

УДК 537.31.311
PACS 05.30.Fk

ЦИКЛІЧНЕ ПЕРЕТВОРЕННЯ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ В ТЕОРІЇ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

М. Ваврух¹, Я. Куштай², С. Смерчинський¹

¹ Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005 Львів, Україна

² Львівський коледж державного університету телекомунікацій
вул. В.Великого, 12, 79053 Львів, Україна

Розраховано енергію основного стану і бінарну функцію розподілу моделі електронної рідини в широкій області параметра неідеальності ($1 \leq r_s \leq 50$) за допомогою методу циклічного перетворення статистичної суми, запропонованого авторами раніше. Розроблено новий варіант цього методу з метою підвищення точності розрахунку. Виконано порівняння з результатами, одержаними іншими методами, зокрема методом Монте-Карло.

Ключові слова: модель електронної рідини, перенормована теорія збурень, кореляційна енергія, бінарна функція розподілу, поправка на локальне поле, параметр неідеальності.

В роботах [1, 2] запропоновано метод циклічного перетворення статистичної суми для моделі електронної рідини як засіб покращення збіжності базисного підходу, що є перенормованою теорією збурень, сформульованою в термінах n -частинкових кореляційних функцій базисної системи – моделі вироджених електронів без взаємодії [3, 4]. Хоча переваги базисного підходу перед традиційною теорією збурень є очевидними, в області сильної неідеальності виникає необхідність врахування кореляцій високого порядку і підсумовування рядів (нерозбіжних) діаграм, що ускладнює застосування базисного підходу. Оскільки n -частинкові короткосяжні кореляції відіграють тим більшу роль, чим більше значення параметра неідеальності, то оптимальним був би такий варіант базисного підходу, діаграми якого будувались би не на потенціалі Кулона, а на ефективному потенціалі типу потенціалу квантового пакета. Саме такий підхід – циклічне перетворення статистичної суми, був запропонований у роботах [1, 2] як спосіб попередньої підготовки до наступного застосування базисного підходу. Це дає можливість використати методи, розроблені в теорії слабо неідеальних систем, до опису сильно неідеальних моделей.

У цій роботі розраховано енергію основного стану та бінарну функцію розподілу моделі електронної рідини в широкій області параметра неідеальності r_s (параметра Вігнера-Бракнера). Одержана залежність кореляційної енергії від параметра неідеальності виявилась близькою до результату методу Монте-Карло [5, 6].

Крім цього, нами запропоновано новий варіант методу циклічного перетворення з метою підвищення точності розрахунків і спрощення практичного застосування базисного підходу. Відхилення розрахованої у цьому варіанті кореляційної енергії від результатів розрахунку методом Монте-Карло [5] в області великих значень r_s складає долі відсотка.

1 Основні співвідношення

Нашим завданням є розрахунок статистичної суми моделі електронної рідини у великому канонічному ансамблі

$$Z(\mu) = Sp\{\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]\}, \quad (1)$$

де $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}$ – оператор числа частинок, \hat{H} – гамільтоніан моделі,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_k a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}, \\ \hat{V} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_q \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \\ \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут $a_{\mathbf{k},s}^+$, $a_{\mathbf{k},s}$ – оператори вторинного квантування на базисі плоских хвиль, μ – змінна хімічного потенціалу, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обернена температура, $V_q = 4\pi e^2/q^2$ – зображення Фур'є потенціалу Кулона, V – об'єм моделі ($N, V \rightarrow \infty$, $N/V = const$), $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$.

Використовуючи ермітів оператор \hat{W} , що комутує з оператором числа частинок \hat{N} і оператором міжелектронних взаємодій \hat{V} , виконаємо циклічне перетворення статистичної суми,

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= Sp\{\exp[-\hat{W}]\} \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \exp[\hat{W}] = \\ &= Sp\{\exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{V} + \hat{K} + \hat{L})]\}, \end{aligned} \quad (3)$$

де

$$\hat{K} = [\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \quad \hat{L} = \frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \hat{W}]_- \quad (4)$$

відмінні від нуля, а комутатор

$$[[[\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \hat{W}]_-, \hat{W}]_-$$

та комутатори вищих порядків дорівнюють нулеві. У роботі [2] оператор \hat{W} виби-

рався у вигляді суми ефективних локальних багаточастинкових взаємодій

$$\begin{aligned}\hat{W} &= \sum_{n \geq 2} \hat{W}_n, \\ \hat{W}_n &= (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \neq 0} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, \dots, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}.\end{aligned}\quad (5)$$

При такому виборі \hat{W}

$$\begin{aligned}\hat{K} &= \sum_{n \geq 2} \hat{K}_n, \\ \hat{K}_n &= \frac{\hbar^2}{m} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{m=1}^n \left(\left[\mathbf{k}_m + \frac{1}{2} \mathbf{q}_m \right], \mathbf{q}_m \right) \hat{J}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n), \\ \hat{J}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) &= \sum_{s_1, \dots, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}.\end{aligned}\quad (6)$$

Для ілюстрації структури оператора \hat{L} наведемо його у наближенні $\hat{W} = \hat{W}_2$:

$$\begin{aligned}\hat{L}_2 &= -\frac{\hat{N}^2}{V^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \varepsilon_q \nu^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) - \frac{\hat{N}}{V^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \varepsilon_q \nu^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\ &+ \frac{1}{V^2} \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \left\{ \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} (\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \right\} \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \\ &+ \frac{\hbar^2}{2mV^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \neq 0} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) \hat{I}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2),\end{aligned}\quad (7)$$

де в останньому рядку $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 \neq 0$.

Нехай функції $\nu_n(q_1, \dots, q_n)$ задовольняють систему рівнянь ($n \geq 2$):

$$\begin{aligned}V_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} - 2NV^{-1} \varepsilon_{q_1} \nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \delta_{n,2} - \\ - [1 - \delta_{n,2}] \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) - \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \sum_{m \geq 2} \Psi_n^{(m)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = 0.\end{aligned}\quad (8)$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned}
 V_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= V_q = 4\pi e^2/q^2, \\
 V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) &= \frac{\hbar^2}{2m} \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) &= -4 \frac{\hbar^2}{m} \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}) &= \frac{\hbar^2}{mV} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}); \\
 \Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= 2 \frac{\hbar^2}{m} \frac{N}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1} \{q_1^2 + (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})\} \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}); \\
 \Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \frac{\hbar^2 N^2}{mV^3} \sum_{\mathbf{q}_1} q_1^2 \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, -\mathbf{q}); \dots \\
 \Psi_3^{(2)}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) &= \frac{\hbar^2}{mV} \sum_{\mathbf{q}} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}, 0} \times \\
 &\times \{[(\mathbf{q}, \mathbf{q} - \mathbf{q}_1) + (\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{q}_2)] \nu_3(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}, \mathbf{q}_3) + \\
 &+ [(\mathbf{q}, \mathbf{q} - \mathbf{q}_2) + (\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{q}_3)] \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}, \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}) + \\
 &+ [(\mathbf{q}, \mathbf{q} - \mathbf{q}_1) + (\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{q}_3)] \nu_3(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 + \mathbf{q})\}; \dots \\
 \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \frac{N}{V} \sum_{i=1}^n 2\varepsilon_{q_i} \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Якщо в операторі \hat{L} у всіх доданках, крім доданка $-\hat{N}^2 V^{-2} \sum_{q \neq 0} \varepsilon_q \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$, виконати заміну $\hat{N} \rightarrow N$, то згідно з рівняннями (8) знаходимо, що

$$\hat{V} + \hat{L} = -\hat{N}^2 V^{-2} \sum_q \varepsilon_q \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \tag{10}$$

у зв'язку з чим статистична сума набуває вигляду

$$\begin{aligned}
 Z(\mu) &= \text{Sp} \left\{ \exp \left[\beta \frac{\hat{N}^2}{V} \nu_0 - \beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N} + \hat{K}) \right] \right\}, \\
 \nu_0 &= V^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \varepsilon_q \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}).
 \end{aligned} \tag{11}$$

Роль оператора міжчастинкових взаємодій тут відіграє оператор \hat{K} , в якому фігурують нелокальні ефективні потенціали, що визначаються функціями $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$.

Розв'язки системи нелінійних інтегральних рівнянь (8) можна знайти тільки в певних наближеннях. Особливе місце в цій системі займає рівняння для $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$.

Нехтуючи доданками $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ при $m \geq 3$, одержуємо замкнуте рівняння

$$V_q - 2 \frac{N}{V} \varepsilon_q \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) - \frac{\hbar^2}{mV} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) = 0. \quad (12)$$

Для аналізу цього рівняння і знаходження його наближених аналітичного та числового розв'язків перейдемо до безрозмірних змінних $\mathbf{z} = \mathbf{q} a_0 n^{-1/3}$, $y_2(z) = \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) n^{7/6} (4\pi a_0^3)^{-1}$, де a_0 – радіус Бора, $n = 4\pi a_0^3 \frac{N}{V} = 3r_s^{-3}$. У цих змінних рівняння (12) набуває вигляду

$$z^{-2} - z^2 y_2^2(z) - (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{z}_1 (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_1 - \mathbf{z}) y_2(z_1) y_2(|\mathbf{z} - \mathbf{z}_1|) = 0. \quad (13)$$

Одержане рівняння не містить жодних фізичних параметрів і визначає універсальну функцію $y_2(z)$. Рівняння (13) інваріантне щодо заміни $y_2(z) \rightarrow -y_2(z)$, але це не впливає на фізичні характеристики. Виконуючи перетворення Фур'є

$$y_2(z) = \int y_2(\rho) e^{-i(\mathbf{z}, \boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho}, \quad (14)$$

одержуємо безрозмірне рівняння в координатному зображенні

$$\{4\pi \nabla y_2(\rho)\}^2 - \rho^{-1} - 4\pi \int d\boldsymbol{\rho}_1 y_2(\rho_1) \nabla_{\rho}^2 y_2(|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_1|) = 0. \quad (15)$$

З якісного аналізу рівняння (13) випливає, що $y_2(z) \sim z^{-2}$ при $z \rightarrow 0$ ($y_2(\rho) \sim \rho^{-1}$ при $\rho \rightarrow \infty$). З рівняння (15) знаходимо, що

$$\{\nabla y_2(\rho)\}^2 \sim \rho^{-1} + \text{const} \quad \text{при} \quad \rho \rightarrow 0, \quad (16)$$

через те

$$y_2(\rho) \cong c + c_1 \rho^{1/2} + c_2 \rho^{3/2} + \dots \quad \text{при} \quad \rho \rightarrow 0. \quad (17)$$

Використовуючи цю асимптотику і метод пробних функцій [7], можна знайти асимптотично точний розв'язок рівняння (13) в аналітичному вигляді. У роботі [1] було використано сферично-симетричні функції, одна з яких є такою:

$$y_2^0(z) = A z^{-2} \{1 + a z^2 - b z^4 (1 + a z^2)^{-1}\}^{-3/4}; \quad a^2 > b. \quad (18)$$

Підставляючи пробну функцію (18) в рівняння (13), знаходимо параметри A, a, b з умов, щоб у цьому рівнянні точно компенсувались доданки типу z^{-2} при $z \gg 1$, а також z^{-2} і const при $z \ll 1$:

$$A = 1; \quad a = 4(9\pi)^{-2/3} (1 - \xi_0)^{-1}; \quad b = a^2 \xi_0; \quad \xi_0 = 0, 2929\dots \quad (19)$$

Використовуючи $y_2^0(z)$ як нульове наближення, в роботі [1] знайдено чисельний розв'язок рівняння (13) методом ітерацій. Залежність функції $y_2^0(z)$ та чисельного розв'язку $y_2(z)$ від змінної z ілюструє таблиця 1.

Табл. 1: Розв’язок рівняння (13): $y_2^0(z)$ відповідає формулі (18); $y_2(z)$ – чисельний розв’язок рівняння (13), знайдений методом ітерацій.

z	$y_2^0(z)$	$y_2(z)$	z	$y_2^0(z)$	$y_2(z)$
0.2	24.555459	24.586118	2.8	0.0404688	0.0420242
0.4	5.8388070	5.8949927	3.0	0.0326125	0.0335962
0.6	2.4109317	2.4679268	3.2	0.0265923	0.0272640
0.8	1.2420494	1.2917625	3.4	0.0219140	0.0223114
1.0	0.7226970	0.7616365	3.6	0.0182321	0.0184985
1.2	0.4549459	0.4844051	3.8	0.0153012	0.0154349
1.4	0.3028950	0.3241250	4.0	0.0129436	0.0130264
1.6	0.2104008	0.2256502	4.2	0.0110290	0.0110472
1.8	0.1511382	0.1616970	4.4	0.0094606	0.0094620
2.0	0.1115848	0.1189872	4.6	0.0081653	0.0081361
2.2	0.0842952	0.0892805	4.8	0.0070877	0.0070547
2.4	0.0649392	0.0683900	5.0	0.0061849	0.0061397
2.6	0.0508841	0.0531468			

Для зручності наступного розрахунку статистичної суми використаємо представлення взаємодії [8], а також перейдемо до “частотного” зображення операторів вторинного квантування, вводячи суперпозицію операторів породження та знищення електронів, заданих у представленні взаємодії [3]

$$a_{\mathbf{k},s}(\nu_*) = \beta^{-1/2} \int_0^\beta a_{\mathbf{k},s}(\beta') \exp(i\nu^* \beta') d\beta', \quad (20)$$

де $\nu^* = \beta^{-1}(2n + 1)$ – “частоти” Фермі-Мацубари. У цьому представленні статистична сума (11) набуває такого вигляду:

$$Z(\mu) = Z_0(\mu) \exp \left\{ \beta \frac{\hat{N}^2}{V} \nu_0 \right\} \langle \hat{S}_\nu \rangle_0, \quad (21)$$

де $Z_0(\mu)$ – статистична сума ідеальної моделі (без взаємодії), а символ $\langle \rangle_0$ означає статистичне середнє за станами цієї моделі;

$$\hat{S}_\nu = T_\beta \exp \left\{ - \sum_{n \geq 2} \hat{K}_n(\nu) \right\}, \quad (22)$$

$$\hat{K}_n(\nu) = \frac{\hbar^2}{m} (\beta V)^{1-n} [(n-1)!]^{-1} \sum_{x_1, \dots, x_n} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \hat{f}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \dots \hat{\rho}_{x_n} \delta_{x_1 + \dots + x_n, 0}. \quad (23)$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_x &= \hat{\rho}_{\mathbf{q},\nu} = \sum_{\mathbf{k},s;\nu^*} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*), \\ \hat{f}_x &= \hat{f}_{\mathbf{q},\nu} = \sum_{\mathbf{k},s;\nu^*} \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*);\end{aligned}\quad (24)$$

$x \equiv (\mathbf{q}, \nu)$, $\nu = \beta^{-1} 2\pi n$ – “частоти” Бозе-Мацубари; $\delta_{x_1+\dots+x_n,0} \equiv \delta_{\mathbf{q}_1+\dots+\mathbf{q}_n,0} \delta_{\nu_1+\dots+\nu_n,0}$; символ T_β є узагальненим оператором впорядкування за змінними β , який крім звичайних властивостей [8] має властивість приводити добуток операторів $a_{\mathbf{k},s}(\beta') a_{\mathbf{k},s}^+(\beta'')$ до нормальної форми у випадку однакових змінних ($\beta' = \beta''$). У роботі [3] встановлено правило обчислення середніх від добутку операторів $a_{\mathbf{k},s}(\nu^*)$:

$$- \langle T_\beta \{ a_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*) a_{\mathbf{k}_2,s_2}^+(\nu_2^*) \} \rangle_0 = G_{\mathbf{k}_1,s_1}^0(\nu_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \delta_{s_1,s_2} \delta_{\nu_1^*,\nu_2^*}, \quad (25)$$

де

$$G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) = \{ i\nu^* - \varepsilon_k + \mu \}^{-1} e^{i\delta\nu^*} \quad (26)$$

є спектральним зображенням одноелектронної функції Гріна ідеальної системи ($\delta \rightarrow +0$). Обчислення сум за частотами здійснюється згідно з правилами:

$$\begin{aligned}\beta^{-1} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k},s}^0(\nu^*) &= n_{\mathbf{k},s}^F = \{ \exp[\beta(\varepsilon_k - \mu)] + 1 \}^{-1}, \\ \beta^{-1} \sum_{\nu} (i\nu + E)^{-1} e^{\pm i\nu\delta} &= \begin{cases} 1 + n_E^B, \\ n_E^B, \end{cases} \quad n_E^B = \{ \exp(\beta E) - 1 \}^{-1}.\end{aligned}\quad (27)$$

2 Енергія основного стану моделі

Як відомо, енергію основного стану моделі можна розрахувати за допомогою двочастинкової кореляційної функції,

$$E = E_0 + \frac{1}{2\beta V} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\mathbf{q},\nu} \lambda V_q \mu_2^{(\lambda)}(x, -x). \quad (28)$$

Тут E_0 – енергія ідеальної моделі (без взаємодії), а $\mu_2^{(\lambda)}(x, -x)$ – спектральне зображення двочастинкової кореляційної функції модельної системи, у якій замість потенціалу Кулона $V_q = 4\pi e^2/q^2$ фігурує потенціал λV_q . Функція $\mu_2^{(1)}(x, -x)$ є кореляційною функцією моделі електронної рідини, яка пов'язана з бінарною функцією розподілу співвідношенням

$$F_2(r) = 1 + \{ N(N-1)\beta \}^{-1} \sum_{\mathbf{q},\nu} \mu_2^{(1)}(x, -x) e^{i(\mathbf{q},\mathbf{r})}. \quad (29)$$

За означенням, зображення Фур'є функції $\mu_2^{(\lambda)}(\mathbf{r}) \equiv F_2^{(\lambda)}(\mathbf{r}) - 1$ модельної системи

$$\begin{aligned} \mu_2^{(\lambda)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \{Sp[\exp[-\beta(\hat{H}_\lambda - \mu\hat{N})]]\}^{-1} Sp\{\hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \exp[-\beta(\hat{H}_\lambda - \mu\hat{N})]\}, \\ \hat{H}_\lambda &= \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}, \quad \hat{V} = (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_q \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (30)$$

Використовуючи циклічне перетворення з оператором $\exp[\lambda^{1/2}\hat{W}]$, перепишемо вираз (30) у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \mu_2^{(\lambda)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \beta^{-1} \sum_{\nu} \mu_2^{(\lambda)}(x, -x), \\ \mu_2^{(\lambda)}(x, -x) &= \{Sp[T_\beta \exp(-\lambda^{1/2}\hat{K}_\nu)]\}^{-1} Sp\{T_\beta \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \exp(-\lambda^{1/2}\hat{K}_\nu)\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Розкладаючи $\exp(-\hat{K}_\nu)$ у ряд за степенями оператора \hat{K}_ν , усереднимо почленно і згорнемо одержаний ряд, що відповідає підсумовуванню рядів теорії збурень. Через те, що оператор \hat{K}_ν антиермітів, така теорія збурень має особливості і відмінні від нуля внески виникають у парних порядках ($n = 0, 2, 4, 6, \dots$). Враховуючи ряд поляризаційних діаграм, породжених оператором $\hat{K}_2(\nu)$, який є найважливішим з $\hat{K}_n(\nu)$, знаходимо, що

$$\begin{aligned} \mu_2^{(\lambda)}(x, -x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mu_2^0(x, -x) \lambda^n \left(\frac{\hbar^2}{m\beta V}\right)^{2n} \\ &\times \{ \langle \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 \langle \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \rangle_0 + \langle \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0^2 \}^n. \end{aligned} \quad (32)$$

Тут

$$\mu_2^0(x, -x) = \beta^{-1} \langle T_\beta \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \rangle_0 - \quad (33)$$

спектральне зображення двочастинкової кореляційної функції ідеальної системи,

$$\begin{aligned} \langle T_\beta \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 &= -2\beta N \varepsilon_q \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-2} + \beta \nu^2 \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-2} \mu_2^0(x, -x); \\ \langle T_\beta \hat{\rho}_x \hat{f}_{-x} \rangle_0 &= i\nu\beta \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-1} \mu_2^0(x, -x). \end{aligned} \quad (34)$$

Таким чином одержуємо, що

$$\mu_2^{(\lambda)}(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \{1 + \lambda v_{eff}(q) V^{-1} \mu_2^0(x, -x)\}^{-1}. \quad (35)$$

Цей вираз є перенормованим наближенням хаотичних фаз, у якому замість потенціалу Кулона виступає слабкий ефективний потенціал міжелектронної взаємодії

$$v_{eff}(q) = 2 \frac{N}{V} \varepsilon_q \nu^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \quad (36)$$

що має асимптотику потенціалу квантового пакета

$$v_{eff}(q) = \begin{cases} V_q & \text{при } q \ll k_F, \\ V_q \frac{4}{3\pi} \left(a - \frac{b}{a}\right)^{-2} (k_F/q)^3. & \end{cases} \quad (37)$$

Підставляючи вираз (35) у формулу (28), інтегруючи за “параметром включення” λ та виділяючи внесок ідеальних кореляцій E_{HF} , представимо енергію основного стану у традиційному вигляді:

$$E = E_0 + E_{HF} + \tilde{E}_{corr}^{RPA}, \quad E_{HF} = -\frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} V_q \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, s}, \quad (38)$$

$$\tilde{E}_{corr}^{RPA} = \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \{\ln[1 + L(x)] - L(x)\} \frac{V_q}{v_{eff}(q)}.$$

У цьому наближенні бінарна функція розподілу має таке зображення:

$$\tilde{F}_2^{RPA}(r) = 1 + \mu_2^0(r) + \mu_2^{corr}(r), \quad (39)$$

де

$$\mu_2^0(r) = -[N(N-1)]^{-1} \sum_s \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} n_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s} e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \quad (40)$$

є кореляційною функцією ідеальної системи, а

$$\mu_2^{corr}(r) = -[\beta N(N-1)]^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \nu} e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r})} \mu_2^0(x, -x) L(x) \{1 + L(x)\}^{-1} \quad (41)$$

зумовлена взаємодією між електронами. У формулах (31) та (34)

$$L(x) = V^{-1} v_{eff}(q) \tilde{\mu}_2^0(x, -x) = 3^{2/3} r_s q_*^2 I_2^0(q_*, u) y_2^2 \left(q_* \left[\frac{3\pi}{4} \right]^{1/3} \right), \quad (42)$$

де

$$I_2^0(q_*, u) = \frac{2\varepsilon_F}{3N_e} \mu_2^0(x, -x) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2q_*} \left[1 + u^2 - \frac{1}{4} q_*^2 \right] \ln \frac{u^2 + (1 + 1/2q_*)^2}{u^2 + (1 - 1/2q_*)^2} - u \left[\arctan \left(\frac{1}{u} \left[1 + \frac{1}{2} q_* \right] \right) + \arctan \left(\frac{1}{u} \left[1 - \frac{1}{2} q_* \right] \right) \right] \right\} \quad (43)$$

є безрозмірним множником функції $\mu_2^0(x, -x)$ у змінних $q_* = q/k_F$, $u = \nu(2\varepsilon_F q_*)^{-1}$.

Виконуючи формальну заміну $v_{eff}(q) \rightarrow V_q = 4\pi e^2/q^2$ у формулах (35), (38), (41), одержимо кореляційну енергію та бінарну функцію розподілу у наближенні хаотичних фаз звичайної теорії збурень E_{corr}^{RPA} та $F_2^{RPA}(r)$.

У таблиці 2 наведено залежність кореляційної енергії від параметра неідеальності у різних наближеннях: E_{corr}^{RPA} , \tilde{E}_{corr} за формулою (38), розраховану методом Монте-Карло [6], розраховану у наближенні post-RPA [4] та у наближенні динамічного локального поля [9]. Як видно з таблиці, у наближенні \tilde{E}_{corr}^{RPA} кореляційна енергія приймає дещо вищі значення, ніж у наближенні Монте-Карло, але різниця між цими величинами зменшується зі збільшенням r_s . Крім того, у таблиці наведено також кореляційну енергію, визначену зі співвідношення

$$E_{corr}^{(\nu_0)}(r) = \frac{N^2}{V} \nu_0 - E_{HF}. \quad (44)$$

Табл. 2: Кореляційна енергія моделі електронної рідини у рідбергах на електрон ($-\varepsilon_{corr}(r_s)$) у різних наближеннях: звичайне наближення RPA з потенціалом Кулона (ε_{corr}^{RPA}); за формулою (38) ($\tilde{\varepsilon}_{corr}^{RPA}$); розрахована методом Монте-Карло [5] (ε_{corr}^{MC}); у наближенні $post - RPA$ ($\varepsilon_{corr}^{PRPA}$) [4]; у наближенні динамічного локального поля (ε_{corr}^{LF}) [9]; за формулою (44) ($\varepsilon_{corr}^{\nu_0}$).

r_s	$-\varepsilon_{corr}^{RPA}$	$-\tilde{\varepsilon}_{corr}^{RPA}, (38)$	$-\varepsilon_{corr}^{MC}$	$-\varepsilon_{corr}^{PRPA}, [4]$	$-\varepsilon_{corr}^{LF}, [9]$	$-\varepsilon_{corr}^{\nu_0}, (44)$
1	0.15757	0.095299	0.12001	0.1197	0.11996	0.48378
2	0.12358	0.071478	0.089545	0.0893	0.08958	0.24189
3	0.10549	0.059552	0.073747	0.0729	0.073798	0.16126
4	0.093585	0.051981	0.06355	0.0621	0.063589	0.12094
5	0.084914	0.046605	0.05625	0.0542	0.056265	0.096756
6	0.078209	0.042527	0.05069	0.048	0.050678	0.08063
7	0.072812	0.039292	0.046277		0.046237	0.069111
8	0.06834	0.036645	0.042667		0.042601	0.060472
9	0.064553	0.034426	0.039647		0.039558	0.053753
10	0.061291	0.032531	0.037075	0.0326	0.036966	0.048378
15	0.049835	0.025992	0.02829			0.032252
20	0.042739	0.022031	0.023085			0.024189
25	0.0378	0.019314	0.019593			0.019351
30	0.034114	0.017306	0.017069			0.016126
35	0.031233	0.015749	0.015151			0.013822
40	0.028903	0.014499	0.013639			0.012094
45	0.026972	0.013467	0.012415			0.010751
50	0.025339	0.012599	0.011401			0.0096756

Використовуючи числовий розв'язок рівняння (13), знаходимо, що $N^2V^{-1}\nu_0 = -NRy1,40011r_s^{-1}$, тому $E_{corr}^{(\nu_0)}(r_s) = -NRy0,48378r_s^{-1}$, що в області $r_s \gtrsim 15$ дуже добре збігається з результатами розрахунку методом Монте-Карло [5]. Це узгоджується з теоремою про те, що енергія моделі, яка описується статистичним оператором

$$\hat{P}_B = \exp \left\{ \beta \frac{\tilde{N}^2}{V} \nu_0 - \beta (\hat{H}_0 - \mu \hat{N}) \right\}, \quad (45)$$

обмежує знизу енергію моделі електронної рідини [13].

Розрахована у наближенні (41), (42) бінарна функція розподілу є набагато коректнішою, ніж у наближенні звичайного наближення хаотичних фаз на потенціалі Кулона, що ілюструє рисунок 1: суцільні криві відповідають наближенню з ефективним потенціалом, пунктирні – з потенціалом Кулона. У таблиці 3 наведено значення асимптотики функції $F_2(r)$ при $r = 0$, розрахованої як у наближенні (41), (42), так і в звичайному наближенні хаотичних фаз, а також в інших наближеннях.

На рисунку 2 зображено бінарну функцію розподілу в апроксимації

$$F_2(r) = F_2^0(r) \exp \{ \tilde{\mu}_2^{RPA}(r) [F_2^0(r)]^{-1} \}, \quad F_2^0(r) = 1 + \mu_2^0(r), \quad (46)$$

Табл. 3: Асимптотика бінарної функції розподілу $F_2(r)$ при $r = 0$ як функція параметра r_s .

r_s	$F_2^{RPA}(0)$	$F_2^{PRPA}(0)$ [4]	$F_2^{LF}(0)$ [9]	$\bar{F}_2^{RPA}(0)$	$F_2(0)$, (46)
1	-0.12716	0.273	0.2733	0.38085	0.39398
2	-0.66213	-	0.1639	0.2904	0.32879
3	-1.1494	0.136	0.1022	0.21269	0.28146
4	-1.6045	-	0.0652	0.14317	0.24492
5	-2.0356	0.071	0.0426	0.079573	0.21567
6	-2.4478	-	0.0287	0.020561	0.19166
7	-2.8446	-	0.0204	-0.034751	0.17159
8	-3.2283	-	0.0148	-0.086987	0.15457
9	-3.6009	-	0.0109	-0.13661	0.13997
10	-3.9637	0.01	0.0092	-0.18397	0.12732
15	-5.6645	-	-	-0.39501	0.083479
20	-7.2293	-	-	-0.57586	0.058142
25	-8.6991	-	-	-0.7364	0.042174
30	-10.097	-	-	-0.88209	0.031514
35	-11.438	-	-	-1.0164	0.024091
40	-12.733	-	-	-1.1417	0.018749
45	-13.988	-	-	-1.2602	0.014793
50	-15.214	-	-	-1.3762	0.011731

що відповідає наближеному підсумовуванню ряду діаграм вищого порядку. Така апроксимація обґрунтована у роботі [4].

Циклічне перетворення статистичної суми можна трактувати як ефективний спосіб врахування кореляційних ефектів, споріднений з наближенням локального поля. Дійсно, спектральне зображення двочастинкової кореляційної функції моделі електронної рідини (ф. (35) при $\lambda = 1$) можна представити у вигляді

$$\mu_2(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \left\{ 1 + \frac{V_q}{V} \mu_2^0(x, -x) [1 - G(x)] \right\}^{-1}, \quad (47)$$

характерному для представлення локального поля. Тому поправка на локальне поле у нашому підході визначається співвідношенням

$$G_q^0 = 1 - 2N(VV_q)^{-1} \varepsilon_q \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = V_q^{-1} \psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}). \quad (48)$$

Ця функція має загальні властивості статичної поправки на локальне поле сильно неідеальної електронної рідини [10]: змінюється в границях від нуля до одиниці, квадратична відносно хвильового вектора в області його малих значень ($G_q \sim 0, 3(q/k_F)^2 + \dots$), монотонно зростаюча функція хвильового вектора. Функція G_q є універсальною і від жодних фізичних параметрів не залежить. Насправді відомо [10], що поправка на локальне поле повинна бути динамічною, а сама форма її має залежати від r_s (при невеликих r_s поправка є немонотонною функцією хвильового

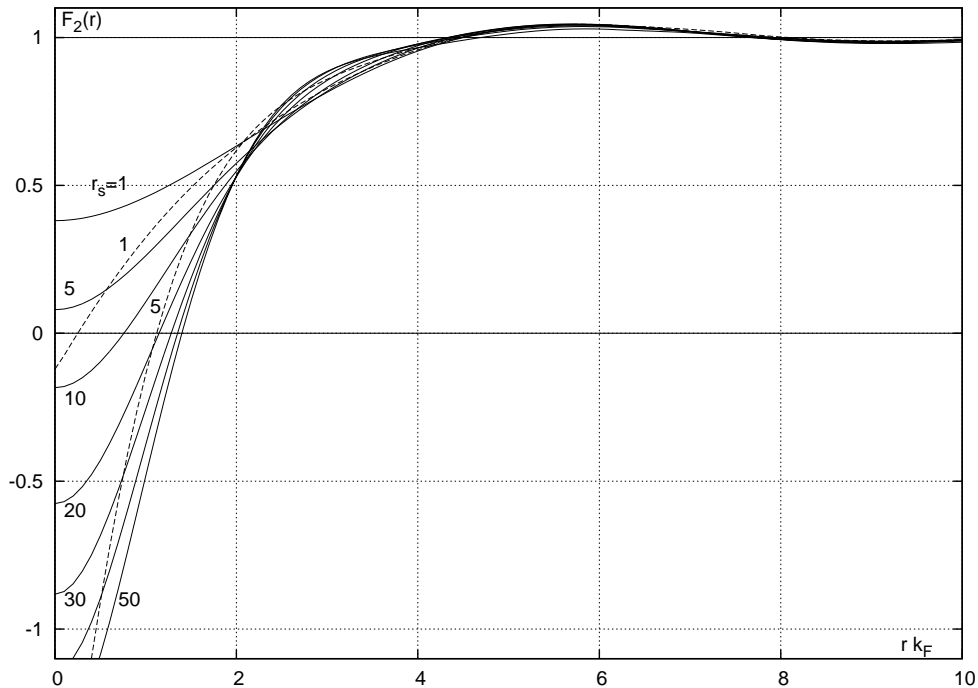


Рис. 1: Бінарна функція розподілу $\tilde{F}^{RPA}(r)$ у наближенні (39)-(42) – суцільні криві; у звичайному наближенні RPA з потенціалом Кулона – пунктирні криві (для $r_s = 1; 5$).

вектора). Тому G_q у формі (48) можна розглядати як певне наближення, коректне для сильно неідеальних систем.

Врахування інших діаграм (власноенергетичних та обмінних) при обчисленні двочастинкової кореляційної функції дозволяє одержати поправки типу post-RPA і уточнити результати розрахунків енергії моделі та бінарної функції розподілу. Якщо обмежитись оператором $\hat{K}_2(\nu)$, то такі поправки є аналогами поправок, розрахованих на кулонівському потенціалі [3], [4], [9], і формально можуть бути одержані з них заміною потенціалу Кулона на $v_{eff}(q)$ [11]. Однак при врахуванні доданків типу post-RPA, побудованих на операторі $\hat{K}_2(\nu)$, необхідно враховувати також оператори $\hat{K}_n(\nu)$ при $n \geq 3$, бо вони мають той самий порядок величини. Слід врахувати також, що знаходження розв'язків системи інтегральних рівнянь (8), (9) з достатньою точністю теж є громіздкою і складною задачею. У зв'язку з цим ми пропонуємо у цій роботі новий варіант методу циклічного перетворення, у рамках якого можна практично реалізувати розрахунки характеристик моделі електронної рідини з потрібною точністю.

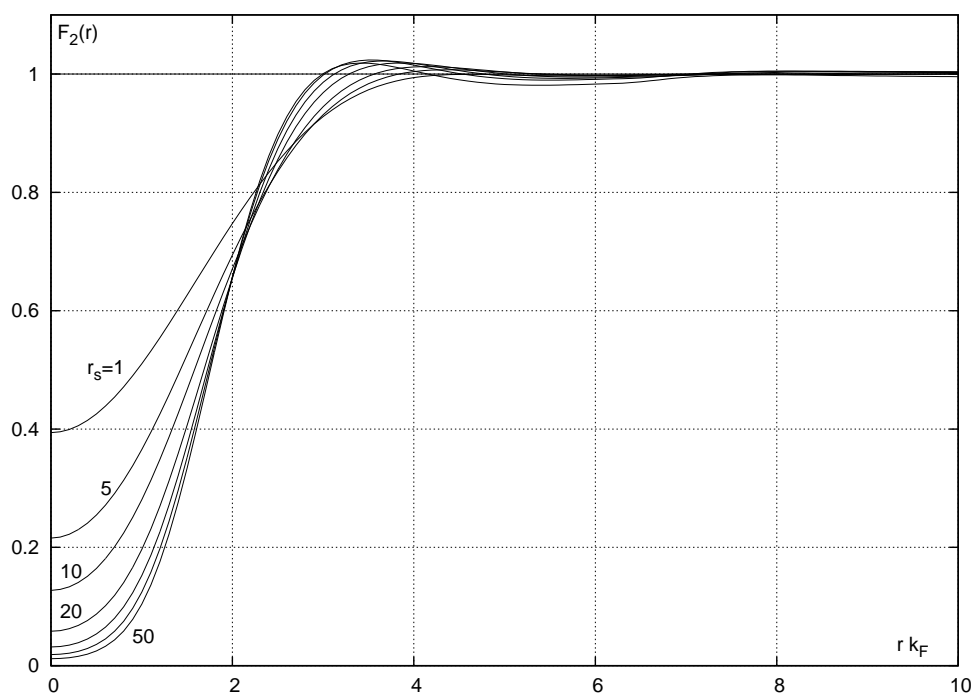


Рис. 2: Бінарна функція розподілу згідно з формулою (46). В інтервалі $20 \leq r_s \leq 50$ крок $\Delta r_s = 10$.

3 Циклічне перетворення на основі оператора $\exp \hat{W}_2$

Вибір оператора \hat{W} у формулі (3) є неоднозначним і може диктуватись зручністю і простотою розрахунків. У даному розділі ми використовуємо спрощений варіант оператора \hat{W} , покладаючи $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = 0$ при $n \geq 3$. У цьому випадку функція $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ задовольняє рівняння (13), розв'язок якого нами представлено у вигляді апроксиманти Паде

$$y_2(z) = \frac{1}{z^2} \frac{1 - A_1 z^2 + A_2 z^4}{1 + B_1 z^2 + B_2 z^4 + B_3 z^6}, \quad (49)$$

а коефіцієнти A_i, B_i знайдено числовим методом, шляхом розрахунку нев'язки – лівої сторони рівняння (13) як функції z (див. таблицю 4).

Табл. 4: Розв'язок рівняння (13) згідно з формулою (49) та нев'язка $\delta(z)$ (ліва сторона рівняння (13)); $A_1 = 2.36747, A_2 = 0.0309862, B_1 = 2.78181, B_2 = 0.677991, B_3 = 0.00235699$.

z	$\delta(z)$	$y_2(z)$	z	$\delta(z)$	$y_2(z)$
0.001	-0.12937	10^6	2.501	0.0022989	0.059801
0.101	-0.06543	97.62	2.601	0.002201	0.052829
0.201	-0.027151	24.356	2.701	0.0021052	0.046842
0.301	-0.007577	10.661	2.801	0.0020104	0.041677
0.401	0.00076551	5.865	2.901	0.0019161	0.037205
0.501	0.0035025	3.6527	3.001	0.0018216	0.033318
0.601	0.0039615	2.4588	3.101	0.0017264	0.029927
0.701	0.0037538	1.7454	3.201	0.0016302	0.026957
0.801	0.0035062	1.2876	3.301	0.0015329	0.02435
0.901	0.0033811	0.9779	3.401	0.0014345	0.022052
1.001	0.0033649	0.75977	3.501	0.0013351	0.020021
1.101	0.0034016	0.6012	3.601	0.0012348	0.018221
1.201	0.0034426	0.48295	3.701	0.0011338	0.016621
1.301	0.0034594	0.39293	3.801	0.0010324	0.015195
1.401	0.0034406	0.32319	3.901	0.00093099	0.013921
1.501	0.0033868	0.26837	4.001	0.00082979	0.012781
1.601	0.0033044	0.22473	4.101	0.00072914	0.011756
1.701	0.0032017	0.1896	4.201	0.00062934	0.010834
1.801	0.0030869	0.16107	4.301	0.00053071	0.010003
1.901	0.0029668	0.13768	4.401	0.00043351	0.0092515
2.001	0.0028461	0.11837	4.501	0.000338	0.008571
2.101	0.0027279	0.1023	4.601	0.00024443	0.0079534
2.201	0.0026139	0.088859	4.701	0.000153	0.007392
2.301	0.0025046	0.077539	4.801	$6.3889 \cdot 10^{-5}$	0.0068806
2.401	0.0023998	0.067956	4.901	$-2.2731 \cdot 10^{-5}$	0.0064139

Замість формули (11) у цьому варіанті

$$Z(\mu) = Sp \left\{ \exp \left[\beta \frac{\hat{N}^2}{V} \nu_0 - \beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{K}_2 + \hat{V}_3) \right] \right\}, \quad (50)$$

де

$$\hat{V}_3 = \frac{\hbar^2}{2mV^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \neq 0} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) \times \{1 - \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0}\} \hat{I}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) - \quad (51)$$

оператор слабких локальних ефективних тричастинкових взаємодій, а оператор \hat{K}_2 визначений формулою (6). Аналогом формули (31) у цьому випадку є

$$\mu_2^{(\lambda)}(x, -x) = \langle \hat{S}_\nu \rangle_0 \langle T_\beta \{ \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \hat{S}_\nu \} \rangle_0, \quad \hat{S}_\nu = \exp\{-\lambda^{1/2} \hat{K}_2(\nu) - \lambda \hat{V}_3(\nu)\}, \quad (52)$$

$$\hat{V}_3(\nu) = \frac{\hbar^2}{2m} (\beta V)^{-2} \sum_{x_1, x_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) \{1 - \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0}\} \hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \hat{\rho}_{-x_1 - x_2}.$$

Як видно з формули (35), оператор $\hat{K}_2(\nu)$ дає внески у наближенні хаотичних фаз, він є основним, а $\hat{V}_3(\nu)$ відіграє роль збурення: він зображається у вигляді подвійної суми за змінною $x = (\mathbf{q}, \nu)$ і тому може давати поправки типу post-RPA до кореляційної функції чи енергії моделі. У зв'язку з цим модель, у якій $\hat{V}_3(\nu) = 0$, можна розглядати як базисну систему для опису внесків оператора $\hat{V}_3(\nu)$.

Власноенергетичні діаграми другого порядку теорії збурень відносно $\hat{K}_2(\nu)$ дають такий внесок до $\mu_2^\lambda(x, -x)$

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2mV} \right)^2 \beta^{-3} \lambda \sum_{\mathbf{q}_1, \nu_1} \nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} G_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^0(\nu_1^* - \nu_1) \times [G_{\mathbf{k}_1, s_1}^0(\nu_1^*)]^2 G_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}_1, s_2}^0(\nu_2^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}_2, s_2}^0(\nu_2^*) \times G_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^0(\nu_1^* + \nu_1) \left\{ \left(\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right) - \left(\mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{q} \right) \right\}^2. \quad (53)$$

За допомогою елементарних тотожних перетворень цей вираз зводиться до такого:

$$-(2\beta V)^{-1} \lambda \sum_{x_1} v_{eff}(q_1) \mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1), \quad (54)$$

де

$$\mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1) = -2\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}, s; \nu^*} [G_{\mathbf{k}, s}^0(\nu^*)]^2 G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s}(\nu^* - \nu) \quad (55)$$

– власноенергетична складова чотиричастинкової кореляційної функції ідеальної системи [4].

Внесок суми обмінних діаграм другого порядку у $\mu_2(x, -x)$ зображається виразом (55), якщо у ньому $\mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1)$ замінити обмінною складовою чотиричастинкової функції

$$\begin{aligned} \mu_{4,2}^0(x, -x, x_1, -x_1) &= -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}, s; \nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^0(\nu^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^0(\nu^* + \nu) \\ &\times G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1, s}^0(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{q}_1, s}^0(\nu^* + \nu_1 + \nu). \end{aligned} \quad (56)$$

У четвертому порядку теорії збурень за $\hat{K}_2(\nu)$ зв'язна діаграма виражається через тричастинкові функції ідеальної моделі:

$$\lambda^2 (2\beta V)^{-1} \sum_{x_1} v_{eff}(\mathbf{q}_1) v_{eff}(\mathbf{q} + \mathbf{q}_1) \mu_3^0(x, x_1, -x - x_1) \mu_3^0(-x, -x_1, x + x_1). \quad (57)$$

Підсумовуючи безмежні ряди діаграм, побудованих на дво-, три- та чотиричастинкових кореляційних функціях ідеальної моделі, надамо $\mu_2^{(\lambda)}(x, -x)$ форми наближення локального поля,

$$\mu_2^{(\lambda)}(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \{1 + \lambda v_{eff}(q) V^{-1} \mu_2^0(x, -x) [1 - \tilde{G}^{(\lambda)}(x)]\}^{-1}, \quad (58)$$

де $\tilde{G}^{(\lambda)}(x)$ – поправка на локальне поле в методі циклічного перетворення. Вирази (54)–(58) відрізняються від аналогічних виразів звичайного базисного підходу заміною потенціалу Кулона V_q на ефективний потенціал $v_{eff}(q)$, що дає змогу використати рівняння для поправки на локальне поле базисного підходу [4]. У наближенні рядів одно- та двокільцевих діаграм, побудованих на потенціалі $v_{eff}(q)$,

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(\lambda)}(x) &= \tilde{G}_1(x|\lambda) + \tilde{G}_2(x|\lambda), \\ \tilde{G}_i(x|\lambda) + \sum_{x_1} \tilde{\Phi}_i^{(\lambda)}(x, x_1) \tilde{G}_2(x_1|\lambda) &= \tilde{G}_i^{RPA}(x|\lambda), \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (59)$$

Ядра цих рівнянь визначені такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_1^{(\lambda)}(x, x_1) &= -(2\beta v_{eff}(q))^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} v_{eff}(q_1) \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1), \\ \tilde{\Phi}_2^{(\lambda)}(x, x_1) &= \lambda (2\beta v_{eff}(q))^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} v_{eff}(q_1) v_0(x + x_1) \\ &\times \mu_3^0(x, x_1, -x - x_1) \mu_3^0(-x, -x_1, x + x_1); \quad v_0(x) = v_{eff}(q) \{1 + \lambda L(x)\}^{-1}; \\ \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1) &= \mu_{4,1}^0(x, -x, x_1 - x_1) + \mu_{4,2}^0(x, -x, x_1 - x_1). \end{aligned} \quad (60)$$

Праві сторони інтегральних рівнянь (59)

$$\tilde{G}_i^{RPA}(x|\lambda) = \sum_{x_1} \tilde{\Phi}_i^{(\lambda)}(x, x_1) \{1 + \lambda L(x)\}^{-1} \quad (61)$$

можна розглядати як нульове наближення для $\tilde{G}_i(x|\lambda)$.

Оскільки в межах звичайної теорії збурень на потенціалі Кулона $\mu_2(x, -x)$ і поправка на локальне поле пов'язані співвідношенням (47), то з порівняння виразів (47) і (58) випливає зв'язок між традиційною поправкою на локальне поле $G(x)$ і її аналогом у методі циклічного перетворення $\tilde{G}(x)$

$$G(x) = G_q^0 + [1 - G_q^0] \tilde{G}(x), \quad (62)$$

а незалежна від частоти функція G_q^0 відіграє роль нульового наближення. Функція $[1 - G_q^0]\tilde{G}(x)$, що визначається слабким ефективним потенціалом

$$v_{eff}(q) = V_q\{z^2 y_1(z)\}^2, \quad (63)$$

дає невелику поправку до G_q^0 .

У випадку слабого потенціалу головний внесок до $\tilde{G}(x)$ дає $\tilde{G}_1(x)$, яка відповідає наближенню Гелдарта-Тейлора [10]. У цьому наближенні функція $\tilde{G}_1(x)$ досліджена у роботі [11], де показано, що в області малих і проміжних значень хвильових векторів ця функція є малою і додатною, тобто врахування обмінних і власноенергетичних діаграм оператора $\hat{K}_2(\nu)$ приводить до невеликого збільшення поправки на локальне поле. За рахунок доданка $[1 - G_q^0]\tilde{G}_1(x)$ поправка $G(x)$ набуває залежності від частоти і параметра неідеальності. При великих значеннях хвильових векторів $\tilde{G}(x)$ стає від'ємною і великою за модулем, що характерно для потенціалів типу квантового пакета [12].

Але згідно зі співвідношенням (62) $\tilde{G}_1(x)$ має коректну асимптотику

$$G(x) \Rightarrow G_q^0 - \frac{1}{6} + O(q^{-2}) = \frac{5}{6} + O(q^{-2}). \quad (64)$$

Максимальне відхилення $G(x)$ від G_q^0 спостерігається в області $(1 \div 3)k_F$, для $r_s \geq 5$ не перевищує 10% і зменшується з ростом r_s .

Вказані особливості функції $G(x)$ призводять до того, що кореляційна енергія в наближенні локального поля стає дещо вищою від результатів розрахунку у наближенні хаотичних фаз на основі $v_{eff}(q)$, тобто ще більше віддаляється від результатів методу Монте-Карло [5,6] при невеликих значеннях параметра r_s . Така ситуація цілком закономірна – врахування поправки на локальне поле у звичайному базисному підході призводить до зростання кореляційної енергії. Дійсно, у лінійному наближенні за $\tilde{G}_1(x)$ внесок власноенергетичних і обмінних діаграм оператора $\hat{K}_2(\nu)$ у другому порядку теорії збурень до $\mu_2(x, -x)$ дає такий внесок до кореляційної енергії основного стану моделі

$$E_2^{(2)} = \frac{1}{2\beta V} \sum_{q,\nu} V_q \mu_2^0(x, -x) \frac{L(x)}{[1 + L(x)]^2} \tilde{G}_1(x), \quad (65)$$

який є додатною величиною. В той же час це призводить до покращення функції розподілу в області малих відстаней і поправка до $F_2(r)$

$$\Delta F_2(r) = \frac{1}{\beta N(N-1)} \sum_{\mathbf{q},\nu} \mu_2^0(x, -x) \frac{L(x)}{(1 + L(x))^2} \tilde{G}_1(x) e^{i(\mathbf{q},\mathbf{r})} \quad (66)$$

також має додатний знак.

Внески операторів $\hat{K}_n(\nu)$ при $n \geq 3$ у роботі [11] не досліджувались. У новому варіанті такі оператори відсутні, а внесок $\hat{V}_3(\nu)$ до енергії основного стану моделі ми враховуємо за допомогою базисного методу, вважаючи, що n -частинкові кореляційні функції

$$\mu_n(x_1, \dots, x_n) = \beta^{-1} \langle T_\beta[\hat{\rho}_{x_1} \dots \hat{\rho}_{x_n}] \rangle_{k_2}^{3B} \quad (67)$$

моделі, якій відповідає S -матриця

$$\hat{S}_2(\nu) = T_\beta \exp[-\hat{K}_2(\nu)], \quad (68)$$

є відомими.

У першому порядку теорії збурень внесок оператора $\hat{V}_3(\nu)$ до енергії основного стану

$$\Delta E_{3,1} = -\frac{\hbar^2}{2m} \beta^{-2} V^{-2} \sum_{x_1, x_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) \mu_3(x_1, x_2, -x_1 - x_2) \quad (69)$$

визначається тричастинковою кореляційною функцією, яка у наближенні RPA дається виразом:

$$\begin{aligned} \mu_3(x_1, x_2, -x_1 - x_2) &= \mu_3^0(x_1, x_2, -x_1 - x_2) \varepsilon^{-1}(x_1) \varepsilon^{-1}(x_2) \varepsilon^{-1}(x_1 + x_2), \\ \varepsilon(x) &= 1 + V^{-1} v_{eff}(q) \mu_2^0(x, -x), \end{aligned} \quad (70)$$

де $\mu_3^0(x_1, x_2, -x_1 - x_2)$ – кореляційна функція ідеальної системи.

Табл. 5: Кореляційна енергія моделі електронної рідини згідно з новим варіантом методу циклічного перетворення: $-\varepsilon_{corr}^{RPA}$, (38), а також внески тричастинкових взаємодій $-\Delta\varepsilon_{corr}^{3,1}$, $-\Delta\varepsilon_{corr}^{3,2}$ за формулами (69) і (71); $-\varepsilon_{corr}^\Sigma$ – сума всіх врахованих кореляційних внесків; $-\varepsilon_{corr}^{MC}$ – результати розрахунку методом Монте-Карло [5].

r_s	$-\varepsilon_{corr}^{RPA}$, (38)	$-\Delta\varepsilon_{corr}^{3,1}$, (69)	$-\Delta\varepsilon_{corr}^{3,2}$, (71)	$-\varepsilon_{corr}^\Sigma$	$-\varepsilon_{corr}^{MC}$, [5]
1	0.095299	0.03479	0.0033123	0.1334	0.12001
2	0.071478	0.011788	0.0025726	0.085839	0.089545
3	0.059552	0.0058928	0.002163	0.067608	0.073747
4	0.051981	0.0034991	0.0018908	0.057371	0.06355
5	0.046605	0.0022949	0.0016924	0.050593	0.05625
6	0.042527	0.0016071	0.0015395	0.045673	0.05069
7	0.039292	0.0011792	0.0014171	0.041889	0.046277
8	0.036645	0.00089627	0.0013162	0.038858	0.042667
9	0.034426	0.00070019	0.0012313	0.036358	0.039647
10	0.032531	0.00055926	0.0011586	0.034249	0.037075
15	0.025992	0.00022751	0.00090728	0.027127	0.02829
20	0.022031	0.00011623	0.00075574	0.022903	0.023085
25	0.019314	$6.7735 \cdot 10^{05}$	0.00065266	0.020034	0.019593
30	0.017306	$4.3042 \cdot 10^{05}$	0.00057726	0.017927	0.017069
35	0.015749	$2.9088 \cdot 10^{05}$	0.00051936	0.016298	0.015151
40	0.014499	$2.0588 \cdot 10^{05}$	0.00047328	0.014993	0.013639
45	0.013467	$1.5107 \cdot 10^{05}$	0.00043561	0.013918	0.012415
50	0.012599	$1.1411 \cdot 10^{05}$	0.00040417	0.013015	0.011401

У другому порядку теорії збурень відносно $\hat{V}_3(\nu)$ внесок поляризаційних діаграм є таким:

$$\begin{aligned} \Delta E_{3,2} = & - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \frac{3}{4} \beta^{-2} V^{-4} \sum_{x_1, x_2} \nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \nu_2^2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)^2 \\ & \times \mu_2(x_1, -x_1) \mu_2(x_2, -x_2) \mu_2(x_1 + x_2, -x_1 - x_2), \\ & \mu_2(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \varepsilon^{-1}(x). \end{aligned} \quad (71)$$

Обидва доданки є невеликими за модулем і від'ємними, що призводить до зменшення кореляційної енергії і наближення її до результатів розрахунку методом Монте-Карло [5] в області малих та проміжних значень r_s . Однак при великих значеннях параметра неідеальності ($r_s \geq 20$) внески оператора $\hat{V}_3(\nu)$, як і внески поправки на локальне поле, спричиненої $\hat{K}_2(\nu)$, є мізерними, що видно з таблиці 5.

Висновки

Енергетичні та структурні характеристики моделі електронної рідини в області слабкої та проміжної неідеальності досліджені різними методами, які узагальнюють наближення хаотичних фаз, і добре відомі.

Циклічне перетворення статистичної суми дозволяє розробити простий варіант базисного підходу, придатний для опису моделі в області сильної неідеальності. Як видно з розрахунків, результати тим кращі, чим більше значення параметра неідеальності r_s . Наближення хаотичних фаз на основі ефективного потенціалу дає кореляційну енергію, що дуже мало відхиляється від результатів методу Монте-Карло [5]. Базисне врахування інших внесків дозволяє покращити результати в перехідній області параметра неідеальності.

Список використаної літератури

1. Ваврух М.В., Куштай Я.В. Журн. фіз. досл. **1**, N 1, 12 (1996).
2. Ваврух М.В., Куштай Я.В., Солов'ян В.Б. Журн. фіз. досл. **2**, N 1, 23 (1998).
3. Vavruk M., Krokhmal'skii T. Phys. stat. sol. (b). **168**, N 2, 519 (1991).
4. Vavruk M., Krokhmal'skii T. Phys. stat. sol. (b). **169**, N 2, 451 (1992).
5. Ceperley D., Alder V. Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
6. Vosko S., Wilk L., Nusair N. Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).
7. Ваврух М. ТМФ. **35**, 263 (1978).
8. Абрикосов А., Горьков Л., Дзялошинский И. *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962), 443 с..
9. Vavruk M., Solovyan V., Vavruk N. Phys. stat. sol. (b). **177**, N 2, 361 (1993).
10. Ваврух М., Ваврух Н. Физика низ. темп. **22**, N 9, 1005 (1996).
11. Ваврух М., Тишко Н., Куштай Я., Коваль С. Журн. фіз. досл. **7**, N 4, 375 (2003).
12. Ваврух М., Коваль С., Тишко Н. Журн. фіз. досл. **4**, N 4, 403 (2000).
13. Ваврух М.В. Доповіді АН УРСР. Серія А. **48**, N 6, 48 (1985).

Стаття надійшла до редакції 14.08.2015
прийнята до друку 15.09.2015

CYCLIC TRANSFORMATION OF THE PARTITION FUNCTION IN THE ELECTRON LIQUID THEORY

М. Vavrukh¹, Ya. Kushtay², S. Smerechynskyi¹

¹ *Ivan Franko National University of Lviv*

Kyrylo and Methodiy Str., 8, 79005 Lviv, Ukraine

² *Lviv College State University of Telecommunications*

V. Velykoho Str., 12, 79053 Lviv, Ukraine

The energy of the ground state and binary distribution function of the electron liquid model were calculated in the wide range of the coupling parameter ($1 \leq r_s \leq 50$). The cyclic transformation method, previous developed by the authors, was used for this purpose. In addition, the new version of the method with improved accuracy was suggested. Finally, the results were compared with ones of another methods, including Monte Carlo method.

Key words: electron liquid model, renormalized perturbation theory, correlation energy, binary distribution function, local field correction function, coupling parameter.

ЦИКЛИЧЕСКОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ В ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ

М. Ваврух¹, Я. Куштай², С. Смеречинский¹

¹ *Львовский национальный университет имени Ивана Франко*
ул. Кирилла и Мефодия 8, 79005 Львов, Украина

² *Львовский колледж государственного университета*
телекоммуникаций

ул. В. Великого, 12, 79053 Львов, Украина

Рассчитаны энергия основного состояния и бинарная функция распределения для модели электронной жидкости в широкой области параметра неидеальности ($1 \leq r_s \leq 50$) при помощи метода циклического преобразования статистической суммы, предложенного авторами ранее. Разработан новый вариант этого метода с целью повышения точности расчетов. Выполнено сравнения с результатами, полученными другими методами, в частности методом Монте-Карло.

Ключевые слова: модель электронной жидкости, перенормированная теория возмущений, корреляционная энергия, бинарная функция распределения, поправка на локальное поле, параметр неидеальности.