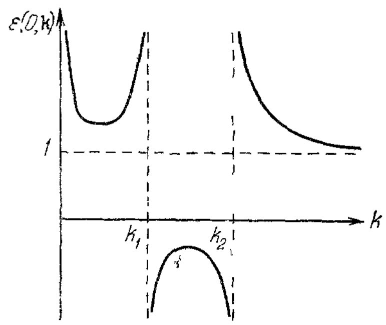

Рис. 3.

Ей соответствует рис. 3. Однако вопрос о физической реализации такой модели остается пока открытым *).

Если системы с $\varepsilon(0, \mathbf{k})<0$ действительно существуют, то их можно перевести в состояние когерентного кристалла (см. гл. 6), добавлением однородно распределенных по объему осцилляторов частоты $\Omega\gg\omega_{pi}$, создававших бы в пустоте ДП $\bar{\varepsilon}>1$ (обобщенная модель «желе»). Соответствующая поляризуемость ($i=3$) имеет вид

$$\alpha_3(\omega, \mathbf{k})=-\frac{(\bar{\varepsilon}-1)\,\Omega^2}{4\pi(\omega^2-\Omega^2+i\delta)}.$$

Она увеличивает первоначальную ДП системы на величину $\bar{\varepsilon}-1$. Ясно, что при $\varepsilon(0, \mathbf{k})<0$ подходящий выбор $\bar{\varepsilon}$ позволит перевести систему в запрещенный условиями (6) интервал $0<\varepsilon(0, \mathbf{k})<1$, что и приведет к образованию когерентного кристалла.

В заключение этого раздела остановимся на вопросе, который часто возникает при сопоставлении соотношений Крамерса — Кронига для ε и $1/\varepsilon$, выражающих факт запаздывания этих функций отклика. На первый взгляд кажется, что такие свойства несовместимы (одновременно $\mathbf{E}$ запаздывает по отношению к $\mathbf{D}$ и, обратно, $\mathbf{D}$ по отношению к $\mathbf{E}$). В действительности, в рассматриваемой нами нерелятивистской теории структура временно́й зависимости $\mathbf{E}$ и $\mathbf{D}$ совершенно подобна, независимо от того, какая из этих величин описывает «воздействие», а какая его «результат»: обе эти величины отличны от нуля лишь при временах, следующих за моментом включения «воздействия».

Легко убедиться в сказанном на простой модели (17), опуская для простоты электронную поляризуемость (16),

$$\varepsilon(\omega, \mathbf{k})=1+\frac{\omega_{pi}^2}{\omega_0^2-\omega^2-i\delta},\qquad \varepsilon^{-1}(\omega, \mathbf{k})=1-\frac{\omega_{pi}^2}{\omega_0^2+\omega_{pi}^2-\omega^2-i\delta}.\qquad(18)$$

Обе эти величины имеют одинаковые правила обхода особенностей **).

*) Укажем в этой связи условие устойчивости $\varepsilon(0, \mathbf{k})\left[1-\left(\frac{g_0^2k^2}{4\pi e^2}\right)\right]>0$ (см.[3], гл. 3, и [16]), где g_0 — «затравочная» константа связи электронов с фононами; при $g_0^2k^2>4\pi e^2$ возможны отрицательные значения $\varepsilon(0, \mathbf{k})$. Отметим, что учет процессов переброса в кристаллической решетке также может привести к выражению (17) с $\omega_0^2<0$ (см. [13, 17]).

**) Нужно иметь в виду не оговоренное до сих пор условие, что входящая во многие формулы этой статьи бесконечно малая величина δ имеет знак, совпадающий со знаком ω. Отметим также, что при $\omega_0^2<0$ нарушение соотношения Крамерса — Кронига для ε происходит из-за потери свойства причинности функцией $\varepsilon(t)$: согласно первой формуле (18) при этом $\varepsilon(t, \mathbf{k})-\delta(t)\sim\exp\left(-\sqrt{-\omega_0^2}\,|t|\right)$.

и потому в t-представлении обе имеют запаздывающий фактор $\theta(t) = 1$ $(t > 0)$ и 0 $(t < 0)$:

$$\varepsilon(t, \mathbf{k}) = \delta(t) + \theta(t)\frac{\omega_{pi}^2}{\omega_0}\sin(\omega_0 t),$$

$$\varepsilon^{-1}(t, \mathbf{k}) = \delta(t) - \theta(t)\frac{\omega_{pi}^2}{\sqrt{\omega_0^2+\omega_{pi}^2}}\sin\left(\sqrt{\omega_0^2+\omega_{pi}^2}\,t\right).$$

Теми же свойствами обладают сами поля $\mathbf{E}(t)$ и $\mathbf{D}(t)$.

8. ПРИЛОЖЕНИЯ К ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Как уже отмечалось в разделе 3, из результатов этой статьи вытекает, в частности, следующее утверждение: могут существовать в принципе такие системы, внутри которых электроны не отталкиваются, как в пустоте, а притягиваются друг к другу (при больших значениях k, т. е. на сравнительно малых расстояниях). Это утверждение, как мы покажем ниже, может оказаться существенным для физики явления сверхпроводимости, поскольку для образования пар Купера и самого возникновения этого явления важен характер статического взаимодействия электронов при относительно больших значениях k.

Сделанное утверждение часто кажется тривиальным тем людям, которые знакомы с теорией сверхпроводимости по ее популярным изложениям, в которых образование пар Купера объясняется именно притяжением между электронами, вызванное их взаимодействием с решеткой (фононами).

Однако в действительности уже давно хорошо известно [3,18], что взаимодействие между электронами V', которое ответственно за их «спаривание» и которое в сверхпроводнике на самом деле должно иметь характер притяжения, заметно отличается от истинного межэлектронного взаимодействия V (см. (8)). Оказывается, что если записать последнее в виде $V = V_{\text{ph}} + V_c$, где V_{ph} — фононная часть (притяжение), V_c — кулоновская часть (отталкивание), то $V' = V_{\text{ph}} + \alpha V_c$, где α меньше единицы. Поэтому из необходимого для «спаривания» условия $V' < 0$ следует, что истинное взаимодействие V меньше величины $(1 - \alpha)V_c$ и может быть как отрицательным, так и положительным. Более того, имеющиеся экспериментальные данные говорят в пользу того, что в известных сверхпроводниках преобладают силы отталкивания между частицами.

Наиболее важное в интересующем нас плане следствие обсуждаемого утверждения касается существования верхней границы для критической температуры сверхпроводящего перехода T_c. Если бы соотношение Крамерса — Кронига (4) было справедливо при больших значениях k и, следовательно, выполнялось бы ограничение $\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1$, то отсюда во всяком случае следовало бы неравенство $V > 0$. Одновременно оказалось бы ограниченным «спаривательное» взаимодействие $|V'| < (1-\alpha)V_c$, а вместе с ним и величина T_c [13,17]. Оценка, проведенная в первой из этих работ, дает для верхней границы T_c величину, близкую к уже достигнутой для сверхпроводников-рекордсменов, и достоверность такой оценки оставляла бы мало надежд на радикальное повышение критической температуры. Хотя эта оценка и не может считаться количественно надежной и, кроме того, имеется ряд благоприятных для повышения T_c факторов, не учтенных в приводимых рассуждениях [13,17], тем не менее ограничения на T_c, вытекающие из неравенства $\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1$, казались весьма серьезными и тревожными.

Из результатов этой статьи следует, что таких ограничений просто не существует из-за несправедливости при больших k самого неравенства $\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1$. Нам неизвестны общие требования, которые запрещали бы сколь угодно сильное притяжение между электронами при больших значениях k и, соответственно, сколь угодно высокое значение критической температуры. Конечно, вопрос о реальном существовании структур с $\varepsilon(0, \mathbf{k}) < 0$ или их искусственном синтезе остается пока полностью открытым. Однако такую возможность нельзя исключить и представляется, что поиск структур такого рода — интересная и важная задача физики твердого тела. Быть может, именно на таком пути и могли бы осуществиться надежды на радикальное повышение критической температуры сверхпроводящего перехода.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итог проведенного в этой статье рассмотрения можно суммировать в виде следующих утверждений:

а) соотношение Крамерса — Кронига для величины $1/\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ и ограничения $\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1$ или $\varepsilon(0, \mathbf{k}) < 0$ безусловно справедливы для всякой устойчивой системы;

б) соотношение Крамерса — Кронига для $\varepsilon(\omega, \mathbf{k})$ и более сильное ограничение $\varepsilon(0, \mathbf{k}) > 1$ имеют силу лишь в длинноволновом пределе $k \to 0$;

в) при достаточно больших значениях k становятся допустимыми отрицательные значения статической диэлектрической проницаемости;

г) существует в принципе класс веществ, внутри которых статическое взаимодействие электронов имеет характер не отталкивания, как в пустоте, а притяжения.

Аналогичные выводы справедливы и применительно к магнитной проницаемости вещества.

В более общем плане рассмотрение, проведенное в этой статье, служит некоторым предостережением против механического распространения формул обычной электродинамики на случай сред с пространственной дисперсией.

Автор признателен своим соавторам по книге [3] за многочисленные дискуссии, в особенности В. Л. Гинзбургу, по инициативе которого была написана эта статья, а также Л. В. Келдышу и А. Д. Линде за полезное обсуждение изложенных вопросов.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, Теория квантовых жидкостей, М., «Мир», 1967.
2. P. Martin, Phys. Rev. **161**, 143 (1967).
3. Л. Н. Булаевский, В. Л. Гинзбург, Г. Ф. Жарков, Д. А. Киржниц, Ю. В. Копаев, Е. Г. Максимов, Д. И. Хомский, Проблема высокотемпературной сверхпроводимости, М., «Наука», 1976.
4. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов, М., «Наука», 1965.
5. В. П. Силин, А. А. Рухадзе, Электромагнитные свойства плазмы и плазмоподобных сред, М., Госатомиздат, 1961.
6. Д. А. Киржниц, В. Н. Сазонов, в кн. Эйнштейновский сборник. 1973, М., «Наука», 1974, стр. 84.
П. Л. Чонка, ibid., стр. 178.

7. Д. А. Киржниц, В. Я. Файнберг, Е. С. Фрадкин, ЖЭТФ **38**, 239 (1960).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, М., Гостехиздат, 1957.
9. М. А. Леонтович, Введение в термодинамику, М.— Л., Гостехиздат, 1952; Статистическая физика, М.— Л., Гостехиздат, 1944.
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, М., «Наука», 1964.
11. S. Coleman, S. Weinberg, Phys. Rev. **D7**, 1888 (1973).
Д. А. Киржниц, А. Д. Линде, ЖЭТФ **67**, 1263 1974.
J. Illiopoulos, C. Itsykson, A. Martin, Rev. Mod. Phys. **47**, 165 (1975).
12. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпатаковская, УФН **117**, 3 (1975).
13. M. L. Cohen, P. W. Anderson, in: Proc. of the AIP Conference on *d* and *f* Band Superconductivity (Rochester, 1971), N.Y., 1972, p. 17.
14. Д. А. Киржниц, Ю. А. Непомнящий, ЖЭТФ **59**, 2203 (1970).
Ю. А. Непомнящий, ТМФ **8**, 413 (1971).
Ю. А. Непомнящий, А. А. Непомнящий, ibid. **9**, 137.
15. Материалы Международного совещания по квантовым кристаллам (Тбилиси, 1974), ФНТ 5-7 (1975).
16. Е. Г. Максимов, ЖЭТФ **69**, 2236 (1975).
17. Д. А. Киржниц, Е. Г. Максимов, Д. И. Хомский, Препринт ИФМ УНЦ АН СССР, 1973.
18. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, Новый метод в теории сверхпроводимости, М., Изд-во АН СССР, 1958.