ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 4, № 1 (2000) с. 6–15

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 4, No. 1 (2000) p. 6–15

ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

М. В. Ваврух[1], В. Н. Паславський[2], Н. Л. Тишко[1]
[1] *Львівський національний університет імені Івана Франка,*
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна
[2] *Інститут фізики конденсованих систем НАН України*
вул. Свєнціцького, 1, 79011, Україна

(Отримано 14 жовтня 1999 р.)

Динамічна поправка на локальне поле моделей фермі–систем досліджена в області температур, низьких порівняно з температурою виродження. Показано, що характер температурної залежности визначається значенням параметра неідеальности та довгохвильовою асимптотикою потенціялу двочастинкової взаємодії. Наведено результати чисельного розрахунку поправки на локальне поле моделі електронної рідини в області слабкої і проміжної неідеальности.

Ключові слова: поправка на локальне поле, параметр неідеальности, модель електронної рідини, температура.

PACS number(s): 05.30.Fk

ВСТУП

Поправка на локальне поле (ПЛП) є однією з фундаментальних характеристик систем взаємодіючих частинок. У традиційному варіанті вона пристосована до розрахунку інтеґральних характеристик. Використання нелокальних функцій, близьких до ПЛП, а саме її варіяційних похідних, дозволяє розширити концепцію локального поля і застосовувати її до розрахунків одночастинкових характеристик [1]. Найповніше ПЛП вивчена для основного стану моделі електронної рідини, що зумовлено її використанням у теорії металів [1–3]. У працях [1,4] показано, що форма ПЛП суттєво залежить від довгохвильової асимптотики потенціялу двочастинкової взаємодії, а також від значення параметра неідеальности.

Однією з нерозв'язаних задач, що становить як евристичний, так і практичний інтерес, є вивчення температурної залежности ПЛП вироджених фермі–систем. Ми дослідили цю залежність у рамках базисного підходу, використовуючи наближені інтеґральні рівняння для ПЛП [1], виведені на основі спектрального зображення багаточастинкових кореляційних функцій ідеальної (базисної) системи (розділ 3). У четвертому розділі аналітично досліджена температурна залежність довгохвильової границі динамічної ПЛП слабо неідеальних систем та її зміни, зумовлені формою потенціялу взаємодії або значенням параметра неідеальности. Результати чисельних розрахунків ПЛП моделі електронної рідини при відмінних від нуля температурах подані у п'ятому розділі.

I. РІВНЯННЯ ДЛЯ ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

У наближенні одно– та двокільцевих "драбинчастих" діяграм для поляризаційного оператора в праці [1] отримано інтеґральні рівняння для динамічної ПЛП фермі–системи з довільним локальним потенціялом відштовхування між частинками. З урахуванням двох типів діяграм ПЛП представлено у вигляді суми двох доданків ($G(x) = G_1(x) + G_2(x)$), що задовольняють таку систему рівнянь:

$$G_i(x) + \sum_{x_1} \Phi_i(x, x_1) G_2(x_1) = G_i^{RPA}(x), \quad i = 1, 2. \quad (1)$$

Тут $x = (\mathbf{q}, \nu)$, де $\mathbf{q}$ — хвильовий вектор, $\nu_n = 2\pi n T$ — парна частота Мацубари [5], T — температура системи. Ядра рівнянь (1) визначають через кумулянтні кореляційні функції ідеальної системи $\mu_n^0(x_1, \ldots, x_n)$ та фур'є–зображенням потенціялу взаємодії V_q:

$$\Phi_1(x, x_1) = -\frac{T V_{q_1} \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1)}{2 V_q [\mu_2^0(x, -x)]^2}, \quad (2)$$

$$\Phi_2(x, x_1) = \frac{T V_{q_1} V_0(x+x_1) [\tilde{\mu}_3^0(x, x_1, -x-x_1)]^2}{2\Omega V_q [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^2},$$

де Ω — об'єм системи, $V_0(x)$ — потенціял, динамічно екранований у наближенні хаотичних фаз,

$$V_0(x) = V_q \{1 + L(x)\}^{-1}, \quad L(x) = \Omega^{-1} V_q \, \mu_2^0(x, -x); \quad (3)$$

$G_i(x)^{RPA}$ — наближення хаотичних фаз для відповідних доданків:

$$G_i^{RPA}(x) = \sum_{x_1} \Phi_i(x, x_1) \{1 + L(x_1)\}^{-1}. \quad (4)$$

Фактично тільки рівняння для складової $G_2(x)$ є замкненим інтеґральним рівнянням, а рівняння для $G_1(x)$ — алґебричне. Доданок $G_1(x)$ відповідає наближенню слабо неідеальних систем. Нехтуючи $G_2(x)$ й екрануванням у $G_1^{RPA}(x)$, знаходимо ПЛП в границі слабо неідеальної системи

$$G_{id}(x) = \sum_{x_1} \Phi_1(x, x_1), \tag{5}$$

яка не залежить від константи взаємодії, але визначається типом потенціялу V_q. Для кулонівського потенціялу при $T = 0K$ $G_{id}(x)$ є універсальною функцією, незалежною від будь–яких параметрів. Рівняння для $G_2(x)$ — замкнуте. При низьких температурах воно зводиться до двовимірного лінійного інтеґрального рівняння Фредгольма II роду з симетричним додатним ядром [1], що забезпечує існування і єдиність його додатного нетривіяльного розв'язку.

II. КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ БАЗИСНОЇ СИСТЕМИ

Температурну залежність $G(x)$ визначають кореляційні функції базисної системи [6]

$$\mu_n^0(x_1,\ldots,x_n) = (-1)^{n+1} T\, n^{-1}\, \delta_{\nu_1+\nu_2+\ldots+\nu_n,0}\, \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\ldots+\mathbf{q}_n,0} \times \sum_{\mathbf{k},s;\nu^*} \sum_{i_1\neq i_2\neq\ldots\neq i_n=1}^{n} \prod_{j=1}^{n} G^0_{\mathbf{k}-\mathbf{p}_j,s}(\nu^*-\omega_j), \tag{6}$$

де

$$G^0_{\mathbf{k},s}(\nu^*) = [i\nu^* - \varepsilon_k + \mu]^{-1} \tag{7}$$

— спектральне зображення одночастинкової функції Ґріна ідеальної системи ($\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$, $\nu^* = (2n+1)\pi T$), $\mathbf{p}_j = \mathbf{q}_{i_1} + \mathbf{q}_{i_2} + \ldots + \mathbf{q}_{i_j}$, $\omega_j = \nu_{i_1} + \nu_{i_2} + \ldots + \nu_{i_j}$. Кумулянти $\mu_n^0(x_1,\ldots,x_n)$ — дійсні симетричні функції своїх арґументів, залежні також від термодинамічних параметрів — температури та густини частинок. Зазначимо, що $\mu_2^0(x,-x)$ — поляризаційний оператор наближення хаотичних фаз — у вигляді (6) введений у праці [7]. Для абсолютного нуля температури він розрахований у [8] (у змінних канонічного ансамблю). У працях [9,10] досліджені й розраховані статичні кумулянти $\mu_3^0(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2; 0,0,0)$ і $\mu_4^0(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2; 0,\ldots,0)$. Динамічні кумулянти вищого порядку ($n \geq 3$) вивчені в [6,11], а $\mu_3^0(x_1, x_2, -x_1-x_2)$, $\mu_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ розраховані для випадку $T = 0K$ і зображені в елементарних функціях. При відмінних від нуля температурах розрахунок кумулянтів значно складніший.

Щоб скласти уявлення про температурну залежність $\mu_n^0(x_1,\ldots,x_n)$, розглянемо їхню статичну довгохвильову границю, покладаючи $\mathbf{p}_j=0$, $\omega_j=0$ у формулі (6):

$$\tilde{\mu}_n^0(0,\ldots,0) = \lim_{x_1,\ldots,x_n\to 0} \tilde{\mu}_n^0(x_1,\ldots,x_n) = 2\frac{\partial^{n-1}}{\partial\mu^{n-1}} \sum_{\mathbf{k}} n_k, \tag{8}$$

де $n_k = \{1 + \exp[T^{-1}(\varepsilon_k - \mu)]\}^{-1}$ — розподіл Фермі (для частинок із фіксованою проекцією спіну) у базисній системі, μ — її хемпотенціял. Застосовуючи відомий метод Зоммерфельда (див. [12]) та враховуючи залежність хемпотенціялу від температури, знаходимо, що

$$\mu_n^0(0,...,0) = 3N(2\varepsilon_F)^{1-n} C_n \left\{ 1 + \frac{(\pi T^*)^2}{6}(n-1)\left(n-\frac{5}{2}\right) \right. \tag{9}$$

$$\left. + \frac{(\pi T^*)^4}{288}\left(n-\frac{5}{2}\right)\left[n + \frac{21}{10} + (2n-1)(2n-3)\left(1+\frac{7}{5}n\right) + \frac{7}{10}\right] + \ldots \right\},$$

де $C_2 = C_3 = 1$, $C_n = (-1)^{n-1}(2n-7)!!$ при $n \geq 4$; $T^* \equiv \frac{k_Б T}{\varepsilon_F} = \frac{T}{T_F}$, $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ — енерґія Фермі, N — число частинок у системі.

Підсумовуючи за змінною ν^* у формулі (6), переходячи від суми за вектором $\mathbf{k}$ до інтеґрала та інтеґруючи після цього за кутовими змінними вектора $\mathbf{k}$, зобразимо кумулянти у вигляді однократних інтеґралів Фермі:

$$\mu_2^0(x,-x) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} I_2(q;u),$$

$$\mu_3^0(x_1,x_2,x_3) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2}\,\delta_{q_1+q_2+q_3,0}\,\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}\,I_3(q_1,q_2;u_1,u_2;t),$$

$$I_2(q;u) = \int\limits_0^\infty dk\,k\,n_k\,\Gamma_2(k|q,u), \tag{10}$$

$$I_3(q_1,q_2;u_1,u_2;t) = \int\limits_0^\infty d_k\,k\,n_k\left\{\Gamma_3(k|q_1,q_2;u_1,u_2;t_{12}) + \Gamma_3(k|q_2,q_3;u_2,u_3;t_{23}) + \Gamma_3(k|q_3,q_1;u_3,u_1;t_{31})\right\}.$$

Тут використано безрозмірні змінні $k \equiv |\mathbf{k}|k_F^{-1}$, $q_i \equiv |\mathbf{q}_i|k_F^{-1}$, $u_1 = \nu_i(2\varepsilon_F q_i)^{-1}$, $t_{ij} \equiv (\mathbf{q}_i\mathbf{q}_j)q_i^{-1}q_j^{-1}$ — косинуси кутів між відповідними векторами. У цих змінних $n_k{=}\{1{+}\exp[(k^2{-}\mu^*)/T^*]\}^{-1}$, де $\mu^*{=}\mu\varepsilon_F^{-1}$,

$$\begin{aligned}
&\Gamma_2(k|q,u) = \frac{1}{2q}\ln\frac{u^2+(k+q/2)^2}{u^2+(k-q/2)^2},\\
&\Gamma_3(k|q_1,q_2;u_1,u_2;t_{12}) = (q_1q_2)^{-1}\mathrm{Re}\left\{\Delta_{(k)}^{-1}\ln\left[\frac{\delta_{(k)}{+}\Delta_{(k)}k}{\delta_{(k)}{-}\Delta_{(k)}k}\right]\right\},\\
&\delta_{(k)} = k^2t_{12}{-}\xi_1\xi_2, \quad \xi_j{=}iu_j{-}\frac{1}{2}\,q_j,\ j{=}1,2;\\
&\Delta_{(k)} = \{k^2(t_{12}^2{-}1){+}\xi_1^2{+}\xi_2^2{-}2t_{12}\xi_1\xi_2\}^{1/2}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Формули (10)–(11) зручні для чисельного розрахунку кумулянтів при довільних температурах. Наближений аналітичний розрахунок їх можна виконати методом Зоммерфельда. Однак у статичному випадку або ж при дуже малих частотах його застосування має деякі незручності у зв'язку з тим, що в околі точок $|\mathbf{q}_i| = 2k_F$ функції $\mu_n^0(...)$ мають особливості. Хоча і в цих окремих випадках метод Зоммерфельда дозволяє аналітично дослідити функції $I_n(q_1,...;u_1,...)$.

Як приклад розглянемо двочастинкову кореляційну функцію, яка разом з ПЛП визначає всі характеристики системи. Метод Зоммерфельда приводить до такого розкладу:

$$\begin{aligned}
I_2(q;u) &= I_2^{(0)}(q;u) - \frac{1}{12}\,(\pi T^*)^2 I_2^{(2)}(q;u) - \frac{11}{360}(\pi T^*)^4 I_2^{(4)}(q;u) + \ldots,\\
I_2^{(0)}(q;u) &= \frac{1}{2}\left\{1{+}\frac{1+u^2{-}q^2}{4}\Gamma_2(1|q;u) - u\sum_{\sigma=\pm1}\arctan\left[\left(1{+}\sigma\frac{q}{2}\right)u^{-1}\right]\right\},\\
I_2^{(2)}(q;u) &= \frac{1}{2}\left\{\Gamma_2(1|q;u) - \frac{1}{q}\sum_{\sigma=\pm1}\sigma\,\left(1+\sigma\frac{q}{2}\right)\vartheta_\sigma(q;u)\right\},\\
I_2^{(4)}(q;u) &= \frac{9}{44}\Gamma_2(1|q;u){-}\frac{31}{176}\sum_{\sigma=\pm1}\vartheta_\sigma(q;u)\left[\frac{1}{2}{+}\left(1{+}\sigma\frac{q}{2}\right)\vartheta_\sigma(q;u)\right]\\
&\quad - \frac{5}{44q}\sum_{\sigma=\pm1}\sigma\,\vartheta_\sigma(q;u)\left[\frac{1}{8}{+}\left(1{+}\sigma\frac{q}{2}\right)\vartheta_\sigma(q;u) + \frac{14}{5}\left(1{+}\sigma\frac{q}{2}\right)^3\vartheta_\sigma^2(q;u)\right],\\
\vartheta_\sigma(q;u) &= \left[u^2 + \left(1+\sigma\frac{q}{2}\right)^2\right]^{-1}.
\end{aligned} \tag{12}$$

Порівнюючи формули (12) і (9) (при $n = 2$), бачимо, що функції $I_2^{(m)}(q;u)$ $(m = 0,2,4,...)$ у статичному випадку наближаються до одиниці в границі $q \to 0$. При цьому $I_2^{(0)}(q;u)$ є додатно визначеною функцією з такою асимптотикою:

$$I_2^{(0)}(q;u) \to \begin{cases} 1-\frac{q^2}{12}+\dots & \text{при} \quad q \ll 1, \quad \nu=0; \\ \frac{1}{3}\left[\frac{\tilde{\nu}^2}{q^2}+\frac{q^2}{4}\right]^{-1}+\dots & \text{при} \quad q \ll 1, \quad \tilde{\nu} \gg q; \\ & \text{або} \quad q \gg 1, \quad \tilde{\nu}=0, \quad \tilde{\nu} \neq 0, \end{cases} \tag{13}$$

де $\tilde{\nu} \equiv \nu(2\varepsilon_F)^{-1}$. Функція $I_2^{(2)}(q;u)$ — знакозмінна, додатна при невеликих значеннях хвильових чисел ($q \leq 2$) і від'ємна в області $q > 2$:

$$I_2^{(2)}(q;u) \to \begin{cases} 1+\frac{1}{6}q^2+\dots & \text{при } q \ll 1, \quad \nu=0; \\ \frac{[(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2-\frac{1}{12}q^2]}{[(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2+\frac{1}{4}q^2]^3}+\dots & \text{при } q \ll 1, \quad \tilde{\nu} \gg q; \\ & \text{або } q \gg 1, \quad \tilde{\nu}=0, \quad \tilde{\nu} \neq 0. \end{cases} \tag{14}$$

Асимптотика $I_2^{(4)}(q;u)$ нагадує асимптотику $I_2^{(0)}(q;u)$:

$$I_2^{(4)}(q;u) \to \begin{cases} 1+\frac{379}{704}q^2+\dots & \text{при } q \ll 1, \quad \nu=0; \\ \frac{5}{176}\left[(\frac{\tilde{\nu}}{q})^2+\frac{1}{4}q^2\right]^{-1}+\dots & \text{при } q \ll 1, \quad \tilde{\nu} \gg q; \\ & \text{або } q \gg 1, \quad \tilde{\nu}=0, \quad \tilde{\nu} \neq 0. \end{cases} \tag{15}$$

На рис. 1 подано $I_2^{(m)}(q;u)$ як функції хвильового числа при фіксованому значенні частоти $\tilde{\nu}$. Як уже зазначалось вище, розклади (12) незастосовні в околі точки $q = 2$ для статичного випадку або ж при малих частотах. Результати чисельного розрахунку функції $I_2(q;u)$ за формулами (9)–(10) наведені на рис. 2а (статичний випадок), 2б (динамічний). Вплив температури зводиться, в основному, до згладжування екстремумів й особливостей функцій $\mu_n^0(x_1,...,x_n)$. Це добре помітно в статичному випадку і при малих частотах. Як відомо, при абсолютному нулі температури статичні кумулянти характеризуються особливостями в околі точок $|\mathbf{q}_i| = 2k_F$, зумовленими розривним характером функції розподілу електронів за імпульсами: $\mu_2^0(x,-x)$ має "слабку" логарифмічну особливість, $\mu_3^0(x_1,x_2,x_3)$ — логарифмічну, $\mu_n^0(x_1,...,x_n)$ при $n \geq 4$ — степеневі особливості. При відмінних від нуля температурах ці особливості згладжуються і розриви відсутні. Як приклад на рис. 3а, 3б наведено сім'ю кривих функції $\mu_3^0(x,-x,0) = \frac{\partial}{\partial\mu}\mu_2^0(x,-x) = 3N(2\varepsilon_F)^{-2}I_3(q;u)$. У статичному випадку при $T = 0$ К ця функція має логарифмічний розрив, з якого при скінченних, але достатньо низьких температурах формується максимум, що зникає при $T^* \sim 1$. Зникнення розриву можна показати аналітично, розрахувавши функцію

$$I_3(q;u) = \frac{2}{T^*}\int_0^\infty dkk\Gamma_2(k|q,u)\frac{\exp[(k^2-\mu^*)/T^*]}{(1+\exp[(k^2-\mu^*)/T^*])^2} \tag{16}$$

у статичному випадку в точці $q_0 = 2(\mu^*)^{1/2}$ методом Зоммерфельда: при $T^* \ll 1$

$$I_3(q,0) = \frac{1}{2(\mu^*)^{1/2}}\left\{\ln\left(\frac{\mu^*}{T^*}\right)+C + \ln\left(\frac{8}{\pi}\right)-\frac{\pi^2}{32}\left(\frac{T^*}{\mu^*}\right)^2+\dots\right\}, \tag{17}$$

де $C = 0,577216$ — стала Ейлера [13].

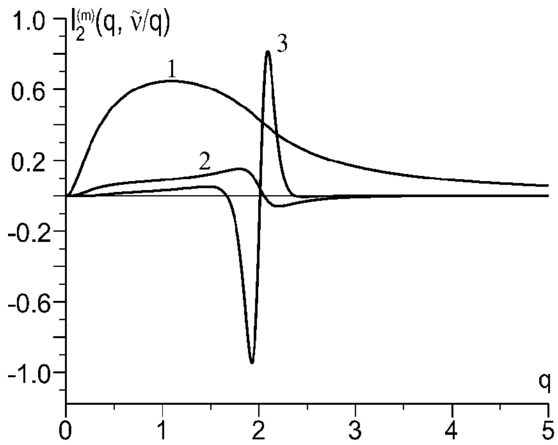


Рис. 1. Залежність функцій $I_2^{(m)}(q,\tilde{\nu}/q)$ від хвильового вектора ($I_2^{(0)}(q,\tilde{\nu}/q)$ — крива 1, $\frac{1}{12}I_2^{(2)}(q,\tilde{\nu}/q)$ — 2, $\frac{11}{360}I_2^{(4)}(q,\tilde{\nu}/q)$ — 3) при заданому значенні безрозмірної частоти ($\tilde{\nu} = 0.2$).

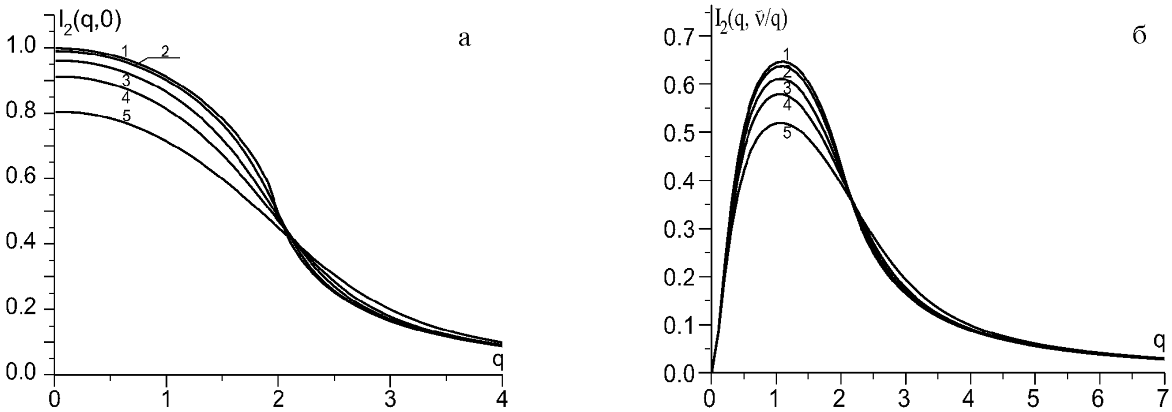


Рис. 2. Температурна залежність функції $I_2(q, \tilde{\nu}/q)$ у статичному (2а) та динамічному (2б) випадках ($T^* = 0$ – крива 1, 0.1 — 2, 0.2 — 3, 0.3 — 4, 0.5 — 5). Чисельний розрахунок за формулами (9)-(10).

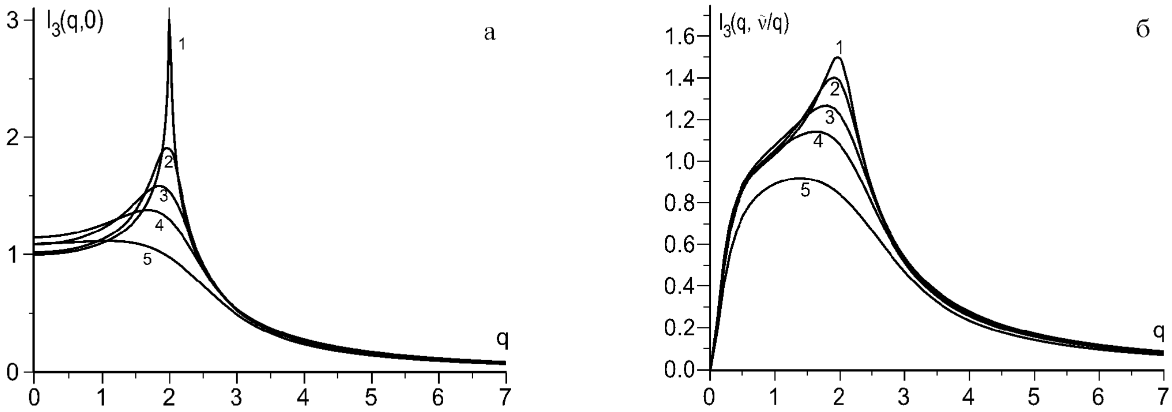


Рис. 3. Температурна залежність функції $I_3(q, \tilde{\nu}/q)$ у статичному (3а) і динамічному (3б) випадках ($T^* = 0$ — крива 1, 0.1 — 2, 0.2 — 3, 0.3 — 4, 0.5 — 5). Чисельний розрахунок за формулою (15).

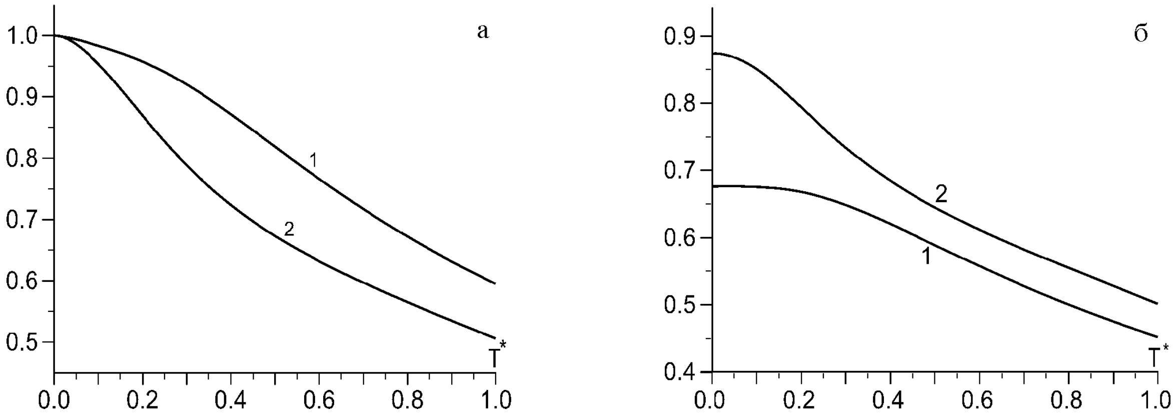


Рис. 4. а. Залежність довгохвильової границі $G_{id}(x)$ для моделі електронної рідини від температури ($f_0(T^*)$ – крива 1, $\varphi_0(T^*)$ – крива 2). б. Залежність довгохвильової границі $G_1(x)$ для моделі електронної рідини від температури ($f_{\xi_1}(T^*)$ – крива 1, $\varphi_{\xi_2}(T^*)$ – крива 2). Чисельний розрахунок за формулами (21), (22).

III. ТЕМПЕРАТУРНА ЗАЛЕЖНІСТЬ АСИМПТОТИКИ ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ СЛАБО НЕІДЕАЛЬНИХ СИСТЕМ

Температурну залежність асимптотики ПЛП для слабо неідеальних систем вдається розрахувати аналітично. Як і в праці [1], розглянемо модель фермі–системи з потенціялом відштовхування Юкави–Дебая

$$V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2 + (\xi/a_0)^2}, \tag{18}$$

де e — заряд електрона, $\xi^{-1}a_0$ — радіус дії потенціялу (a_0 — радіус Бора). Це дозволить нам дослідити залежність ПЛП від радіуса потенціялу. Крім того, вивчивши асимптотику $G_{id}(x)$, ми користуємось отриманими результатами для визначення температурної залежности $G_1(x)$.

У цьому наближенні використаємо вираз (6) для функції $\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1)$. Виконуючи підсумовування за частотами Мацубари, отримуємо

$$G_{id}(x) = 2\hbar^2[mV_q]^{-1}[\mu_2^0(x,-x)]^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} V_{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)}(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2,\mathbf{q}) \tag{19}$$

$$\times\,(n_{\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}})(n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}}) \times\ \mathrm{Re}\,\{(i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}})^{-2}(i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}})^{-1}\}.$$

Асимптотика цієї функції для потенціялу (18) при $T = 0K$ розрахована в [1]. Розглянемо тут її асимптотику при $T \neq 0K$. Короткохвильова асимптотика $G_{id}(x)$ не залежить від частоти і температури та визначається формою потенціялу при $q \gg 1$

$$\begin{aligned} G_{id}(x) &\to \frac{1}{2}\{1 - D(\xi_1) + \ldots\}, \\ D(\xi_1) &= \frac{1}{3} - \frac{3}{4}z + \frac{1}{8}z^2 + z^{3/2}\arctan(2z^{-1/2}) - \frac{3}{8}z^2\Big(1 + \frac{z}{12}\Big)\ln[1 + 4/z], \end{aligned} \tag{20}$$

де $z = \xi_1^2$, $\xi_1 \equiv \xi r_s/\eta$, $\eta = (\frac{9\pi}{4})^{1/3}$, r_s — параметр Бракнера. У границі $\xi = 0$, що відповідає звичайній моделі електронної рідини, $D(\xi_1) = \frac{1}{3}$, а при $\xi \to \infty$ $D(\xi_1)$ перетворюється на нуль.

Щоб знайти довгохвильову асимптотику, використаємо розклад

$$n_{k+q} = n_k + (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)\,\frac{dn_k}{d\varepsilon_k} + \ldots \tag{21}$$

й асимптотику функції $\mu_2^0(x,-x)$. Переходячи до безрозмірних змінних та інтеґруючи у сферичній системі координат, у статичній границі знаходимо:

$$G_{id}(x) \underset{q\ll 1;\nu=0}{\longrightarrow} \frac{1}{4}[q^2 + \xi_1^2]f_{\xi_1}(T^*), \tag{22}$$

$$f_{\xi_1}(T^*) = \left\{\int_0^\infty dk\,k^2\,\frac{dn_k}{d(k^2)}\right\}^{-2} \int_0^\infty\!\!\int_0^\infty dk_1\,dk_2\,k_1^2\,k_2^2\,\frac{dn_{k_1}}{d(k_1^2)}\cdot\frac{dn_{k_2}}{d(k_2^2)} \times \int_{-1}^{+1} dt\,(1 - k_2t/k_1)\,[k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2t + \xi_1^2]^{-1}.$$

У границі великих частот

$$G_{id}(x) \underset{q\ll 1;\tilde{\nu}\gg q}{\longrightarrow} \frac{3}{20}[q^2 + \xi_1^2]\varphi_{\xi_1}(T^*), \tag{23}$$

$$\varphi_{\xi_1}(T^*) = 4\int_0^\infty\!\!\int_0^\infty dk_1\,dk_2\,(k_1k_2)^4\,\frac{dn_{k_1}}{d(k_1^2)}\cdot\frac{dn_{k_2}}{d(k_2^2)} \times \int_{-1}^{+1} dt\,[1 + 2t^2 - 3tk_1/k_2]\,[k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2t + \xi_1^2]^{-1}.$$

Оскільки $dn_k/d(k^2) \to -\delta(k^2-\mu^*)$ при $T^* \to 0$, то $f_{\xi_1}(T^*)$, $\varphi_{\xi_1}(T^*) \to 1$ у границі абсолютного нуля температури для моделі електронного газу ($\xi_1 = 0$). У випадку моделі з потенціялом (18)

$$f_{\xi_1}(T^*) = 1+\frac{1}{4}z\ln\left[\frac{z+\frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z+4}\right] + \frac{(\pi T^*)}{12}(1+\frac{7}{4}z)\ln\left[\frac{z+\frac{(\pi T^*)^2}{6}}{z+4}\right] + \frac{(\pi T^*)^2}{24(4+z)^2}(4+3z)+\ldots,$$

$$\varphi_{\xi_1}(T^*) = 1-z-\frac{z(1+z)}{4}\ln\left[\frac{z+(\pi T^*)^2/6}{z+4}\right] + \frac{(\pi T^*)^2}{12}(1+\frac{z}{4})\ln\left[\frac{z+(\pi T^*)^2/6}{z+4}\right] \tag{24}$$

$$+\frac{(\pi T^*)^2}{6}z\left\{1+\frac{1-3z}{4(4+z)}+2\frac{1+z}{(4+z)^2}\right\}+\ldots.$$

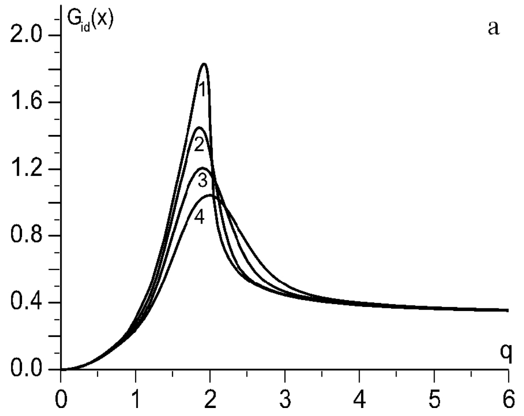
У границі $T^* \to 0$ ці вирази визначають довгохвильову асимптотику $G_{id}(x)$ узагальненої моделі (18) [1]. У моделі електронного газу (у границі $\xi_1 \to 0$) виникає особливість типу $(T^*)^2 \ln T^*$. Наявність такої особливости в ПЛП веде до аналогічної особливости вільної енерґії, а отже, й інших характеристик. Оскільки останні можуть бути зображені у вигляді розкладів за степенями $(T^*)^2$, то зазначена особливість нефізична. Це свідчить про те, що $G_{id}(x)$ є недостатньо коректним наближенням для кулонівських систем. У випадку слабо неідеального електронного газу слід використовувати $G_1(x)$. Ураховуючи екранований потенціял у наближенні Томаса–Фермі, тобто замінюючи $L(x)$ на $3NV_q(2V\varepsilon_F)^{-1}$, знаходимо границю $G_1(x)$ при $q \ll 1$:

$$G_1(x) \underset{q\ll 1}{\longrightarrow} \begin{cases} \frac{1}{4}q^2 f_{\xi_1}(T^*) & \text{при } \nu = 0; \\ \frac{3}{20}q^2 \varphi_{\xi_1}(T^*) & \text{при } \tilde{\nu} \gg 1, \end{cases} \tag{25}$$

де $\xi_1^2 = 4r_s(\pi\eta)^{-1}$. В області $T^* \ll \xi_1$ функції (24) є розкладами за степенями $(T^*)^2$. Розклади (24) отримані методом Зоммерфельда і відповідають області температур $T^* \leq 0,25$. Результати чисельного розрахунку температурної залежности довгохвильової границі функцій $G_{id}(x)$ і $G_1(x)$ для моделі електронного газу показані на рис. 4а и 4б ($r_s = 1$). При обчисленні $f_\xi(x)$, $\varphi_\xi(x)$ для функції $G_1(x)$ використано наближення Томаса–Фермі. Результати аналізу свідчать про наявність суттєвої температурної залежности поправки на локальне поле.

IV. ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗРАХУНОК ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

У цьому розділі наведено результати чисельного розрахунку функцій $G_{id}(x)$ і $G_1(x)$ при відмінних від нуля температурах. З метою спрощення розрахунків використано наближення Томаса–Фермі, що дає змогу обмежитися формулою (19), замінюючи в ній $V(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)$ фур'є–зображенням екранованого потенціялу $4\pi e^2\{(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)^2+\xi^2/a_0^2\}^{-1}$ при $\xi_1^2 = 4\eta(\pi r_s)^{-1}$. Для векторів $\mathbf{k}_1$ і $\mathbf{k}_2$ використано циліндричну систему координат, вісь OZ якої паралельна до вектора $\mathbf{q}$. Після інтеґрування за кутовими змінними $G_1(x)$ зводиться до такого інтеґрала:



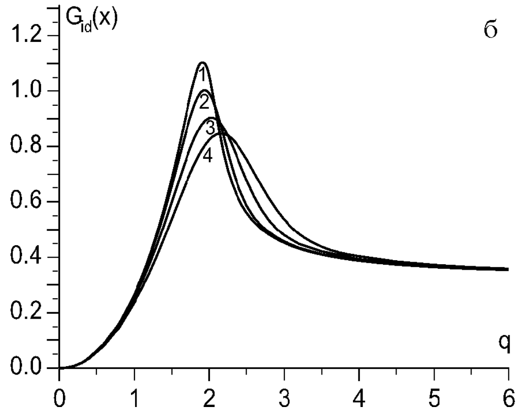


Рис. 5. Залежність $G_{id}(x)$ у статичному (5а) і динамічному (5б; $\tilde{\nu} = 0.2$) випадках від температури (крива 1 відповідає значенню $T^* = 0$; крива 2 — 0.1; 3 — 0.2; 4 — 0.3).

$$G_1(x) = \frac{1}{8} I_2^{-2}(q;u) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz_1\, dz_2 \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm1} \sigma_1\sigma_2 \times\ F_u\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}, z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big) T_\xi\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}, z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big). \tag{26}$$

Тут використано позначення:

$$\begin{aligned} F_u(z_1,z_2) &= (z_1-z_2)\{z_1^2 z_2 - u^2(2z_1+z_2)\}[z_1^2+u^2]^{-2}[z_2^2+u^2]^{-1}, \\ T_\xi(z_1,z_2) &= \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty d\rho_1\, d\rho_2\, \rho_1\rho_2\, n(z_1,\rho_1)\, n(z_2,\rho_2) \times \Big\{[\rho_1^2+\rho_2^2+\xi_1^2+(z_1-z_2)^2]^2 - 4\rho_1^2\rho_2^2\Big\}^{-1/2}, \\ n(z,\rho) &= \{1+\exp[(z^2+\rho^2-\mu^*(T^*))/T^*]\}^{-1}. \end{aligned} \tag{27}$$

При абсолютному нулі температури $T_\xi(z_1,z_2)$ зображається в елементарних функціях [1]. За низьких температур його можна звести до однократного інтеґрала, використовуючи тотожність

$$n(z,\rho) = n^0(z,\rho) + \{n(z,\rho) - n^0(z,\rho)\}, \tag{28}$$

у якій

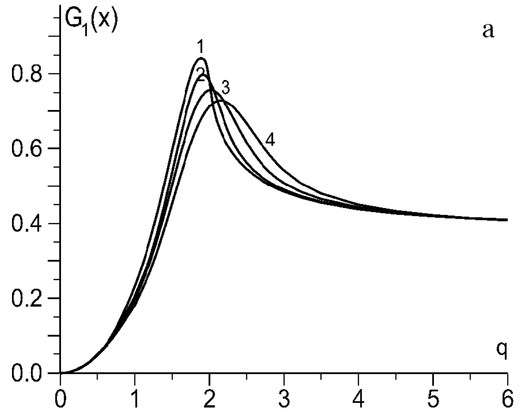
$$n^0(z,\rho) = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad z^2+\rho^2 \le \mu^*(T^*), \\ 0 & \text{при} \quad z^2+\rho^2 > \mu^*(T^*), \end{cases} \tag{29}$$

і нехтуючи доданком, квадратичним стосовно $n(z,\rho) - n^0(z,\rho)$. Таке наближення забезпечує врахування членів порядку $(T^*)^2$ без використання розкладів Зоммерфельда, а функція $G_1(x)$ зводиться до двократних і трикратних інтеґралів:

$$\begin{aligned} G_1(x) = \frac{1}{8} I_{2,0}^{-2}(q;u) \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm1} \sigma_1\,\sigma_2 \Bigg\{ &\frac{1}{4} \int\limits_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_1 \int\limits_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_2\ \times F_u\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}, z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big) A_{\sigma_1,\sigma_2}(s^2;\mu^*-z_1^2;\mu^*-z_2^2) \\ &+ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz_2 \int\limits_0^\infty \rho_2\, d\rho_2 [n(z_2,\rho_2) - n^0(z_2,\rho_2)] \int\limits_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_1\ \times F_u\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}, z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big)\ B_{\sigma_1,\sigma_2}(s^2;\mu^*-z_1^2;\rho_2^2) \\ &+ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int\limits_0^\infty \rho_1\, d\rho_1 [n(z_1,\rho_1) - n^0(z_1,\rho_1)] \int\limits_{-\sqrt{\mu^*}}^{\sqrt{\mu^*}} dz_2\ \times F_u\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}, z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big) \times\ B_{\sigma_1,\sigma_2}(s^2;\mu^*-z_2^2;\rho_1^2) \Bigg\}. \end{aligned} \tag{30}$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned} A_{\sigma_1,\sigma_2}(s^2;a;b) &= \frac{1}{2}\{W(s^2;a;b) - s^2 - a - b\} + a\,\ln\{(2s^2)^{-1}[W(s^2;a;b) + s^2 + b - a]\} \\ &\quad + b\,\ln\{(2s^2)^{-1}[W(s^2;a;b) + s^2 + a - b]\}, \\ B_{\sigma_1,\sigma_2} &= \frac{1}{2}\,\ln\{(2s^2)^{-1}[W(s^2;a;b) + s^2 + a - b]\}, \\ W(s^2;a;b) &= [s^4 + 2s^2(a+b) + (a-b)^2]^{1/2}, \\ s^2 \equiv s_{\sigma_1,\sigma_2}^2 &= \xi_1^2 + \Big[\Big(z_1+\sigma_1\frac{q}{2}\Big) - \Big(z_2+\sigma_2\frac{q}{2}\Big)\Big]^2. \end{aligned} \tag{31}$$



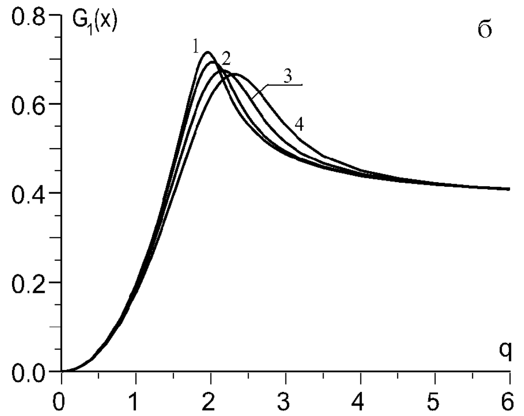


Рис. 6. Залежність $G_1(x)$ від температури у статичному (6а) і динамічному (6б; $\tilde{\nu} = 0.2$) випадках ($T^* = 0; 0.1; 0.2; 0.3$).

Переходу до границі абсолютного нуля температури відповідає заміна $n(z,\rho) \to n^0(z,\rho)$, $\mu^* \to 1$.

Чисельний розрахунок ПЛП за формулами (26) і (30) дає близькі результати. Вище було показано, що $G_{id}(x)$ не є досить коректним наближенням. Однак її температурна залежність викликає певний інтерес, оскільки для моделі електронної рідини $G_{id}(x)$ є універсальною функцією і відображає у загальних рисах властивості ПЛП слабо неідеальних систем. Як бачимо з рис. 5а і 5б, вплив температури приводить до суттєвої зміни $G_{id}(x)$ як у статичному, так і динамічному випадках, виявляючись у зміні висоти і форми екстремуму в околі точки $q = 2k_F$.

Температурну залежність ПЛП моделі слабо неідеальної електронної рідини ілюструють рис. 6а, 6б, на яких зображена $G_1(x)$ при $r_s = 1$. Як і для $G_{id}(x)$, температурну залежність спостерігаємо в широкій області зміни хвильового вектора, а зростання температури від абсолютного нуля до $T^* = 0,1$ приводить до зміни $G_1(x)$ в середньому на величину порядку 6 %.

V. ВИСНОВКИ

Широке застосування ПЛП в теорії електронної рідини та в теорії металів визначає актуальність задачі її мікроскопічного дослідження. Властивості ПЛП моделі електронної рідини при абсолютному нулі температури достатньо вивчені. У загальних рисах відомі властивості ПЛП і для інших моделей фермі–систем як з кулонівською, так і з короткосяжною взаємодією при $T = 0K$. Дослідженню температурної залежности ПЛП не надавалось належної уваги, хоч ця задача є важливою як з евристичної, так і практичної точок зору. Ми показали, що ПЛП суттєво залежить від температури, а її розрахунок при скінчених температурах не складає принципових труднощів: він лише ненабагато складніший від аналогічного розрахунку при $T = 0K$. У цій праці ми дослідили ПЛП для слабо неідеальних систем. Результати чисельного розв'язання рівняння для доданка $G_2(x)$ при відмінних від нуля температурах і точнішого розрахунку $G_1(x)$ для моделі електронної рідини в області проміжної та сильної неідеальности будуть подані в окремій праці.

[1] М. В. Ваврух, Физ. низк. темп. **22**, 1005 (1996).
[2] П. Цише, Г. Леманн, *Достижения электронной теории металлов* (Мир, Москва, 1984).
[3] S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982).
[4] M. Vavrukh, V. Paslavs'kiy, Phys. Status Solidi B **208**, 91 (1998).
[5] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Физматгиз, Москва, 1962).
[6] М. В. Ваврух, Т. Е. Крохмальский, Укр. физ. журн. **32**, 621 (1987).
[7] Е. Монтролл, Дж. Уорд, В *Вопросы квантовой теории необратимых процессов* (ИЛ, Москва, 1961).
[8] M. Gell–Mann, K. A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364 (1957).
[9] Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган, Журн. эксп. теор. физ. **63**, 1937 (1972).
[10] Е. Г. Бровман, А. Холас, Журн. эксп. теор. физ. **66**, 1877 (1974).
[11] М. В. Ваврух, Укр. физ. журн. **36** 150 (1991).
[12] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1964).
[13] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE LOCAL–FIELD CORRECTION FUNCTION

M. V. Vavrukh[1], V. N. Paslavs'kiy[2], N. L. Tyshko[1]
[1] *Ivan Franko National University of Lviv,*
8 Kyrylo i Mefodii Str., Lviv, UA–79005, Ukraine
[2] *Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,*
1 Svientsitskii Str., Lviv, UA–79011, Ukraine

Dynamic local–field correction function for models of Fermi–systems model has been investigated at low temperature in the region of the strong degeneration. It has been shown that temperature dependence of the local–field correction function expressed by a long–wave asymptote of the interaction potential and coupling parameter. This function for the electron liquid model has been calculated in the weak and medium nonideality region.