ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 1, № 1 (1996) с. 12–24

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 1, No 1 (1996) p. 12–24

АПРОКСИМАЦІЙНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР ДЛЯ СИЛЬНО НЕІДЕАЛЬНИХ ФЕРМІ–СИСТЕМ

М. Ваврух[1], Я. Куштай[2]
[1] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Україна, 290011, Львів, вул.Свєнціцького, 1*
[2] *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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}\ , \tag{1.1}$$

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

$$\hat{H}_\zeta = \hat{H}_0 + \zeta\hat{V}\ , \tag{1.2}$$

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

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

Тут β — обернена температура; μ — 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 β, одержуємо операторну рівність

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

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

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

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

Відповідно до рівності (1.4)

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

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

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

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

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

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

$$Z^0_\zeta = Sp\hat{P}^0_\zeta = \exp[-\beta\Omega^0_\zeta(\mu)] \ . \tag{1.8}$$

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

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

Її термодинамічний потенціал

$$\Omega^\Gamma_\zeta(\mu) = -\beta^{-1}\ln Sp\hat{P}^\Gamma_\zeta \tag{1.10}$$

пов'язаний з термодинамічним потенціалом системи (1.1)

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

такою нерівністю:

$$0 \le \Omega(\mu) - \Omega^\Gamma_1(\mu) \le \langle\hat{V} + \frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_1\rangle_{P^\Gamma_1} \ . \tag{1.12}$$

При цьому символ $< ... >_P$ означає звичайне статистичне середнє: $< \hat{A} >= \{Sp\hat{P}\}^{-1}Sp\{\hat{A}\hat{P}\}$. Згідно з (1.12) термодинамічний потенціал моделі, що описується оператором $\hat{P}^\Gamma_1$, 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"

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

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

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

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

$$Sp\{\exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_1(1) - \mu\hat{N})]\} \tag{1.15}$$
$$= Sp\{\exp[-\beta(\hat{H}_\zeta - \mu\hat{N})]\} = Z_\zeta(\mu) = \exp[-\beta\Omega_\zeta(\mu)] \ .$$

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

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

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:

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

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

$$\langle\hat{V} + \frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_\zeta\rangle_{P_1} \le \Omega(\mu) - \Omega^\Gamma_\zeta(\mu) \le \langle\hat{V} + \frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_\zeta\rangle_{P^\Gamma_\zeta} \ . \tag{1.18}$$

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

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

Відповідно до (1.11), (1.14) $\Omega(\mu|1) = \Omega(\mu)$, $\Omega(\mu|0) = \Omega^\Gamma_1(\mu)$. З метою оцінити зміну $\Omega(\mu|t)$ за рахунок оператора $\hat{K}_1$ методом [9] на основі тотожності

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

розрахуємо похідні

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

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

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

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

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) випливає нерівність

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Отже, у тих областях параметрів системи, де залежність $\hat{\varphi}(\beta)$ від β є монотонною, оператор $\hat{U}_{\zeta}$ має монотонну залежність від параметра ζ. 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 реґулювати межі відхилення $\Omega_{\zeta}^{\Gamma}(\mu)$ від $\Omega(\mu)$ відповідним вибором параметра $\zeta < 1$. Визначаючи ζ_0 умовою

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

і вводячи величину

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

запишемо нерівність (1.18) у такій формі:

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

Величина $\Delta(\zeta_0)$ задає мінімальні симетричні межі для різниці термодинамічних потенціалів фізичної системи і модельної (1.9): $|\Omega_{\zeta_0}^{\Gamma}(\mu) - \Omega(\mu)| \le \Delta(\zeta_0)$. 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 $\hat{U}_1 \to -\beta\hat{V}$.

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

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

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:

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

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):

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{q}\ne0}V_{\mathbf{q}}\sum_{\mathbf{k_1},\mathbf{k_2}}\sum_{s_1,s_2}a_{\mathbf{k_1}+\mathbf{q},s_1}^{+}a_{\mathbf{k_2}-\mathbf{q},s_2}^{+}a_{\mathbf{k_2},s_2}a_{\mathbf{k_1},s_1}.$$

Тут $\epsilon_{\mathbf{k}} = h^2k^2/2m, V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2/q^2$ — 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

$$\hat{U}_\zeta = \hat{N}\nu_1(\zeta,\beta,\mu) + \sum_{n\geq 2}\hat{u}_n(\zeta,\beta,\mu),$$

$$\hat{u}_n(\zeta,\beta,\mu) = (n!)^{-1}V^{1-n}\sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n}\nu_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n|\zeta,\beta,\mu)\hat{I}_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n)\delta_{\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_n,0}, \tag{2.2}$$

$$\hat{I}_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n) = \sum_{\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_n}\sum_{s_1,\ldots,s_n} a^+_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,s_1}...a^+_{\mathbf{k}_n+\mathbf{q}_n,s_n}a_{\mathbf{k}_n,s_n}...a_{\mathbf{k}_1,s_1}.$$

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

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\nu_1(\xi) = N(\mu)V^{-2}\sum_{\mathbf{q}}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi), \tag{2.3}$$

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

$$+(1-\delta_{n,2})\nu_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n|\xi)\Phi_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n|\xi).$$

Для запису цієї системи рівнянь використано такі позначення:

$$V_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi) = \zeta V_{\mathbf{q}}, \tag{2.4}$$

$$V_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3|\xi) = h^2(2m)^{-1}\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0}\sum_{i\neq j=1}^{3}(\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j)\nu_2(\mathbf{q}_i,-\mathbf{q}_i|\xi)\nu_2(\mathbf{q}_j,-\mathbf{q}_j|\xi),$$

$$V_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2|\xi) = -4h^2m^{-1}\nu_3(-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2|\xi)$$

$$\times\ \{(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)\nu_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1|\xi) + (\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1)\nu_2(\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2|\xi)\},$$

$$\Psi_2^{(2)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi) = h^2m^{-1}V^{-1}\sum_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q})\nu_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1|\xi)\nu_2(\mathbf{q}-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}|\xi),$$

$$\Psi_2^{(3)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi) = 2h^2m^{-1}N(\mu)V^{-2}\sum_{\mathbf{q}_1}\{\mathbf{q}_1^2 + (\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q})\}\nu_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1|\xi)\nu_3(-\mathbf{q}_1,\mathbf{q},\mathbf{q}_1-\mathbf{q}|\xi),$$

$$\Psi_2^{(4)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi) = h^2N^2m^{-1}V^{-3}\sum_{\mathbf{q}_1}\mathbf{q}_1^2\nu_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1|\xi)\nu_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi),$$

....

$$\Phi_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n|\xi) = h^2m^{-1}N(\mu)V^{-1}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{q}_i^2\nu_2(\mathbf{q}_i,-\mathbf{q}_i|\xi).$$

Рівняння для функцій $\nu_n(\mathbf{q}_1,...,\mathbf{q}_n|\xi)$ 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:

$\nu_n(...) \to 0$ при $\beta \to 0$.

Для складної системи суттєво нелінійних інтеґро–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 інтеґральними 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

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

де $\omega_0 = \{4\pi e^2 N(\mu) m^{-1} V^{-1}\}^{1/2}$. При $\mu = \mu^*$ (де μ^* — хемічний потенціал системи) ω_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 ($k_Б T \leq h\omega_0$). Це дає підставу розглядати рівняння для $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ як інтеґральне, нехтуючи похідною $\frac{\partial}{\partial\beta}\nu_2(\cdots)$:

$$-\zeta V_{\mathbf{q}} + 2N(\mu)V^{-1}\epsilon_{\mathbf{q}}\nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) + \sum_{m\geq 3}\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$$
$$-h^2(mV)^{-1}\sum_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}-\mathbf{q}_1)\nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1|\xi)\ \nu_2(\mathbf{q}-\mathbf{q_1}, \mathbf{q_1}-\mathbf{q}|\xi) = \mathbf{0}. \tag{2.6}$$

Інтеґральні складові $\Psi_2^{(m)}(\cdots)$ при $m \geq 3$ можна враховувати методом послідовних наближень. Тому розглянемо спочатку нелінійне інтеґральне рівняння при $\Psi_2^{(m)}(\cdots) = 0$. 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 $\Psi_2^{(m)}(\cdots) = 0$ маємо таке нелінійне рівняння:

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

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

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

запишемо еквівалентне рівняння в координатному зображенні:

$$\{4\pi\nabla f_2(\rho)\}^2 - \rho^{-1} \tag{2.9}$$
$$-4\pi\int f_2(\rho_1)\nabla_\rho^2 f_2(|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}_1|) d\boldsymbol{\rho}_1 = 0.$$

З аналізу рівняння (2.7) бачимо, що $y_2(x) \sim -x^{-2}$ при $x \to 0$ ($f_2(\rho) \sim -\rho^{-1}$ при $\rho \to \infty$). З рівняння (2.9)

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

тому $f_2(\rho) \simeq C + C_1\rho^{1/2} + C_2\rho^{3/2} + \cdots$ при $\rho \to 0$. 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:

$$f_2^{(0)}(\rho) = -B\rho^{-1}[1 - e^{-p\rho}][1 + b\rho^{1/2} e^{-\gamma\rho}], \tag{2.11}$$
$$y_2^{(0)}(x) = -Ax^{-2}[1 + ax^2 - bx^4(1 + ax^2)^{-1}]^{-3/4},$$
$$a^2 > b.$$

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:

$$y_2^{(0)}(x) \sim \begin{cases} -x^{-2} + const + \dots, & x << 1, \\ -const\ x^{-7/2} + \dots, & x >> 1. \end{cases} \tag{2.12}$$

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

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

При цьому ξ_0 є розв'язком рівняння

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

$$\times 2^{-n}(n!)^{-1}(2n+\frac{1}{2})^{-1} = 4/3$$

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 ($x = p$):

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

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

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

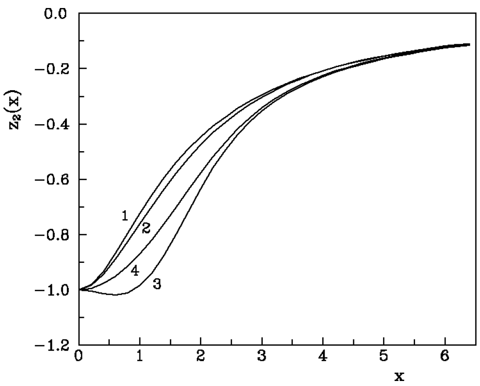

Рис. 1. Функція $Z_2(x) = x^2 y_2(x)$ при $T = 0$ K в різних наближеннях: крива 1 відповідає $y_2^{(0)}(x)$, 2 – розв'язку рівняння (2.7), 3 – розв'язку (2.20) при врахуванні $\Psi_2^{(2)}(...)$ та $\Psi_2^{(3)}(...)$, 4 – розв'язку цього ж рівняння в наближенні $\Psi_2^{(m)}(...) = 0$ при $m \ge 5$.

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

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

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 Віґнера-Бракнера [10]. При цьому $\nu_2(0|\zeta) = -(\zeta r_s)^{1/2}3^{-1/6}p$.

В області низьких температур рівняння для функцій

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

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

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

Методом пробних функцій одержуємо асимптотичні розв'язки цих рівнянь:

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

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

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

....

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

Використовуючи (2.19), знайдемо наближені вирази для інтеґральних складових $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ і, отже, замкнуте інтеґральне рівняння для функції $\nu_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi)$. Записане в безрозмірних змінних, воно не містить ніяких параметрів і визначає універсальну функцію $y_2(x)$:

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

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

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

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

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 $\beta\to\infty$, а при $\beta\to 0$ функція $f_{\mathbf{q}}(\beta)$ прямує до нуля. Наближено рівняння для $f_{\mathbf{q}}(\beta)$ має такий вигляд:

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

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

Його розв'язком є

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

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

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

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

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

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

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 $k_F=\left(3\pi^2\frac{N}{V}\right)^{1/3}$ — хвильове число Фермі.

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

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

Переходячи до безрозмірних змінних, маємо

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

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

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

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 ζ_0 як функції параметра неідеальності. З цією метою розглянемо статистичну суму $Z_\zeta^0(\mu)$ в околі точки $\mu = \mu^*$, де μ^* — хемічний потенціал моделі (корінь рівняння $N = -\frac{d}{d\mu}\Omega_\zeta^0(\mu)$). Виконуючи зсув змінної хемічного потенціалу, маємо

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

$$\tilde{\mu} \equiv \mu + \beta^{-1}\{\nu_1(\xi) - (2V)^{-1}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) + (3V^2)^{-1}\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2\neq 0}\nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|\xi) + ...\}, \tag{3.1}$$

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

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

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

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k},s} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}a_{\mathbf{k},s}. \tag{3.3}$$

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

$$\tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) = \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) - V^{-1}\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3}\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0}\ \nu_3(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi)$$

$$+V^{-2}\sum_{\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4}\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4,0}\ \nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4|\xi) +\ ...\ , \tag{3.4}$$

$$\tilde{\nu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) = \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) - V^{-1}\sum_{\mathbf{q}}\nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi)\ +\ ...\ .$$

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

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

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

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

та інтеґральне зображення δ-функції, визначаємо

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

Тут

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

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

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

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

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

$$S^0_n(\mathbf{q}_1,\dots,\mathbf{q}_n) \equiv S^0_n(\mathbf{q}_1,\dots,\mathbf{q}_n|\tilde\mu) = \langle\hat\rho_{\mathbf{q}_1}\hat\rho_{\mathbf{q}_2}\dots\hat\rho_{\mathbf{q}_n}\rangle_0^{\text{зв}} \tag{3.10}$$

і пов'язані з багаточастинковими структурними факторами базисної системи. При цьому змінні $\omega_{\mathbf{q}} = \omega^c_{\mathbf{q}} - i\omega^s_{\mathbf{q}}$ спряжені до змінних $\rho_{\mathbf{q}}$, $(d\omega) = \prod_{c(\mathbf{q})} d\omega^c_{\mathbf{q}} d\omega^s_{\mathbf{q}}$.

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

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

Множник

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

у наближенні двочастинкових взаємодій можна врахувати точно:

$$\tilde f_2 = \left\{\prod_{c(\mathbf{q})}[-V^{-1}\tilde\nu_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi)]\right\}^{-1}\times\exp\left\{\frac{\pi^2}{2}V\sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}\omega_{-\mathbf{q}}\ \tilde\nu_2^{-1}(\mathbf{q},-\mathbf{q}|\xi)\right\}. \tag{3.13}$$

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

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

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

який допускає точне інтеґрування, 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 ґрупових 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

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

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

$$B_2(\tilde{\mu}) = -(4\beta V^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} R^2_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) g^2(\mathbf{q}) \; - \; (2\beta)^{-1} \sum_{n\geq 3} (-V)^{-n} (n!) \sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n} R_n(\mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_n) R_n(-\mathbf{q}_1, ..., -\mathbf{q}_n) \prod_{j=1}^{n} g(\mathbf{q}_j),$$

....

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

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

Беручи до уваги температурну залежність функцій $\nu_n(\mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_n|\xi)$, 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 $\beta \to \infty$. З рівняння

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

визначаємо хемопотенціал моделі у випадку абсолютного нуля температури

$$\mu^*_\zeta = \epsilon_F - NV^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu^2_2(\mathbf{q}|\zeta, \infty, \epsilon_F) \tag{3.17}$$

$$= \left\{ \frac{\eta^2}{r^2_s} - \frac{\zeta d}{r_s} \right\} \; Ry,$$

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

$$E_\zeta = \Omega_0(\epsilon_F) + N\mu^*_\zeta = \left\{ \frac{3}{5} \; \frac{\eta^2}{r^2_s} - \frac{\zeta d_0}{r_s} \right\} N \; Ry, \tag{3.18}$$

де d_0 — універсальна стала, незалежна від фізичних параметрів. Різним наближенням для функції $y_2(x)$ відповідають такі значення d_0: асимптотичний розв'язок $y^{(0)}_2(x)$ дає значення 1.3044..., числовий розв'язок рівняння (2.20) при $\Psi^{(m)}_2(x) = 0$ для $m \geq 3$ дає значення $d_0(2) = 1.3872...$, у наближенні $\Psi^{(m)}_2(x) = 0$ при $m \geq 4$ одержуємо $d_0(3) = 1.9600...$, врахування $\Psi^{(m)}_2(x)$ 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 $\Psi^{(m)}_2(x)$, урахування складових $\Psi^{(m)}_2(x)$ при $m > 6$ може змінити $y_2(x)$ незначно, та й то лише в області малих значень змінної x. Отже, вплив $\Psi^{(m)}_2(x)$ при $m > 6$ на значення d_0 теж буде незначним.

Як відомо, енергія основного стану електронної рідини в області низьких густин ($r_s >> 1$) досить добре досліджена. Віґнер 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 Віґнера в працях [16, 17] було одержано такий розклад для енергії основного стану за степенями параметра $r_s^{-1/2}$:

$$E_0 = N \; Ry \; \left\{ \sum_{n\geq 0} A_{1+n} r_s^{-(1+1/2n)} + \right. \tag{3.19}$$

$$\left. +0(\exp[-\alpha r_s^{1/2}]) \right\}.$$

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_ζ при $\zeta = 1$ асимптотично точно визначає енергію ґратки Віґнера при великих r_s і обмежує знизу значення енергії електронної рідини при довільних значеннях параметра неідеальності.

Розглянемо далі питання про вибір параметра включення ζ_0 для випадку основного стану моделі. Щоб розв'язати рівняння (1.37), необхідно знати не лише

$$\langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1} = \langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P^0_{\zeta_0}} = N \; Ry \; \frac{\zeta_0 d_0}{r_s}, \tag{3.20}$$

але також $\langle \hat{V} \rangle_{P_1}$ та $\langle \hat{V} \rangle_{P^0_{\zeta_0}}$. Коректний розрахунок останньої величини можна виконати на основі парної кореляційної функції моделі зі статистичним оператором $\hat{p}^0_{\zeta_0}$, 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_ζ 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]:

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

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:

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

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

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

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 тотожності

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

знаходимо, що

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

Виберемо тепер параметр ζ_0 з умови

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

яка забезпечує співпадіння E_ζ з точним значенням енергії моделі (1.1) при $T = 0$ K. При такому виборі ζ_0 визначаємо, що

$$\Delta_1(\zeta_0) = \langle \hat{V} + \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1} = -d_0 \; \frac{d\zeta_0(r_s)}{dr_s}$$

$$= \frac{d}{dr_s} [r_s \epsilon_c(r_s)]. \qquad (3.27)$$

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

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

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:

$$\Delta_1(\zeta_0) = -1.32862 r_s^{-3/2} + \qquad (3.29)$$

$$+ 2.94 r_s^{-2} + 1.2 r_s^{-5/2} + \dots \, .$$

З розкладів (3.28), (3.29) бачимо, що $\zeta_0(r_s) < 1$ і прямує до одиниці при $r_s \to \infty$. 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 $d_0 = -A_1 = 1.79815....$

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

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

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

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

$$+0.096 r_s + \dots \, ,$$

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

Отже, $\zeta_0(r_s)$ прямує до значення $\zeta_0(0) = 3\eta(2\pi d_0)^{-1} = 0.509596...$ в границі слабо неідеальної системи ($r_s \to 0$). Відношення $\Delta_1(\zeta_0)\epsilon^{-1}(r_s) \to 0$ при $r_s \to 0$, 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 ζ_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:

$$\epsilon_c(r_s) = -2b_0 \int_a^\infty dx \; (b_1 + x^{-1}) \qquad (3.32)$$

$$\times \, [1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3]^{-1}$$

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 $r_s \le 10$.

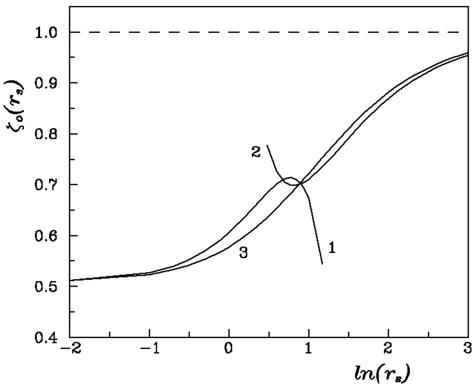

Рис. 2. Залежність параметра ζ_0 від параметра неідеальності r_s: крива 1 – наближення високих густин (3.31), 2 – наближення низьких густин (3.28), крива 3 відповідає формулі (3.26) при використанні інтерполяційної формули (3.32) для $\epsilon_c(r_s)$.

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 $\hat{P}^0_{\zeta_0}$, який відіграє роль апроксимаційного для досліджуваної фізичної системи (1.1). На прикладі моделі електронної рідини ми проілюстрували можливість такої побудови, а також можливість реґулювання границь відхилень розрахованих термодинамічних характеристик від їхніх точних значень. Для визначення параметра ζ_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 $\hat{P}^0_{\zeta_0}$ 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 $\hat{P}^0_{\zeta_0}$ будуть досліджені фазові стани моделі однорідної електронної рідини (парамагнетний, надпровідний [22], феромагнетний [18]), а також можливі структурні перетворення (виникнення хвиль зарядової густини, ґратка Віґнера [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 $\hat{\mathcal{H}}_2(t)$:

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

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

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 $Sp\{...\}$, переходячи від неермітового оператора $\hat{\mathcal{H}}_1'$ до ермітового $\hat{\mathcal{H}}_2'$

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

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

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

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

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

де

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

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

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

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

$$\sum_n \alpha^{(+)}_{nl}\alpha^{(-)}_{kn} = \delta_{l,k}, \tag{Д.5}$$

знайдемо такі m_0, n_0, що

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

Тому

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

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

Отже, похідна $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)$ є монотонною неспадною функцією параметра $t(0 \leq t \leq 1)$, що дорівнює нулеві при $t = 0$. З цієї причини

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

звідки випливає 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. Головко, *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. Vavrukh, N. Vavrukh, 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. Vavrukh[1], Ya. Kushtay[2]
[1] *Institute for Condensed Matter Physics Ukrainian Academy of Sciences, Lviv 1 Svientsitskii Str., Lviv UA–290011, Ukraine*
[2] *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.