

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-98-15U

М.Ваврух\*, Я.Куштай†, В.Солов'ян, Н.Тишко\*

МОДИФІКОВАНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ЗМІЩЕНЬ І  
ЦИКЛІЧНЕ ПЕРЕТВОРЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ В  
ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

\*Львівський державний університет ім. І.Я.Франка, 290005, Львів,  
вул. Кирила і Мефодія 8

†Львівський економічний бізнес-коледж, 290000, Львів,  
вул. Менцинського 8

УДК: 537.31; 538.945

PACS: 05.30.Fk

Модифіковане зображення зміщень і циклічне перетворення статистичної суми в теорії електронної рідини

Ваврух М., Куштай Я., Солов'ян В., Тишко Н.

**Анотація.** Доведено, що зображення зміщень у статистичному операторі еквівалентне циклічному перетворенню статистичної суми фермі-системи. Сформульовано швидкозбіжну перенормовану термодинамічну теорію збурень, що застосовна в широкій області параметра неідеальності, оскільки в ній природним чином враховуються ефекти екранування і локального поля. Наведено результати розрахунку характеристик основного стану моделі сильно неідеальної електронної рідини: кореляційної енергії, бінарної функції розподілу та розподілу електронів за імпульсами. Показано, що наближення хаотичних фаз у розвинутому підході приводить до результатів, які мало відрізняються від результатів наближення локального поля звичайної теорії збурень.

**The Modified Displacements Representation and the Cyclic Transformation of the Partition Function in the Electron Liquid Model**

Vavruk M, Kushtaj Ya., Solovyan V., Tyshko N.

**Abstract.** It was proved that the displacements representation in the statistical operator is equivalent to some cyclic transformation of Fermi system partition function. On this base for the strongly coupled systems the renormalized thermodynamical perturbation theory was formulated. The obtained diagrams are built on the effective interaction potential which takes into account the local-field-type effects. The correlation energy, pair distribution functions and the moment distribution of particles calculated in the frames of random phase approximation in proposed method are close to results obtained in the local-field approximation.

Подається в Журналу фізичних досліджень  
Submitted to Journal of Physical Studies

## 1. Вступ

Дальша розробка методу дослідження сильно неідеальних фермі-систем, запропонованого в роботах авторів [1, 2], є метою цієї публікації. Тут показано, що зображення зміщень не є якимсь специфічним прийомом, а належить до певного класу перетворень статистичної суми фермі-систем, а саме циклічних перетворень, добре відомих у статистичній фізиці. Такі перетворення є основою методів перенормувань у теорії збурень. Нами доведено, що перетворення зміщень (або циклічне перетворення) дозволяє сформулювати перенормовану термодинамічну теорію збурень, застосовну в широкій області параметра неідеальності, оскільки в ній природним чином враховуються ефекти екранування та локального поля. Приведено результати розрахунку енергії основного стану моделі електронної рідини, бінарної функції розподілу та розподілу частинок за імпульсами у парамагнітній фазі.

## 2. Циклічне перетворення статистичної суми

Покажемо, що представлення зміщень тісно пов'язане із перетворенням статистичної суми, яке ґрунтується на властивості циклічності шпура. Розглянемо статистичну суму моделі електронної рідини у великому канонічному ансамблі

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \text{Sp}\{\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]\}, \\ \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

де  $\hat{H}_0$  – оператор кінетичної енергії,  $\hat{V}$  – оператор кулонівської взаємодії між електронами,  $\hat{N}$  – оператор числа частинок,  $\mu$  – змінна хімічного потенціалу,  $\beta$  – обернена температура.

Використаємо ермітів оператор  $\hat{W}$ , який комує з оператором числа частинок  $\hat{N}$  та енергією взаємодії  $\hat{V}$ . Виконаємо таке циклічне перетворення

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \text{Sp}\{\exp(-\hat{W}) \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \exp(\hat{W})\} = \\ &= \text{Sp}\left\{-\beta\left(\hat{H} - \mu\hat{N} + \hat{K}(w) + \hat{L}(w)\right)\right\}, \\ \hat{K}(w) &= [\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \quad \hat{L}(w) = \frac{1}{2} \left[ [\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \hat{W} \right]_-. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Підберемо  $\hat{W}$  таким чином, щоб оператор

$$\hat{V} + \hat{L}(w) \quad (2.3)$$

комує з операторами  $\hat{H}_0$  та  $\hat{K}(w)$ . Тоді

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \text{Sp}\{\exp[-\beta(\hat{V} + \hat{L}(w))] \times \\ &\times \exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{K}(w))]\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Виберемо  $\hat{W}$  подібним до оператора зміщень [2]

$$\begin{aligned} \hat{W} &= \sum_{n \geq 2} \hat{W}_n(\mu), \\ \hat{W}_n(\mu) &= (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \times \\ &\times \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}_2, s_2}^+ \cdots \times \\ &\times a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \cdots a_{\mathbf{k}_1, s_1}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

де  $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  – розв'язки рівнянь, якими визначаються коефіцієнтні функції оператора зміщень в границі низьких температур

$$\begin{aligned} -V_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) + \sum_{m \geq 2} \Psi_n^{(m)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) + \\ + 2N(\mu)V^{-1}\nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1)\epsilon_{\mathbf{q}_1}\delta_{n,2} + \\ + (1 - \delta_{n,2})\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)\Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

при  $n \geq 2$ . Тут використано такі позначення :

$$\begin{aligned} V_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 q^{-2}, \\ V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) &= h^2(2m)^{-1} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, 0} \times \\ &\times \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i) \nu_2(\mathbf{q}_j, -\mathbf{q}_j), \\ V_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) &= -4h^2 m^{-1} \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \times \\ &\times \{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) + (\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2)\}; \dots \\ \Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= h^2 m^{-1} V^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \times \\ &\times \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}), \\ \Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= 2h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1} \{\mathbf{q}_1^2 + (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})\} \times \\ &\times \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= h^2 N^2 m^{-1} V^{-3} \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1^2 \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \times \\ &\times \nu_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, -\mathbf{q}), \\ \dots\dots\dots \\ \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i^2 \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i). \end{aligned}$$

Беручи до уваги явний вигляд комутатора  $\hat{L}(w)$  і рівняння (2.6), знаходимо, що

$$\begin{aligned} -\beta[\hat{V} + \hat{L}(w)] &= \hat{N}^2 \beta \nu_0 V^{-1}, \\ \nu_0 &= V^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Модельну систему, яка описується статистичним оператором

$$\hat{P}_B = \exp\{\beta \hat{N}^2 V^{-1} \nu_0 - \beta[\hat{H}_0 - \mu \hat{N}]\}, \quad (2.9)$$

будемо використовувати як базисну при розрахунку  $Z(\mu)$ . Після представлення взаємодії (2.4) набуває такої форми:

$$Z(\mu) = Z_B(\mu) \langle \hat{S} \rangle_B, \quad (2.10)$$

$$\hat{S} = T \exp\left\{-\int_0^\beta d\beta' e^{\beta'(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} \hat{K}(w) e^{-\beta'(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})}\right\},$$

Тут

$$Z_B(\mu) = \text{Sp} \hat{P}_B = \exp(-\beta \Omega_B(\mu)) - \quad (2.11)$$

статистична сума базисної системи, а  $\Omega_B(\mu)$  – її термодинамічний потенціал; символ  $\langle \dots \rangle_B$  означає статистичне середнє за станами базисної системи.  $Z_B(\mu)$  розрахуємо за допомогою методу колективних змінних, використовуючи оператор переходу [3]

$$\hat{J}(N - \hat{N}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp[2\pi i \omega (N - \hat{N})]. \quad (2.12)$$

Таким чином одержуємо представлення :

$$\begin{aligned} Z_B(\mu) &= Z_0(\mu) \int_{-\infty}^{+\infty} dN \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \exp\{\beta V^{-1} N^2 \nu_0 + 2\pi i \omega N + \\ &+ \sum_{n \geq 1} (-1)^n (n!)^{-1} (2\pi i \omega)^n S_n^0(\mu)\}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

де

$$S_n^0(\mu) = \langle \hat{N}^n \rangle_0^{3B} = -\beta^{1-n} \frac{d^n}{d\mu^n} \Omega_0(\mu), \quad (2.14)$$

$Z_0(\mu)$  – статистична сума ідеальної системи, а  $\Omega_0(\mu)$  – її термодинамічний потенціал; символ  $\langle \dots \rangle_0^{3B}$  означає зв'язне середнє за станами цієї системи. Щоб проінтегрувати за змінною  $\omega$ , скористаємось тотожністю:

$$\begin{aligned} \exp \sum_{n \geq 1} (-1)^n (2\pi i \omega)^n (n!)^{-1} S_n^0(\mu) &= \left\{ \exp \sum_{n \geq 2} \hat{D}_n \right\} \times \\ &\times \exp\{-2\pi i \omega S_1^0\}, \\ \hat{D}_n &\equiv (n!)^{-1} S_n^0(\mu) \frac{d^n}{d(S_1^0)^n}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Інтегрування за змінними  $\omega$  та  $N$  виконується елементарно і  $Z_B(\mu)$  представляється у вигляді такої диференціальної форми :

$$Z_B(\mu) = Z_0(\mu) \left\{ \exp \sum_{n \geq 2} \hat{D}_n \right\} \exp\{\beta V^{-1} [S_1^0(\mu)]^2 \nu_0\}. \quad (2.16)$$

Беручи до уваги, що  $S_1^0(\mu) \sim N$ , а

$$\begin{aligned} \hat{D}_n \exp\{\beta V^{-1} \nu_0 [S_1^0(\mu)]^2\} &= \exp\{\beta V^{-1} \nu_0 [S_1^0(\mu)]^2\} \times \\ &\times \{[2\beta \nu_0 V^{-1} S_1^0(\mu)]^n + \beta \nu_0 V^{-1} n(n-1) \times \\ &\times [2\beta \nu_0 V^{-1} S_1^0(\mu)]^{n-2} + \dots\}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

бачимо, що в термодинамічній границі  $N, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$

$$\begin{aligned} \Omega_B(\mu) &= -V^{-1} \nu_0 [S_1^0(\mu^*)]^2 + \Omega_0(\mu) - \\ &- \beta^{-1} \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} S_n^0(\mu^*) [2V^{-1} \beta \nu_0 S_1^0(\mu^*)]^n + \dots \end{aligned} \quad (2.18)$$

Враховуючи співвідношення (2.14), знаходимо

$$\begin{aligned} \Omega_B(\mu) &= \Omega_0(\mu^*) + V^{-1} [S_1^0(\mu^*)]^2 \nu_0, \\ \mu^* &\equiv \mu + 2\nu_0 V^{-1} S_1^0(\mu^*). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Цей асимптотично точний вираз для  $\Omega_B(\mu)$  легко одержати за допомогою самоузгодженого наближення, скориставшись тотожністю

$$\hat{N}^2 = 2\hat{N} S_1^0 - (S_1^0)^2 + [\hat{N} - S_1^0]^2. \quad (2.20)$$

Нехтуючи останнім членом у правій стороні (2.20), одержуємо (2.19). Врахування моментів доданка  $[\hat{N} - S_1^0]^2$  за розподілом  $\exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu^* \hat{N})]$  приводить до поправок, що мають “зайві” степені множника  $V^{-1}$  і є несуттєвими в термодинамічній границі. Проведений розрахунок  $Z_B(\mu)$  обґрунтовує також наближення, які були зроблені при записі рівнянь (2.6) - (2.7) [2].

Оскільки  $S_1^0(\mu) = -\frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_0(\mu)$ , то умова  $N = -\frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_B(\mu)$ , яка визначає хімічний потенціал базисної системи, зводиться до рівняння

$$-\frac{\partial}{\partial \mu^*} \Omega_0(\mu^*) = N. \quad (2.21)$$

Отже,

$$\mu^* = \mu_{id} \equiv \mu_{id} \left( \beta, \frac{N}{V} \right), \quad (2.22)$$

а хімпотенціал базисної системи рівний

$$\mu_B = \mu_B \left( \beta, \frac{N}{V} \right) = \mu_{id} - 2 \frac{N}{V} \nu_0, \quad (2.23)$$

де  $\mu_{id}$  – хімічний потенціал ідеальної системи електронів. Звідси випливає такий вираз для вільної енергії базисної системи :

$$F_B = \Omega_B(\mu_B) + N \mu_B = F_{id} - \frac{N^2}{V} \nu_0. \quad (2.24)$$

При цьому  $F_{id}$  – вільна енергія ідеальної системи, а  $\nu_0$  не залежить від температури. Таким чином, циклічне перетворення (2.2), (2.5) статистичної суми еквівалентне представленню зміщень при абсолютному нулі температури.

Врахування множника  $Z_B(\mu)$  приводить до виразу для вільної енергії, який обмежує знизу енергію основного стану моделі електронної рідини при всіх  $r_s$ . В роботі [2] показано, що цей вираз є асимптотично точним в границі низьких густин ( $r_s \gg 1$ ). Ми покажемо тут, що розрахунок середнього у формулі (2.10) за теорією збурень приводить до результатів, справедливих в широкій області параметра неідеальності. Розрахунок середнього  $\langle \hat{S} \rangle_B$  виконується так само, як і засереднення за станами ідеальної системи.

Приведемо тут явний вираз для комутатора  $\hat{K}(w)$  :

$$\begin{aligned} [\hat{H}_0, \hat{W}]_- &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \times \\ &\times \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{m=1}^n \left( \mathbf{k}_m + \frac{\mathbf{q}_m}{2}, \mathbf{q}_m \right) \hat{J}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Тут введено  $\mathbf{k}$ -компоненти операторів  $\hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ , які визначаються таким співвідношенням:

$$\begin{aligned} \hat{J}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) &= \sum_{s_1, \dots, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ \times \\ &\times a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

$\hat{S}$ -матриця записується в такій формі:

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \tilde{T} \exp \left\{ - \int_0^\beta \sum_{n \geq 2} \frac{\hbar^2}{m} V^{1-n} [(n-1)!]^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \times \right. \\ &\times \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \times \\ &\times \left. \hat{f}_{\mathbf{q}_1}(\beta') \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}(\beta') \dots \hat{\rho}_{\mathbf{q}_n}(\beta') d\beta' \right\}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Тут

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta') = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\beta') a_{\mathbf{k}, s}(\beta'), \quad (2.28)$$

$$\hat{f}_{\mathbf{q}}(\beta') = \sum_{\mathbf{k}, s} \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right) a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\beta') a_{\mathbf{k}, s}(\beta'),$$

а  $\tilde{T}$  – символ узагальненого хронологічного впорядкування [4], який, крім звичайних властивостей, має ще властивість приводити добуток операторів до нормальної форми при співпадаючих значеннях змінної  $\beta'$ , а саме

$$\tilde{T} \{ a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\beta') a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\beta') \} = -a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\beta') a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\beta'). \quad (2.29)$$

Від представлення (2.27) легко перейти до частотного представлення [4], вводячи суперпозицію фермі-операторів у зображенні взаємодії

$$a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) = \beta^{-1/2} \int_0^\beta a_{\mathbf{k}, s}(\beta') \exp(i\nu^* \beta') d\beta', \quad (2.30)$$

де  $\nu^* = (2n+1)\pi\beta^{-1}$  – частоти Фермі-Мацубари [5]. Використовуючи методику роботи [3], одержуємо таке частотне зображення :

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \tilde{T} \exp \left\{ - \sum_{n \geq 2} \frac{\hbar^2}{m} (\beta V)^{1-n} [(n-1)!]^{-1} \sum_{x_1, \dots, x_n} \delta_{x_1 + \dots + x_n, 0} \times \right. \\ &\times \left. \delta_{x_1 + \dots + x_n, 0} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \hat{f}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \dots \hat{\rho}_{x_n} \right\}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

При цьому

$$\hat{\rho}_x = \hat{\rho}_{\mathbf{q},\nu} = \sum_{\mathbf{k},s;\nu^*} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*) - \quad (2.32)$$

спектральне представлення оператора електронної густини,

$$\hat{f}_x = \hat{f}_{\mathbf{q},\nu} = \sum_{\mathbf{k},s;\nu^*} \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*) , \quad (2.33)$$

$x \equiv (\mathbf{q}, \nu)$ , де  $\nu = 2n\pi\beta^{-1}$  – частоти Бозе-Мацубари [5]. Представлення (2.31) узагальнює вираз для  $S$ -матриці в теорії фермі-систем, запропонований в роботі [4]. Оператори  $a_{\mathbf{k},s}(\nu^*)$  не мають самостійного змісту, вони є лише зручними позначеннями. Однак їм можна надати такого змісту, якщо визначити правило розрахунку середніх від добутку цих операторів. Як доведено в роботі [6],

$$- \langle \tilde{T} \{ a_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*) a_{\mathbf{k}_2,s_2}^+(\nu_2^*) \} \rangle_0 = G_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{s_1,s_2} \delta_{\nu_1^*,\nu_2^*}, \quad (2.34)$$

де  $G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) = [i\nu^* - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu]^{-1} e^{i\nu^*\delta}$  – спектральне представлення одночастинкової функції Гріна базисної (ідеальної) системи ( $\delta \rightarrow +0$ ).

Для розрахунку середнього в (2.10) використаємо теорію збурень. В силу антиермітовості оператора  $\hat{K}(w)$  внески всіх непарних порядків теорії збурень рівні нулеві. З цієї ж причини рівні нулеві також всі власноенергетичні діаграми, або діаграми з такими елементами. У зв'язку з цим перетворення (2.2) інваріантне відносно заміни  $\hat{W} \rightarrow -\hat{W}$ . Розглянемо спочатку діаграми другого порядку теорії збурень, побудовані на парному ефективному потенціалі  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ . Внесок поляризаційних діаграм у термодинамічний потенціал дорівнює

$$-(2\beta)^{-1} (\beta V)^{-2} \sum_x \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \{ \langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0^2 + \quad (2.35)$$

$$+ \times \langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 \langle \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \rangle_0 \} .$$

Середні, що тут фігурують, визначаються через спектральні зображення функцій Гріна ідеальної системи:

$$\langle \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \rangle_0 = - \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^0(\nu^* + \nu) = \beta \tilde{\mu}_2^0(x, -x),$$

$$\langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^0(\nu^* + \nu) G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right)^2,$$

$$\langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^0(\nu^* + \nu) G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right). \quad (2.36)$$

Обчислення сум за непарними частотами здійснюється за правилом

$$\beta^{-1} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) = n_{\mathbf{k},s}^F = \{ \exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)] + 1 \}^{-1}. \quad (2.37)$$

Суми за парними частотами обчислюються таким чином [6]:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \beta^{-1} \sum_{\nu} (i\nu + E)^{-1} e^{\pm i\delta\nu} = \begin{cases} 1 + n_E^B, \\ n_E^B, \end{cases} \quad (2.38)$$

$$n_E^B = \{ \exp(\beta E) - 1 \}^{-1} .$$

Після нескладних, але громіздких перетворень приводимо внесок (2.35) до такої форми :

$$\left( \frac{N}{V} \right)^2 \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{\mu}_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) 2 \frac{N}{V} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \quad (2.39)$$

Тут

$$\tilde{\mu}_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = \beta^{-1} \sum_{\nu} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) = - \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}^F n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^F = \quad (2.40)$$

$$= \begin{cases} -N \{ 1 - 3q/4k_F + (q/k_F)^3/16 \} & \text{при } q \leq 2k_F, \\ 0 & \text{при } q > 2k_F. \end{cases}$$

Врахування обмінної діаграми другого порядку приводить до такого внеску у термодинамічний потенціал :

$$- \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^2 \beta^{-3} V^{-2} \sum_{x_1, x_2} \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} \times$$

$$\times G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,s}^0(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,s}^0(\nu^* + \nu_2) \times \quad (2.41)$$

$$\times G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,s}^0(\nu^* + \nu_1 + \nu_2) \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}_1}{2}, \mathbf{q}_1 \right) \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}_2}{2}, \mathbf{q}_2 \right) .$$

Після обчислення сум за частотами і елементарних перетворень (2.41) набуває такого вигляду:

$$(2!V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \tilde{\mu}_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) + \quad (2.42)$$

$$+ (3!)^{-1} V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) ,$$

де  $V_3(\dots)$  визначено у (2.7), а

$$\tilde{\mu}_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = 2 \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,s}^F n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,s}^F n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,s}^F \times$$

$$\times \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0} - \quad (2.43)$$

фур'є-образ тричастинкової кореляційної функції базисної системи. Як видно з (2.42), перший доданок є поправкою до другого доданку (2.39) і зводиться до заміни в ньому множника  $2\frac{N}{V}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\dots)$  на  $2\frac{N}{V}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\dots) + \Psi_2^{(2)}(\dots)$ . Врахування внесків, пропорційних до  $\nu_n(\dots)$  при  $n \geq 3$ , зводиться до заміни цього виразу на

$$2\frac{N}{V}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\dots) + \sum_{m \geq 2} \Psi_2^{(m)}(\dots) = V_{\mathbf{q}}, \quad (2.44)$$

як це впливає з рівнянь (2.6) при  $T = 0K$ . Перший доданок (2.39) цілком компенсує внесок функції  $\nu_1$ , а другий (при врахуванні  $\Psi_2^{(m)}(\dots)$ ) дає обмінну енергію  $\epsilon_{HF}(r_s) = -\frac{3\eta}{2\pi}r_s^{-1}$ , де  $\eta = (9\pi/4)^{1/3}$ , а  $r_s$  – параметр Вігнера-Бракнера.

Сума ряду поляризаційних діаграм, що виникають у четвертому і вищих порядках теорії збурень і побудовані на  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ , приводить до такого аналогу наближення хаотичних фаз для кореляційної енергії :

$$\begin{aligned} E_c &= (2\beta)^{-1} \sum_x \{\ln[1 + L_x] - L_x\}, \quad (2.45) \\ L_x &= -\left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) (\beta V)^{-2} \left[ \langle \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \rangle_0 \langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 + \right. \\ &\quad \left. + \langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0^2 \right]. \end{aligned}$$

Середні  $\langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0$  та  $\langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0$  легко виразити через парну кореляційну функцію базисної системи  $\tilde{\mu}_2^0(x, -x)$  :

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 &= -\beta i \nu \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x), \quad (2.46) \\ \langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 &= -2\beta N \epsilon_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-2} + \nu^2 \beta \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-2} \tilde{\mu}_2^0(x, -x). \end{aligned}$$

Звідси випливає, що

$$L_x = v_{ef}(q) V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x), \quad v_{ef}(q) = 2NV^{-1} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \quad (2.47)$$

В границі малих хвильових векторів функція  $L_x$  близька до  $V_{\mathbf{q}} V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x)$ , а через це  $E_c$  близька до кореляційної енергії електронної рідини в наближенні хаотичних фаз, що справедливо для високих густин ( $r_s \leq 1$ ). Оскільки  $V_{ef}(q)$  має характер фур'є-образу потенціала квантового пакета, то кореляційна енергія  $E_c$  моделі при

проміжних значеннях параметра неідеальності приймає вищі значення, ніж у звичайній теорії збурень на кулонівському потенціалі.

Таким чином, представлення зміщень або циклічне перетворення статистичної суми можна розглядати як ефективний спосіб врахування кореляційних ефектів, зокрема ефектів локального поля у фермі-системах. Дійсно, спектральне представлення парної кореляційної функції [4]

$$\mu_2(x, -x) = Z^{-1}(\mu^*) \text{Sp} \{ \tilde{T} [\hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} e^{-\beta(\hat{H} - \mu^* N)}] \} \quad (2.48)$$

в наближенні хаотичних фаз для оператора  $\hat{K}$  дорівнює

$$\mu_2(x, -x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) \{1 + L_x\}^{-1}. \quad (2.49)$$

Оскільки в наближенні локального поля [7]

$$\mu_2(x, -x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) \left\{ 1 + \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) [1 - G_x] \right\}^{-1}, \quad (2.50)$$

то статична поправка на локальне поле у нашому підході визначається співвідношенням :

$$G_q^0 = 1 - 2\epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) N(VV_{\mathbf{q}})^{-1} = 1 - V_{ef}(q) V_{\mathbf{q}}^{-1}. \quad (2.51)$$

Якщо  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  визначається з рівнянь (2.6), то  $G_q^0$  у змінних  $x = qa_0 n^{-1/3}$  є безрозмірною універсальною функцією, яка не залежить від фізичних параметрів.

Така функція має загальні властивості поправки на локальне поле цієї моделі і змінюється в границях від нуля до одиниці, квадратична відносно  $q$  в області малих імпульсів

$$G_q^0 \simeq \gamma (q/k_F)^2 + \dots, \quad \gamma \simeq 0, 32, \dots, \quad (2.52)$$

слабо залежить від хвильового вектора при великих  $|\mathbf{q}|$ . Як відомо [7], поправка на локальне поле залежить від параметра неідеальності  $r_s$ . Через це  $G_q^0$  не можна цілком ототожнювати з поправкою на локальне поле, її можна розглядати як певне наближення для цієї функції для сильно неідеальних систем, де залежність від  $r_s$  є слабою, короткохвильова асимптотика близька до одиниці, а сама поправка є монотонною функцією  $|\mathbf{q}|$ .

### 3. Розрахунки й обговорення результатів

В рамках методу циклічного перетворення (або зображення зміщень при  $T = 0K$ ) розрахуємо тут інтегральні та одночастинкові характеристики моделі електронної рідини – кореляційну енергію, бінарну функцію розподілу та розподіл частинок за імпульсами.

Переходячи в (2.45) до абсолютного нуля температури і виділяючи внесок ідеальних кореляцій, що описуються функцією  $\mu_2^0(x, -x)$ , зобразимо енергію основного стану моделі в традиційній формі

$$E = E_{id} + E_{HF} + E_c = N\{\varepsilon_0(r_s) + \varepsilon_{HF}(r_s) + \varepsilon_c(r_s)\}Ry, \quad (3.1)$$

де  $E_{id}$  – енергія ідеальної системи,  $E_{HF}$  – внесок, що відповідає наближенню Хартрі-Фока, а  $E_c$  – так звана кореляційна енергія – внесок кореляцій, зумовлених взаємодією ( $\varepsilon_0(r_s)$ ,  $\varepsilon_{HF}(r_s)$  і  $\varepsilon_c(r_s)$  – безрозмірна форма названих вище трьох складових енергії системи; при цьому  $\varepsilon_0(r_s) = \frac{3}{5}(\eta/r_s)^2$ ,  $\varepsilon_{HF}(r_s) = -\frac{3}{2\pi} \eta/r_s$ ).

Переходячи у формулах (2.45)-(2.47) до безрозмірних змінних  $x = qa_0n^{-1/3}$  (де  $n = 4\pi a_0^3NV^{-1}$ ,  $a_0$  – радіус Бора) та замінюючи суми за частотою  $\nu$  і хвильовим вектором  $\mathbf{q}$  інтегралами, одержуємо такий вираз для кореляційної енергії:

$$\varepsilon_c(r_s) = \frac{3}{2\pi} \left(\frac{4}{\pi}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \int_0^\infty du \int_0^\infty dx x^3 \{\ln[1 + L_x] - L_x\}, \quad (3.2)$$

$$L_x = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{2/3} \cdot \frac{r_s}{x^2} Z_2^2(x) I_{2,0} \left(x \left[\frac{4}{3\pi}\right]^{1/3}, u\right).$$

Тут  $u = \nu(2\varepsilon_F q)^{-1} k_F$ , а

$$Z_2(x) = x^2 y_2(x), \quad y_2(x) = -\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})(4\pi a_0^3)^{-1} n^{7/6}. \quad (3.3)$$

Згідно з аналітичними і числовими розрахунками робіт [1, 2] функція  $y_2(x)$  може бути апроксимована таким виразом:

$$y_2(x) \simeq x^{-2} \{1 + ax^2 - bx^4 [1 + ax^2]^{-1}\}^{-3/4} \times \\ \times \{1 + dx^2 [1 + cx^2 + lx^4]^{-1}\}, \quad (3.4) \\ a = 4(9\pi^2)^{-2/3} [1 - \xi]^{-1}, \quad b = a^2 \xi, \quad \xi = 0,2929.$$

Значення коефіцієнтів  $d$ ,  $c$  та  $l$  залежать від наближень, що використовувались при розв'язанні рівняння для  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ . Асимптотичний розв'язок відповідає  $d = 0$ ; при врахуванні  $\Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  маємо

$d = 0,0587$ ,  $c = -0,886$ ,  $l = 0,201$ ; при врахуванні ще й  $\Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  та  $\Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  одержуємо  $d = 0,2521$ ,  $c = 0,0998$ ,  $l = 0,1396$ . На рис. 1 приведена функція  $G_q^0$ : крива 1 відповідає  $d = 0$ , крива 2 – врахуванню  $\Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ , крива 3 – також  $\Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  та  $\Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ .

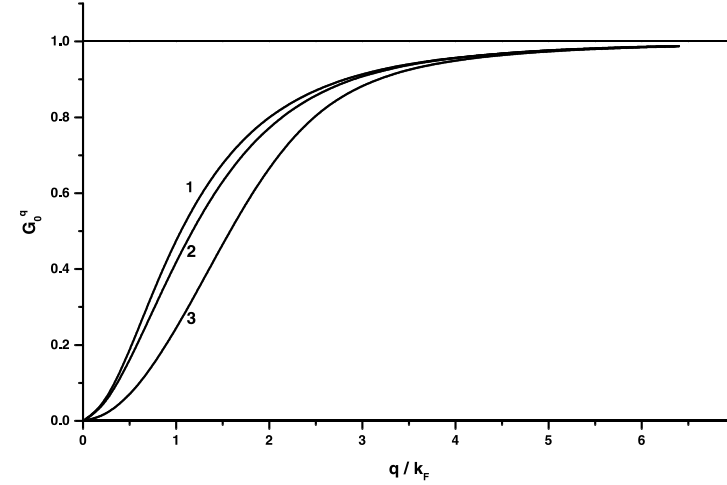


Рис. 1. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в області  $0 \leq r_s \leq 10.0$  в наближенні хаотичних фаз у розвинутому підході.

Наближенню хаотичних фаз звичайної теорії збурень на кулонівському потенціалі відповідає  $Z_2(x) = 1$ . Функція  $I_{2,0}(q, u)$  – безрозмірний множник кумулянта  $\tilde{\mu}_2^0(x, -x)$ :

$$I_{2,0}(q, u) = 2\varepsilon_F(3N)^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) = \quad (3.5) \\ = \frac{1}{2} \left\{ 1 + (2q)^{-1} [1 + u^2 - q^2/4] \ln \frac{u^2 + (1 + q/2)^2}{u^2 + (1 - q/2)^2} - \right. \\ \left. - u \left[ \arctg \frac{1 + q/2}{u} + \arctg \frac{1 - q/2}{u} \right] \right\}.$$

Результати розрахунку кореляційної енергії у наближенні (3.2)-(3.4) наведені в таблиці 1. Тут для порівняння подана також кореляційна енергія в наближенні хаотичних фаз звичайної теорії збурень  $\varepsilon_c^{RPA}(r_s)$  на кулонівському потенціалі, а також розрахована методом Монте-Карло [8]  $\varepsilon_c^{MC}(r_s)$  та результати деяких інших робіт. Як

видно з таблиці, кореляційна енергія, обчислена за формулою (3.2), дуже близька до результату роботи [8], особливо в області слабкої та проміжної неідеальності. Але і при  $r_s = 10,0$  відносно відхилення складає лише 6 %. Кореляційна енергія близька також до результатів роботи [9], що ґрунтується на використанні поляризаційного оператора, розрахованого в рамках звичайної теорії збурень при врахуванні кореляційних функцій ідеальної системи  $\tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, x_3)$  та  $\tilde{\mu}_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2)(\epsilon_c^{PRPA})$ , а також до результатів розрахунку кореляційної енергії на основі динамічної поправки на локальне поле [10]. Згідно з формулою (2.49) для бінарної функції розподілу електронів маємо таке зображення:

$$F_2(\mathbf{r}) = 1 + [N(N-1)\beta]^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \times \quad (3.6)$$

$$\times \{1 + \tilde{\mu}_2^0(x, -x)V^{-1}v_{ef}(\mathbf{q})\}^{-1}.$$

Табл. 1. Кореляційна енергія моделі електронної рідини ( $-10^3\epsilon_c(r_s)$ )

$r_s$	0.01	0.1	1	2	3	4	5	6	8	10
RPA	428.9	288.0	157.6	123.6	105.5	93.6	84.95	78.2	-	61.3
[8]	-	-	120.0	90.2	-	-	56.3	-	-	37.2
[9]	-	-	119.7	89.3	72.9	62.1	54.2	48.0	-	32.6
[11]	380.6	242.6	120.0	89.6	73.8	63.6	56.3	50.7	-	37.1
[12]	-	-	117.4	86.9	71.1	61.0	53.8	48.3	-	35.0
[13]	-	-	112.0	89.0	75.0	65.0	58.0	52.0	-	35.0
[14]	-	-	122.0	90.4	73.8	63.4	56.0	50.5	-	23.6
(3.2)	398.4	253.7	120.0	87.5	71.2	60.8	53.6	48.1	40.3	35.0

На рис. 2 наведено сім'ю кривих для функції  $F_2(\mathbf{r})$  в цьому наближенні ( $0 \leq r_s \leq 10,0$ ). Як бачимо з рисунка, в області  $r_s \leq 7,0$  бінарна функція має цілком коректну поведінку, і тільки при більших значеннях  $r_s$  приймає невеликі від'ємні значення в околі точки  $r = 0$ . Як відомо, у звичайному наближенні хаотичних фаз на потенціалі Кулона бінарна функція приймає від'ємні значення при малих  $r$  вже в області  $r_s \geq 0,88\dots$  Отже циклічне перетворення призводить до дуже великого розширення області застосування наближення хаотичних фаз. В таблиці 2 наведено значення бінарної функції розподілу при  $r = 0$  в цьому наближенні.

Як впливає з даних рис. 2 і таблиці 2, розрахована в цьому наближенні бінарна функція розподілу дуже близька до результатів

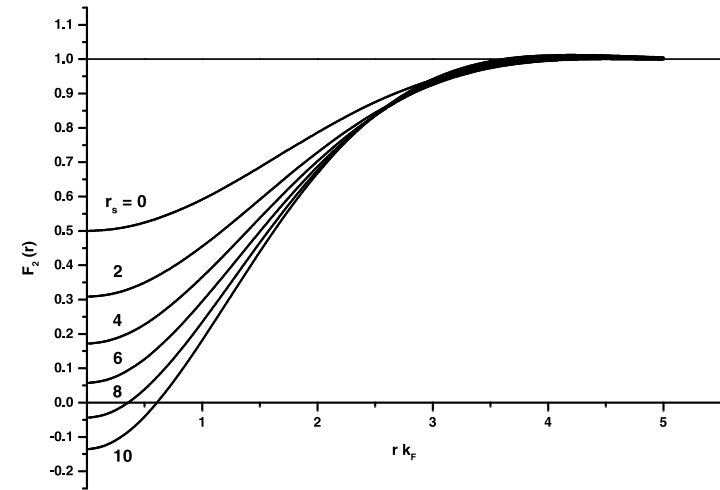


Рис. 2. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в області  $0 \leq r_s \leq 10,0$  в наближенні хаотичних фаз у розвинутому підході.

Табл. 2. Бінарна функція розподілу при  $r = 0$

$r_s$	1	2	3	4	5	6	7	10
RPA	-0.125	-0.657	-1.141	-1.594	-2.022	-2.431	-2.826	-3.936
[12]	0.279	0.181	0.128	0.094	0.070	0.052	0.036	0.011
(3.6)	0.391	0.308	0.236	0.172	0.112	0.056	0.005	-0.136



розрахунку в наближенні локального поля [10].

Розподіл електронів за імпульсами є важливою і ще недостатньо вивченою характеристикою моделі електронної рідини. Ми розрачуємо її у змінних канонічного ансамблю на основі співвідношення

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k},s} &= \langle a_{\mathbf{k},s}^{\dagger} a_{\mathbf{k},s} \rangle_{H-\mu^*N} = Z^{-1}(\mu^*) \times \\ &\times \text{Sp} \{ a_{\mathbf{k},s}^{\dagger} a_{\mathbf{k},s} e^{-\beta(\hat{H}-\mu^*\hat{N})} \} = \\ &= -\frac{1}{2\beta} \cdot \frac{\delta}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}} \ln Z(\mu^*)|_{\mu^*} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}} \Omega(\mu^*)|_{\mu^*}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Тут  $\mu^*$  – значення хімічного потенціалу моделі, який є функціоналом  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Використаємо наближення для термодинамічного потенціалу, що відповідає наближенню (3.1) для енергії основного стану

$$\Omega(\mu^*) = \Omega_0(\mu^*) + \Omega_{HF}(\mu^*) + \Omega_c(\mu^*). \quad (3.8)$$

Тут  $\Omega_0(\mu^*)$  – термодинамічний потенціал базисної системи,  $\Omega_{HF}(\mu^*)$  – наближення Хартрі-Фока,  $\Omega_c(\mu^*)$  – кореляційний внесок наближення хаотичних фаз. Згідно з формулою (3.7)

$$n_{\mathbf{k},s} = n_{\mathbf{k},s}^F - \frac{1}{4\beta} \sum_x L_x [1 + L_x]^{-1} \frac{\delta L_x}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.9)$$

де  $n_{\mathbf{k},s}^F$  – розподіл електронів за імпульсами в ідеальній системі. Оскільки

$$\begin{aligned} \frac{\delta L_x}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}} &= V^{-1} v_{ef}(q) \frac{\delta}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tilde{\mu}_2^0(x, -x), \\ \frac{\delta}{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) &= 2 \sum_{\sigma=\pm 1} (n_{\mathbf{k},s}^F - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma,s}^F) (i\nu\sigma + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})^{-2}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

то для розподілу електронів за імпульсами одержуємо таке узагальнення відомого наближення в рамках хаотичних фаз звичайної теорії збурень:

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k},s} &= n_{\mathbf{k},s}^F - \frac{1}{\beta V^2} \sum_x v_{ef}^2(q) \tilde{\mu}_2^0(x, -x) \times \\ &\times [1 + V^{-1} v_{ef}(q) \tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-1} \times \\ &\times (n_{\mathbf{k},s}^F - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^F) \text{Re}[i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}]^{-2}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

У границі слабо неідеальної системи, коли важливі малі значення хвильових векторів у сумі за змінною  $x$  і  $v_{ef}(q) = 2 \frac{N}{V} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \varepsilon_{\mathbf{q}}$

можна замінити кулонівським потенціалом, (3.11) збігається із результатом наближення хаотичних фаз звичайної теорії збурень. Однак у випадку проміжної чи сильно неідеальності (3.11) приводить до значно менших відхилень  $n_{\mathbf{k},s}$  від  $n_{\mathbf{k},s}^F$ , ніж у звичайній теорії збурень [15].

Як відомо, особливістю  $n_{\mathbf{k},s}$  у вироджених системах є наявність залишкової поверхні Фермі. При абсолютному нулі температури у парамагнітній фазі [16]

$$\Delta = n_{k_F - \delta, s} - n_{k_F + \delta, s} \geq 0; \quad \delta > 0, \delta \rightarrow 0. \quad (3.12)$$

Ця нерівність підтверджена методами теорії збурень у випадку слабо неідеальних систем. Зокрема в роботі [17] такий розрахунок виконано для модельної фермі-системи з короткодійчим потенціалом взаємодії (у другому порядку теорії збурень). У роботі [15] вперше досліджено  $n_{\mathbf{k},s}$  у моделі електронної рідини в наближенні хаотичних фаз. У випадку сильно неідеальної електронної рідини в цьому наближенні умова (3.12) порушується і  $\Delta \equiv \Delta(r_s)$  приймає від'ємні значення при  $r_s \geq 5, 7, \dots$ . Відзначимо, що при розрахунку інших характеристик наближення хаотичних фаз звичайної теорії збурень незастосовне вже при набагато нижчих значеннях параметрах неідеальності. Нами розраховано  $n_{\mathbf{k},s}$  для моделі електронної рідини у наближенні (3.11) для випадку абсолютного нуля температури, коли інтегрування за кутковими змінними вектора  $\mathbf{q}$  виконується в аналітичній формі. Переходячи від змінних  $|\mathbf{q}|$  та  $\nu$  до безрозмірних  $q^* = |\mathbf{q}| k_F^{-1}$ ,  $u = \nu / 2\varepsilon_F q^*$ , а потім від  $q^*$  до змінної  $x = |\mathbf{q}| a_0 n^{-1/3}$ , представимо  $n_{\mathbf{k},s}$  у вигляді двократних інтегралів ( $k = |\mathbf{k}| k_F^{-1}$ ):

при  $0 \leq k \leq 1$

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{k},s} &= 1 + \frac{a^2}{4\pi k} \int_0^\infty du \left\{ \int_{(1-k)/a}^{(1+k)/a} \frac{dx}{x} \Psi(x; u) \left[ \frac{\frac{k^2-1}{2xa}}{(\frac{k^2-1}{2xa})^2 + u^2} + \right. \right. \\ &\left. \left. \frac{k + \frac{x}{2}a}{(k + \frac{x}{2}a)^2 + u^2} \right] + \int_{(1+k)/a}^\infty \frac{dx}{x} \Psi(x; u) \sum_{\sigma=\pm 1} \frac{k + \frac{x}{2}a\sigma}{(k + \frac{x}{2}a\sigma)^2 + u^2} \right\}; \end{aligned}$$

при  $k > 1$

$$n_{\mathbf{k},s} = \frac{a^2}{4\pi k} \int_0^\infty du \int_{(k-1)/a}^{(k+1)/a} \frac{dx}{x} \Psi(x; u) \left\{ \frac{\frac{k^2-1}{2xa}}{(\frac{k^2-1}{2xa})^2 + u^2} - \right.$$

$$\left. - \frac{k - \frac{x}{2}a}{(k - \frac{x}{2}a)^2 + u^2} \right\}; \quad (3.13)$$

$$\Psi(x; u) = I_{2,0}(xa; u) \left[ \left( \frac{4}{\pi} \right)^{2/3} r_s Z_2^2(x) \right]^2 \left[ x^2 + \left( \frac{4}{\pi} \right)^{2/3} \times \right.$$

$$\left. \times r_s Z_2^2(x) I_{2,0}(xa; u) \right]^{-1};$$

$$Z_2(x) \equiv x^2 y_2(x); \quad a = \left( \frac{4}{3\pi} \right)^{1/3}.$$

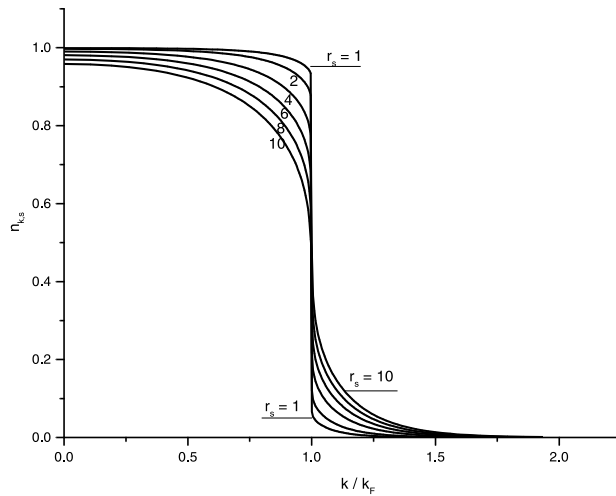


Рис. 3. Розподіл електронів за імпульсами в моделі електронної рідини в тому ж наближенні.

Результати розрахунку ілюструє рис. 3, на якому наведено сім'ю кривих  $n_{\mathbf{k},s}$  при заданих значеннях параметра неідеальності  $r_s$ . Умова (3.12) порушується лише в області  $r_s \geq 9, 7, \dots$ . Відзначимо, що при використанні статичної поправки на локальне поле роботи [10] ця умова порушується при  $r_s \geq 8, 0, \dots$ . Отже (3.13) ще більше розширює область параметра неідеальності, в якій справедливе наближення хаотичних фаз при розрахунку розподілу електронів за імпульсами.

\* \* \*

Проведені розрахунки характеристик моделі електронної рідини свідчать, що циклічне перетворення статистичної суми (або мо-

дифіковане зображення зміщень) реалізує перенормовану теорію збурень, діаграми якої побудовані на ефективних потенціалах, що відповідають врахуванню ефектів локального поля. Кореляційна енергія, розрахована в наближенні хаотичних фаз цього варіанту, близька до результатів розрахунку методом Монте-Карло. Бінарна функція розподілу та розподіл частинок за імпульсами моделі електронної рідини в цьому наближенні близькі до результатів розрахунків у наближенні локального поля при використанні сучасних варіантів поправки на локальне поле.

Уточнення розрахованих характеристик вимагає виходу за рамки наближення хаотичних фаз нашого підходу, який може бути зрозумілий за методикою роботи [9].

## Література

1. Ваврух М.В., Куштай Я.В. Представлення зміщень і апроксимаційний статистичний оператор неідеальних фермі-систем. - Львів, 1996. - (Препринт Ін-ту фізики конденс. систем; ICMP-96-10U).
2. Ваврух М.В., Куштай Я.В. Апроксимаційний статистичний оператор для сильно неідеальних фермі-систем // ЖФД. - 1996. - **1**, N 1. - С. 12-24.
3. Ваврух М.В. Колективні зміни в двосортній системі // Вісник Львів. держ. ун-ту. - 1968. - **3**. - С. 26.
4. Ваврух М.В. Базисний підхід в теорії фермі-систем взаємодіючих частинок // Укр. фіз. журн. - 1991. - **36**, N 1. - С. 150-157.
5. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. - М.: Физматгиз, 1962. - 443 с.
6. Ваврух М.В., Буній Р.В. Про спектральне зображення температурних функцій Гріна // Доп. НАН України. - 1995. - Сер. А., N 4. - С. 48-53.
7. Ваврух М.В. Обобщение концепции локального поля в теории ферми-жидкостей // ФНТ. - 1996. - **22**, N 9. - С. 1005-1017.
8. Ceperley D.M., Alder B.J. Ground state of the electron gas by a stochastic method // Phys. Rev. Lett. - 1980. - **45**, N 7. - P. 566-569.
9. Ваврух М.В., Крохмальський Т.Є. Розрахунок характеристик електронного газу в області проміжних густин // Укр. фіз. журн. - 1991. - **36**, N 2. - С. 296-302.

10. Vavrukh M., Vavrukh N., Solovyan V. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory. III. Dynamic function of local-field correction // *Phys. stat. sol. (b)*. - 1993. - **177**, N 2. - P. 361-371.
11. Vosko S.H., Wilk L., Nusair N. Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculation // *Can. J. Phys.* - 1980. - **58**, N 8. - P. 1200-1211.
12. Ichimaru S. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids // *Rev. Mod. Phys.* - 1982. - **54**, N 4. - P. 1017-1059.
13. Vashishta P., Singwi K.S. Electron correlation at metallic densities. V // *Phys. Rev. B*. - 1972. - **6**, N 3. - P. 875-887.
14. Zabolitsky J.C. Hypernatted-chain Euler-Langrange equations and the electron fluid // *Phys. Rev. B*. - 1980. - **22**, N 5. - P. 2353-2372.
15. Daniel E., Vosko S.N. Momentum distribution of an interacting electron gas // *Phys. Rev.* 1960. - **120**, N 8. - P. 2041-2044.
16. Мигдал А.Б. О распределении взаимодействующих ферми-частиц по импульсам // *ЖЭТФ*. - 1957. - **32**, вып. 2. - С. 399-400.
17. Беляков В.А. Распределение частиц по импульсам в разреженном ферми-газе // *ЖЭТФ*. - 1961. - **40**, вып. 4. - С. 1210-1211.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Маркіян Васильович Ваврух  
Ярослав Васильович Куштай  
Володимир Борисович Солов'ян  
Нестор Любомирович Тишко

МОДИФІКОВАНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ЗМІЩЕНЬ І ЦИКЛІЧНЕ  
ПЕРЕТВОРЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ В ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ  
РІДИНИ

Роботу отримано 24 червня 1998 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних  
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені