ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 7, № 4 (2003) с. 375–386

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 7, No. 4 (2003) p. 375–386

# 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 діяграмах якої замість потенціялу Кулона фіґурує слабкий ефективний далекосяжний потенціял, близький до потенціялу квантового пакета $e^2r^{-1}\{1-(1+r^*)\exp(-2r^*)\}$, де $r^*\equiv rk_{\mathrm{F}}$, а $k_{\mathrm{F}}$ — хвильове число Фермі. У цій схемі розраховано динамічну поправку на локальне поле, а на її основі — кореляційну енерґію та бінарну функцію розподілу моделі в широкій ділянці параметра неідеальности. 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, енерґія 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 проникности 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 інтеґральні 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 неідеальности [2], узагальненої моделі з короткосяжним потенціялом взаємодії між частинками типу потенціялу 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 неідеальности 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 навіяна методом псевдопотенціялу в теорії електрон–йонних взаємодій у металах. Використання ефективного потенціялу взаємодії між електронами типу потенціялу квантового пакета поліпшує збіжність рядів теорії збурень і допускає використання наближень, що звичайно застосовуються у випадку слабкої неідеальности, до опису сильно неідеальних систем. Ідею використання таких ефективних потенціялів в праці [6] обґрунтовано за допомогою співвідношення невизначеностей Гайзенберґа на напівфеноменологічному рівні.

Наша праця дає мікроскопічне обґрунтування модельного підходу. Ми одержали ефективний слабкий далекосяжний потенціял 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, діяграми якого побудовані на слабкому ефективному потенціялі взаємодії між частинками, що має властивості потенціялу квантового пакета. Розгляньмо модель однорідної електронної рідини з гамільтоніяном $\hat H=\hat H_0+\hat V$, де $\hat H_0$ — оператор кінетичної енерґії, а $\hat V$ — оператор енерґії взаємодії за законом Кулона. У зображенні вторинного квантування на базисі плоских хвиль

$$\hat H_0=\sum_{\mathbf{k},s}\varepsilon_k\, a^+_{\mathbf{k},s}\, a_{\mathbf{k},s},$$

$$\hat V=(2V)^{-1}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}V_q\,\hat I_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}), \tag{1}$$

$$\hat I_2(\mathbf{q},-\mathbf{q})=\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\sum_{s_1,s_2}a^+_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}\,a^+_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}\,a_{\mathbf{k}_2,s_2}\,a_{\mathbf{k}_1,s_1},$$

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

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

де

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \beta^{-1}\sum_\nu \mu_2(x, -x), \\ \mu_2(x, -x) &= \beta^{-1}\langle T\hat{S}_\nu\rangle_0^{-1}\langle T\{\hat{I}_2(x, -x)\hat{S}_\nu\}\rangle_0, \\ \hat{I}_2(x, -x) &= \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\sum_{s_1,s_2}\sum_{\nu_1^*,\nu_2^*} a^+_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}(\nu_1^*+\nu) \\ &\times a^+_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}(\nu_2^*-\nu)\,a_{\mathbf{k}_2,s_2}(\nu_2^*)\,a_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*), \\ \hat{S}_\nu &= \exp\left\{-(2\beta V)^{-1}\sum_{\mathbf{q},\nu} V_q\hat{I}_2(x, -x)\right\}, \end{aligned} \tag{7}$$

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

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

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

## 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

$$\begin{aligned}\mu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \{\mathrm{Sp}[\hat{R}_w]\}^{-1}\mathrm{Sp}\{\hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})\,\hat{R}_w\}, \\ \hat{R}_w &= \exp(-\hat{W})\exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{V})]\exp\hat{W}. \end{aligned} \tag{9}$$

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

$$\begin{aligned}\hat{W} &= \sum_{n\ge 2}(n!)^{-1}V^{1-n}\sum_{\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n\ne 0} w_n(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_n)\,\hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n)\,\delta_{\mathbf{q}_1+\cdots+\mathbf{q}_n,0}, \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_n}\sum_{s_1,\ldots,s_n} a^+_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,s_1}\cdots a^+_{\mathbf{k}_n+\mathbf{q}_n,s_n}\,a_{\mathbf{k}_n,s_n}\cdots a_{\mathbf{k}_1,s_1}. \end{aligned} \tag{10}$$

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

$$\hat{R}_\omega = \exp\{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{V} + \hat{K}_w + \hat{L}_w)\}, \tag{11}$$
$$\hat{K}_w = \hat{H}_0\hat{W} - \hat{W}\hat{H}_0 \equiv [\hat{H}_0,\hat{W}]_-,$$
$$\hat{L}_w = 1/2\Big[[\hat{H}_0,\hat{W}]_-,\hat{W}\Big]_-.$$

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 інтеґральних рівнянь для коефіцієнтних функцій $w_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)$ [7]:

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

Записуючи цю систему рівнянь, ми використали такі позначення :

$$V_2(\mathbf{q},-\mathbf{q}) = V_\mathbf{q}\ ,$$
$$V_3(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3) = \hbar^2(2m)^{-1}\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,0}\sum_{i\neq j=1}^{3}(\mathbf{q}_i,\mathbf{q}_j)w_2(\mathbf{q}_i,-\mathbf{q}_i)w_2(\mathbf{q}_j,-\mathbf{q}_j)\ ,$$
$$V_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2) = -4\hbar^2m^{-1}w_3(-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)$$
$$\times\{(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2)w_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)+(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1)w_2(\mathbf{q}_2,-\mathbf{q}_2)\}\ ;\ldots \tag{13}$$
$$\Psi_2^{(2)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}) = \hbar^2m^{-1}V^{-1}\sum_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q})w_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)w_2(\mathbf{q}-\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q})\ ,$$
$$\Psi_2^{(3)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}) = 2\hbar^2m^{-1}N(\mu)V^{-2}\sum_{\mathbf{q}_1}\{\mathbf{q}_1^2+(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_1-\mathbf{q})\}w_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)w_3(-\mathbf{q}_1,\mathbf{q},\mathbf{q}_1-\mathbf{q})\ ,$$
$$\Psi_2^{(4)}(\mathbf{q},-\mathbf{q}) = \hbar^2N^2m^{-1}V^{-3}\sum_{\mathbf{q}_1}\mathbf{q}_1^2w_2(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1)w_4(\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_1,\mathbf{q},-\mathbf{q})\ ,$$
......................................
$$\Phi_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n) = \hbar^2m^{-1}N(\mu)V^{-1}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{q}_i^2w_2(\mathbf{q}_i,-\mathbf{q}_i)\ .$$

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

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

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 тотожности

$$\hat{N}^2 \ = \ 2\hat{N}S - S^2 + [\hat{N}-S]^2 \tag{15}$$

випливає, що асимптотично точний опис базисної моделі здійснює статистичний оператор

$$\hat{P}_\text{Б} = \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu\hat{N} - 2\hat{N}SV^{-1}w_0 + S^2V^{-1}w_0]\}, \tag{16}$$

якому відповідає термодинамічний потенціял

$$\Omega_\text{Б}(\mu) \ = \ \Omega_0(\mu^*) + S^2V^{-1}w_0\ \ , \tag{17}$$

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

$$\mu^* \;=\; \mu_{\text{id}} \;-\; 2\,\frac{N}{V}\,w_0, \tag{18}$$

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

$$F_{\text{Б}} \;=\; F_{\text{id}} \;-\; \frac{N^2}{V}\,w_0 \tag{19}$$

($F_{\text{id}}$ — вільна енерґія 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

$$\hat{S}_\nu = \exp\,\hat{K}_w(\nu), \quad \hat{K}_w(\nu) = \sum_{n\geq 2}\hat{K}_n^w(\nu),$$

$$\hat{K}_n^w(\nu) = \frac{\hbar^2}{m}\,(n!)^{-1}\,(\beta V)^{1-n}\sum_{x_1,\ldots,x_n} w_n(\mathbf{q}_1,\ldots,\mathbf{q}_n)\,\delta_{\mathbf{q}_1+\cdots+\mathbf{q}_n,0}\,\delta_{\nu_1+\cdots+\nu_n,0}\;\times \tag{20}$$

$$\times\sum_{\mathbf{k}_1,\ldots,\mathbf{k}_n}\sum_{s_1,\ldots,s_n}\sum_{m=1}^{n}\Big(\mathbf{k}_m + \frac{1}{2}\,\mathbf{q}_m, \mathbf{q}_m\Big)\sum_{\nu_1^*,\ldots,\nu_n^*} a^+_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,s_1}(\nu_1^*+\nu_1)\,\cdots a^+_{\mathbf{k}_n+\mathbf{q}_n,s_n}(\nu_n^*+\nu_n)a_{\mathbf{k}_n,s_n}(\nu_n^*)\,\cdots\,a_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*).$$

Для розрахунку $\mu_2(x,-x)$ використаємо теорію збурень. Розкладаючи в ряд оператор $\hat{S}_\nu$, одержимо діяграми, побудовані на функціях Ґріна $G_{\mathbf{k},s}(\nu^*)$. Через антиермітовість оператора $\hat{K}_w$ така теорія збурень за топологією діяграм суттєво відрізняється від звичайної теорії збурень, побудованої на локальному потенціялі 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 діяграм у непарних порядках теорії збурень дорівнюють нулеві, як і внески діяграм типу власної енерґії, зумовлені оператором $\hat{K}_w(\nu)$, у парних порядках. Відмінні від нуля лише ті діяграми типу власної енерґії 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 діяграм,ураховуючи 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:

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

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

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

Оскільки

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

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

то вираз (23) зводиться до

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

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

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

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

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

За допомогою елементарних тотожних перетворень цей вираз зводиться до такого:

$$-(2\beta V)^{-1}\sum_{x_1} v_{\rm eff}(\mathbf{q}_1)\,\mu^0_{4,1}(x,-x,x_1,-x_1), \tag{27}$$

де

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

— власноенерґетична складова чотиричастинкової кореляційної функції базисної системи.

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

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

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

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

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

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

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 потенціялу Кулона $V_q$ на ефективний потенціял $v_{\rm eff}(\mathbf{q})$. 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 двокільцевих діяграм. Замінюючи потенціял Кулона слабким потенціялом $v_{\rm eff}(\mathbf{q})$, а $\tilde{G}(x)$ зображаючи у вигляді суми $\tilde{G}(x)=\tilde{G}_1(x)+\tilde{G}_2(x)$, маємо такі рівняння:

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

Ядра цих рівнянь визначені такими співвідношеннями:

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

де

$$v_0(x)=v_{\rm eff}(\mathbf{q})\,\{1+\tilde{L}(x)\}^{-1},\qquad \tilde{L}(x)=v_{\rm eff}(\mathbf{q})\,V^{-1}\mu_2^0(x,-x),$$
$$\mu_4^0(x,-x,x_1,-x_1)=\mu_{4,1}^0(x,-x,x_1,-x_1)+\mu_{4,2}^0(x,-x,x_1,-x_1). \tag{34}$$

Доданки

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

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

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

$$\mu_2(x,-x)=\mu_2^0(x,-x)\,\{1+V_qV^{-1}\times\mu_2^0(x,-x)\,[1-G(x)]\}^{-1}, \tag{36}$$

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

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

Незалежна від частоти функція

$$G_q^0\;=\;1\;-\;V_q^{-1}\,v_{\rm eff}(\mathbf{q}) \tag{38}$$

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

Як показано у статті [7], у безрозмірних змінних $x=qa_0n^{-1/3}$ ($a_0$ — радіус Бора, $n=4\pi a_0^3N/V$ — безрозмірна густина частинок) функція $w_2(\mathbf{q},-\mathbf{q})$ може бути зображена за допомогою безрозмірної універсальної функції $y_2(x)$,

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

яка не залежить від жодних параметрів і має таку асимптотику:

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

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

$$y_2^{(0)}(x)\cong -x^{-2}\{1+\alpha x^2-\beta x^4(1+\alpha x^2)^{-1}\}^{-3/4}, \tag{41}$$
$$\alpha=4\,(9\pi)^{-2/3}(1-\xi_0)^{-1},\quad \beta=\xi_0\alpha^2;\quad \xi_0\simeq 0.2929.$$

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 потенціял

$$v_{\rm eff}(\mathbf{q})\;=\;V_q\,\{x^2y_2(x)\}^2 \tag{42}$$

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

$$v_{\rm eff}(\mathbf{q})\;\sim\;\begin{cases}4\pi e^2q^{-2}+\cdots & \text{при}\quad a_0q\ll 1,\\ 12\pi e^2q^{-5}(a_0r_s)^{-3}\alpha^{3/2}(\alpha^2-\beta)^{-3/2}+\cdots & \text{при}\quad qa_0\gg 1,\end{cases} \tag{43}$$

чим нагадує потенціял зарядженого квантового пакета.

## 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 неідеальности, обмежуючись складовою $\tilde{G}_1(x)$. З метою спрощення розрахунків використаємо наближення Томаса–Фермі для екранованого потенціялу (34), а саме

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

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:

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

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

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

$$C(r_s) = \frac{3}{8\eta^2} \int\limits_0^{x_0} dx\, x^3\, [y_2(x)\, x^2]^2 \left\{x^2 + \frac{4\eta r_s}{3\pi}\,[x^2 y_2(x)]^2\right\}^{-1},$$

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

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

$$D(r_s) = \frac{9}{40\eta^2} \int\limits_0^{x_0} dx\, x^3 \left[\frac{3}{\eta^2}\, x^2 - 1\right] [x^2 y_2(x)]^2 \left\{x^2 + \frac{4\eta r_s}{3\pi}\,[x^2 y_2(x)]^2\right\}^{-1}.$$

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

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

де $\gamma \approx 0,30\ldots$. Із рис. 1, на якому зображено залежність функцій $C(r_s)$ та $D(r_s)$ від параметра неідеальности, 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:

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

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 $v_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ потенціялом Кулона, то згадану асимптотику одержуємо такою:

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

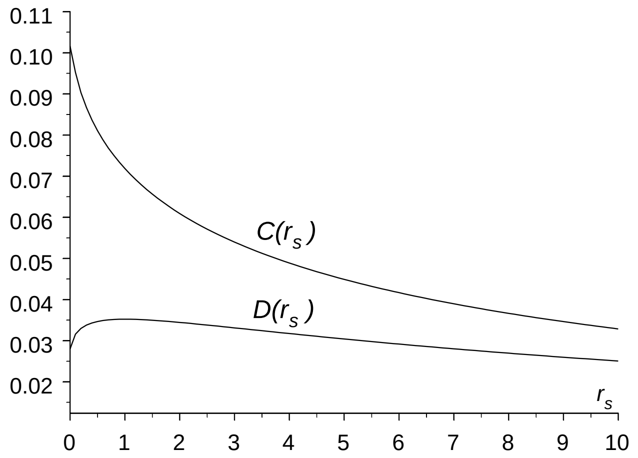


Рис. 1. Залежність коефіцієнтів $C(r_s)$, $D(r_s)$ від параметра неідеальности.

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,

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

хоча внесок $\tilde{G}_1(x)$ є досить значним. Як відомо, асимптотика $G(x)$ при $q \gg k_{\text{F}}$, розрахована в межах базисного підходу (див. [2]), є монотонною функцією параметра неідеальности 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 необхідности обчислити п'ятикратний інтеґрал. Ми використали наближений спосіб розрахунку, апроксимувавши множник $x^2 y_2^2(x)$ однопараметричною пробною функцією

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

а параметр $\gamma$ знайдено з умови мінімуму суми квадратів відхилень функції (49) від "точних" чисельних значень на інтервалі $0 \le x \le 5$. Рис. 2 ілюструє точність такої апроксимації (точки — "точні" чисельні дані праці [7], суцільна крива — функція (52) при $\gamma = 2.616\ldots$). Функція (52) відповідає потенціялові зарядженого квантового пакета, який у координатному зображенні має такий вигляд:

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

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

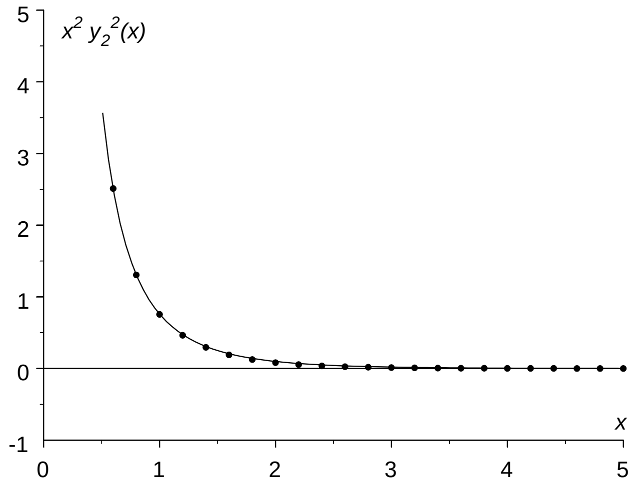


Рис. 2. Ефективний двочастинковий потенціял міжелектронної взаємодії в імпульсному зображенні (у змінних $x = qa_0 n^{-1/3}$): точки відповідають результатам чисельного розрахунку рівняння для $y_2(x)$, суцільна крива — функція (52).

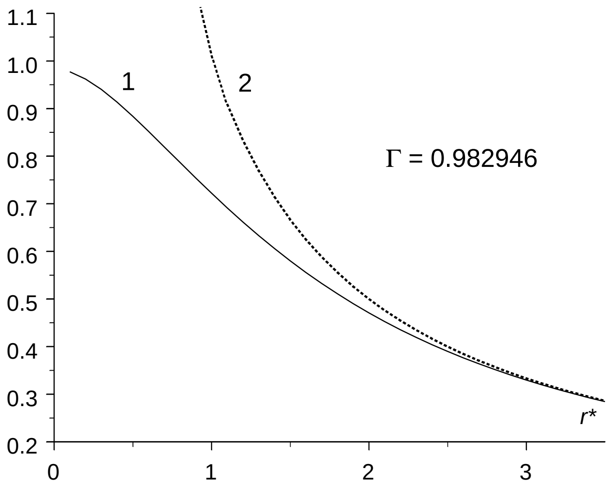


Рис. 3. Ефективний двочастинковий потенціял міжелектронної взаємодії в координатному зображенні (крива 1) і потенціял Кулона (крива 2).

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 інтеґрування за чотирма змінними ($\varphi_1, \varphi_2$ та $\rho_1, \rho_2$ ) і звести розрахунок до двократного інтеґрала

$$\tilde{G}_1(x) = \frac{1}{32} I_{2,0}^{-2}(q,u)(\Gamma^2+q^2)^2(\Gamma^2-\zeta^2)^{-1} \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm1} \sigma_1\sigma_2 \int_{-1}^{+1} dz_1 \int_{-1}^{+1} dz_2 F_u\Big(z_1+\sigma_1 q/2; z_2+\sigma_2 q/2\Big) \tag{54}$$

$$\times \Bigg\{ (\Gamma^2-\zeta^2)^{-1}[A_{\sigma_1\sigma_2}(s_1^2;a;b) - A_{\sigma_1\sigma_2}(s_2^2;a;b)] + \Bigg[ \frac{s_2^2+a+b}{2W(s_2^2;a;b)} - \frac{s_2^2+2a+2b}{2s_2^2}$$

$$+ \Big( \frac{a}{W(s_2^2;a;b)+s_2^2+b-a} + \frac{b}{W(s_2^2;a;b)+s_2^2+a-b} \Big) \Big( 1 + \frac{s_2^2+a+b}{W(s_2^2;a;b)} \Big) \Bigg] \Bigg\}.$$

Тут використано такі позначення:

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

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

## IV. ХАРАКТЕРИСТИКИ ОСНОВНОГО СТАНУ МОДЕЛІ

Залежність динамічної поправки на локальне поле, розрахованої за формулами (37), (54), у безрозмірних змінних (хвильовий вектор $q = |\mathbf{q}| k_{\mathrm{F}}^{-1}$, частота $u = \nu\{2\varepsilon q\}^{-1}$) 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 потенціялом. 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 неідеальности, причому $G(q,u) < G_q^0$ при $q >> 1$.

Залежність характеру поправки на локальне поле $G(x)$ (у статичній границі) від параметра $r_s$ в ділянці проміжної й сильної неідеальности подано на рис. 5. Характер функції $G(x)$ в околі $q = 2$ суттєво залежить від значення параметра неідеальности, а при $r_s \geq 10$ вона є монотонною функцією хвильового вектора і наближається до $G_q^0$ в міру зростання параметра неідеальности, 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 потенціялі Кулона. На рис. 6 подано залежність короткохвильової асимптотики поправки на локальне поле моделі електронної рідини $G_\infty \equiv \lim_{q\to\infty} G(\mathbf{q},0)$, розрахованої у різних наближеннях, від параметра неідеальности ($G_\infty^0 \equiv \lim_{q\to\infty} G_q^0 = 1$). При цьому $G_\infty^{[2]}$ взято з роботи [2], спосіб розрахунку в якій, безсумнівно, коректний в ділянці слабкої і проміжної неідельности. Суцільна крива ($G_\infty^*$) відповідає результатам цієї статті. $G_\infty^{\mathrm{IU}} = \lim_{q\to\infty} G^{\mathrm{IU}}(q)$ — асимптотика статичної поправки на локальне поле роботи [12], яка дає добрі результати при розрахунку характеристик електронної рідини, бо вона сконструйована з використанням таких характеристик. Принагідно зауважимо, що поправка $G^{\mathrm{IU}}(q)$ зберігає пік в околі $q = 2k_{\mathrm{F}}$ навіть при великих значеннях $r_s$, що суперечить як результатам роботи [2], так і цієї статті. Як бачимо з рисунка, в ділянці неідеальности, що відповідає металам, а також в ділянці сильної неідеальности функції $G_{\infty}^{\mathrm{IU}}$, $G_{\infty}^{[2]}$, $G_{\infty}^{*}$ близькі між собою.

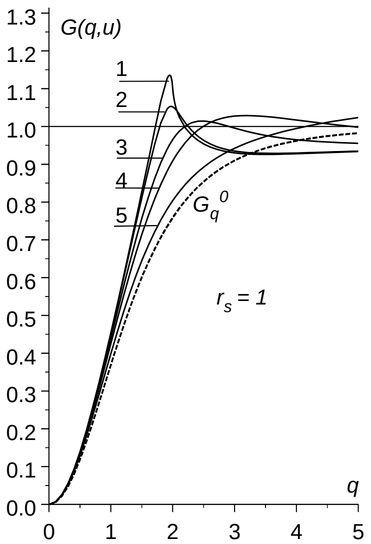


Рис. 4. Динамічна поправка на локальне поле моделі електронної рідини при $r_s = 1$ у змінних ($q$, $u$): крива 1 — $u = 0$, 2 — $u = 0,1$, 3 — $u = 0,5$, 4 — $u = 1$, 5 — $u = 4$. Пунктирна крива — $G_q^0$, що відповідає наближенню хаотичних фаз з ефективним потенціялом.

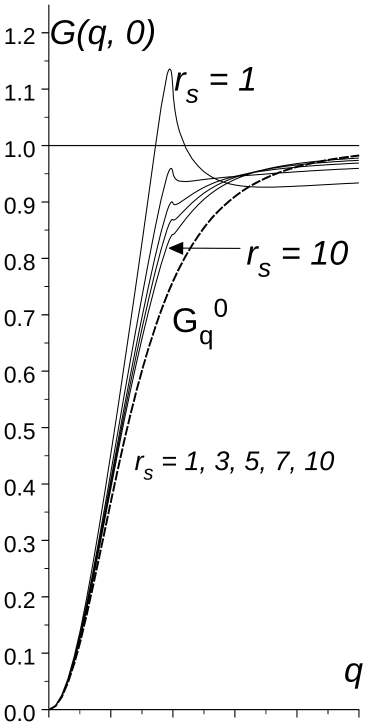


Рис. 5. Залежність характеру поправки на локальне поле моделі електронної рідини від параметра неідеальности (статична границя).

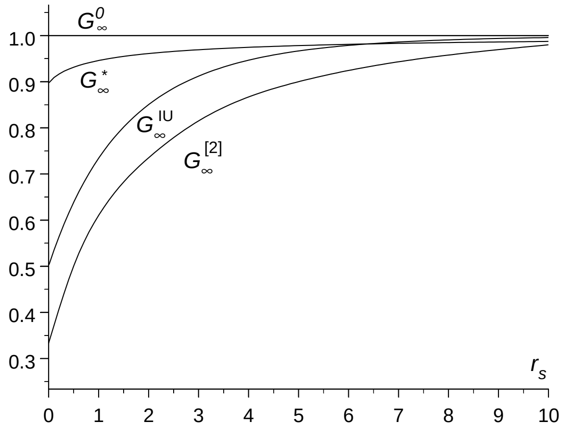


Рис. 6. Залежність короткохвильової асимптотики поправки на локальне поле моделі електронної рідини, розрахованої в працях різних авторів, від параметра неідеальности.

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

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

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

де $\mu_2^{\lambda}(x,-x)$ — двочастинкова кореляційна функція допоміжної моделі з потенціялом міжчастинкової взаємодії $\lambda V_q$. Порівняння кореляційної енерґії (у рідберґах на електрон), розрахованої в різних наближеннях, подано на рис. 7. Пунктирна крива рис. 7a відповідає наближенню хаотичних фаз з ефективним потенціялом (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 потенціялом, і поправка на локальне поле $G(x)$ дають значення кореляційної енерґії, близькі до еталонних, у ділянці металічної неідеальности ($2 \leq r_s \leq 5.5$), а особливо в ділянці сильної неідеальности ($r_s > 5.5$). 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 потенціялом Кулона ($G(x) = 0$).

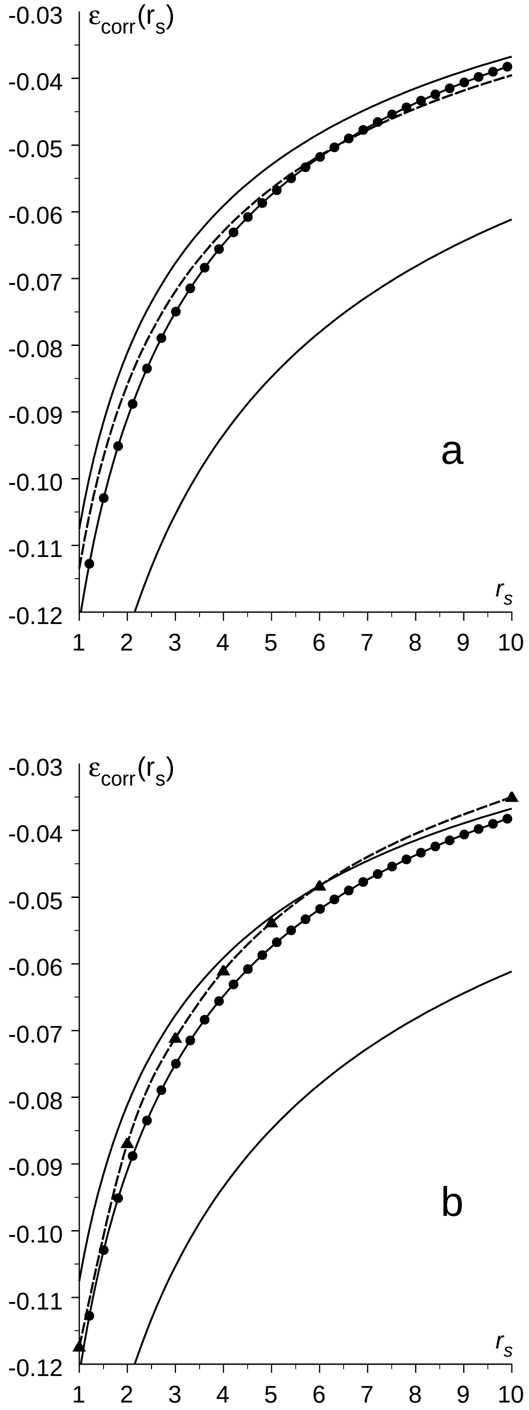


Рис. 7. Кореляційна енергія моделі електронної рідини в різних наближеннях. Крива з кружечками — результати розрахунку методом Монте-Карло; нижня суцільна крива — наближення хаотичних фаз з потенціялом Кулона; верхня суцільна крива відповідає врахуванню поправки на локальне поле (37), (54): a) Пунктирна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

Як відомо, бінарна функція розподілу

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

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

є величиною, чутливою до прийнятих наближень розрахунку, а в традиційному наближенні хаотичних фаз з потенціялом Кулона вона приймає нефізичні від'ємні значення на малих віддалях між частинками в ділянці $r_s \geq 0.82\ldots$. Розрахована в наближенні хаотичних фаз з ефективним потенціялом бінарна функція розподілу зображена на рис. 8. Ефективний потенціял значно розширює ділянку застосування наближення хаотичних фаз, а від'ємні значення бінарної функції появляються в околі $r = 0$ при $r_s = 3.7\ldots$. 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 традиціного наближення хаотичних фаз при $r_s = 1$.

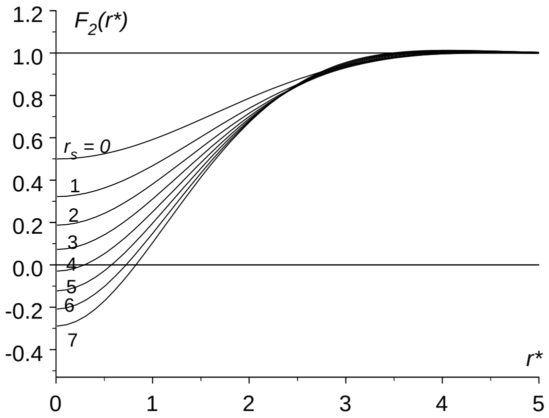


Рис. 8. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні хаотичних фаз з ефективним потенціялом (53).

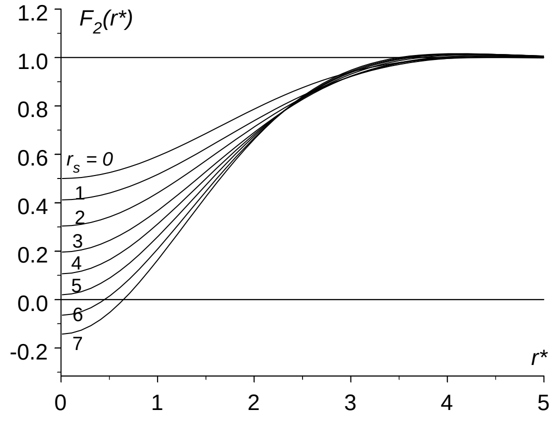


Рис. 9. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в наближенні локального поля.

## V. ЗАКІНЧЕННЯ

Метод циклічного перетворення при розрахунку імпульсного зображення двочастинкової кореляційної функції моделі електронної рідини дає змогу сформулювати перенормовану теорію збурень, діяграми якої побудовані на ефективних багаточастинкових нелокальних потенціялах взаємодії. У цій статті показано, що врахування двоелектронного ефективного потенціялу приводить до діяграм теорії збурень, побудованих на ефективному локальному потенціялі $v_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ типу потенціялу 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 слабконеідеальним системам, до опису характеристик вироджених електронних систем у ділянці проміжної та сильної неідеальности. Це дозволяє також трактувати модельний підхід як наближений метод самоузгодженого опису короткосяжних кореляцій.

Розрахунок кореляційної енерґії 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 неідеальности.

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 $w_n(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n)$ 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. Vavrukh, T. Krokhmalskii, Phys. Status Solidi B **169**, 451 (1992).

[3] M. Vavrukh, V. Paslavskii, Phys. Status Solidi B **208**, 91 (1998).

[4] M. Vavrukh, 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. Vavrukh, T. Krokhmalskii, 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. Vavrukh, 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 $e^2r^{-1}\{1-(1+r^*)\exp(-2r^*)\}$ by $r^* \equiv rk_{\text{F}}$, where $k_{\text{F}}$ 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.