

Силовая функция для дипольных колебаний. Макроскопична межа та ефекти скінченності розмірів.

Ф. О. Іванюк

Інститут ядерних досліджень НАН України

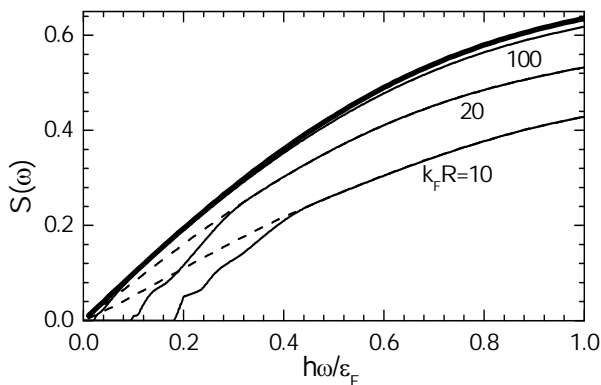
Коллективні збудження в атомних ядрах та мезоскопічних системах як правило описуються за допомогою силової функції $S(\omega)$, або функції відгуку $\chi(\omega) = S(\omega) - S\omega(-\omega)$. Для великих систем (важкі ядра, металеві кластери) часто використовуються квазі-класичні методи. В роботі [1] силовая функція була розрахована шляхом заміни сум по квантових станах на інтеграли по енергії та орбітальному моменту. В результаті був отриманий аналітичний вираз для силової функції, який можна назвати Томас-Фермі наближенням для силової функції $S_{TF}(\omega)$ оскільки $S_{TF}(\omega)$ виражається через Томас-Фермі наближення для густини одночастинкових станів з фіксованим орбітальним моментом $g_l^{TF}(\epsilon)$. Однак виявилось [2], що коефіцієнт тертя та масовий параметер, розраховані на основі $S_{TF}(\omega)$ є абсолютно неправильними. Уточнення $S_{TF}(\omega)$ можна досягнути шляхом врахування квазікласичних поправок (поправок на скінченність розмірів системи) до $g_l^{TF}(\epsilon)$. In [2] було отримано вираз

$$g_l^{ETF}(\epsilon) = g_l^{TF}(\epsilon)\Theta(\epsilon - \epsilon_{0l}) + \frac{1}{2}\delta(\epsilon - \epsilon_{0l}) + \frac{1}{12}\delta'(\epsilon - \epsilon_{0l})\frac{\partial \epsilon_{nl}}{\partial n}\Big|_{n=0} \quad (1)$$

Величина ϵ_{0l} в (1) являється енергією найнижчого стану з даним l . Вираз (1) було отримано шляхом апроксимації точної густини квантових станів (суми δ -функцій) за допомогою формули Ейлера-МакЛорена,

$$h\sum_{n=0}^N F(a+nh) \approx \int_a^b F(x)dx + \frac{h}{2}[F(a) + F(b)] + \frac{h^2}{12}[F'(b) - F'(a)] + \dots, \quad (2)$$

де $h = (b - a) / N$. Використання (1) для розрахунку силової функції приводить до *розширеного* наближення Томаса-Фермі $S_{ETF}(\omega)$, в якому враховуються поправки на скінченність розмірів системи. Виявляється, що $S_{ETF}(\omega)$ з високою точністю співпадає з середнім значенням квантової силової функції, див. рисунок. Крім того, апроксимація сум по квантових станах інтегралами на основі (2) дозволяє врахувати той факт, що в будь-якій скінченній системі спектр збуджень дискретний і існує деяка мінімальна частота, $h\omega_{\min} / \epsilon_F = 2 / (k_F R)$, нижче якої силовая функція обертається в нуль. Ця обставина дозволяє пояснити фазовий перехід метал-діелектрик, що спостерігається, зокрема, в металевих кластерах.



Наближення Томаса-Фермі (жирна крива) та середнє значення (пунктир) квантової дипольної силової функції в залежності від частоти. Суцільними кривими показане *розширене* наближення $S_{ETF}(\omega)$.

Крім того, апроксимація сум по квантових станах інтегралами на основі (2) дозволяє врахувати той факт, що в будь-якій скінченній системі спектр збуджень дискретний і існує деяка мінімальна частота, $h\omega_{\min} / \epsilon_F = 2 / (k_F R)$, нижче якої силовая функція обертається в нуль. Ця обставина дозволяє пояснити фазовий перехід метал-діелектрик, що спостерігається, зокрема, в металевих кластерах.

1. M. Barma and V.Subrahmanyam, J.Phys.: Condens. Matter, 1, 7681 (1989).
2. F. A. Ivanyuk, submitted to Phys. Rev. B.