

## АПРОКСИМАЦІЙНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР ДЛЯ СИЛЬНО НЕІДЕАЛЬНИХ ФЕРМІ-СИСТЕМ

М. Ваврух<sup>1</sup>, Я. Куштай<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Україна, 290011, Львів, вул.Свенціцького, 1

<sup>2</sup> Львівський торговий коледж, Україна, 290000, Львів, вул. Менцинського, 8

(Отримано 15 березня 1996)

На основі модифікованого методу зміщень розроблено спосіб побудови ефективного статистичного оператора, що відіграє роль апроксимаційного і призначений для дослідження сильно неідеальних фермі-систем без використання методів теорії збурень. Загальна схема застосована до моделі однорідної електронної рідини при низьких температурах без обмеження на значення параметра неідеальності.

**Ключові слова:** метод зміщень, статистичний оператор, електронна рідина.

PACS number(s): 05.30.Fk

### I. МОДИФІКОВАНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ЗМІЩЕНЬ І АПРОКСИМАЦІЙНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР

Дослідження властивостей фермі-систем посідає одне з центральних місць у статистичній фізиці і фізиці твердого тіла. Якщо слабко неідеальні системи до цього часу в основному вивчені методами теорії збурень, то вивчення їх в області сильної неідеальності потребує застосування нестандартних підходів. Одним з них є метод зміщень і колективних змінних, запропонований у працях [1, 2] для моделі електронної рідини і розвинутий у серії праць, присвячених фермі- і бозе-системам [3–7].

Метою нашої роботи є розробка спеціального варіанта методу зміщень [8] для моделей фермі-систем з локальною двочастинковою взаємодією, відмінного від методу праці [1]. Встановлено нерівності для термодинамічного потенціалу. Побудовано апроксимаційний статистичний оператор, який дає змогу розраховувати фізичні характеристики без використання традиційних методів теорії збурень.

Розглянемо фермі-систему з гамільтоніаном загального вигляду

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1.1)$$

де  $\hat{H}_0$  — оператор кінетичної енергії, а  $\hat{V}$  — локальної взаємодії між частинками. Беручи до уваги умову стабільності, будемо припускати для означеності, що статистичне середнє оператора  $\hat{V}$  від'ємне. Фізичній системі (1.1) поставимо у відповідність модельну систему з гамільтоніаном

$$\hat{H}_\zeta = \hat{H}_0 + \zeta \hat{V}, \quad (1.2)$$

де  $\zeta$  — параметр включення взаємодії ( $0 < \zeta \leq 1$ ). Маючи на увазі наступний розрахунок статистичної суми у великому канонічному ансамблі та узагальнюючи перетворення праці [8], виконаємо зображення зміщень у статистичному операторі модельної системи

$$\hat{P}_\zeta = \exp\{-\beta[\hat{H}_\zeta - \mu\hat{N}]\} = \{\exp \hat{U}_\zeta\} \hat{\sigma}_\zeta. \quad (1.3)$$

Тут  $\beta$  — обернена температура;  $\mu$  — змінна хемічного потенціалу;  $\hat{N}$  — оператор кількості частинок. Будемо вимагати, щоб невідомий оператор зміщень  $\hat{U}_\zeta$  задовольняв умову ермітовості і комутував з операторами  $\hat{N}$  та  $\hat{V}$ , тобто був би оператором ефективних багаточастинкових локальних взаємодій. Диференціюючи (1.3) за змінною  $\beta$ , одержуємо операторну рівність

$$\begin{aligned} & - \left\{ \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \right\} \hat{\sigma}_\zeta - \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\sigma}_\zeta \\ & = \{ \hat{H}_0 + \zeta \hat{V} - \mu \hat{N} + \hat{K}_\zeta + \hat{L}_\zeta \} \hat{\sigma}_\zeta, \\ & \hat{K}_\zeta = [\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \quad \hat{L}_\zeta = \frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \hat{U}_\zeta]_-. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Згідно зі зробленими вище припущеннями  $\hat{K}_\zeta$  — антиермітів оператор,  $\hat{L}_\zeta$  — ермітів.

Нехай оператор  $\hat{U}_\zeta$  задовольняє рівняння

$$- \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta = \zeta \hat{V} + \hat{L}_\zeta. \quad (1.5)$$

Відповідно до рівності (1.4)

$$- \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\sigma}_\zeta = \{ \hat{H}_0 - \mu \hat{N} + \hat{K}_\zeta \} \hat{\sigma}_\zeta. \quad (1.6)$$

З (1.3) випливає гранична умова:  $\hat{U}_\zeta \rightarrow 0, \hat{\sigma}_\zeta \rightarrow 1$  при  $\beta \rightarrow 0$ . Це відповідає класичній границі, в якій  $\hat{P}_\zeta \rightarrow \exp(-\beta \zeta \hat{V}) \times \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu \hat{N}]\}$ . Використовуючи зображення взаємодії на основі оператора  $\hat{H}_0$ , запишемо статистичний оператор модельної системи в такому вигляді:

$$\hat{P}_\zeta = \hat{P}_\zeta^0 \cdot \hat{S}_\zeta, \quad \hat{P}_\zeta^0 = \exp \hat{U}_\zeta \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu \hat{N}]\},$$

$$\hat{S}_\zeta = T \exp \left\{ - \int_0^\beta \hat{K}_\zeta(\beta') d\beta' \right\}, \quad (1.7)$$

$$\hat{K}_\zeta(\beta') = \exp(\beta' [\hat{H}_0 - \mu \hat{N}]) \hat{K}_\zeta \exp(-\beta' [\hat{H}_0 - \mu \hat{N}]),$$

де  $T$  — символ звичайного хронологічного впорядкування. Статистичний оператор  $\hat{P}_\zeta^0$  відповідає деякій модельній системі, що має статистичну суму

$$Z_\zeta^0 = Sp \hat{P}_\zeta^0 = \exp[-\beta \Omega_\zeta^0(\mu)]. \quad (1.8)$$

До цієї системи близька інша модельна система, яку описує статистичний оператор

$$\hat{P}_\zeta^\Gamma = \exp\{-\beta[\hat{\Gamma}_\zeta - \mu \hat{N}]\}, \quad \hat{\Gamma}_\zeta = \hat{H}_0 - \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta. \quad (1.9)$$

Її термодинамічний потенціал

$$\Omega_\zeta^\Gamma(\mu) = -\beta^{-1} \ln Sp \hat{P}_\zeta^\Gamma \quad (1.10)$$

пов'язаний з термодинамічним потенціалом системи (1.1)

$$\Omega(\mu) = -\beta^{-1} \ln Sp \hat{P}_1 \quad (1.11)$$

такою нерівністю:

$$0 \leq \Omega(\mu) - \Omega_1^\Gamma(\mu) \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \rangle_{P_1^\Gamma}. \quad (1.12)$$

При цьому символ  $\langle \dots \rangle_P$  означає звичайне статистичне середнє:  $\langle \hat{A} \rangle = \{Sp \hat{P}\}^{-1} Sp\{\hat{A} \hat{P}\}$ . Згідно з (1.12) термодинамічний потенціал моделі, що описується оператором  $\hat{P}_1^\Gamma$ , обмежує знизу термодинамічний потенціал фізичної системи (1.1). Для доведення скористаємось відомим методом [9] оцінки термодинамічного потенціалу. Оскільки він ґрунтується на використанні гамільтоніанів, а не статистичних операторів, розглянемо допоміжну модельну систему з “гамільтоніаном”

$$\hat{\mathcal{H}}_1(t) = \hat{\Gamma}_\zeta + t \hat{K}_\zeta, \quad (1.13)$$

де  $0 < t \leq 1$ . При  $t = 1$  оператор  $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$  набуває значення

$$\hat{\mathcal{H}}_1(1) = \hat{H}_0 - \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta + \hat{K}_\zeta = e^{-\hat{U}_\zeta} \hat{H}_\zeta e^{\hat{U}_\zeta}. \quad (1.14)$$

Завдяки властивості циклічності шпурів статистична сума системи з “гамільтоніаном”  $\hat{\mathcal{H}}_1(1)$  збігається зі статистичною сумою модельної системи (1.2), оскільки

$$Sp\{\exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_1(1) - \mu \hat{N})]\} \quad (1.15)$$

$$= Sp\{\exp[-\beta(\hat{H}_\zeta - \mu \hat{N})]\} = Z_\zeta(\mu) = \exp[-\beta \Omega_\zeta(\mu)].$$

У цьому сенсі операторові  $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$  еквівалентний “гамільтоніан”

$$\hat{\mathcal{H}}_2(t) = \hat{\Gamma}_\zeta - t^2 \hat{L}_\zeta = e^{t \hat{U}_\zeta} \hat{\mathcal{H}}_1(t) e^{-t \hat{U}_\zeta}, \quad (1.16)$$

який при  $t = 1$  збігається з  $\hat{H}_\zeta$ . Обидві складові “гамільтоніана” (1.16) — ермітові.

Гамільтоніан фізичної системи (1.1) запишемо у вигляді таких двох доданків:

$$\hat{H} = \hat{\Gamma}_\zeta + \left\{ \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \right\}. \quad (1.17)$$

З відомої нерівності Боголюбова (див. [9]) знаходимо, що

$$\langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_1} \leq \Omega(\mu) - \Omega_\zeta^\Gamma(\mu) \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_\zeta^\Gamma}. \quad (1.18)$$

Розглянемо статистичну суму  $Z(\mu|t)$  і термодинамічний потенціал  $\Omega(\mu|t)$  допоміжної модельної системи (1.13) при  $\zeta = 1$ :

$$\begin{aligned} Z(\mu|t) &= Sp\{\exp[-\beta(\hat{\Gamma}_1 - \mu \hat{N} + t \hat{K}_1)]\} \\ &= \exp[-\beta \Omega(\mu|t)]. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Відповідно до (1.11), (1.14)  $\Omega(\mu|1) = \Omega(\mu)$ ,  $\Omega(\mu|0) = \Omega_1^\Gamma(\mu)$ . З метою оцінити зміну  $\Omega(\mu|t)$  за рахунок оператора  $\hat{K}_1$  методом [9] на основі тотожності

$$\Omega(\mu|t) - \Omega(\mu|0) = \int_0^t \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) dt \quad (1.20)$$

розрахуємо похідні

$$\frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) = \langle \hat{K}_1 \rangle_{P_1(t)}, \quad (1.21)$$

$$\beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2} \Omega(\mu|t) = \langle \hat{K}_1^2 \rangle_{P_1(t)}$$

$$-Z^{-1}(\mu|t) \int_0^1 Sp\{\hat{K}_1 e^{-\beta \gamma \hat{H}'_1} \hat{K}_1 e^{-\beta(1-\gamma) \hat{H}'_1}\} d\gamma,$$

$$\hat{P}_1(t) = \exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_1(t) - \mu \hat{N}]\} \equiv \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}'_1).$$

У додатку доведено, що  $\frac{d}{dt} \Omega(\mu|t)$  є монотонною неспадною функцією параметра  $t$ , що дорівнює нулеві при  $t = 0$ . Внаслідок цього з тотожності (1.20) впли-

ває нерівність

$$0 \leq \Omega(\mu) - \Omega_1^\Gamma \leq \{ \langle \hat{K}_1 \rangle_{P_1(t)} \}_{t=1}, \quad (1.22)$$

яка визначає знак різниці  $\Omega(\mu) - \Omega_1^\Gamma(\mu)$ , на відміну від нерівності (1.18). Комбінуючи ці дві нерівності, одержуємо нерівність (1.12). Зазначимо, що вона виконується для квантових систем з гамільтоніанами типу (1.1) незалежно від статистики і конкретного вигляду оператора  $\hat{V}$ .

Нерівність (1.12) є підставою для побудови такого статистичного оператора  $\hat{P}_\zeta^\Gamma$ , який відіграє роль апроксимаційного для даної фізичної системи. Припустимо, що статистичне середнє оператора взаємодії від'ємне. Порівнюючи нерівності (1.12) та (1.18), знаходимо, що

$$0 \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \rangle_{P_1^\Gamma}. \quad (1.23)$$

За умови, що  $\langle \hat{V} \rangle_{P_1^\Gamma} < 0$ , одержуємо нерівність

$$\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \rangle_{P_1^\Gamma} \geq 0. \quad (1.24)$$

Як впливає з рівняння (1.5), його розв'язок можна записати у вигляді

$$\hat{U}_\zeta = \zeta^{1/2} \hat{\varphi}(\beta^*), \quad \beta^* \equiv \beta \zeta^{1/2}, \quad (1.25)$$

де оператор  $\hat{\varphi}(\beta^*)$  задовольняє рівняння

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\varphi}(\beta) = \hat{V} + \frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \varphi(\beta)]_-, \varphi(\beta)]_-. \quad (1.26)$$

Отже, у тих областях параметрів системи, де залежність  $\hat{\varphi}(\beta)$  від  $\beta$  є монотонною, оператор  $\hat{U}_\zeta$  має монотонну залежність від параметра  $\zeta$ . Таку ж залежність має  $\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_\zeta^\Gamma}$ .

У силу нерівностей (1.23), (1.24) і монотонності  $\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_\zeta^\Gamma}$  є можливість регулювати межі відхилення  $\Omega_\zeta^\Gamma(\mu)$  від  $\Omega(\mu)$  відповідним вибором параметра  $\zeta < 1$ . Визначаючи  $\zeta_0$  умовою

$$-\langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_1} = \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_{\zeta_0}^\Gamma} \quad (1.27)$$

і вводячи величину

$$\Delta(\zeta_0) = \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_{\zeta_0}^\Gamma}, \quad (1.28)$$

запишемо нерівність (1.18) у такій формі:

$$-\Delta(\zeta_0) \leq \Omega(\mu) - \Omega_{\zeta_0}^\Gamma(\mu) \leq \Delta(\zeta_0). \quad (1.29)$$

Величина  $\Delta(\zeta_0)$  задає мінімальні симетричні межі для різниці термодинамічних потенціалів фізичної системи і модельної (1.9):  $|\Omega_{\zeta_0}^\Gamma(\mu) - \Omega(\mu)| \leq \Delta(\zeta_0)$ . Через малість  $\Delta(\zeta_0)$  статистичний оператор  $\hat{P}_\zeta^\Gamma$  відіграє роль апроксимаційного для системи (1.1). У класичній границі з нерівності (1.12) випливає очевидна рівність  $\Omega(\mu) = \Omega_1^\Gamma(\mu)$ , оскільки  $\hat{U}_1 \rightarrow -\beta \hat{V}$ .

Покажемо, що статистичний оператор  $\hat{P}_{\zeta_0}^\Gamma$  близький до  $\hat{P}_\zeta^0$ . Справді, використовуючи властивість циклічності шпуру і рівняння (1.5), маємо

$$\begin{aligned} & Sp\{\exp[-\beta(\hat{\Gamma}_\zeta - \mu \hat{N})]\} \\ &= Sp\{\exp \hat{U}_\zeta \cdot \exp[-\beta(\hat{\Gamma}_\zeta - \mu \hat{N})] \exp(-\hat{U}_\zeta)\} \\ &= Sp\{\exp[-\beta(\hat{H}_\zeta - \mu \hat{N} - \hat{K}_\zeta + 2\hat{L}_\zeta)]\}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Над оператором під знаком шпуру виконаємо перетворення зміщень

$$\exp\{-\beta[\hat{H}_\zeta - \mu \hat{N} - \hat{K}_\zeta + 2\hat{L}_\zeta]\} = \{\exp \hat{U}_\zeta\} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)} \quad (1.31)$$

з оператором  $\hat{U}_\zeta$ , який задовольняє рівняння (1.5). Для невідомого  $\hat{\sigma}_\zeta^{(1)}$  знаходимо таке операторне рівняння:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)} &= \left\{ \hat{H}_0 - \mu \hat{N} + \beta \frac{\partial \hat{K}_\zeta}{\partial \beta} \right. \\ &\left. - \beta [\hat{K}_\zeta, \frac{\partial \hat{U}_\zeta}{\partial \beta}]_- \right\} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Як буде показано далі, оператори  $\frac{\partial \hat{K}_\zeta}{\partial \beta}, [\hat{K}_\zeta, \frac{\partial \hat{U}_\zeta}{\partial \beta}]_-$  є експоненційно малими в області низьких температур. Нехтуючи ними, знаходимо, що  $\hat{\sigma}_\zeta^{(1)} \simeq \exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})]$ , а  $\hat{P}_\zeta^\Gamma \simeq \hat{P}_\zeta^0$ .

## II. ОПЕРАТОР ЗМІЩЕНЬ ДЛЯ МОДЕЛІ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

Побудуємо оператор  $\hat{U}_\zeta$  для моделі електронної рідини, використовуючи зображення вторинного квантування для гамільтоніана (1.1):

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, s} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}, \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}, \quad (2.1)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1}.$$

Тут  $\epsilon_{\mathbf{k}} = h^2 k^2 / 2m$ ,  $V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 / q^2$  — фур'є-образ потенціалу Кулона,  $V$  — об'єм системи,  $a_{\mathbf{k},s}$  — оператори вторинного квантування на базисі плоских хвиль. Рівняння (1.5) задовольняє оператор у вигляді суми багаточастинкових локальних взаємодій

$$\begin{aligned}\hat{U}_\zeta &= \hat{N}\nu_1(\zeta, \beta, \mu) + \sum_{n \geq 2} \hat{u}_n(\zeta, \beta, \mu), \\ \hat{u}_n(\zeta, \beta, \mu) &= (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \zeta, \beta, \mu) \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0}, \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, \dots, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Виконується умова  $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \neq 0$ . Невідомі функції  $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \zeta, \beta, \mu)$  можна інтерпретувати як фур'є-образи  $n$ -частинкових ефективних взаємодій, які не зводяться до взаємодій нижчого порядку. Вони залежать від змінної хемічного потенціалу  $\mu$ , оскільки ми працюємо у великому канонічному ансамблі. Обчислюючи комутатор  $[[\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \hat{U}_\zeta]_-$  у явному вигляді, виконаємо заміну  $\hat{N}\hat{I}_n(\dots) \rightarrow N(\mu)\hat{I}_n(\dots)$ , де  $N(\mu) = \langle \hat{N} \rangle$  — статистичне середнє оператора числа частинок. Така заміна обґрунтована тим, що перетворення (1.3) відбувається під знаком  $Spr\{\dots\}$ . Похибка, що в цьому випадку виникає, має порядок  $N^{-1}$ . Прирівнюючи коефіцієнти при однакових операторах  $\hat{I}_n(\dots)$  у рівнянні (1.5), одержуємо ланцюжок рівнянь типу згортки для коефіцієнтних функцій (далі для скорочення позначень  $\xi = (\zeta, \beta, \mu)$ ):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \beta} \nu_1(\xi) &= N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi), \\ \frac{\partial}{\partial \beta} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) &= -V_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) + \sum_{m \geq 2} \Psi_n^{(m)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) + 2N(\mu) V^{-1} \nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \epsilon_{\mathbf{q}_1} \delta_{n,2} \\ &+ (1 - \delta_{n,2}) \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi).\end{aligned}\tag{2.3}$$

Для запису цієї системи рівнянь використано такі позначення:

$$\begin{aligned}V_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= \zeta V_{\mathbf{q}}, \\ V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 | \xi) &= h^2 (2m)^{-1} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, 0} \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i | \xi) \nu_2(\mathbf{q}_j, -\mathbf{q}_j | \xi), \\ V_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2 | \xi) &= -4h^2 m^{-1} \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 | \xi) \\ &\times \{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) + (\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2 | \xi)\}, \\ \Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= h^2 m^{-1} V^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q} | \xi), \\ \Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= 2h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1} \{\mathbf{q}_1^2 + (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})\} \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q} | \xi), \\ \Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= h^2 N^2 m^{-1} V^{-3} \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1^2 \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \nu_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi), \\ &\dots \\ \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) &= h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i^2 \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i | \xi).\end{aligned}\tag{2.4}$$

Рівняння для функцій  $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi)$  при  $n \geq 3$  мають однакову структуру. Рівняння ж для парної функції  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$  вирізняється більш сильною нелінійністю. Системі рівнянь (2.3) відповідає гранична умова:

$\nu_n(\dots) \rightarrow 0$  при  $\beta \rightarrow 0$ .

Для складної системи суттєво нелінійних інтегро-диференціальних рівнянь (2.3)–(2.4) має зміст знаходження наближених розв'язків. У цій системі особливе місце займає рівняння для  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ . Як видно з аналізу рівняння, в області невеликих хвильових векторів можна знехтувати його інтегральними складовими  $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$  при  $m \geq 2$ . В цьому наближенні воно зводиться до диференціального рівняння, а його розв'язком є

$$\begin{aligned} \nu_2^{(0)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) &= -\zeta^{1/2} V_{\mathbf{q}}(h\omega_0)^{-1} \{1 - R(\beta)\} \{1 + R(\beta)\}^{-1}, \\ R(\beta) &= \exp \left\{ -2\beta\zeta^{1/2} h\omega_0 \right\}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

де  $\omega_0 = \{4\pi\epsilon^2 N(\mu)m^{-1}V^{-1}\}^{1/2}$ . При  $\mu = \mu^*$  (де  $\mu^*$  — хемічний потенціал системи)  $\omega_0$  збігається з частотою плазмових коливань. Хоч розв'язок (2.5) відповідає асимптотиці малих хвильових векторів, він визначає характер залежності  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$  від температури: експоненційно слабку залежність в області низьких температур ( $k_B T \leq h\omega_0$ ). Це дає підставу розглядати рівняння для  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$  як інтегральне, нехтуючи похідною  $\frac{\partial}{\partial \beta} \nu_2(\dots)$ :

$$\begin{aligned} -\zeta V_{\mathbf{q}} + 2N(\mu)V^{-1}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) + \sum_{m \geq 3} \Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \\ -h^2(mV)^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q} - \mathbf{q}_1)\nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1|\xi) \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}|\xi) = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Інтегральні складові  $\Psi_2^{(m)}(\dots)$  при  $m \geq 3$  можна враховувати методом послідовних наближень. Тому розглянемо спочатку нелінійне інтегральне рівняння при  $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$ . Для аналізу і наближеного розв'язування його введемо безрозмірні змінні  $x = qa_0 n^{-1/3}$  і функцію  $y_2(x) = \zeta^{-1/2} (4\pi a_0^3)^{-1} n^{7/6} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ , де  $a_0$  — радіус Бора;  $n = 4\pi a_0^3 N(\mu)/V$ . У цих змінних при  $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$  маємо таке нелінійне рівняння:

$$\begin{aligned} x^2 y_2^2(x) - x^{-2} - (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{x}_1 (\mathbf{x}_1, \mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \\ \times y_2(x_1) y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|) = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Виконуючи перетворення Фур'є до змінних  $\rho$ , спряжених змінним  $\mathbf{x}$ ,

$$y_2(x) = \int f_2(\rho) e^{-i\mathbf{x}\rho} d\rho, \quad (2.8)$$

запишемо еквівалентне рівняння в координатному зображенні:

$$\begin{aligned} \{4\pi \nabla f_2(\rho)\}^2 - \rho^{-1} \\ -4\pi \int f_2(\rho_1) \nabla_{\rho}^2 f_2(|\rho - \rho_1|) d\rho_1 = 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

З аналізу рівняння (2.7) бачимо, що  $y_2(x) \sim -x^{-2}$  при

$x \rightarrow 0$  ( $f_2(\rho) \sim -\rho^{-1}$  при  $\rho \rightarrow \infty$ ). З рівняння (2.9)

$$\{\nabla f_2(\rho)\}^2 \sim \rho^{-1} + \text{const} \text{ при } \rho \rightarrow 0, \quad (2.10)$$

тому  $f_2(\rho) \simeq C + C_1 \rho^{1/2} + C_2 \rho^{3/2} + \dots$  при  $\rho \rightarrow 0$ . Використовуючи цю асимптотику, знайдемо наближений — асимптотично точний — розв'язок рівняння (2.7) методом пробних функцій. Функцію з невеликою кількістю параметрів можна задати або в координатному, або в імпульсному зображенні:

$$f_2^{(0)}(\rho) = -B\rho^{-1} [1 - e^{-\rho}] [1 + b\rho^{1/2} e^{-\gamma\rho}], \quad (2.11)$$

$$y_2^{(0)}(x) = -Ax^{-2} [1 + ax^2 - bx^4 (1 + ax^2)^{-1}]^{-3/4},$$

$$a^2 > b.$$

Безпосередній розрахунок свідчить, що  $y_2^{(0)}(x)$  має таку ж асимптотику в координатному зображенні, як і  $f_2^{(0)}(\rho)$ . В імпульсному зображенні обидві функції теж мають подібну асимптотику, а саме:

$$y_2^{(0)}(x) \sim \begin{cases} -x^{-2} + \text{const} + \dots, & x \ll 1, \\ -\text{const} x^{-7/2} + \dots, & x \gg 1. \end{cases} \quad (2.12)$$

Параметри функції  $y_2^{(0)}(x)$  знайдено з умови, щоб у рівнянні (2.7) компенсувались члени типу  $x^{-2}$  при  $x \gg 1$ , а також  $x^{-2}$  і  $x^0$  при  $x \ll 1$ :

$$A = 1, \quad a = 4(9\pi)^{-2/3}(1 - \xi_0)^{-1}, \quad b = \xi_0 a^2. \quad (2.13)$$

При цьому  $\xi_0$  є розв'язком рівняння

$$(1 - \xi_0)^{3/2} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_0^n (2n + 1)!! \times 2^{-n} (n!)^{-1} (2n + \frac{1}{2})^{-1} = 4/3 \quad (2.14)$$

і наближено дорівнює 0.2929... . Параметри функції  $f_2^{(0)}(\rho)$  визначені з тих самих умов, а також з вимоги, щоб рівняння (2.7) точно виконувалось при фіксованому значенні змінної ( $x = p$ ):

$$B = (4\pi)^{-1}, \quad b = -2p^{-1}, \quad (2.15)$$

$$\gamma = p \cdot 0.5758\dots, \quad p = 2.7008\dots$$

Функції  $y_2^{(0)}(x)$  і  $f_2^{(0)}(\rho)$  дуже близькі між собою у всьому інтервалі  $0 \leq x \leq \infty$ . На рис. 1 зображено  $Z_2(x) = x^2 y_2^{(0)}(x)$  у різних наближеннях. Крива 1

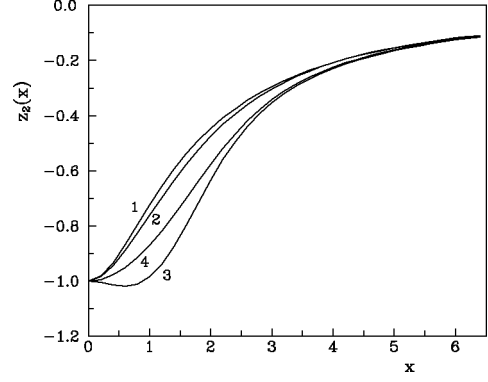


Рис. 1. Функція  $Z_2(x) = x^2 y_2(x)$  при  $T = 0$  К в різних наближеннях: крива 1 відповідає  $y_2^{(0)}(x)$ , 2 – розв'язку рівняння (2.7), 3 – розв'язку (2.20) при врахуванні  $\Psi_2^{(2)}(\dots)$  та  $\Psi_2^{(3)}(\dots)$ , 4 – розв'язку цього ж рівняння в наближенні  $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$  при  $m \geq 5$ .

відповідає функції  $y_2^{(0)}(x)$ , а крива 2 — розв'язку рівняння (2.7), обчисленому числовим методом. Зазначимо, що  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \in$  фур'є-образом потенціалу взаємодії квантових пакетів. З функції  $f_2^{(0)}(\rho)$  при абсолютному нулі температури маємо

$$\nu_2(\mathbf{r}|\xi) = V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = -(\zeta r_s)^{1/2} 3^{-1/6} \rho^{-1} [1 - e^{-p\rho}] [1 - \frac{2}{p} \rho^{1/2} e^{-\gamma\rho}], \quad (2.16)$$

де  $\rho = 3^{1/3} (a_0 r_s)^{-1} r$ ,  $r_s(\mu) = a_0^{-1} \left( \frac{3V}{4\pi N(\mu)} \right)^{1/3}$  при  $N(\mu) = N$  збігається з параметром Вігнера-Бракнера [10]. При цьому  $\nu_2(0|\zeta) = -(\zeta r_s)^{1/2} 3^{-1/6} p$ .

В області низьких температур рівняння для функцій

$$y_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = \zeta^{-1/2} n^{m-5/6} (4\pi a_0)^{1-m} \nu_m(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_m|\xi) \quad (2.17)$$

також не містять жодних параметрів, як і (2.7):

$$y_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) \tilde{\Phi}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) + \sum_{l \geq 2} \tilde{\Psi}_m^{(l)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = \tilde{V}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m). \quad (2.18)$$

Методом пробних функцій одержуємо асимптотичні розв'язки цих рівнянь:

$$y_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \simeq -\tilde{V}_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \{ \eta(x_1) + \eta(x_2) + \eta(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \}^{-1},$$

$$y_4(\mathbf{x}_1, -\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, -\mathbf{x}_2) \simeq 2y_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \{ \eta(x_1) + \eta(x_2) \}^{-1}$$

$$\times \{ (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) y_2(x_1) + (\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) y_2(x_2) \}, \quad (2.19)$$

.....

$$\tilde{V}_3(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) y_2(x_i) y_2(x_j), \quad \eta(x) = -[x^2 y_2(x)]^{-1}.$$

Використовуючи (2.19), знайдемо наближені вирази для інтегральних складових  $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$  і, отже, за-

мкнуте інтегральне рівняння для функції  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ . Записане в безрозмірних змінних, воно не містить ніяких параметрів і визначає універсальну функцію  $y_2(x)$ :

$$-x^{-2} + x^2 y_2^2(x) + \sum_{m \geq 3} \tilde{\Psi}_2^{(m)}(\mathbf{x}, -\mathbf{x}) - (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{x}_1 (\mathbf{x}_1, (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) y_2(x_1) y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|)) = 0. \quad (2.20)$$

Ми дослідили аналітично, а також числовим методом рівняння (2.20) з урахуванням внеску тричастинкових взаємодій

$$\Psi_2^{(3)}(\mathbf{x}) = \pi^{-2} \int d\mathbf{x}_1 [\mathbf{x}_1^2 + (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x})] y_2(x_1) \{\eta(x) + \eta(x_1) + \eta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|)\}^{-1} \quad (2.21)$$

$$\times \{(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) y_2(x) y_2(x_1) + (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}) y_2(x_1) y_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}|) + (\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{x}_1) y_2(x) y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|)\}.$$

Комп'ютерному розв'язку в цьому наближенні відповідає крива 3 на рис. 1. Відносне відхилення кривої 3 від кривої 2 досягає значення порядку 20 % в основній області змінної  $x$ . Розв'язку рівняння (2.20) з урахуванням  $\Psi_2^{(3)}(\mathbf{x})$  і  $\Psi_2^{(4)}(\mathbf{x})$  (відбувається їхня значна взаємна компенсація) відповідає крива 4.

Для знаходження наближеного розв'язку рівняння для  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$  при скінченних температурах візьмемо до уваги асимптотичний розв'язок (2.6) і зробимо підстановку:

$$\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) = \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu) f_{\mathbf{q}}(\beta),$$

де  $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)$  є розв'язком рівняння (2.7),  $f_{\mathbf{q}}(\beta)$  прямує до одиниці при  $\beta \rightarrow \infty$ , а при  $\beta \rightarrow 0$  функція  $f_{\mathbf{q}}(\beta)$  прямує до нуля. Наближено рівняння для  $f_{\mathbf{q}}(\beta)$  має такий вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} f_{\mathbf{q}}(\beta) \quad (2.22)$$

$$= \zeta V_{\mathbf{q}} [\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^{-1} \{f_{\mathbf{q}}^2(\beta) - 1\}.$$

Його розв'язком є

$$f_{\mathbf{q}}(\beta) = \{1 - R_{\mathbf{q}}(\beta)\} \{1 + R_{\mathbf{q}}(\beta)\}, \quad (2.23)$$

$$R_{\mathbf{q}}(\beta) = \exp\{2\beta \zeta V_{\mathbf{q}} [\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^{-1}\}.$$

Такий розв'язок має сенс в області малих значень вектора  $\mathbf{q}$ , де показник експоненти можна записати як

$$-2\beta \zeta^{1/2} h \omega_{\mathbf{q}}, \quad (2.24)$$

а  $\omega_{\mathbf{q}}$  визначає спектр плазмових коливань:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 \{1 + \alpha (q/k_F)^2 + \dots\}. \quad (2.25)$$

Використовуючи  $y_2^{(0)}(x)$ , для коефіцієнта дисперсії одержуємо значення  $\alpha = \frac{1}{2} (\frac{3}{2})^{1/3} [1 - \xi_0]^{-1} \sim 1$ . Він не залежить від параметра неідеальності, на відміну від наближення слабо неідеальних систем. Тут  $k_F = (3\pi^2 \frac{N}{V})^{1/3}$  — хвильове число Фермі.

Підставляючи (2.23) у перше з рівнянь (2.4), визначаємо наближений розв'язок для функції  $\nu_1(\xi)$ :

$$\nu_1(\xi) \cong N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} [\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^2 \times \{\beta + [\zeta V_{\mathbf{q}}]^{-1} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu) [1 - R_{\mathbf{q}}(\beta)] [1 + R_{\mathbf{q}}(\beta)]^{-1}\}. \quad (2.26)$$

Переходячи до безрозмірних змінних, маємо

$$\nu_1(\xi) \cong \beta \frac{Ry}{r_s(\mu)} \zeta d(\beta^*),$$

$$d(\beta^*) = \frac{2}{\pi} 3^{1/3} \int_0^\infty dx x^4 y_2^2(x) \times \left\{ 1 + \frac{x^2 y_2(x)}{\beta^*} \cdot \frac{1 - R(x|\beta^*)}{1 + R(x|\beta^*)} \right\}, R(x|\beta^*) = \exp\{2\beta^* [x^2 y_2(x)]^{-1}\}. \quad (2.27)$$

Отже, при низьких температурах функція  $\nu_1(\xi)$  пропорційна до  $\beta$ , а всі інші коефіцієнтні функції  $\nu_n(\dots)$

мають слабу експоненційну залежність від цієї змінної, з чого випливає експоненційна малість операторів  $\frac{\partial \hat{K}_\zeta}{\partial \beta}$  і  $[\hat{K}_\zeta, \frac{\partial \hat{U}_\zeta}{\partial \beta}]$ .

### III. РОЗРАХУНКИ Й ОЦІНКИ

Завершення схеми побудови апроксимаційного статистичного оператора для моделі електронної рідини потребує розрахунку  $\zeta_0$  як функції параметра неідеальності. З цією метою розглянемо статистичну суму  $Z_\zeta^0(\mu)$  в околі точки  $\mu = \mu^*$ , де  $\mu^*$  — хемічний потенціал моделі (корінь рівняння  $N = -\frac{d}{d\mu}\Omega_\zeta^0(\mu)$ ). Виконуючи зсув змінної хемічного потенціалу, маємо

$$Z_\zeta^0(\mu) = Z_0(\tilde{\mu}) \langle \exp \hat{U}(\hat{\rho}|\xi) \rangle_0, \quad (3.1)$$

$$\tilde{\mu} \equiv \mu + \beta^{-1} \{ \nu_1(\xi) - (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) + (3V^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \neq 0} \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|\xi) + \dots \},$$

де  $Z_0(\tilde{\mu})$  — статистична сума ідеальної системи (яка відіграє роль базисної), а символ  $\langle \dots \rangle_0$  означає засереднення за станами цієї системи. При цьому

$$\hat{U}(\hat{\rho}|\xi) = \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \tilde{\nu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi) \prod_{j=1}^n \hat{\rho}_{\mathbf{q}_j} \quad (3.2)$$

є оператором ефективних багаточастинкових взаємодій, записаним у термінах операторів електронної густини

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}. \quad (3.3)$$

У зв'язку з переходом від  $\hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  до  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$  функції  $\tilde{\nu}_n(\dots)$  є лінійними комбінаціями  $\nu_n(\dots)$ , наприклад:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) &= \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) - V^{-1} \sum_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3, 0} \nu_3(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) \\ &+ V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4, 0} \nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4|\xi) + \dots, \quad (3.4) \\ \tilde{\nu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) &= \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) - V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) + \dots \end{aligned}$$

Для розрахунку середнього у формулі (3.1) перейдемо до простору колективних змінних  $\rho_{\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}}^c + i\rho_{\mathbf{q}}^s$  за допомогою оператора переходу [10]

$$\hat{J}(\rho - \hat{\rho}) = \prod_{c(\mathbf{q})} \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}), \quad (3.5)$$

що є аналогом функції переходу в класичній статистиці [11, 12]. Оскільки  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$  та  $\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}$  не є незалежними ( $\hat{\rho}_{-\mathbf{q}} = \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^+$ ), область  $c(\mathbf{q})$  охоплює половину всіх можливих значень  $\mathbf{q}$ . Змінні  $\rho_{\mathbf{q}}$  не пов'язані з зображенням взаємодії і тому є прямими аналогами колективних координат у статистиці класичних систем. Використовуючи співвідношення

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \int (d\rho) \hat{J}(\rho - \hat{\rho}) \rho_{\mathbf{q}}, \quad (d\rho) = \prod_{c(\mathbf{q})} d\rho_{\mathbf{q}}^c d\rho_{\mathbf{q}}^s \quad (3.6)$$

та інтегральне зображення  $\delta$ -функції, визначаємо



$$Z_\zeta^0(\mu) = Z_0(\tilde{\mu}) \int (d\rho) \exp U(\rho|\xi) \int (d\omega) J(\omega) \times \exp[i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}]. \quad (3.7)$$

Тут

$$U(\rho|\xi) = \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \tilde{\nu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi) \prod_{j=1}^n \rho_{\mathbf{q}_j} \quad (3.8)$$

— зображення оператора  $\hat{U}(\hat{\rho}|\xi)$  в колективних змінних,

$$J(\omega) = \langle \exp[-i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}] \rangle_0 = \exp \sum_{n \geq 2} D_n(\omega), \quad (3.9)$$

$$D_n(\omega) = (-i\pi)^n (n!)^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \omega_{\mathbf{q}_1} \dots \omega_{\mathbf{q}_n} S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n),$$

а функції  $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  визначені як зв'язні середні від добутку операторів (3.3)

$$\begin{aligned} S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &\equiv S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\tilde{\mu}) \\ &= \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2} \dots \hat{\rho}_{\mathbf{q}_n} \rangle_0^{\text{зв}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

і пов'язані з багаточастинковими структурними фак-

торами базисної системи. При цьому змінні  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}}^c - i\omega_{\mathbf{q}}^s$  спряжені до змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$ ,  $(d\omega) = \prod_{c(\mathbf{q})} d\omega_{\mathbf{q}}^c d\omega_{\mathbf{q}}^s$ .

Інтегруючи за змінними  $\rho_{\mathbf{q}}$  у формулі (3.7), зведемо статистичну суму до такого зображення в  $\omega$ -просторі:

$$Z_\zeta^0(\mu) = Z_0(\tilde{\mu}) \int (d\omega) J(\omega) f(\omega). \quad (3.11)$$

Множник

$$f(\omega) = \int (d\rho) \exp \left\{ U(\rho|\xi) + i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \right\} \quad (3.12)$$

у наближенні двочастинкових взаємодій можна врахувати точно:

$$\tilde{f}_2 = \left\{ \prod_{c(\mathbf{q})} [-V^{-1} \tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)] \right\}^{-1} \times \exp \left\{ \frac{\pi^2}{2} V \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}} \tilde{\nu}_2^{-1}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \right\}. \quad (3.13)$$

Врахування ж багаточастинкових взаємодій (що відіграють роль поправок) можна зробити наближено методом моментів.

Інтегрування в (3.11) також не можна виконати точно через складну залежність  $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  від своїх аргументів. Найпростіший спосіб наближеного інтегрування полягає у виділенні базового розподілу

$$\begin{aligned} W_0(\omega) &= \exp \left\{ -\frac{\pi^2 V}{2} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}} g^{-1}(\mathbf{q}) \right\}, \\ g(\mathbf{q}) &= -\tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \epsilon_0^{-1}(\mathbf{q}), \\ \epsilon_0(\mathbf{q}|\xi) &= 1 - V^{-1} S_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi), \end{aligned} \quad (3.14)$$

який допускає точне інтегрування, і в наступному врахуванні множника  $J(\omega) f(\omega) W_0^{-1}(\omega)$  методом моментів відносно базового розподілу. Таким чином виникає зображення термодинамічного потенціалу у вигляді квантових групових розкладів. У цій роботі ми обмежимося наближенням двочастинкових взаємодій в  $U(\rho|\xi)$ , замінюючи  $\tilde{\nu}_2(\dots)$  на  $\nu_2(\dots)$  у формулах (3.13), (3.14). У цьому наближенні

$$\Omega_\zeta^0(\mu) = \Omega_0(\tilde{\mu}) + \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \epsilon_0(\mathbf{q}) + \sum_{n \geq 1} B_n(\tilde{\mu}),$$

$$B_1(\tilde{\mu}) = -\beta^{-1} \sum_{n \geq 2} (-1)^n V^{-n} [(2n)!!]^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} S_{2n}^0(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, -\mathbf{q}_n) \prod_{j=1}^n g(\mathbf{q}_j), \quad (3.15)$$

$$B_2(\tilde{\mu}) = -(4\beta V^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} R_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) g^2(\mathbf{q}) - (2\beta)^{-1} \sum_{n \geq 3} (-V)^{-n} (n!) \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} R_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) R_n(-\mathbf{q}_1, \dots, -\mathbf{q}_n) \prod_{j=1}^n g(\mathbf{q}_j),$$

.....

$$R_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) + \sum_{l \geq 1} (-V)^{-l} [(2l)!!]^{-1} \sum_{\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_l} S_{n+2l}^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, \mathbf{q}'_1, -\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_l, -\mathbf{q}'_l) \prod_{j=1}^l g(\mathbf{q}'_j).$$

За своєю структурою групові коефіцієнти  $B_n(\tilde{\mu})$  збігаються з груповими коефіцієнтами класичної статистики у базисному підході до врахування короткосяжних взаємодій [13]. Специфічні риси, характерні для квантової моделі, відображають кумулянти  $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  базисної системи.

Беручи до уваги температурну залежність функцій  $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi)$ , бачимо, що термодинамічний потенціал основного стану моделі визначається складовою  $\Omega_0(\tilde{\mu})$  при  $\tilde{\mu} = \mu + \beta^{-1}\nu_1(\xi)$ , а всі інші складові (3.15) вносять температурні поправки, які перетворюються в нуль при  $\beta \rightarrow \infty$ . З рівняння

$$-N = \frac{\partial}{\partial \tilde{\mu}} \Omega_0(\tilde{\mu}) \quad (3.16)$$

визначаємо хемопотенціал моделі у випадку абсолютного нуля температури

$$\begin{aligned} \mu_\zeta^* &= \epsilon_F - NV^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}|\zeta, \infty, \epsilon_F) \\ &= \left\{ \frac{\eta^2}{r_s^2} - \frac{\zeta d}{r_s} \right\} Ry, \end{aligned} \quad (3.17)$$

де  $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 (2m)^{-1}$  — енергія Фермі. Середня енергія основного стану моделі

$$E_\zeta = \Omega_0(\epsilon_F) + N\mu_\zeta^* = \left\{ \frac{3}{5} \frac{\eta^2}{r_s^2} - \frac{\zeta d_0}{r_s} \right\} N Ry, \quad (3.18)$$

де  $d_0$  — універсальна стала, незалежна від фізичних параметрів. Різним наближенням для функції  $y_2(x)$  відповідають такі значення  $d_0$ : асимптотичний розв'язок  $y_2^{(0)}(x)$  дає значення 1.3044..., числовий розв'язок рівняння (2.20) при  $\Psi_2^{(m)}(x) = 0$  для  $m \geq 3$  дає значення  $d_0(2) = 1.3872...$ , у наближенні  $\Psi_2^{(m)}(x) = 0$  при  $m \geq 4$  одержуємо  $d_0(3) = 1.9600...$ , врахування  $\Psi_2^{(m)}(x)$  при  $2 \leq m \leq 4$  дає  $d_0(4) = 1.6873...$  і т.д. Нижче наведено значення  $d_0(n)$  як функції числа  $n(2 \leq n \leq 6)$ :

| $n$      | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $d_0(n)$ | 1.3872 | 1.9600 | 1.6873 | 1.8417 | 1.7704 |

Як видно з аналізу кривих рис. 1 та функцій  $\Psi_2^{(m)}(x)$ , врахування складових  $\Psi_2^{(m)}(x)$  при  $m > 6$  може змінити  $y_2(x)$  незначно, та й то лише в області малих значень змінної  $x$ . Отже, вплив  $\Psi_2^{(m)}(x)$  при  $m > 6$  на значення  $d_0$  теж буде незначним.

Як відомо, енергія основного стану електронної рідини в області низьких густин ( $r_s \gg 1$ ) досить добре досліджена. Вігнер зазначив [14, 15], що у цьому випадку вигідним стає утворення об'ємоцентрованої кубічної ґратки, електростатична енергія якої в границі сильного зв'язку  $E_w = -N Ry 1.79815...$ . На основі квантово-механічного опису динаміки ґратки Вігнера в працях [16, 17] було одержано такий розклад для енергії основного стану за степенями параметра  $r_s^{-1/2}$ :

$$\begin{aligned} E_0 &= N Ry \left\{ \sum_{n \geq 0} A_{1+n} r_s^{-(1+1/2n)} + \right. \\ &\left. + 0(\exp[-\alpha r_s^{1/2}]) \right\}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

При цьому  $A_1 = -1.79815...$ ,  $A_2 = 2.65724...$ ,  $A_3 = -0.73...$ ,  $A_n = -0.8...$ ;  $\alpha = 2.06...$ . Таким чином обчислене нами значення енергії основного стану  $E_\zeta$  при  $\zeta = 1$  асимптотично точно визначає енергію ґратки Вігнера при великих  $r_s$  і обмежує знизу значення енергії електронної рідини при довільних значеннях параметра неідеальності.

Розглянемо далі питання про вибір параметра включення  $\zeta_0$  для випадку основного стану моделі. Щоб розв'язати рівняння (1.37), необхідно знати не лише

$$\left\langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \right\rangle_{P_1} = \left\langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \right\rangle_{P_{\zeta_0}^0} = N Ry \frac{\zeta_0 d_0}{r_s}, \quad (3.20)$$

але також  $\langle \hat{V} \rangle_{P_1}$  та  $\langle \hat{V} \rangle_{P_{\zeta_0}^0}$ . Коректний розрахунок останньої величини можна виконати на основі парної

кореляційної функції моделі зі статистичним оператором  $\hat{p}_{\zeta_0}^0$ , що, однак, виходить за рамки цієї статті. Тут ми покажемо, що можливий такий вибір параметра  $\zeta_0 = \zeta_0(r_s)$ , який забезпечує точний збіг  $E_\zeta$  з енергією моделі при всіх значеннях параметра неідеальності  $r_s$ . У цьому випадку величина  $\Delta_1 = \langle \hat{V} + \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1}$  буде від'ємною, відповідно до рівняння (1.37) і малою.

Для розрахунку середнього  $\langle \hat{V} \rangle_{P_1}$  використаємо такий прийом. Як відомо, середнє значення енергії моделі (1.1) можна записати у вигляді [18]:

$$E = E_{id} + \int_0^{e^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)}, \quad (3.21)$$

де  $E_{id}$  — середнє значення енергії ідеальної системи;  $\langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)}$  — середнє значення енергії взаємодії у системі, де заряд електрона дорівнює  $e_1$ . Внесок взаємодії в (3.21) можна звести до такої форми:

$$\int_0^{e^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)} = Nh^2 [2m\langle r \rangle^2]^{-1} r_s^2 \epsilon(r_s), \quad (3.22)$$

де  $\langle r \rangle = (3V/4\pi N)^{1/3}$ , а  $\epsilon(r_s)$  — безрозмірна функція параметра  $r_s$ , а саме:

$$\epsilon(r_s) = \epsilon_{HF}(r_s) + \epsilon_c(r_s). \quad (3.23)$$

Тут  $\epsilon_{HF}(r_s) = -3\eta(2\pi r_s)^{-1}$  — внесок, зумовлений ідеальними кореляціями,  $\epsilon_c(r_s)$  — так звана кореляційна енергія (внесок неідеальних кореляцій). З точності

$$\langle \hat{V} \rangle_{P_1} = e^2 \frac{d}{de^2} \left\{ \int_0^{e^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)} \right\} \quad (3.24)$$

знаходимо, що

$$\langle \hat{V} \rangle_{P_1} = N Ry r_s^{-1} \frac{d}{dr_s} [r_s^2 \epsilon(r_s)]. \quad (3.25)$$

Виберемо тепер параметр  $\zeta_0$  з умови

$$-\frac{\zeta_0 d_0}{r_s} = \epsilon(r_s), \quad (3.26)$$

яка забезпечує співпадіння  $E_\zeta$  з точним значенням енергії моделі (1.1) при  $T = 0$  К. При такому виборі  $\zeta_0$  визначаємо, що

$$\begin{aligned} \Delta_1(\zeta_0) &= \langle \hat{V} + \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1} = -d_0 \frac{d\zeta_0(r_s)}{dr_s} \\ &= \frac{d}{dr_s} [r_s \epsilon_c(r_s)]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Виділяючи енергію взаємодії з (3.19), знаходимо розклад за степенями  $r_s^{-1/2}$  для параметра  $\zeta_0(r_s)$  в області низьких густин:

$$\zeta_0(r_s) = 1 - a_1 r_s^{-1/2} + a_2 r_s^{-1} + a_3 r_s^{-3/2} + \dots \quad (3.28)$$

Коефіцієнти  $a_n > 0$  визначаються такими співвідношеннями:  $a_1 = -A_2 A_1^{-1} = 1.47776$ ,  $a_2 = A_1^{-1} [A_3 - 3/5\eta^2] = 1.6461$ ,  $a_3 = A_1^{-1} A_4 = 0.44490$  і т.д. Відповідно для  $\Delta_1(\zeta_0)$  маємо:

$$\begin{aligned} \Delta_1(\zeta_0) &= -1.32862 r_s^{-3/2} + \\ &+ 2.94 r_s^{-2} + 1.2 r_s^{-5/2} + \dots \end{aligned} \quad (3.29)$$

З розкладів (3.28), (3.29) бачимо, що  $\zeta_0(r_s) < 1$  і прямує до одиниці при  $r_s \rightarrow \infty$ . Функція  $\Delta_1(\zeta_0)$  є від'ємною і малою порівняно з  $\epsilon(r_s)$ : відношення  $\Delta_1(\zeta_0)\epsilon^{-1}(r_s)$  має порядок  $-A_2(2A_1)^{-1} r_s^{-1/2}$  і прямує до нуля в границі великих  $r_s$ . При розрахунку  $\zeta_0(r_s)$  ми поклали, що  $d_0 = -A_1 = 1.79815\dots$

В області високих густин використаємо відомий вираз для кореляційної енергії [18]

$$\epsilon_c(r_s) = 0.0622 \ln r_s - 0.096 + O(r_s). \quad (3.30)$$

З формул (3.26) та (3.27) знаходимо в границі малих  $r_s$ :

$$\zeta_0(r_s) = 3\eta(2\pi d_0)^{-1} - 0.0622 d_0^{-1} r_s \ln r_s \quad (3.31)$$

$$+ 0.096 r_s + \dots,$$

$$\Delta_1(\zeta_0) = 0.0622 \ln r_s - 0.034 + O(r_s).$$

Отже,  $\zeta_0(r_s)$  прямує до значення  $\zeta_0(0) = 3\eta(2\pi d_0)^{-1} = 0.509596\dots$  в границі слабо неідеальної системи ( $r_s \rightarrow 0$ ). Відношення  $\Delta_1(\zeta_0)\epsilon^{-1}(r_s) \rightarrow 0$  при  $r_s \rightarrow 0$ , хоч  $\Delta_1(\zeta_0)$  має такий самий порядок величини, що й  $\epsilon_c(r_s)$ . Усе це свідчить про недоцільність використання апроксимаційного статистичного оператора для опису слабо неідеальних систем. На рис. 2 показано залежність параметра  $\zeta_0$  від параметра неідеальності  $r_s$  у наближенні (3.31) (крива 1), а також в наближенні (3.28) (крива 2). Крива 3 побудована за формулою (3.26), причому для кореляційної енергії використано апроксимаційну формулу, справедливу в області проміжних  $r_s$  також:

$$\begin{aligned} \epsilon_c(r_s) &= -2b_0 \int_a^\infty dx (b_1 + x^{-1}) \\ &\times [1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3]^{-1} \end{aligned} \quad (3.32)$$

при  $a = r_s^{1/2}$ ,  $b_0 = 0.0621814$ ,  $b_1 = 9.81379$ ,  $b_2 = 2.82214$ ,  $b_3 = 0.69699$ , що відповідає апроксимації результатів методу Монте-Карло [19], зробленій у праці [20] для  $\frac{d}{dr_s} \epsilon_c(r_s)$ . Можна бачити з рисунка, наближення низьких густин (3.28) справедливе вже в області  $r_s \leq 10$ .

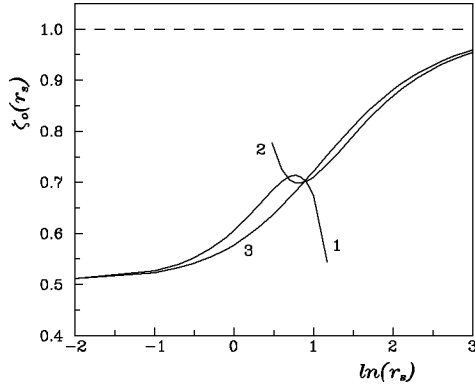


Рис. 2. Залежність параметра  $\zeta_0$  від параметра неідеальності  $r_s$ : крива 1 – наближення високих густин (3.31), 2 – наближення низьких густин (3.28), крива 3 відповідає формулі (3.26) при використанні інтерполяційної формули (3.32) для  $\epsilon_c(r_s)$ .

#### IV. ВИСНОВКИ

Запропоноване нами узагальнення методу зміщень є деякою альтернативою до методів теорії збурень, які традиційно використовують у теорії систем взаємодіючих частинок. Нерівності (1.12), (1.18) дають підстави для побудови модельного статистичного оператора  $\hat{P}_{\zeta_0}^0$ , який відіграє роль апроксимаційного для досліджуваної фізичної системи (1.1). На прикладі моделі електронної рідини ми проілюстрували можливість такої побудови, а також можливість регулювання границь відхилень розрахованих термодинамічних характеристик від їхніх точних значень. Для визначення параметра  $\zeta_0$  ми скористалися результатами розрахунку середньої енергії електронної рідини методом Монте-Карло [19]. Однак цієї мети можна було б досягти, використавши добре відому асимптотичну залежність  $\epsilon(r_s)$  при малих та великих значеннях  $r_s$ , а також числові розрахунки цієї характеристики в області проміжної неідеальності [21]. Статистичний оператор  $\hat{P}_{\zeta_0}^0$  дає змогу розрахувати всі характеристики моделі, у тому числі й при скінченних температурах. Відсутність зображення взаємодії значною мірою полегшує цю задачу і дає змогу скористатися методами класичної статистики.

На основі  $\hat{P}_{\zeta_0}^0$  будуть досліджені фазові стани моделі однорідної електронної рідини (парамагнетний, надпровідний [22], феромагнетний [18]), а також можливі структурні перетворення (виникнення хвиль зарядової густини, ґратка Вігнера [10]). Апроксимаційний оператор можна застосувати також для дослідження споріднених моделей сильно неідеальних фермі-систем, зокрема моделей металів, надпровідників, електрон-діркової рідини. Особливий інтерес становить можливість застосування цього підходу для вивчення характеристик просторово неоднорідних та обмежених фермі-систем.

#### ДОДАТОК

Через антиермітовість оператора  $\hat{K}_1$  похідну  $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)$  зручніше обчислити на основі оператора  $\hat{\mathcal{H}}_2(t)$ :

$$\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t) = -2t\langle\hat{L}_1\rangle_{P_2(t)}, \quad (\text{Д.1})$$

$$\hat{P}_2(t) = \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_2(t) - \mu\hat{N})] = \exp[-\beta\hat{\mathcal{H}}_2']. \quad (\text{Д.1})$$

Звідси випливає, що  $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t) = 0$  при  $t = 0$ , а перший доданок другої похідної (див. (1.21)) є невід'ємною величиною при всіх  $t$ .

Для обчислення другого доданка похідної  $\frac{d^2}{dt^2}\Omega(\mu|t)$  використаємо властивість циклічності операції  $Sp\{\dots\}$ , переходячи від неермітового оператора  $\hat{\mathcal{H}}_1'$  до ермітового  $\hat{\mathcal{H}}_2'$

$$Sp\left\{\hat{K}_1 e^{-\beta\gamma\hat{\mathcal{H}}_1'} \hat{K}_1 e^{-\beta(1-\gamma)\hat{\mathcal{H}}_1'}\right\} \quad (\text{Д.2})$$

$$= Sp\left\{\hat{B}(t) e^{-\beta\gamma\hat{\mathcal{H}}_2'} \hat{B}(t) e^{-\beta(1-\gamma)\hat{\mathcal{H}}_2'}\right\},$$

де  $\hat{B}(t) = \exp(t\hat{U}_1)\hat{K}_1 \exp(-t\hat{U}_1)$ . Перейдемо до зображення, в якому  $\hat{\mathcal{H}}_2'$  діагональний, враховуючи, що для матричних елементів  $\hat{K}_1$  виконується рівність  $(\hat{K}_1)_{ij} = -(\hat{K}_1)_{ji}$ . Вводячи матричні елементи  $\alpha_{kl}^{(\pm)} = [\exp(\pm t\hat{U}_1)]_{kl}$ , одержуємо:

$$\beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2}\Omega(\mu|t) = \left\{\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)\right\}^2 \quad (\text{Д.3})$$

$$+ Z^{-1}(\mu|t) \sum_{l_1, l_2, k_1, k_2} (\hat{K}_1)_{l_1, k_1} (\hat{K}_1)_{k_2, l_2}^* A(l_1, l_2, k_1, k_2),$$

де

$$Z(\mu|t) = \sum_n \exp(-\beta E_n^t),$$

$$A(l_1, l_2, k_1, k_2) = \sum_{n, m} A_{m, n}(t) \alpha_{k_1, n}^{(-)} \alpha_{nl_2}^{(+)} \alpha_{ml_1}^{(+)} \alpha_{k_2, m}^{(-)}, \quad (\text{Д.4})$$

$$A_{m, n}(t) = \{E_n^t - E_m^t\}^{-1} \cdot \{\exp(-\beta E_m^t) - \exp(-\beta E_n^t)\},$$

а  $E_n^t$  — власні значення оператора  $\hat{\mathcal{H}}_2' = \hat{\mathcal{H}}_2(t) - \mu\hat{N}$ . Беручи до уваги, що  $A_{m, n}(t)$  — додатна функція і

$$\sum_n \alpha_{nl}^{(+)} \alpha_{kn}^{(-)} = \delta_{l, k}, \quad (\text{Д.5})$$

знайдемо такі  $m_0, n_0$ , що

$$A(l_1, l_2, k_1, k_2) \geq A_{m_0, n_0}(t) \delta_{k_1, l_2} \delta_{l_1, k_2}. \quad (\text{Д.6})$$

Тому

$$\beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2} \Omega(\mu|t) \geq \left\{ \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) \right\}^2 \quad (\text{Д.7})$$

$$+ A_{m_0, n_0}(t) Z^{-1}(\mu|t) \sum_{l_1, l_2} |(\hat{K}_1)_{l_1, l_2}|^2 \geq 0.$$

функцією параметра  $t(0 \leq t \leq 1)$ , що дорівнює нулеві при  $t = 0$ . З цієї причини

$$0 \leq \int_0^1 dt \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) \leq \left\{ \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) \right\}_{|_{t=1}}, \quad (\text{Д.8})$$

Отже, похідна  $\frac{d}{dt} \Omega(\mu|t)$  є монотонною неспадною звідки впливає нерівність (1.22).

[1] І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **9**, 702 (1964).  
 [2] І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **9**, 827 (1964).  
 [3] Л. Ф. Блажиєвський, І. Р. Юхновський, Укр. фіз. журн. **16**, 924 (1967).  
 [4] И. Р. Юхновский, Р. Н. Петрашко, ТМФ **17**, 118 (1973).  
 [5] И. А. Вакарчук, ТМФ **18**, 90 (1974).  
 [6] И. А. Вакарчук, ТМФ **23**, 260 (1975).  
 [7] М. В. Ваврух, ТМФ **35**, 263 (1978).  
 [8] М. В. Ваврух, Доп. АН УРСР, сер. А № 6, 48 (1985).  
 [9] Н. Н. Боголюбов, *Метод исследования модельных гамильтонианов* (Наука, Москва, 1974).  
 [10] Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, *Проблема многих тел в квантовой механике* (Мир, Москва, 1969).  
 [11] М. В. Ваврух, Вісн. Львів. ун-ту **3**, 26 (1968).  
 [12] Д. Н. Зубарев, ДАН СССР **95**, 757 (1954).  
 [13] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова

думка, Київ, 1980).  
 [14] E. P. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934).  
 [15] E. P. Wigner, Trans. Faraday Soc. **34**, 678 (1938).  
 [16] W. J. Carr (Jr.), Phys. Rev. **122**, 1437 (1961).  
 [17] W. J. Carr (Jr.), R. A. Goldwell-Horsfall, A. E. Fein, Phys. Rev. **124**, 747 (1961).  
 [18] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).  
 [19] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).  
 [20] S. H. Vosko, L. Wilk, N. Nusair, Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).  
 [21] M. Vavruk, N. Vavruk, V. Solovyan, phys. stat. sol. (b) **177**, 361 (1993).  
 [22] М. В. Ваврух, Н. М. Ваврух, Физ. низ. темп. **21**, 572 (1995).

## APPROXIMATING STATISTICAL OPERATOR FOR A STRONGLY NON-IDEAL FERMI SYSTEM

M. Vavruk<sup>1</sup>, Ya. Kushtay<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute for Condensed Matter Physics Ukrainian Academy of Sciences, Lviv  
1 Svientsitskii Str., Lviv UA-290011, Ukraine*

<sup>2</sup>*Lviv Commercial College, 8 Mentsinskii Str., Lviv UA-290000, Ukraine*

On the ground of the modified displacement transformation a method of constructing an effective statistical operator for the strongly non-ideal Fermi systems has been developed. The general scheme is adapted to the homogeneous electron liquid model at the low temperatures without the limitation on the nonideality parameter  $r_s$ .