

## УРАХУВАННЯ КОРЕЛЯЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ МОДЕЛІ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ МЕТОДОМ ЦИКЛІЧНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ

М. В. Ваврух, Н. Л. Тишко, С. П. Коваль, Я. В. Куштай  
*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики  
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна  
(Отримано 18 лютого 2003 р.)*

Розрахунок двочастинкової кореляційної функції моделі електронної рідини виконано за допомогою циклічного перетворення, що приводить до перенормованої теорії збурень, у діаграмах якої замість потенціалу Кулона фігурує слабкий ефективний далекосяжний потенціал, близький до потенціалу квантового пакета  $e^2 r^{-1} \{1 - (1 + r^*) \exp(-2r^*)\}$ , де  $r^* \equiv rk_F$ , а  $k_F$  — хвильове число Фермі. У цій схемі розраховано динамічну поправку на локальне поле, а на її основі — кореляційну енергію та бінарну функцію розподілу моделі в широкій ділянці параметра неідеальності. Розвинутий метод обґрунтовує модельний опис короткосяжних кореляційних ефектів, який автори запропонували раніше, є простим і ефективним способом розрахунку електронних характеристик металічних систем.

**Ключові слова:** модель електронної рідини, статистична сума, поправка на локальне поле, енергія основного стану, бінарна функція розподілу.

PACS number(s): 05.30.Fk

### I. ВСТУП

Концепція локального поля є загальноприйнятим способом урахування кореляційних ефектів у сучасній теорії металічних систем, а поправка на локальне поле — одна з універсальних характеристик систем взаємодіючих частинок, що визначає функцію діелектричної проникності та кореляційні функції. Вона найповніше вивчена для моделі електронної рідини, що зумовлено важливістю цієї моделі в мікроскопічній теорії металів [1]. Загальні властивості поправки на локальне поле добре відомі, однак її мікроскопічна теорія ще далека від свого завершення. У статті [2] у межах базисного підходу одержано інтегральні рівняння для поправки на локальне поле в наближенні три- та чотиричастинкових кореляційних функцій базисної системи. У цьому наближенні досліджено поправку на локальне поле вироджених фермі-систем — моделі електронної рідини в широкій ділянці параметра неідеальності [2], узагальненої моделі з короткосяжним потенціалом взаємодії між частинками типу потенціалу Юкави [3], однорідної моделі електрон-діркової рідини [4]. Температурній залежності поправки на локальне поле фермі-систем присвячена праця [5].

Базисний підхід вимагає точних термодинамічних і кореляційних функцій базисної системи. Ці функції відомі або можуть бути легко розраховані лише для ідеальних систем. Через це в ролі базисних систем у працях [2–5] використано ідеальні системи ферміонів. Звідси випливає, що базисний підхід є обґрунтованим методом опису слабо неідеальних систем, а в ділянці сильної неідеальності його результати є менш достовірними, у зв'язку з чим актуальним стає використання альтернативних методів.

Одним із них є модельний підхід, запропонований у статті [6] для опису короткосяжних кореляційних ефектів у моделі електронної рідини. Ідея цього

підходу нав'язана методом псевдопотенціалу в теорії електрон-йонних взаємодій у металах. Використання ефективного потенціалу взаємодії між електронами типу потенціалу квантового пакета поліпшує збіжність рядів теорії збурень і допускає використання наближень, що звичайно застосовуються у випадку слабкої неідеальності, до опису сильно неідеальних систем. Ідею використання таких ефективних потенціалів в праці [6] обґрунтовано за допомогою співвідношення невизначеностей Гайзенберга на напівфеноменологічному рівні.

Наша праця дає мікроскопічне обґрунтування модельного підходу. Ми одержали ефективний слабкий далекосяжний потенціал міжелектронної взаємодії у явному вигляді. Розрахунок характеристик основного стану моделі електронної рідини свідчить про простоту й ефективність розвинутого методу.

Метою нашої роботи є дослідити поправку на локальне поле моделі електронної рідини за допомогою методу циклічного перетворення статистичної суми [7] і базисного підходу, діаграми якого побудовані на слабкому ефективному потенціалі взаємодії між частинками, що має властивості потенціалу квантового пакета. Розгляньмо модель однорідної електронної рідини з гамільтонієм  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , де  $\hat{H}_0$  — оператор кінетичної енергії, а  $\hat{V}$  — оператор енергії взаємодії за законом Кулона. У зображенні вторинного квантування на базисі плоских хвиль

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

де  $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$ ,  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ ,  $V$  — об'єм системи,  $s$  — спінова змінна. Побудуємо зображення Фур'є дво-частинкової кореляційної функції

$$\begin{aligned} \mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \langle \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \rangle_H \\ &= Z^{-1} \text{Sp} \{ \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \exp[-\beta(\hat{H}_\mu + \hat{V})] \} \\ &= -V \beta^{-1} \frac{\delta}{\delta V_q} \ln Z, \end{aligned} \quad (2)$$

де

$$Z = \text{Sp} \{ \exp[-\beta(\hat{H}_\mu + \hat{V})] \} \quad (3)$$

— статистична сума моделі у великому канонічному ансамблі,  $\hat{H}_\mu = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}$ ,  $\mu$  — змінна хемічного потенціалу,  $\hat{N}$  — оператор числа частинок,  $\beta$  — обернена температура. Використовуючи традиційне зображення взаємодії у статистичному операторі [8], зведемо  $\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  до такого вигляду:

$$\begin{aligned} \mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \beta^{-1} \{ \langle T \hat{S}_\beta \rangle_0 \}^{-1} \\ &\times \langle T \left\{ \int_0^\beta d\beta' \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \beta') \hat{S}_\beta \right\} \rangle_0. \end{aligned} \quad (4)$$

Тут  $T$  — символ хронологічного впорядкування,  $\langle \dots \rangle_0$  — символ статистичного засереднення за станами ідеальної системи.

$$\hat{S}_\beta = \exp \left\{ -(2V)^{-1} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}} V_q \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \beta') \right\}, \quad (5)$$

$$\hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \beta') = \exp(\beta' \hat{H}_\mu) \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \exp(-\beta' \hat{H}_\mu).$$

Перейдімо до частотного зображення, використовуючи суперпозицію фермі-операторів у зображенні взаємодії [9]

$$a_{\mathbf{k},s}(\nu^*) = \int_0^\beta a_{\mathbf{k},s}(\beta') \psi_{\nu^*}(\beta') d\beta', \quad (6)$$

де  $\psi_{\nu^*}(\beta') = \beta^{-1/2} \exp(i\nu^* \beta')$  — система ортогональних функцій змінної  $\beta'$  ( $0 \leq \beta' \leq \beta$ ;  $\nu^* = (2n+1)\pi\beta^{-1}$  — непарні частоти Мацубари). У частотному зображенні

$$\begin{aligned} \mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \beta^{-1} \sum_{\nu} \mu_2(x, -x), \\ \mu_2(x, -x) &= \beta^{-1} \langle T \hat{S}_\nu \rangle_0^{-1} \langle T \{ \hat{I}_2(x, -x) \hat{S}_\nu \} \rangle_0, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\hat{I}_2(x, -x) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+(\nu_1^* + \nu)$$

$$\times a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+(\nu_2^* - \nu) a_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2^*) a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*),$$

$$\hat{S}_\nu = \exp \left\{ -(2\beta V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \nu} V_q \hat{I}_2(x, -x) \right\},$$

$x \equiv (\mathbf{q}, \nu)$ , де  $\nu = 2n\pi\beta^{-1}$  — парні частоти Мацубари. У праці [10] встановлено правило обчислення середніх від добутку операторів  $a_{\mathbf{k},s}(\nu^*)$ :

$$\begin{aligned} &-\langle T \{ a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*) a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\nu_2^*) \} \rangle_0 \\ &= G_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{s_1, s_2} \delta_{\nu_1^*, \nu_2^*}, \end{aligned} \quad (8)$$

де  $G_{\mathbf{k},s}(\nu^*) = \{i\nu^* - \varepsilon_k + \mu\}^{-1} \exp(i\nu^* \delta)$  — спектральне зображення одночастинкової функції Гріна ідеальної системи ( $\delta \rightarrow +0$ ).

## II. ДВОЧАСТИНКОВА КОРЕЛЯЦІЙНА ФУНКЦІЯ В МЕТОДІ ЦИКЛІЧНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ

Для розрахунку  $\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  застосуємо циклічне перетворення на основі ермітового оператора  $\hat{W}$ , а саме

$$\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = \{ \text{Sp}[\hat{R}_w] \}^{-1} \text{Sp} \{ \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \hat{R}_w \}, \quad (9)$$

$$\hat{R}_w = \exp(-\hat{W}) \exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N} + \hat{V})] \exp \hat{W}.$$

Як і в праці [7], виберемо оператор  $\hat{W}$  у вигляді суми ефективних багаточастинкових локальних взаємодій

$$\begin{aligned} \hat{W} &= \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \neq 0} w_n(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n) \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0}, \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, \dots, s_n} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}. \end{aligned} \quad (10)$$

Такий оператор  $\hat{W}$  комутує з  $\hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$ ,  $\hat{N}$  та  $\hat{V}$ , а  $\hat{R}_w$  визначається лише двома комутаторами операторів  $\hat{H}_0$  і  $\hat{W}$ :

$$\hat{R}_w = \exp\{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{V} + \hat{K}_w + \hat{L}_w)\}, \quad (11)$$

$$\hat{K}_w = \hat{H}_0\hat{W} - \hat{W}\hat{H}_0 \equiv [\hat{H}_0, \hat{W}]_-,$$

$$\hat{L}_w = 1/2 [ [\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \hat{W} ]_-.$$

Крім згаданих вище умов, накладемо на оператор  $\hat{W}$  ще одну умову, а саме, будемо вимагати, щоб у сумі операторів  $\hat{V}$  і  $\hat{L}_w$  компенсувались складові, які

відповідають  $n$ -частинковим взаємодіям ( $n \geq 2$ ). Ця умова приводить до такої системи інтегральних рівнянь для коефіцієнтних функцій  $w_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  [7]:

$$\begin{aligned} & 2N(\mu)V^{-1}w_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1)\varepsilon_{\mathbf{q}_1}\delta_{n,2} \\ & + (1 - \delta_{n,2})w_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)\Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \\ & + \sum_{m \geq 2} \Psi_n^{(m)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = V_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n). \end{aligned} \quad (12)$$

Записуючи цю систему рівнянь, ми використали такі позначення :

$$V_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = V_{\mathbf{q}},$$

$$V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) = \hbar^2(2m)^{-1}\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0} \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)w_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i)w_2(\mathbf{q}_j, -\mathbf{q}_j),$$

$$\begin{aligned} V_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2) &= -4\hbar^2m^{-1}w_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \\ &\times \{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)w_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) + (\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)w_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2)\}; \dots \end{aligned} \quad (13)$$

$$\Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = \hbar^2m^{-1}V^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})w_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1)w_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}),$$

$$\Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = 2\hbar^2m^{-1}N(\mu)V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1} \{\mathbf{q}_1^2 + (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})\}w_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1)w_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}),$$

$$\Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = \hbar^2N^2m^{-1}V^{-3} \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1^2w_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1)w_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, -\mathbf{q}),$$

.....

$$\Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = \hbar^2m^{-1}N(\mu)V^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i^2w_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i).$$

При такому виборі функцій  $w_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$

$$\hat{V} + \hat{L}_w = -\hat{N}^2V^{-1}w_0, \quad w_0 = V^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \varepsilon_{\mathbf{q}}w_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \quad (14)$$

а оператор  $\hat{V} + \hat{L}_w$  комутує з  $\hat{H}_\mu$  та  $\hat{K}_w$ . Це дає змогу використати в ролі базисної модельну систему, яка описується статистичним оператором  $\hat{P} = \exp\{\beta[\hat{N}^2V^{-1}w_0 - \hat{H}_0 + \mu\hat{N}]\}$ . Із тотожності

$$\hat{N}^2 = 2\hat{N}S - S^2 + [\hat{N} - S]^2 \quad (15)$$

випливає, що асимптотично точний опис базисної моделі здійснює статистичний оператор

$$\hat{P}_B = \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu\hat{N} - 2\hat{N}SV^{-1}w_0 + S^2V^{-1}w_0]\}, \quad (16)$$

якому відповідає термодинамічний потенціал

$$\Omega_B(\mu) = \Omega_0(\mu^*) + S^2V^{-1}w_0, \quad (17)$$

де  $\mu^* \equiv \mu + 2SV^{-1}w_0$ , а  $\Omega_0(\mu)$  — відповідний потенціал ідеальної системи. З умови  $\frac{\partial}{\partial S} \Omega_B(\mu) = 0$  випливає, що  $S = -\frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_0(\mu) = N$ , хемпотенціал базисної системи

$$\mu^* = \mu_{\text{id}} - 2 \frac{N}{V} w_0, \quad (18)$$

де  $\mu_{\text{id}}$  — хемічний потенціал ідеальної системи, а вільна енергія базисної системи дорівнює

$$F_B = F_{\text{id}} - \frac{N^2}{V} w_0 \quad (19)$$

( $F_{\text{id}}$  — вільна енергія системи електронів без взаємодії).

Якщо у формулі (9) використати зображення взаємодії на основі оператора (16) і перейти до частотного зображення, то для  $\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  одержуємо аналог формули (6), але тепер

$$\begin{aligned} \hat{S}_\nu &= \exp \hat{K}_w(\nu), \quad \hat{K}_w(\nu) = \sum_{n \geq 2} \hat{K}_n^w(\nu), \\ \hat{K}_n^w(\nu) &= \frac{\hbar^2}{m} (n!)^{-1} (\beta V)^{1-n} \sum_{x_1, \dots, x_n} w_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \delta_{\nu_1 + \dots + \nu_n, 0} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, \dots, s_n} \sum_{m=1}^n \left( \mathbf{k}_m + \frac{1}{2} \mathbf{q}_m, \mathbf{q}_m \right) \sum_{\nu_1^*, \dots, \nu_n^*} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+(\nu_1^* + \nu_1) \cdots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+(\nu_n^* + \nu_n) a_{\mathbf{k}_n, s_n}(\nu_n^*) \cdots a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*). \end{aligned} \quad (20)$$

Для розрахунку  $\mu_2(x, -x)$  використаємо теорію збурень. Розкладаючи в ряд оператор  $\hat{S}_\nu$ , одержимо діаграми, побудовані на функціях Гріна  $G_{\mathbf{k}, s}(\nu^*)$ . Через антиермітовість оператора  $\hat{K}_w$  така теорія збурень за топологією діаграм суттєво відрізняється від звичайної теорії збурень, побудованої на локальному потенціалі Кулона. Зокрема, при розрахунку  $\langle T \hat{S}_\nu \rangle_0$  та  $\langle T [\hat{I}_2(x, -x) \hat{S}_\nu] \rangle_0$  внески всіх діаграм у непарних порядках теорії збурень дорівнюють нулеві, як і внески діаграм типу власної енергії, зумовлені оператором  $\hat{K}_w(\nu)$ , у парних порядках. Відмінні від нуля лише ті діаграми типу власної енергії при розрахунку  $\langle T [\hat{I}_2(x, -x) \hat{S}_\nu] \rangle_0$ , які породжені оператором  $\hat{I}_2(x, -x)$ . Хоч оператори  $\hat{K}_n^w(\nu)$  містять нелокальні взаємодії, внески у  $\mu_2(x, -x)$  виявляються локальними. Характер ряду теорії збурень для  $\mu_2(x, -x)$  проілюструємо розглядом найпростіших діаграм, урахувавши лише складову  $\hat{K}_2^w(\nu)$ .

У нульовому наближенні теорії збурень  $\mu_2(x, -x)$  збігається зі спектральним зображенням двочастинкової кореляційної функції ідеальної системи:

$$\langle T \hat{I}_2(x, -x) \rangle_0 = \mu_2^0(x, -x) = - \sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} G_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}(\nu^* + \nu). \quad (21)$$

Поляризаційна діаграма другого порядку дає такий внесок у  $\mu_2(x, -x)$ :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{2m\beta V} \right)^2 w_2^2(q, -q) \mu_2^0(x, -x) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} G_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}(\nu_1^* - \nu) G_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*) G_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}(\nu_2^* - \nu) G_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2^*) \\ \times \left\{ \left[ (\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - \frac{q^2}{2} \right]^2 - \left[ (\mathbf{k}_2, \mathbf{q}) - \frac{q^2}{2} \right] \left[ (\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) - \frac{q^2}{2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Оскільки

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} G_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) G_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s}(\nu^* - \nu) \left[ (\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \frac{q^2}{2} \right] = -i\nu \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{-1} \mu_2^0(x, -x),$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, s}(\nu^* - \nu) G_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) \left[ (\mathbf{k}, \mathbf{q}) - \frac{q^2}{2} \right]^2 = \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{-1} \left\{ -Nq^2 + \nu^2 \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{-1} \mu_2^0(x, -x) \right\}, \quad (23)$$

то вираз (23) зводиться до

$$-\{\mu_2^0(x, -x)\}^2 V^{-1} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}), \quad v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = 2 \frac{N}{V} \varepsilon_q w_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \quad (24)$$

що є аналогом внеску першого порядку звичайної теорії збурень за ефективним локальним потенціалом  $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ . Підсумовування безмежного ряду поляризаційних діаграм приводить до аналога наближення хаотичних фаз звичайної теорії збурень

$$\mu_2^{\text{RPA}}(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \{1 + \mu_2^0(x, -x) V^{-1} v_{\text{eff}}(\mathbf{q})\}^{-1}. \quad (25)$$

Сукупність власноенергетичних діаграм другого порядку теорії збурень для  $\mu_2(x, -x)$  дає такий внесок:

$$\begin{aligned} & - \left( \frac{\hbar^2}{2mV} \right)^2 \beta^{-3} \sum_{\mathbf{q}_1, \nu_1} w_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} G_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1, s_1}(\nu_1^* - \nu) \\ & \times G_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}_1, s_2}(\nu_2^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2^*) G_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}(\nu_1^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}_1, s_1}^2(\nu_1^*) \left\{ \left( \mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{q}_1}{2}, \mathbf{q}_1 \right) - \left( \mathbf{k}_1 + \frac{\mathbf{q}_1}{2}, \mathbf{q}_1 \right) \right\}^2. \end{aligned} \quad (26)$$

За допомогою елементарних тотожних перетворень цей вираз зводиться до такого:

$$-(2\beta V)^{-1} \sum_{x_1} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}_1) \mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1), \quad (27)$$

де

$$\mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1) = -2\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}, s, \nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^2(\nu^*) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, s}(\nu^* - \nu) \quad (28)$$

— власноенергетична складова чотиричастинкової кореляційної функції базисної системи.

Внесок суми обмінних діаграм другого порядку у  $\mu_2(x, -x)$  зображається виразом (26), якщо в ньому  $\mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1)$  замінити обмінною складовою чотиричастинкової кореляційної функції

$$\mu_{4,2}^0(x, -x, x_1, -x_1) = -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}; s; \nu^*} G_{\mathbf{k}, s}(\nu^*) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}(\nu^* + \nu) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}(\nu^* + \nu + \nu_1). \quad (29)$$

Тричастинкові кореляційні функції виникають у четвертому порядку теорії збурень за взаємодією. Їхній внесок дорівнює

$$(2\beta V)^{-1} \sum_{x_1} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}_1) v_{\text{eff}}(\mathbf{q} + \mathbf{q}_1) \mu_3^0(x, x_1, -x - x_1) \mu_3^0(-x, -x_1, x + x_1). \quad (30)$$

Підсумовуючи безмежні ряди діаграм, побудованих на кореляційних функціях базисної системи й ефективних потенціалах взаємодії, зобразимо  $\mu_2(x, -x)$  так:

$$\mu_2(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \{1 + v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) V^{-1} \mu_2^0(x, -x) [1 - \tilde{G}(x)]\}^{-1}, \quad (31)$$

де  $\tilde{G}(x)$  — поправка на локальне поле в методі циклічного перетворення. Одержані вище розклади для  $\mu_2(x, -x)$  відрізняються від аналогічних розкладів звичайної теорії збурень заміною потенціалу Кулона  $V_q$  на ефективний потенціал  $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ . Це дає змогу скористатися результатом роботи [2], у якій у межах базисного підходу одержано рівняння для поправки на локальне поле в наближенні рядів одно- і двокільце-

вих діаграм. Замінюючи потенціал Кулона слабким потенціалом  $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ , а  $\tilde{G}(x)$  зображуючи у вигляді суми  $\tilde{G}(x) = \tilde{G}_1(x) + \tilde{G}_2(x)$ , маємо такі рівняння:

$$\tilde{G}_i(x) + \sum_{x_1} \tilde{\Phi}_1(x, x_1) \tilde{G}_2(x_1) = \tilde{G}_i^{\text{RPA}}(x), \quad i = 1, 2. \quad (32)$$

Ядра цих рівнянь визначені такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_1(x, x_1) &= -(2\beta v_{\text{eff}}(\mathbf{q}))^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}_1) \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1); \\ \tilde{\Phi}_2(x, x_1) &= (2\beta V v_{\text{eff}}(\mathbf{q}))^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}_1) v_0(x + x_1) \mu_3^0(x, x_1, -x - x_1) \mu_3^0(-x, -x_1, x + x_1), \end{aligned} \quad (33)$$

де

$$\begin{aligned} v_0(x) &= v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \{1 + \tilde{L}(x)\}^{-1}, \quad \tilde{L}(x) = v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) V^{-1} \mu_2^0(x, -x), \\ \mu_4^0(x, -x, x_1, -x_1) &= \mu_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1) + \mu_{4,2}^0(x, -x, x_1, -x_1). \end{aligned} \quad (34)$$

Доданки

$$\tilde{G}_i^{\text{RPA}}(x) = \sum_{x_1} \tilde{\Phi}_i(x, x_1) \{1 + \tilde{L}(x_1)\}^{-1} \quad (35)$$

є наближенням для складових  $\tilde{G}_i(x)$  в ділянці слабкої і проміжної неідеальності.

Оскільки в межах звичайної теорії збурень на потенціалі Кулона  $\mu_2(x, -x)$  і поправка на локальне поле  $G(x)$  пов'язані співвідношенням

$$\begin{aligned} \mu_2(x, -x) &= \mu_2^0(x, -x) \{1 + V_q V^{-1} \\ &\times \mu_2^0(x, -x) [1 - G(x)]\}^{-1}, \end{aligned} \quad (36)$$

то з порівняння виразів (31) та (36) впливає зв'язок між істинною поправкою на локальне поле  $G(x)$  і її аналогом у методі циклічного перетворення  $\tilde{G}(x)$ :

$$G(x) = G_q^0 + [1 - G_q^0] \tilde{G}(x). \quad (37)$$

Незалежна від частоти функція

$$G_q^0 = 1 - V_q^{-1} v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \quad (38)$$

відіграє роль нульового наближення. Вона відповідає наближенню хаотичних фаз методу циклічного перетворення (25). Функція  $\tilde{G}(x)$ , що відповідає слабкому ефективному потенціалові  $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ , відіграє роль поправки до  $G_q^0$ .

Як показано у статті [7], у безрозмірних змінних

$x = qa_0 n^{-1/3}$  ( $a_0$  — радіус Бора,  $n = 4\pi a_0^3 N/V$  — безрозмірна густина частинок) функція  $w_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  може бути зображена за допомогою безрозмірної універсальної функції  $y_2(x)$ ,

$$w_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = (4\pi a_0^3) n^{-7/6} y_2(x), \quad (39)$$

яка не залежить від жодних параметрів і має таку асимптотику:

$$y_2(x) \sim \begin{cases} -x^{-2} + \text{const} + \dots, & x \ll 1; \\ -\text{const} x^{-7/2} + \dots, & x \gg 1. \end{cases} \quad (40)$$

Методом пробних функцій знайдено наближений аналітичний розв'язок рівняння для  $y_2(x)$

$$y_2^{(0)}(x) \cong -x^{-2} \{1 + \alpha x^2 - \beta x^4 (1 + \alpha x^2)^{-1}\}^{-3/4}, \quad (41)$$

$$\alpha = 4(9\pi)^{-2/3} (1 - \xi_0)^{-1}, \quad \beta = \xi_0 \alpha^2; \quad \xi_0 \simeq 0.2929.$$

Знайдено також чисельний розв'язок  $y_2(x)$  при врахуванні вищих кореляційних ефектів, зумовлених функціями  $w_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)$  та  $w_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2)$ . Ефективний потенціал

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = V_q \{x^2 y_2(x)\}^2 \quad (42)$$

лише у довгохвильовій границі збігається з потенціалом Кулона і має асимптотику  $q^{-5}$  у короткохвильовій границі,

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \sim \begin{cases} 4\pi e^2 q^{-2} + \dots & \text{при } a_0 q \ll 1, \\ 12\pi e^2 q^{-5} (a_0 r_s)^{-3} \alpha^{3/2} (\alpha^2 - \beta)^{-3/2} + \dots & \text{при } qa_0 \gg 1, \end{cases} \quad (43)$$

чим нагадує потенціал зарядженого квантового пакета.

Томаса-Фермі для екранованого потенціалу (34), а саме

### III. РОЗРАХУНОК ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

Розгляньмо насамперед асимптотику функції  $\tilde{G}(x)$  в границі малих і великих хвильових чисел для абсолютного нуля температури в ділянці слабкої неідеальності, обмежуючись складовою  $\tilde{G}_1(x)$ . З метою спрощення розрахунків використаємо наближення

$$v_0(x) \rightarrow v_0(\mathbf{q}) \rightarrow v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \left\{ 1 + \left( \frac{k_F}{q} \right)^2 \cdot \zeta^2 \right\}^{-1}, \quad (44)$$

де  $\zeta^2 = 4r_s(\pi\eta)^{-1}$ ,  $\eta = \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3}$ ,  $r_s$  — параметр Віґнера-Бракнера. Це наближення дає змогу виконати підсумовування за частотами в аналітичній формі, зводячи  $\tilde{G}_1(x)$  до такого вигляду:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1(x) &\cong v_{\text{eff}}^{-1}(\mathbf{q}) \{ \mu_2^0(x, -x) \}^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s} v_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [n_{\mathbf{k}_1, s} - n_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s}] [n_{\mathbf{k}_2, s} - n_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s}] \\ &\times \text{Re} \{ (i\nu + \varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_1 - q})^{-1} (i\nu + \varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_2 - q})^{-1} - (i\nu + \varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_1 - q})^{-2} \}. \end{aligned} \quad (45)$$

Щоб знайти асимптотику у границі малих хвильових векторів, застосуємо розклади  $n_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s} = n_{\mathbf{k}, s} + \frac{dn_{\mathbf{k}, s}}{d\varepsilon_k} (\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k) + \dots$ . Використовуючи сферичні системи координат для векторів  $\mathbf{k}_1$  та  $\mathbf{k}_2$  і вважаючи, що  $\frac{dn_{\mathbf{k}, s}}{d\varepsilon_k} \simeq -\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F)$ , зведемо розрахунок  $\tilde{G}_1(x)$  до безрозмірного однократного інтеграла. Для нульової частоти одержуємо:

$$\tilde{G}_1(\mathbf{q}; 0) = \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 C(r_s) + \dots, \quad (46)$$

$$C(r_s) = \frac{3}{8\eta^2} \int_0^{x_0} dx x^3 [y_2(x) x^2]^2 \left\{ x^2 + \frac{4\eta r_s}{3\pi} [x^2 y_2(x)]^2 \right\}^{-1},$$

де  $x_0 = 2\eta(3)^{-1/2}$ . Для великих частот  $\left( \nu \gg 2\varepsilon_F \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 \right)$  у тій же границі маємо

$$\tilde{G}_1(\mathbf{q}; \nu) = \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 D(r_s) + \dots, \quad (47)$$

$$D(r_s) = \frac{9}{40\eta^2} \int_0^{x_0} dx x^3 \left[ \frac{3}{\eta^2} x^2 - 1 \right] [x^2 y_2(x)]^2 \left\{ x^2 + \frac{4\eta r_s}{3\pi} [x^2 y_2(x)]^2 \right\}^{-1}.$$

Згідно з формулами (37), (38), функція  $G_q^0$  не залежить від параметра неідеальності і має таку асимптотику:

$$G_q^0 \simeq \gamma \left( \frac{q}{k_F} \right)^2 + \dots \quad \text{при} \quad q \ll k_F, \quad (48)$$

де  $\gamma \approx 0,30 \dots$ . Із рис. 1, на якому зображено залежність функцій  $C(r_s)$  та  $D(r_s)$  від параметра неідеальності, бачимо, що  $\tilde{G}_1(x)$  в ділянці малих хвильових векторів дійсно є малою порівняно з  $G_q^0$ , особливо при проміжних та великих значеннях  $r_s$ .

У границі великих хвильових векторів  $\tilde{G}_1(x)$  має таку асимптотику:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1(x) &\Rightarrow 4v_{\text{eff}}^{-1}(\mathbf{q}) \{ \mu_2^0(x, -x) \}^{-2} \varepsilon_q^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s} n_{\mathbf{k}_1, s} n_{\mathbf{k}_2, s} \\ &\times \{ v_{\text{eff}}(\mathbf{q}) - q^{-4} v_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [(\mathbf{k}_1 \mathbf{q})(\mathbf{k}_2 \mathbf{q}) \\ &+ (\mathbf{k}_2 \mathbf{q})^2 - 2(\mathbf{k}_1 \mathbf{q})^2] \} + \dots \end{aligned} \quad (49)$$

Оскільки в цій границі  $\mu_2^0(x, -x) \Rightarrow 2N\varepsilon_q^{-1}$ , то перший доданок фігурної дужки приводить до границі

$\tilde{G}_1(x) \Rightarrow 1/2$ . Якщо для спрощення обчислень замінити  $v_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$  потенціалом Кулона, то згадану асимптотику одержуємо такою:

$$\tilde{G}_1(x) \Rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \cdot \frac{V_q}{v_{\text{eff}}(\mathbf{q})} + \dots \quad (50)$$

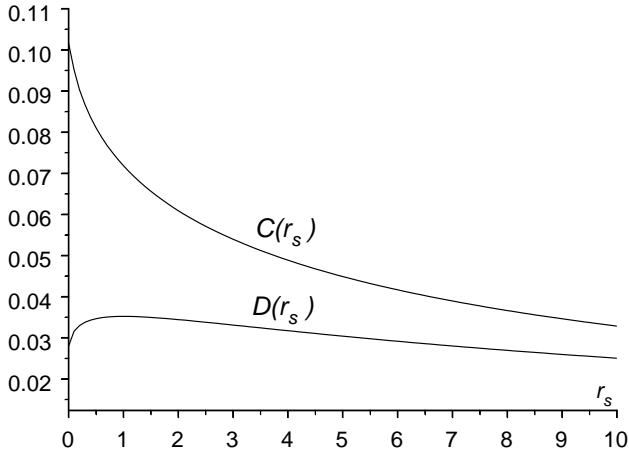


Рис. 1. Залежність коефіцієнтів  $C(r_s)$ ,  $D(r_s)$  від параметра неідеальності.

Отже,  $\tilde{G}_1(x)$  у короткохвильовій границі приймає від'ємні значення, великі за модулем, і не може вважатися малою порівняно з  $G_q^0$ . Однак функція  $G(x)$ , згідно з формулами (37), (38), має коректну фізичну асимптотику,

$$G(x) \Rightarrow G_q^0 - \frac{1}{6} + O(q^{-2}) = \frac{5}{6} + O(q^{-2}), \quad (51)$$

хоча внесок  $\tilde{G}_1(x)$  є досить значним. Як відомо, асимптотика  $G(x)$  при  $q \gg k_F$ , розрахована в межах базисного підходу (див. [2]), є монотонною функцією параметра неідеальності і змінюється в межах від  $1/3$  до  $1$  при зростанні  $r_s$  від  $0$  до  $\infty$ .

Розрахунок поправки на локальне поле за формулою (45) при використанні чисельного розв'язку для  $y_2(x)$  приводить до необхідності обчислити п'ятикратний інтеграл. Ми використали наближений спосіб розрахунку, апроксимувавши множник  $x^2 y_2^2(x)$  однопараметричною пробною функцією

$$\frac{1}{x^2} \left( \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + x^2} \right)^2, \quad (52)$$

а параметр  $\gamma$  знайдено з умови мінімуму суми квадратів відхилень функції (49) від "точних" чисельних значень на інтервалі  $0 \leq x \leq 5$ . Рис. 2 ілюструє точність такої апроксимації (точки — "точні" чисельні дані праці [7], суцільна крива — функція (52) при

$\gamma = 2.616\dots$ ). Функція (52) відповідає потенціалові зарядженого квантового пакета, який у координатному зображенні має такий вигляд:

$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \{1 - e^{-2\Gamma r^*} [1 + \Gamma r^*]\}, \quad (53)$$

де  $r^* = r \cdot k_F$ ,  $\Gamma = \frac{1}{2}\gamma(4/3\pi)^{1/3} \simeq 0.983\dots$ . На рис. 3 зображено безрозмірний множник цього потенціалу, а саме,  $v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \left\{ R_y \cdot \frac{2\eta}{r_s} \right\}^{-1}$  (суцільна крива), а також звичайний потенціал Кулона в цих змінних (точкова крива).

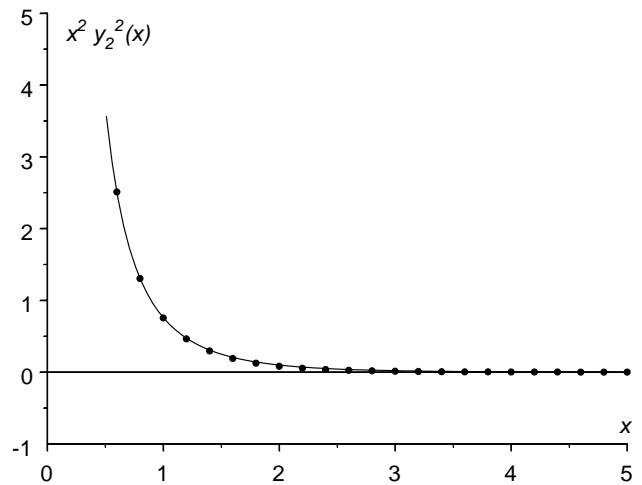


Рис. 2. Ефективний двочастинковий потенціал міжелектронної взаємодії в імпульсному зображенні (у змінних  $x = qa_0 n^{-1/3}$ ): точки відповідають результатам чисельного розрахунку рівняння для  $y_2(x)$ , суцільна крива — функція (52).

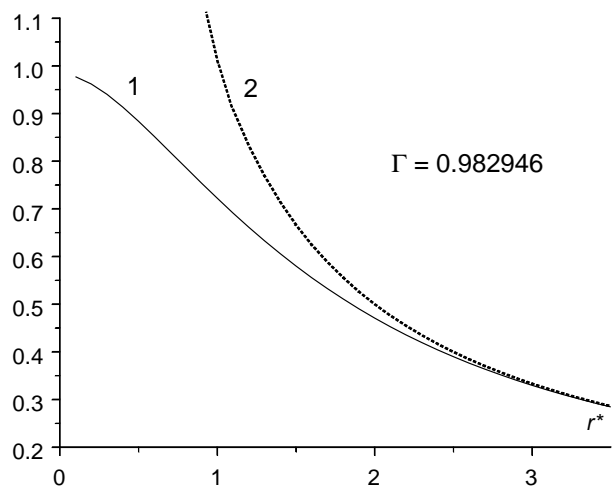


Рис. 3. Ефективний двочастинковий потенціал міжелектронної взаємодії в координатному зображенні (крива 1) і потенціал Кулона (крива 2).



Наступний розрахунок поправки на локальне поле в наближенні (45) виконано за аналогією до праць [2,4,5]. Використання циліндричних систем координат для векторів  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  ( $\mathbf{k}_i = (\rho_i, \varphi_i, z_i)$ ) дає змогу у випадку абсолютного нуля температури виконати інтегрування за чотирма змінними ( $\varphi_1, \varphi_2$  та  $\rho_1, \rho_2$ ) і звести розрахунок до двократного інтеграла

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1(x) = & \frac{1}{32} I_{2,0}^{-2}(q, u) (\Gamma^2 + q^2)^2 (\Gamma^2 - \zeta^2)^{-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \sigma_1 \sigma_2 \int_{-1}^{+1} dz_1 \int_{-1}^{+1} dz_2 F_u \left( z_1 + \sigma_1 q/2; z_2 + \sigma_2 q/2 \right) \\ & \times \left\{ (\Gamma^2 - \zeta^2)^{-1} [A_{\sigma_1 \sigma_2}(s_1^2; a; b) - A_{\sigma_1 \sigma_2}(s_2^2; a; b)] + \left[ \frac{s_2^2 + a + b}{2W(s_2^2; a; b)} - \frac{s_2^2 + 2a + 2b}{2s_2^2} \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{a}{W(s_2^2; a; b) + s_2^2 + b - a} + \frac{b}{W(s_2^2; a; b) + s_2^2 + a - b} \right) \left( 1 + \frac{s_2^2 + a + b}{W(s_2^2; a; b)} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (54)$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned} a = 1 - z_1^2; b = 1 - z_2^2; \zeta^2 = 4r_s(\pi\eta)^{-1}; \\ W(s^2; a; b) = \{s^4 + 2s^2(a+b) + (a-b)^2\}^{1/2}; \\ F_u(z_1, z_2) = (z_1 - z_2) \{z_1^2 z_2 - u^2(2z_1 + z_2)\} (z_1^2 + u^2)^{-2} (z_2^2 + u^2)^{-1}; \\ A_{\sigma_1 \sigma_2}(s^2; a; b) = \frac{1}{2} \{W(s^2; a; b) - s^2 - a - b\} + \\ + a \ln \frac{W(s^2; a; b) + s^2 + b - a}{2s^2} + b \ln \frac{W(s^2; a; b) + s^2 + a - b}{2s^2}; \\ s_1^2 = \left\{ (z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}) - (z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2}) \right\}^2 + \zeta^2; \quad s_2^2 = \left\{ (z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}) - (z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2}) \right\}^2 + 4\Gamma^2. \end{aligned} \quad (55)$$

У формулі (54)  $I_{2,0}(q, u) = \mu_2^0(x, -x) 2\varepsilon_F(3N)^{-1}$  — безрозмірний множник двочастинкової кореляційної функції базисної системи ( $q \equiv |\mathbf{q}|k_F^{-1}$ ,  $u = \nu(2\varepsilon_F q)^{-1}$ ) [9].

#### IV. ХАРАКТЕРИСТИКИ ОСНОВНОГО СТАНУ МОДЕЛІ

Залежність динамічної поправки на локальне поле, розрахованої за формулами (37), (54), у безрозмірних змінних (хвильовий вектор  $q = |\mathbf{q}|k_F^{-1}$ , частота  $u = \nu\{2\varepsilon_F q\}^{-1}$ ) ілюструє рис. 4 для  $r_s = 1$ . Для порівняння там же наведено поправку на локальне поле  $G_q^0$  у наближенні хаотичних фаз з ефективним потенціалом. Як видно з рисунка, у границі великих частот  $G(q, u)$  прямує до  $G_q^0$  в ділянці малих і середніх хвильових векторів, де  $G(q, u) > G_q^0$ . Зі збільшенням частоти максимум функції  $G(q, u)$ , який у статичній границі перебуває в околі точки  $q = 2$ , пересувається в ділянку більших хвильових векторів, а висота максимуму зменшується при зростанні частоти. Короткохвильова асимптотика функції  $G(q, u)$  не залежить від частоти, а визначається лише значенням параметра неідеальності, причому  $G(q, u) < G_q^0$  при  $q \gg 1$ .

Залежність характеру поправки на локальне поле  $G(x)$  (у статичній границі) від параметра  $r_s$  в ділянці

проміжної й сильної неідеальності подано на рис. 5. Характер функції  $G(x)$  в околі  $q = 2$  суттєво залежить від значення параметра неідеальності, а при  $r_s \geq 10$  вона є монотонною функцією хвильового вектора і наближається до  $G_q^0$  в міру зростання параметра неідеальності, що якісно збігається з результатами праці [2], у якій одержано чисельні розв'язки системи рівнянь (32) для  $G_i(x)$  у традиційному базисному підході на потенціалі Кулона. На рис. 6 подано залежність короткохвильової асимптотики поправки на локальне поле моделі електронної рідини  $G_\infty \equiv \lim_{q \rightarrow \infty} G(\mathbf{q}, 0)$ , розрахованої у різних наближеннях, від параметра неідеальності ( $G_\infty^0 \equiv \lim_{q \rightarrow \infty} G_q^0 = 1$ ). При цьому  $G_\infty^{[2]}$  взято з роботи [2], спосіб розрахунку в якій, безсумнівно, коректний в ділянці слабкої і проміжної неідеальності. Суцільна крива ( $G_\infty^*$ ) відповідає результатам цієї статті.  $G_\infty^{\text{IU}} = \lim_{q \rightarrow \infty} G^{\text{IU}}(q)$  — асимптотика статичної поправки на локальне поле роботи [12], яка дає добрі результати при розрахунку характеристик електронної рідини, бо вона сконструйована з використанням таких характеристик. При-

нагідно зауважимо, що поправка  $G^{IU}(q)$  зберігає пік в околі  $q = 2k_F$  навіть при великих значеннях  $r_s$ , що суперечить як результатам роботи [2], так і цієї статті. Як бачимо з рисунка, в ділянці неідеальності, що відповідає металам, а також в ділянці сильної неідеальності функції  $G_\infty^{IU}$ ,  $G_\infty^{[2]}$ ,  $G_\infty^*$  близькі між собою.

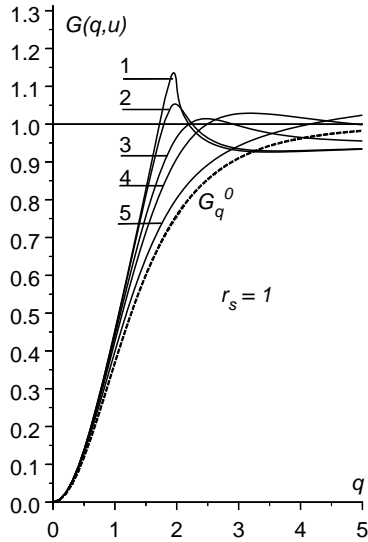


Рис. 4. Динамічна поправка на локальне поле моделі електронної рідини при  $r_s = 1$  у змінних  $(q, u)$ : крива 1 —  $u = 0$ , 2 —  $u = 0, 1$ , 3 —  $u = 0, 5$ , 4 —  $u = 1$ , 5 —  $u = 4$ . Пунктирна крива —  $G_q^0$ , що відповідає наближенню хаотичних фаз з ефективним потенціалом.

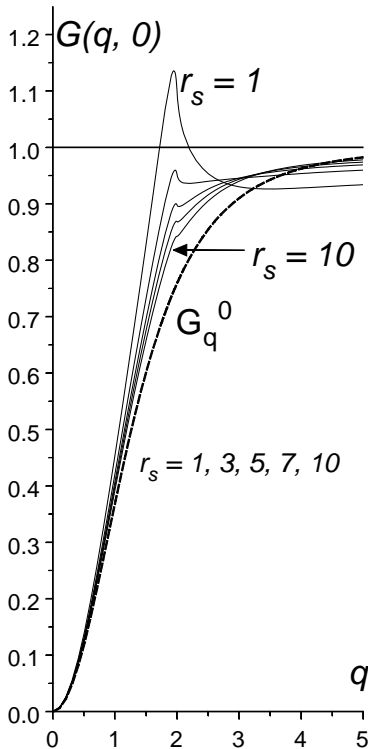


Рис. 5. Залежність характеру поправки на локальне поле моделі електронної рідини від параметра неідеальності (статична границя).

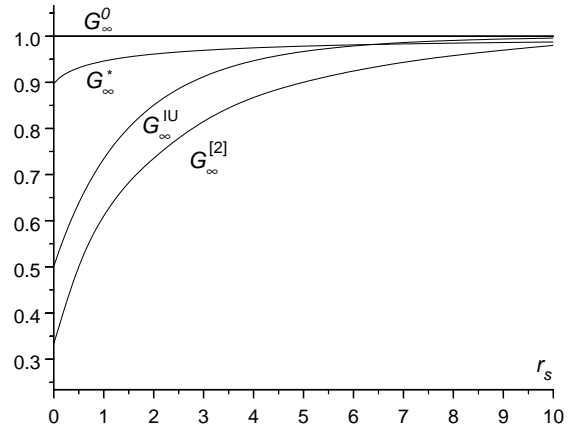


Рис. 6. Залежність короткохвильової асимптотики поправки на локальне поле моделі електронної рідини, розрахованої в працях різних авторів, від параметра неідеальності.

Тестом для поправки на локальне поле може бути розрахунок залежності кореляційної енергії моделі від параметра неідеальності, оскільки результати розрахунку цієї залежності методом Монте-Карло [13] є еталонними до цього часу. Розраховуючи середнє значення енергії взаємодії як енергії зарядження, для кореляційної енергії маємо зображення:

$$E_{corr} = \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} V_q \int_0^1 d\lambda \{ \mu_2^\lambda(x, -x) - \mu_2^0(x, -x) \},$$

$$\mu_2^\lambda(x, -x) = \mu_2^0(x, -x) \times \left\{ 1 + \lambda \frac{V_q}{V} \mu_2^0(x, -x) [1 - G^\lambda(x)] \right\}^{-1}, \quad (56)$$

де  $\mu_2^\lambda(x, -x)$  — двочастинкова кореляційна функція допоміжної моделі з потенціалом між частинковою взаємодією  $\lambda V_q$ . Порівняння кореляційної енергії (у рідбергах на електрон), розрахованої в різних наближеннях, подано на рис. 7. Пунктирна крива рис. 7а відповідає наближенню хаотичних фаз з ефективним потенціалом (або  $G^\lambda(x) = G_q^0$  у формулі (53)), верхня суцільна крива — формулі (53) при  $G(x)$ , розрахованій за формулами (37), (53). Для порівняння точками позначено результати методу Монте-Карло [13], крива з трикутниками на рис. 7b відповідає поправці на локальне поле праці [12]. Як бачимо з рисунка, і наближення хаотичних фаз з ефективним потенціалом, і поправка на локальне поле  $G(x)$  дають значення кореляційної енергії, близькі до еталонних, у ділянці металічної неідеальності ( $2 \leq r_s \leq 5.5$ ), а особливо в ділянці сильної неідеальності ( $r_s > 5.5$ ). У ділянці ( $r_s \geq 10$ ) обидва вказані наближення обмежують еталонні значення зверху і знизу, вони однаково придатні для точних практичних розрахунків. Нижня крива рис. 7 відповідає традиційному наближенню хаотичних фаз з потенціалом Кулона ( $G(x) = 0$ ).

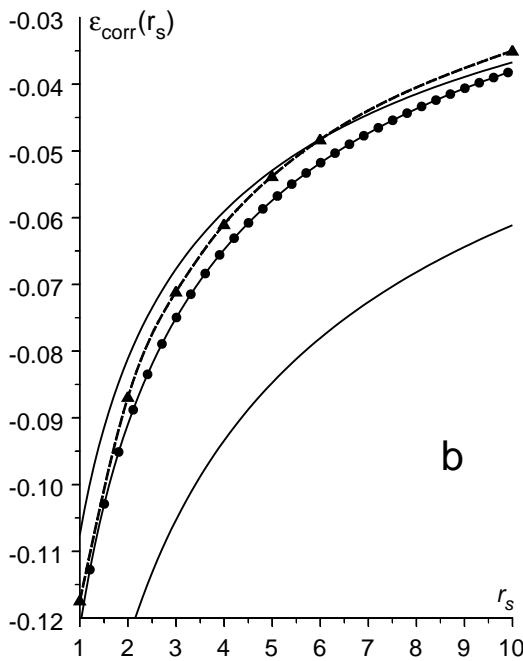
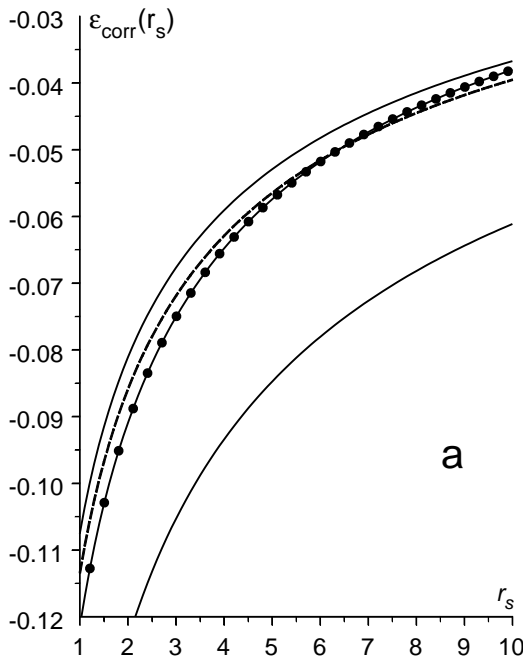


Рис. 7. Кореляційна енергія моделі електронної рідини в різних наближеннях. Крива з кружечками — результати розрахунку методом Монте-Карло; нижня суцільна крива — наближення хаотичних фаз з потенціалом Кулона; верхня суцільна крива відповідає врахуванню поправки на локальне поле (37), (54): а) Пунктирна крива — наближення хаотичних фаз з ефективним потенціалом (53); б) Крива з трикутниками відповідає врахуванню поправки на локальне поле роботи [12].

Як відомо, бінарна функція розподілу

$$F_2(\mathbf{r}) = 1 + \mu_2(\mathbf{r}), \quad (57)$$

$$\mu_2(\mathbf{r}) = (N^2\beta)^{-1} \sum_{\mathbf{q}\nu} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mu_2(x, -x)$$

є величиною, чутливою до прийнятих наближень розрахунку, а в традиційному наближенні хаотичних фаз з потенціалом Кулона вона приймає нефізичні від'ємні значення на малих відстанях між частинками в ділянці  $r_s \geq 0.82 \dots$ . Розрахована в наближенні хаотичних фаз з ефективним потенціалом бінарна функція розподілу зображена на рис. 8. Ефективний потенціал значно розширює ділянку застосування наближення хаотичних фаз, а від'ємні значення бінарної функції появляються в околі  $r = 0$  при  $r_s = 3.7 \dots$ . Як бачимо з рис. 9, наближення локального поля у цьому підході ще більше розширює ділянку додатних значень бінарної функції:  $F_2(0)$  набуває додатних значень у ділянці  $0 \leq r_s \leq 5, 2$ . При більших  $r_s$  вона має невеликі за модулем від'ємні значення: наприклад, нижня крива рис. 9, для якої  $r_s = 7$ , приблизно відповідає бінарній функції розподілу традиційного наближення хаотичних фаз при  $r_s = 1$ .

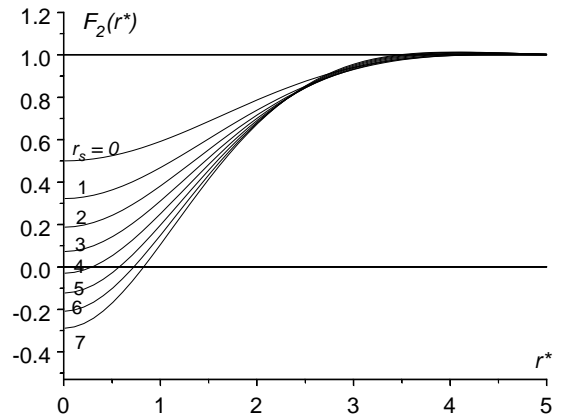


Рис. 8. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні хаотичних фаз з ефективним потенціалом (53).

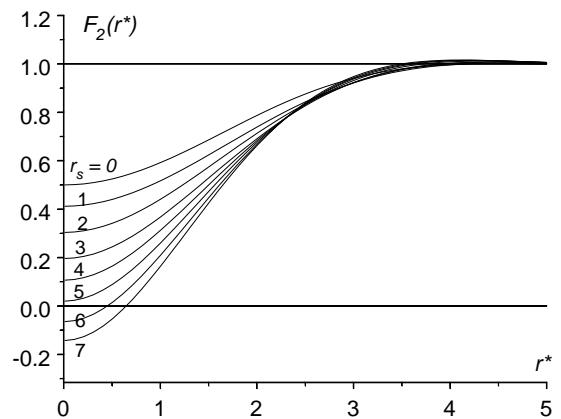


Рис. 9. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні локального поля.

## V. ЗАКІНЧЕННЯ

Метод циклічного перетворення при розрахунку імпульсного зображення двочастинкової кореляційної функції моделі електронної рідини дає змогу сформулювати перенормовану теорію збурень, діярами якої побудовані на ефективних багаточастинкових нелокальних потенціалах взаємодії. У цій статті показано, що врахування двоелектронного ефективного потенціалу приводить до діаграм теорії збурень, побудованих на ефективному локальному потенціалі  $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$  типу потенціалу зарядженого квантового пакета. Це обґрунтовує використання модельного опису короткосяжних взаємодій при розрахунку двочастинкової кореляційної функції, запропонованого раніше [6], і дозволяє використовувати наближення, які в межах традиційної теорії збурень адекватні слабконейдеальним системам, до опису харак-

теристик вироджених електронних систем у ділянці проміжної та сильної неідеальності. Це дозволяє також трактувати модельний підхід як наближений метод самоузгодженого опису короткосяжних кореляцій.

Розрахунок кореляційної енергії моделі електронної рідини показує, що результати цієї роботи близькі до результатів статті [6], а також до результатів розрахунку методом Монте-Карло [13], причому збіжність поліпшується при зростанні параметра неідеальності.

У цій праці не враховано багаточастинкових ефективних взаємодій, що описуються операторами  $\hat{K}_n^w(\nu)$  при  $n \geq 3$ . Оскільки такі взаємодії є короткосяжними, то вони відіграють роль поправок. Впливу багаточастинкових взаємодій  $w_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  на результати розрахунків фізичних характеристик моделі буде присвячена окрема робота.

- 
- [1] *Достижения электронной теории металлов. Т. 1*, под ред. П. Цише, Г. Леманна (Мир, Москва, 1984).  
 [2] M. Vavruk, T. Krokhmalkii, Phys. Status Solidi B **169**, 451 (1992).  
 [3] M. Vavruk, V. Paslavskii, Phys. Status Solidi B **208**, 91 (1998).  
 [4] M. Vavruk, O. Blazhievskii, Phys. Status Solidi B **186**, 449 (1994).  
 [5] М. Ваврух, В. Паславський, Н. Тишко, Журн. фіз. досл. **4**, 21 (2000).  
 [6] М. Ваврух, Н. Тишко, С. Коваль, Журн. фіз. досл. **4**, 403 (2000).  
 [7] М. Ваврух, Я. Куштай, В. Солов'ян, Журн. фіз. досл. **2**, 23 (1998).  
 [8] А. Абрикосов, Л. Горьков, Н. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. (Физматгиз, Москва, 1962).  
 [9] M. Vavruk, T. Krokhmalkii, Phys. Status Solidi B **168**, 519 (1991).  
 [10] М. Ваврух, Р. Буній, Доп. НАН України. Сер. А, №4, 50 (1995).  
 [11] D. J. W. Geldart, R. Taylor, Can. J. Phys. **48**, 155 (1970).  
 [12] S. Ichimaru, K. Utsumi, Phys. Rev. B **24**, 7385 (1981).  
 [13] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).

## CORRELATION EFFECTS ACCOUNTING IN THE ELECTRON LIQUID MODEL BY THE METHOD OF CYCLIC TRANSFORMATION

M. Vavruk, N. Tyshko, S. Koval', Ya. Kushtay  
 Department for Astrophysics, Ivan Franko National University of Lviv,  
 8 Kyrylo i Mefodii Str., Lviv, UA-79005, Ukraine

The calculation of two-particle correlation function of the electron liquid model by means of the cyclic transformation is realized. In this way we reduce to the renormalized perturbation theory round the effective weak potential similar to quantum packet potential  $e^2 r^{-1} \{1 - (1 + r^*) \exp(-2r^*)\}$  by  $r^* \equiv r k_F$ , where  $k_F$  is Fermi wave-number. In the frames of this scheme the dynamic local field correction function, the mean energy and binary distribution function of electron liquid model are calculated. This method proved the model description of short-range correlation effects developed by the authors earlier. It is a simple and effective way of calculating electronic properties in metallic systems.