

МІКРОСКОПІЧНА ТЕОРІЯ НАДПРОВІДНОСТІ МЕТАЛІЧНИХ СИСТЕМ

М. Ваврух, С. Слободян

*Львівський національний університет імені Івана Франка, кафедра астрофізики
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 16 січня 2004 р.; в остаточному вигляді — 6 грудня 2004 р.)

Запропоновано базисний багатоелектронний підхід до опису надпровідної фази моделей металічних систем, до складу яких входить вироджена підсистема електронів. Показано, що в ділянці сильної неідеальності електронної підсистеми міжелектронні кореляції сприяють переходові до надпровідного стану, як і електрон-фононна взаємодія. Обговорено відповідність розглянутої моделі “розведеного” металу реальним надпровідним системам та можливість синтезу нових.

Ключові слова: електрон-ядерна модель, електрон-йонна модель, (u, v) -перетворення, електронні кореляції, поправка на локальне поле, електрон-фононний механізм.

PACS number(s): 05.30. Fk, 74.25. Kc

I. ВСТУП

Відкриття надпровідників з проміжними та високими критичними температурами привело до появи теоретичних праць, у яких розглядаються можливі механізми виникнення надпровідного стану, відмінні від традиційного електрон-фононного, що характерний для низькотемпературних металічних надпровідних систем. У роботі [1] запропоновано мікроскопічний багатоелектронний підхід до опису моделі надпровідника, до складу якого входить сильно неідеальна вироджена електронна підсистема. Фізична система, яка відповідає цій моделі, повинна бути достатньо “розведеним” металом з низькою середньою густиною електронів провідності. Як видно з експериментальних даних, така ситуація може реалізуватися у фулеритах, інтеркальованих лужними металами, та в деяких високотемпературних надпровідниках типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (див. [2]), хоч у нормальному стані ці системи за своєю структурою і властивостями мало подібні на звичайні метали. Надпровідні сполуки MgB_2 , $\text{Mg}_x\text{Al}_{1-x}\text{B}_2$ та інші [3, 4, 5] свідчать про можливість синтезу дійсно “розведених” металів. У статті [6] показано, що в моделі сильно неідеальної електронної рідини може виникнути надпровідна фаза в ділянці значень параметра неідеальності (параметра Вігнера–Бракнера) $r_s \geq 6$. Причиною цього є короткосяжні кореляційні ефекти, яких не враховують у наближенні хаотичних фаз. Із результатів експериментальних досліджень структури MgB_2 випливає, що значення параметра неідеальності в цій сполуці більше за його значення в чистому металі Mg. Можливість існування “розбавлених” металічних систем не здається проблематичною. Розглянута в цій статті модель відповідає надпровідним системам такого типу. Ми показали, що в них можуть реалізуватися одночасно два механізми надпровідності — електрон-фононний та кореляційний.

Відзначимо також, що сучасній теорії надпровідності притаманний модельний підхід: або беруться дуже прості моделі, або ж задача зводиться до моделі

БКШ в підході Еліашберга [7] з використанням параметрів зв'язку, одержаних на основі густини електронних станів чи фононних спектрів, розрахованих у рамках мікроскопічного чи напівмікроскопічного підходу. На противагу цьому наша робота ґрунтується на використанні (u, v) -перетворення Боголюбова в межах базисного підходу без використання модельних уявлень та феноменологічних елементів.

У межах нашої моделі можна пояснити концентраційну залежність T_c для надпровідників типу PdH, $\text{Pd}_{1-x}\text{Al}_x\text{H}$ та інших, оскільки наслідком утворення йонів H^- в останніх є ефективне зменшення середньої концентрації електронів провідності. Ще більшою мірою така модель застосовна до опису традиційних металічних надпровідників, бо при цьому послідовно беруться до уваги міжелектронні взаємодії. Відзначимо також, що врахування міжелектронних кореляцій або ж електрон-плазмонних взаємодій, які розглянуто в працях Е. А. Пашицького (див. [8]), є двома різними підходами до опису того самого явища — взаємодій між електронами провідності, які відіграють суттєву роль у сильно неідеальних надпровідних системах.

II. ЕЛЕКТРОН-ФОНОННА МОДЕЛЬ НАДПРОВІДНИКА

Розгляньмо модель системи, до складу якої входить n -сортна ядерна підсистема (eQ_c — заряд ядра сорту c , M_c — його маса, N_c — кількість ядер сорту c ; $1 \leq c \leq n$) та підсистема N електронів ($N = \sum_c Q_c N_c$)

у термодинамічній границі $N_c, V \rightarrow \infty, \frac{N_c}{V} = \text{const.}$

Щоб послідовно врахувати електрон-фононні взаємодії та міжелектронні кореляції, побудуємо для описаної системи електрон-йонну модель за методом роботи [9]. Нехай первісним зображенням для ядерної підсистеми є координатне, а для електронної — зображення вторинного квантування у змішаному базисі

$$\{\Psi_\sigma\} = \{\Psi_{l_1}\} \oplus \{\Psi_{l_2}\} \oplus \dots \oplus \{\Psi_{l_n}\} \oplus \{\Psi_{\mathbf{k}}\}, \quad (1)$$

яке є прямою сумою підпросторів функцій, локалізованих на ядрах різного типу ($\Psi_{l_c}(\mathbf{r})$) та підпростору делокалізованих функцій $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, що відповідає двом типам одночастинкових електронних станів у металі. Локалізовані базисні функції у випадку n -сортної системи ядер можна утворити шляхом ортогоналізації хвильових функцій заповнених станів ізольованих йонів $\varphi_{\lambda_c|j}(\mathbf{r}) \equiv \varphi_{\lambda_c}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^c)$ (де λ_c – набір квантових чисел стану електрона на j -му ядрі сорту c , \mathbf{R}_j^c – радіус-вектор ядра) за методом роботи [10],

$$\Psi_{\lambda_c|j}(\mathbf{r}) = \sum_{b=1}^n \sum_{\mu_b} \sum_i u_{\mu_b \lambda_c}^{ij} \varphi_{\mu_b|i}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

де $1 \leq j \leq N_c; 1 \leq i \leq N_b$. Оскільки функції різних квантових станів $\varphi_{\mu_b|i}(\mathbf{r})$, що центровані на одному ядрі, можна вибрати ортогональними, то коефіцієнти $u_{\mu\lambda}^{ij}$ зображаються у вигляді розкладів за степенями інтегралів перекриття,

$$u_{\mu\lambda}^{ij} = \delta_{i,j} \delta_{\mu\lambda} - \frac{1}{2} S_{\mu\lambda}^{ij} + \dots; S_{\mu\lambda}^{ij} = (\varphi_{\lambda|j}, \varphi_{\mu|i}) - \delta_{i,j} \delta_{\mu,\lambda}. \quad (3)$$

Базисні функції $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, що мають асимптотику плоских хвиль на великих відстанях від ядер, можна побудувати різними способами. Побудову функцій цього підпростору ми не будемо розглядати тут, бо, згідно зі схемою роботи [9], після засереднення за станами локалізованих електронів перейдемо від підпростору $\{\Psi_{\mathbf{k}}\}$ до підпростору плоских хвиль, так що кінцеві результати виражатимуться лише у функціях підпросторів $\{\Psi_{l_c}\}$.

Гамільтоніян електрон-ядерної моделі запишемо у змішаному зображенні – вторинному квантуванні на базисі $\{\Psi_\sigma\}$ для електронів та координатному – для ядер:

$$\hat{H} = \hat{H}_n(R) + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_s \epsilon_{\sigma_1, \sigma_2} a_{\sigma_1, s}^+ a_{\sigma_2, s} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_4} \sum_{s_1, s_2} V_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} a_{\sigma_1, s_1}^+ a_{\sigma_2, s_2}^+ a_{\sigma_3, s_2} a_{\sigma_4, s_1}. \quad (4)$$

При цьому

$$\hat{H}_n(R) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_c \frac{1}{M_c} \sum_{i=1}^{N_c} (\nabla_i^c)^2 + \frac{1}{2} \sum_{c_1, c_2} \sum_{i, j} e^2 \frac{Q_{c_1} Q_{c_2}}{|\mathbf{R}_i^{c_1} - \mathbf{R}_j^{c_2}|} \quad (5)$$

– гамільтоніян ядерної підсистеми з кулонівськими

взаємодіями ($i \neq j$ при $c_1 = c_2$). Фермі-оператори $a_{\sigma, s}$ відповідають базисним функціям $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$, s – спінова змінна, $\epsilon_{\sigma_1 \sigma_2}$ – сума матричних елементів оператора кінетичної енергії електрона і його взаємодії з ядрами

$$\epsilon_{\sigma_1 \sigma_2} = \left(\Psi_{\sigma_1} \left| -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \sum_c Q_c \sum_{j_c=1}^{N_c} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_c}|} \right| \Psi_{\sigma_2} \right), \quad (6)$$

а $V_{\sigma_1 \dots \sigma_4}$ – матричний елемент двоелектронної взаємодії,

$$V_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} = \left(\Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma_2} \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Psi_{\sigma_3} \Psi_{\sigma_4} \right). \quad (7)$$

Узагальнюючи схему робіт [9, 11], виконаймо статистичне засереднення за станами підсистеми локалізованих електронів, а саме, розрахуймо слід статистичного оператора за змінними, що відповідають підпросторові $\{\Psi_l\} = \{\Psi_{l_1}\} \oplus \dots \oplus \{\Psi_{l_n}\}$, у великому канонічному ансамблі:

$$\hat{P}_{\text{eff}} = \text{Sp}_l \exp\{-\beta[\hat{H} - \mu \hat{N}]\}. \quad (8)$$

Тут μ – змінна хемічного потенціалу, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ – обернена температура,

$$\hat{N} = \sum_{\sigma, s} a_{\sigma, s}^+ a_{\sigma, s} - \quad (9)$$

– оператор числа електронів, \hat{P}_{eff} – ефективний статистичний оператор електрон-йонної моделі. З цією метою зобразимо гамільтоніян (4) у вигляді суми доданків,

$$\hat{H} = \hat{H}_n(R) + \hat{H}_l + \hat{H}_k + \hat{V}_{lk}, \quad (10)$$

де \hat{H}_l – складова, побудована на операторах $a_{l, s}$ ($\sigma = (\lambda_1, j_1; \dots; \lambda_n, j_n)$), \hat{H}_k – аналогічна складова, побудована на $a_{\mathbf{k}, s}$, а \hat{V}_{lk} описує взаємодію двох підсистем, поміж ними й ефекти гібридизації.

Як і в статті [11], уведемо модельний допоміжний гамільтоніян

$$\hat{H}_l^0 = \sum_c \sum_{\lambda_c, j_c} \sum_s (E_{\lambda_j}^c - \mu) a_{\lambda_c, j_c, s}^+ a_{\lambda_c, j_c, s}, \quad (11)$$

що описує підсистему невзаємодіючих локалізованих електронів і відіграє роль апроксимаційного щодо \hat{H}_l , а параметри $E_{\lambda_j}^c \equiv E_{\lambda_c, j_c}^c$ визначимо з варіаційного принципу. Оператор \hat{H}_l^0 використаємо для організації теорії збурень, розглядаючи \hat{H}_l^0 як гамільтоніян незбуреної задачі, а $\hat{H}_l - \hat{H}_l^0$ та \hat{V}_{lk} – як збурення:

$$\hat{P}_{\text{eff}} = \exp\{-\beta\Omega_l^0(\mu)\} \langle \hat{S} \rangle_{\hat{H}_l^0}, \quad (12)$$

$$\hat{S} = T \exp \left\{ - \int_0^\beta d\beta' \left[\hat{H}_n(R) + \hat{H}_l(\beta') + \hat{H}_k + \hat{V}_{lk}(\beta') - \hat{H}_l^0(\beta') \right] \right\},$$

де

$$\Omega_l^0(\mu) = -\frac{1}{\beta} \sum_c \sum_{\lambda_c, j_c} \sum_s \ln \{1 + \exp(-\beta[E_{\lambda_j}^c - \mu])\} \quad (13)$$

— термодинамічний потенціал моделі (11), а оператори $\hat{H}_l(\beta')$, $\hat{V}_{lk}(\beta')$, $\hat{H}_l^0(\beta')$ мають зображення взаємодії на основі \hat{H}_l^0 (комутуючі з ним оператори $a_{k,s}^+$, $a_{k,s}$ такого зображення не мають). Зауважимо, що некомутативність операторів, які визначають S -матрицю, проявляється лише у вищих порядках теорії збурень. При врахуванні всіх діаграм теорії збурень результат був би інваріантним щодо вибору $E_{\lambda_j}^c$,

$$\frac{\delta}{\delta E_{\lambda_j}^c} \Omega_l(\mu) = 0, \quad (14)$$

де $\Omega_l(\mu)$ — термодинамічний потенціал підсистеми локалізованих електронів. Практичний розрахунок є наближенням, тому умова (14) дає один з наближених способів вибору спектра модельного гамільтоніяна в межах варіаційного принципу.

У результаті такого засереднення одержуємо статистичний оператор електрон-йонної моделі в такому вигляді:

$$\hat{P}_{\text{eff}} = \exp \left\{ -\beta \left[\hat{H}_i(R) + \hat{H}_{ei} - \mu \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s} \right] \right\}. \quad (15)$$

Тут

$$\hat{H}_{ei} = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s a_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | R) a_{\mathbf{k}_1, s}^+ a_{\mathbf{k}_2, s} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \cdots \mathbf{k}_4} \sum_{s_1, s_2} a_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 | R) a_{\mathbf{k}_1, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_3, s_2} a_{\mathbf{k}_4, s_1} + \cdots, \quad (19)$$

де коефіцієнтні функції $a_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | R)$, $a_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 | R)$ залежать від сукупності координат йонної підсистеми та мають багаточастинковий характер.

$$\begin{aligned} \hat{H}_i(R) = & \Omega_l(\mu) + \sum_c \left(-\frac{\hbar^2}{2M_c} \right) \sum_{j_c=1}^{N_c} \nabla_{j_c}^2 \\ & + \frac{1}{2} \sum_{c_1, c_2} \sum_{j_{c_1}, i_{c_2}} \Phi_{c_1 c_2}(\mathbf{R}_{j_{c_1}} - \mathbf{R}_{i_{c_2}}) + \cdots \end{aligned} \quad (16)$$

а $\Phi_{c_1 c_2}(\mathbf{R}_{j_{c_1}} - \mathbf{R}_{i_{c_2}})$ — потенціал ефективної взаємодії двох йонів, які належать до сортів c_1 та c_2 (при $c_1 = c_2$ маємо $j_{c_1} \neq i_{c_2}$), що складається з кулонівської взаємодії ядер і взаємодії електронних оболонок;

$$\hat{H}_{ei} = \hat{H}_k - \frac{1}{\beta} \langle \hat{S}_{lk} \rangle_l \quad (17)$$

— гамільтоніян підсистеми колективізованих електронів у полі йонів, де

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_{lk} \rangle_l & \equiv \langle T \hat{S}_l \rangle_{\hat{H}_l^0}^{-1} \langle T \hat{S}_l \hat{S}_{lk} \rangle_{\hat{H}_l^0}, \\ \hat{S}_l & = \exp \left\{ - \int_0^\beta d\beta' [H_l(\beta') - H_l^0(\beta')] \right\}, \\ \hat{S}_{lk} & = \exp \left\{ - \int_0^\beta d\beta' \hat{V}_{lk}(\beta') \right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Гамільтоніян електрон-йонної моделі має таку загальну структуру щодо електронних операторів:

Для електрон-йонних моделей загальноприйнятим є зображення плоских хвиль. Це дає переваги при дальшому врахуванні багатоелектронних кореляцій-

них ефектів у межах теорії збурень. У зв'язку з цим перейдімо в гамільтоніані (19) від $a_{\mathbf{k},s}$ до операторів вторинного квантування на базисі плоских хвиль $c_{\mathbf{q},s}$ згідно зі співвідношеннями

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{q},s} &= \sum_{\sigma} (\varphi_{\mathbf{q}}, \Psi_{\sigma}) a_{\sigma,s}, \\ a_{\sigma,s} &= \sum_{\mathbf{q}} (\Psi_{\sigma}, \varphi_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{q},s}. \end{aligned} \quad (20)$$

Умова повноти базисних функцій $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$, записана в імпульсному зображенні,

$$\sum_l (\Psi_l, \varphi_{\mathbf{q}_1}) (\varphi_{\mathbf{q}_2}, \Psi_l) + \sum_k (\Psi_k, \varphi_{\mathbf{q}_1}) (\varphi_{\mathbf{q}_2}, \Psi_k) = \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}, \quad (21)$$

дає змогу обчислити суми за векторами $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ та $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4$ в загальному вигляді, без конкретизації функцій $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Це перетворення зберігає загальну структуру гамільтоніана \hat{H}_{ei} , але приводить до формальної заміни матричних елементів, розрахованих на базисі $\{\Psi_{\sigma}\}$, матричними елементами, обчисленими на функціях OPW — системи

$$\begin{aligned} &\{\Psi_{l_1}\} \oplus \{\Psi_{l_2}\} \oplus \dots \oplus \{\Psi_{l_n}\} \oplus \{\chi_{\mathbf{k}}\}, \\ \chi_n(\mathbf{r}) &= \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \sum_c \sum_{l_c} (\Psi_{l_c}, \varphi_{\mathbf{k}}) \Psi_{l_c}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (22)$$

де $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-\frac{1}{2}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Оператор числа колективізованих електронів (див. (15)) в новому зображенні набуває недіагональної форми:

$$\begin{aligned} \hat{N}_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k},s} c_{\mathbf{k},s}^+ c_{\mathbf{k},s} - \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s c_{\mathbf{k}_1, s}^+ c_{\mathbf{k}_2, s} \\ &\times \sum_c \sum_{l_c} (\Psi_{l_c} \varphi_{\mathbf{k}_1}) (\varphi_{\mathbf{k}_2}, \Psi_{l_c}). \end{aligned} \quad (23)$$

Виділимо в операторі \hat{H}_{ei} гамільтоніан вільних електронів \hat{H}_0 та оператор міжелектронної взаємодії за законом Кулона \hat{V}_{ee} , надаючи гамільтоніанові електронної моделі стандартного вигляду:

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \hat{H}_i(R) + \hat{H}_0 + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ei}, \\ \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},s}^+ c_{\mathbf{k},s}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ c_{\mathbf{k}_2, s_2} c_{\mathbf{k}_1, s_1},$$

де $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, $V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2}$. Оператор \hat{V}_{ei} описує взаємодію колективізованих електронів з йонами і має багаточастинкову структуру:

$$\hat{V}_{ei} = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s c_{\mathbf{k}_1, s}^+ c_{\mathbf{k}_2, s} v_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | R) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \sum_{s_1, s_2} c_{\mathbf{k}_1, s_1}^+ c_{\mathbf{k}_2, s_2}^+ c_{\mathbf{k}_3, s_2} c_{\mathbf{k}_4, s_1} v_4(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 | R) + \dots \quad (25)$$

Перша складова \hat{V}_{ei} описує одночастинкову взаємодію електронів з йонами системи, друга — поправку до кулонівської міжелектронної взаємодії, зумовлену наявністю локалізованих станів. Структуру оператора \hat{V}_{ei} та властивості його матричних елементів досліджено в статті [11] для односортної підсистеми йонів.

Перейдімо від координат йонів \mathbf{R}_j^c до квазічастинкового опису, вводячи оператори фононів за загальними правилами [12]:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_j^c &= \left(\frac{M_c}{N_c} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \hat{P}_{\mathbf{k}, \nu} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j0}^c}, \quad \delta \mathbf{R}_j^c = (M_c N_c)^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \hat{q}_{\mathbf{k}, \nu} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j0}^c}, \\ \hat{P}_{\mathbf{k}, \nu} &= i \left(\frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}, \nu}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{k}, \nu}^+ - b_{-\mathbf{k}, \nu}), \quad \hat{q}_{\mathbf{k}, \nu} = \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}, \nu}} \right)^{\frac{1}{2}} (b_{\mathbf{k}, \nu} + b_{-\mathbf{k}, \nu}^+), \end{aligned} \quad (26)$$

де сукупність $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu}$ становить базис векторів поляризації для \mathbf{k} ,

$$(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu'}) = \delta_{\nu, \nu'}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}, \nu} = \boldsymbol{\varepsilon}_{-\mathbf{k}, \nu}, \quad (27)$$

а \mathbf{R}_{j0}^c визначають рівноважні положення йонів. Переходячи до фононів, в операторі $\hat{H}_i(R)$ обмежимося квадратичним наближенням за відхиленням йонів від рівноважних положень, а в операторі \hat{V}_{ei} — лінійним наближен-

ням, ураховуючи одноелектронні взаємодії, що визначаються матричними елементами $v_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2|R)$. Оператор \hat{V}_{ei} в цьому наближенні набирає такого вигляду:

$$\hat{V}_{ei} = \hat{V}_{ei}^0 + \hat{V}_{ep} + \dots, \quad (28)$$

де

$$\hat{V}_{ei}^0 = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_s c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+ c_{\mathbf{k},s} \sum_c v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) S_{-\mathbf{q}}^{c0} \quad (29)$$

— оператор нелокальної взаємодії електронів з нерухомою ґраткою ($S_{-\mathbf{q}}^{c0} = \sum_{j=1}^{N_c} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j0}^c)$) — структурний фактор підсистеми йонів сорту c), а

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ep} &= -\frac{i}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s, \nu} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+ c_{\mathbf{k},s} D_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) (b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^+), \\ D_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= (\mathbf{q}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{q},\nu}) \sum_c \left(\frac{\hbar N_c}{2M_c \omega_{\mathbf{q},\nu}} \right)^{\frac{1}{2}} v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (30)$$

описує електрон-фононну взаємодію.

Функції $v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ не залежать від координат йонів і визначаються матричними елементами, побудованими на локалізованих функціях. У найпростішому наближенні

$$\begin{aligned} v_2^c(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= -Z_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}^c V_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} [1 - \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}] - (\epsilon_{\mathbf{k}_1} + \epsilon_{\mathbf{k}_2}) \sum_{\lambda_c} \varphi_{\lambda_c}(\mathbf{k}_1) \varphi_{\lambda_c}^*(\mathbf{k}_2) \\ &+ \sum_{\lambda_c} T_{\lambda_c \lambda_c} \varphi_{\lambda_c}(\mathbf{k}_1) \varphi_{\lambda_c}^*(\mathbf{k}_2) - \frac{1}{2V} \sum_{\lambda_c, s} n_{\lambda_c, s} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \\ &\times \{ \varphi_{\lambda_c}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) - R_{\lambda_c \lambda_c}(\mathbf{q}) \varphi_{\lambda_c}(\mathbf{k}_1) \} \{ \varphi_{\lambda_c}^*(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) - R_{\lambda_c \lambda_c}^*(\mathbf{q}) \varphi_{\lambda_c}^*(\mathbf{k}_2) \} + \dots \end{aligned} \quad (31)$$

Тут

$$n_{\lambda_c, s} = \left\{ 1 + \exp[\beta(E_{\lambda_j}^c - \mu)] \right\}^{-1} \quad (32)$$

— середні значення чисел заповнення локалізованих електронів,

$$R_{\lambda\lambda}(\mathbf{q}) = (\varphi_\lambda | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \varphi_\lambda), \quad T_{\lambda\lambda} = (\varphi_\lambda | -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} | \varphi_\lambda). \quad (33)$$

Функція $Z_{\mathbf{p}}^c = Q_c - \sum_{\lambda_c, s} n_{\lambda_c, s} R_{\lambda_c \lambda_c}(\mathbf{p})$ відіграє роль ефективної валентності йона сорту c і збігається з валентністю при $\mathbf{p} \rightarrow 0$; $\varphi_\lambda(\mathbf{k})$ — зображення Фур'є атомної функції, центрованої в початку координат,

$$\varphi_\lambda(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \varphi_\lambda(\mathbf{r}). \quad (34)$$

Перший член у формулі (31) описує взаємодію електрона провідності з йоном у наближенні Гартрі, другий і третій зображають внесок кінетичної енергії, останній доданок описує обмінну взаємодію електрона провідності з локалізованими електронами йона.

Щоб урахувати вплив оператора \hat{V}_{ei} на формування фононного спектра і не мати справи з його перенормуванням, застосуємо тут самоузгоджену схему, подібну до використаної раніше при засередненні за локалізованими станами. Уведемо допоміжний гамільтоніан вільних фононів

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\mathbf{k}, \nu} \hbar \omega_{\mathbf{k}, \nu} \left\{ b_{\mathbf{k}, \nu}^+ b_{\mathbf{k}, \nu} + \frac{1}{2} \right\} \quad (35)$$

з невизначеним спектром $\hbar \omega_{\mathbf{k}, \nu}$, зображаючи гамільтоніан (24) у вигляді

$$\hat{H}_0 + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ei}^0 + \hat{H}_{ph} + \hat{V}_{ep} + \hat{\Delta},$$

$$\hat{\Delta} = \hat{H}_i(b_{\mathbf{k},\nu}) - \hat{H}_{ph}, \quad (36) \quad \beta_{2s\mathbf{k},s} = u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k},\frac{1}{2}-s} + 2sv_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k},\frac{1}{2}+s}^+, \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1, \quad (38)$$

де $\hat{H}_i(b_{\mathbf{k},\nu})$ — гамільтоніан $\hat{H}_i(R)$, записаний через оператори фононів згідно зі співвідношеннями (26). Розраховуючи статистичну суму моделі (24), використаємо \hat{H}_{ph} як гамільтоніан незбуреної задачі, а $\hat{\Delta}$ розглянемо як збурення. Так само візьмемо до уваги і \hat{V}_{ep} . При врахуванні всіх діаграм теорії збурень термодинамічний потенціал моделі $\Omega(\mu)$ був би інваріантним щодо вибору спектра фононів $\hbar\omega_{\mathbf{k},\nu}$,

$$\frac{\delta}{\delta\omega_{\mathbf{k},\nu}}\Omega(\mu) = 0. \quad (37)$$

Практично ця умова зводиться до варіаційної процедури й дає екстремум $\Omega(\mu)$ щодо спектра фононів.

III. КВАЗІЧАСТИНКОВИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОННОЇ ПІДСИСТЕМИ

Використовуючи загальну схему праці [6], підсистему електронів, хвильові вектори яких належать невеликій ділянці $\delta(\mathbf{k})$ в околі поверхні Фермі, будемо описувати в термінах квазічастинок. “Пасивну” підсистему електронів, хвильові вектори яких не належать до $\delta(\mathbf{k})$, вважатимемо нормальною (парамагнетною) і опишемо в термінах операторів частинок. При цьому $\delta(\mathbf{k})$ є параметром теорії або ж визначається самоузгоджено (див. розділ VII).

Щоб розділити дві підсистеми електронів, замість операторів $c_{\mathbf{k},s}$, введемо фермі-оператори $\gamma_{\mathbf{k},s}$ при $\mathbf{k} \notin \delta(\mathbf{k})$ та $c_{\mathbf{k},s} = \beta_{\mathbf{k},s}$ при $\mathbf{k} \in \delta(\mathbf{k})$. Для “активної” (надпровідної) підсистеми використаємо (u, v) -перетворення Боголюбова [13]:

зображаючи гамільтоніан (24) в термінах $\gamma_{\mathbf{k},s}^+$, $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$ ($\sigma = 0; 1$) та $b_{\mathbf{q},\nu}$. При цьому $[\gamma_{\mathbf{k}_1,s}, \alpha_{\mathbf{k}_2,\sigma}]_+ = 0$, оскільки $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2$.

Розглянемо статистичну суму електрон-йонної моделі у великому канонічному ансамблі:

$$Z_1(\mu) = \text{Sp}\{\exp[-\beta(\hat{H}'' - \mu\hat{N}_k)]\}, \quad (39)$$

де $\hat{H}'' \equiv \hat{H}' - E_L^0$, де E_L^0 — енергія прямих взаємодій ґратки нерухомих йонів. З метою організації перенормованої теорії збурень уведемо допоміжний гамільтоніан невзаємодіючих квазічастинок,

$$\hat{h} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k},\sigma}^+\alpha_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (40)$$

з невідомим спектром $E_{\mathbf{k}}$, що буде знайдений пізніше.

Виділимо гамільтоніан базисної системи — моделі, яка складається з γ -підсистеми електронів, що взаємодіють між собою і з нерухомою ґраткою, вільних фононів, а також вільних квазічастинок,

$$\hat{H}_R = \hat{H}_e^\gamma + \hat{H}_{ph} + \hat{h}, \quad (41)$$

де використано такі позначення:

$$\hat{H}_e^\gamma \equiv \hat{H}_0^\gamma + \hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma} + \hat{V}_{ei}^{0\gamma} \quad (42)$$

— гамільтоніан парамагнетної підсистеми моделі металу, причому

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^\gamma &= \sum_{\mathbf{k},s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\gamma_{\mathbf{k},s}^+\gamma_{\mathbf{k},s}, \\ \hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^+ \gamma_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, s_2}^+ \gamma_{\mathbf{k}_2, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1, s_1}, \\ \hat{V}_{ei}^{0\gamma} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_s \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \gamma_{\mathbf{k}, s} \sum_c v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) S_{-\mathbf{q}}^c. \end{aligned} \quad (43)$$

Згідно з формулами (41)–(43),

$$\hat{H}'' - \mu\hat{N}_k = \hat{H}_R + \hat{V}_{ee}^{\beta\beta} + \hat{V}_{ei}^{0\beta} + \hat{V}_{ei}^{0\gamma\beta} + \hat{V}_{ee}^{\gamma\beta} + \hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma} + \hat{V}_{ep}^{\beta\beta} + \hat{V}_{ep}^{\gamma\beta} + \hat{H}_0^\beta - \hat{h} + \hat{\Delta}. \quad (44)$$

При цьому $\hat{H}_0^\beta = \sum_{\mathbf{k},s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\beta_{\mathbf{k},s}^+\beta_{\mathbf{k},s}$; $\hat{V}_{ee}^{\beta\beta}$ одержуємо з $\hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma}$, замінюючи всі оператор $\gamma_{\mathbf{k},s}$ на відповідні $\beta_{\mathbf{k},s}$; оператор $\hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}$ описує змішану взаємодію двох підсистем електронів між собою:

$$\hat{V}_{ee}^{\gamma\beta} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \beta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^+ \gamma_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, s_2}^+ \beta_{\mathbf{k}_2, s_2} \gamma_{\mathbf{k}_1, s_1} + \rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\gamma} \rho_{-\mathbf{q}}^{\beta\beta} + \frac{1}{2} [\rho_{\mathbf{q}}^{\beta\gamma} \rho_{-\mathbf{q}}^{\beta\gamma} + \rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\beta} \rho_{-\mathbf{q}}^{\gamma\beta}] + [\rho_{\mathbf{q}}^{\beta\beta} + \rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\gamma}] [\rho_{-\mathbf{q}}^{\beta\gamma} + \rho_{-\mathbf{q}}^{\gamma\beta}] \right\}; \quad (45)$$

$$\rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\gamma} \equiv \sum_{\mathbf{k}, s} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \gamma_{\mathbf{k}, s}, \quad \rho_{\mathbf{q}}^{\beta\beta} = \sum_{\mathbf{k}, s} \beta_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \beta_{\mathbf{k}, s}, \quad \rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\beta} = \sum_{\mathbf{k}, s} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \beta_{\mathbf{k}, s}.$$

Оператор $\hat{V}_{ei}^{0\beta}$ описує взаємодію надпровідної підсистеми електронів із ґраткою нерухомих йонів; $\hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}$ — взаємодію парамагнетної підсистеми електронів з фононами

$$\hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma} = -\frac{i}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s, \nu} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \gamma_{\mathbf{k}, s} D_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \{b_{\mathbf{q}, \nu} + b_{-\mathbf{q}, \nu}^+\}; \quad (46)$$

$\hat{V}_{ep}^{\beta\beta}$, який одержуємо з $\hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}$ заміною $\gamma_{\mathbf{k}, s}$ на $\beta_{\mathbf{k}, s}$, представляє аналогічну взаємодію надпровідної підсистеми з фононами, $\hat{V}_{ep}^{\gamma\beta}$ — змішану взаємодію електронів обох підсистем з фононною підсистемою,

$$\hat{V}_{ep}^{\gamma\beta} = -\frac{i}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s, \nu} D_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) (b_{\mathbf{q}, \nu} + b_{-\mathbf{q}, \nu}^+) [\gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ \beta_{\mathbf{k}, s} + \beta_{\mathbf{k} - \mathbf{q}, s}^+ \gamma_{\mathbf{k}, s}], \quad (47)$$

а $\hat{V}_{ei}^{0\gamma\beta}$ — аналогічну взаємодію з нерухомою ґраткою. У формулах (44)–(47) оператори $\beta_{\mathbf{k}, s}$ ми використовуємо лише як зручні позначення, насправді ж незалежними є оператори $\alpha_{\mathbf{k}, s}$, згідно із співвідношенням (38).

У статистичному операторі перейдімо до зображення взаємодії на базі модельного гамільтоніяна

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{h} + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_0^{\gamma}, \quad (48)$$

який описує дві підсистеми квазічастинок і модельну підсистему невзаємодіючих парамагнетних електронів. У зображенні взаємодії

$$\exp\{-\beta(\hat{H}'' - \mu\hat{N})\} = \exp\{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0\} \hat{S},$$

$$\hat{S} = P \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d\tau \left[\hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma}(\tau) + \hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\tau) + \hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\tau) + \hat{V}_{ei}^{0\gamma}(\tau) + \hat{V}_{ei}^{0\beta}(\tau) + \hat{V}_{ei}^{0\gamma\beta}(\tau) + \hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}(\tau) + \hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\tau) + \hat{V}_{ep}^{\gamma\beta}(\tau) + \hat{\Delta} + \hat{H}_0^{\beta}(\tau) - \hat{h}(\tau) \right] \right\}. \quad (49)$$

Тут P — символ хронологічного впорядкування. Перейдімо до частотного зображення операторів $\gamma_{\mathbf{k}, s}(\tau)$, $\alpha_{\mathbf{k}, s}(\tau)$ і $b_{\mathbf{q}, \nu}(\tau)$, узагальнюючи техніку праць [14, 15] і вводячи лінійні комбінації

$$d_{\mathbf{k}}(\eta^*) = \int_0^{\beta} \Psi_{\eta^*}^*(\tau) d_{\mathbf{k}}(\tau) d\tau \quad (50)$$

для фермі-операторів ($d_{\mathbf{k}} = \gamma_{\mathbf{k}, s}$ або $\alpha_{\mathbf{k}, \sigma}$), де

$$\Psi_{\eta^*}(\tau) = \beta^{-\frac{1}{2}} \exp(-i\eta^* \tau) \quad (51)$$

— власні функції оператора похідної за “часом” τ ($0 \leq \tau \leq \beta$) із частотами Фермі–Мацубари $\eta^* = (2n +$

1) $\pi\beta^{-1}$, ($n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$), а також відповідні комбінації фононних операторів

$$b_{x,\nu} \equiv b_{\mathbf{q},\nu}(\eta) = \int_0^\beta \Psi_\eta^*(\tau) b_{\mathbf{q},\nu}(\tau) d\tau, \quad (52)$$

побудовані на функціях (51) із частотами Бозе–Мацубари $\eta = 2\pi n\beta^{-1}$, ($n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$; $x = (\mathbf{q}, \eta)$).
У частотному зображенні S -матрицю запишемо в такій формі:

$$\hat{S} = P\{\hat{S}^{\gamma\gamma}(\eta)\hat{S}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)\hat{S}_p(\eta)\}, \quad (53)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{S}^{\gamma\gamma}(\eta) &= \exp\{-\hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma}(\eta) - \hat{V}_{ei}^{0\gamma}(\eta)\}, \\ \hat{S}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) &= \exp(-\hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)); \\ \hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) &= \hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta) + \hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) + \hat{H}_0^\beta(\eta) - \hat{h}(\eta) + \hat{V}_{ei}^{0\beta}(\eta) + \hat{V}_{ei}^{0\gamma\beta}(\eta); \\ \hat{S}_p(\eta) &= \exp(-\hat{\Phi}_p(\eta)); \quad \hat{\Phi}_p(\eta) = \hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}(\eta) + \hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\eta) + \hat{V}_{ep}^{\gamma\beta}(\eta) + \hat{\Delta}(\eta). \end{aligned} \quad (54)$$

Оператори, що тут фігурують, мають таке зображення:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma}(\eta) &= (2\beta V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, s_1, s_2} \sum_{\eta_1^*, \eta_2^*} \gamma_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^+(\eta_1^* - \eta) \gamma_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, s_2}^+(\eta_2^* + \eta) \gamma_{\mathbf{k}_2, s_2}(\eta_2^*) \gamma_{\mathbf{k}_1, s_1}(\eta_1^*); \\ \hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) &= (\beta V)^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \eta} V_{\mathbf{q}} \left\{ \rho_x^{\beta\beta} \rho_{-x}^{\gamma\gamma} + (\rho_x^{\beta\beta} + \rho_{-x}^{\gamma\gamma})(\rho_{-x}^{\beta\gamma} + \rho_{-x}^{\gamma\beta}) + \frac{1}{2}(\rho_x^{\beta\gamma} + \rho_x^{\gamma\beta})(\rho_{-x}^{\beta\gamma} + \rho_{-x}^{\gamma\beta}) \right\}; \\ \hat{V}_{ei}^{0\gamma}(\eta) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s, \eta^*} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\eta^*) \gamma_{\mathbf{k}, s}(\eta^*) \sum_c v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) S_{-\mathbf{q}}^c; \\ \hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}(\eta) &= -\frac{i}{V} \beta^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s, \nu} \sum_{\eta^*, \eta} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\eta^* + \eta) \gamma_{\mathbf{k}, s}(\eta^*) D_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \{b_{\mathbf{q}, \nu}(\eta) + b_{-\mathbf{q}, \nu}^*(-\eta)\}; \\ \hat{h}(\eta) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\eta^*} E_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}, \sigma}^+(\eta^*) \alpha_{\mathbf{k}, \sigma}(\eta^*); \\ \hat{H}_0^\beta(\eta) &= \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\eta^*} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \beta_{\mathbf{k}, s}^+(\eta^*) \beta_{\mathbf{k}, s}(\eta^*) \end{aligned} \quad (55)$$

і т. д. Оператор $\hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)$ набуває наведеного вище вигляду, оскільки в зображенні взаємодії оператор обміну можна виразити через оператори ρ_x^{ab} згідно з формулою:

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\eta_1^*, \eta_2^*} \beta_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s_1}^+(\eta_1^* - \eta) \gamma_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, s_2}^+(\eta_2^* + \eta) \beta_{\mathbf{k}_2, s_2}(\eta_2^*) \gamma_{\mathbf{k}_1, s_1}(\eta_1^*) = \frac{1}{2} (\rho_x^{\gamma\beta} \rho_{-x}^{\beta\gamma} + \rho_x^{\beta\gamma} \rho_{-x}^{\gamma\beta}).$$

$\hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta)$ формально одержуємо з $\hat{V}_{ee}^{\gamma\gamma}(\eta)$, а $\hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\eta) -$ з $\hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}$, замінюючи всі $\gamma_{\mathbf{k}, s}(\eta^*)$ на відповідні $\beta_{\mathbf{k}, s}(\eta^*)$;

$$\rho_x^{\gamma\gamma} \equiv \rho_{\mathbf{q}}^{\gamma\gamma}(\eta) = \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\eta^*} \gamma_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\eta^* + \eta) \gamma_{\mathbf{k}, s}(\eta^*),$$

$$\rho_x^{\gamma\beta} \equiv \rho_q^{\gamma\beta}(\eta) = \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\eta^*} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\eta^* + \eta) \beta_{\mathbf{k},s}(\eta^*); \quad (56)$$

$$\beta_{2s\mathbf{k},s}(\eta^*) = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k},\frac{1}{2}-s}(\eta^*) + 2sv_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k},\frac{1}{2}+s}^+(\eta^*).$$

$$\Omega_R(\mu) = \Omega_{\gamma\gamma}(\mu) + \Omega_{ph} + \Omega_h \quad (59)$$

— термодинамічний потенціал базисної системи, у якому

$$\Omega_h = -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \ln [1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}] \quad (60)$$

IV. ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ У БАЗИСНОМУ ПІДХОДІ

Моделю систему, що описується гамільтонієм \hat{H}_R , використаємо в ролі базисної при розрахунку $Z_1(\mu)$, зображаючи його як два співмножники:

$$Z_1(\mu) = Z_R(\mu) \left\langle \hat{S}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) \hat{S}_p(\eta) \right\rangle_R. \quad (57)$$

Тут

$$\begin{aligned} Z_R(\mu) &= \text{Sp}\{\exp[-\beta \hat{H}_R]\} \\ &= \text{Sp}\left\{\exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_0) P[\hat{S}^{\gamma\gamma}(\eta)]\right\} = \exp(-\beta \Omega_R(\mu)) \end{aligned} \quad (58)$$

— статистична сума базисної системи, а

— термодинамічний потенціал підсистеми квазічастинок, яка описується оператором \hat{h} ;

$$\Omega_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\nu} \hbar \omega_{\mathbf{k},\nu} + \beta^{-1} \sum_{\mathbf{k},\nu} \ln [1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\mathbf{k},\nu}}] \quad (61)$$

— термодинамічний потенціал підсистеми фононів; $\Omega_{\gamma\gamma}(\mu)$ — термодинамічний потенціал парамагнетної підсистеми електронів, що взаємодіють між собою. Так само, як інші характеристики цієї підсистеми, $\Omega_{\gamma\gamma}(\mu)$ можна розрахувати за допомогою методів, що використовуються в теорії нормальних металів.

Згідно з припущенням про те, що ділянка $\delta(\mathbf{k})$ займає невелику частину сфери Фермі, розраховуючи середнє

$$\left\langle S_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) S_p(\eta) \right\rangle_R = Z_R^{-1}(\mu) \text{Sp}\left\{e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0} P S^{\gamma\gamma}(\eta) S_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) S_p(\eta)\right\} = \exp(-\beta \Omega_{\gamma\beta}(\mu)), \quad (62)$$

використаймо теорію збурень, розкладаючи добуток $S_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) S_p(\eta)$ у степеневий ряд і засереднюючи почленно. Зображаючи результат цієї процедури в експонентній формі, знаходимо такий вираз для $\Omega_{\gamma\beta}(\mu)$:

$$\Omega_{\gamma\beta}(\mu) = -\beta^{-1} \sum_{t \geq 1} (-1)^t \frac{1}{t!} \left\langle [\hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) + \hat{\Phi}_p(\eta)]^t \right\rangle_R^{\text{ЗБ}}. \quad (63)$$

Тут використано кумулянтні (зв'язні) середні за станами базисної системи (41):

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{X} \right\rangle_R^{\text{ЗБ}} &= \left\langle P \hat{S}_\gamma \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}^{-1} \left\langle P \hat{S}_\gamma \hat{X} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}; \\ \left\langle \hat{X}^2 \right\rangle_R^{\text{ЗБ}} &= \left\langle P \hat{S}_\gamma \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}^{-1} \left\langle P \hat{S}_\gamma \hat{X}^2 \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} - [\left\langle \hat{X} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}^{\text{ЗБ}}]^2; \dots \end{aligned} \quad (64)$$

Середні, що фігурують у (63), визначаються кореляційними функціями базисної системи. Найпростіші з них побудовані на операторах електронної густини:

$$\begin{aligned} \mu_r^{\gamma \dots \gamma}(x_1, \dots, x_r | \mu) &= \beta^{-1} \left\langle \rho_{x_1}^{\gamma\gamma} \rho_{x_2}^{\gamma\gamma} \dots \rho_{x_r}^{\gamma\gamma} \right\rangle_R^{\text{ЗБ}}, \\ \mu_r^{\beta \dots \beta}(x_1, \dots, x_r | \mu) &= \beta^{-1} \left\langle \rho_{x_1}^{\beta\beta} \dots \rho_{x_r}^{\beta\beta} \right\rangle_R^{\text{ЗБ}} = \beta^{-1} \left\langle P \{ \rho_{x_1}^{\beta\beta} \dots \rho_{x_r}^{\beta\beta} \} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}^{\text{ЗБ}} \end{aligned} \quad (65)$$

при $r \geq 2$. Кореляційні функції γ -підсистеми $\mu_r^{\gamma \dots \gamma}(x_1, \dots, x_r | \mu)$ близькі до відповідних функцій моделі електронної рідини в парамагнетній фазі [16]. Функції β -підсистеми за своєю структурою подібні до відповідних функцій моделі незважених ферміонів [17]. В остаточному підсумку обчислення функцій (65) та інших виразів ґрунтується на середніх значеннях добутоків операторів $\gamma_{\mathbf{k},s}(\eta^*)$ або $\alpha_{\mathbf{k},s}(\eta^*)$:

$$\begin{aligned}
 -P \left\langle \left\{ \gamma_{\mathbf{k}_1, s_1}(\eta_1^*) \gamma_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\eta_2^*) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} &= G_{\mathbf{k}_1, s_1}^\gamma(\eta_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{\eta_1^*, \eta_2^*} \delta_{s_1, s_2}, \\
 -P \left\langle \left\{ \alpha_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}(\eta_1^*) \alpha_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^+(\eta_2^*) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} &= G_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\alpha(\eta_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{\eta_1^*, \eta_2^*} \delta_{\sigma_1, \sigma_2},
 \end{aligned}$$

де

$$G_{\mathbf{k}, s}^\gamma(\eta^*) = \{i\eta^* - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu\}^{-1} e^{i\eta^* \delta}, \quad G_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha(\eta^*) = \{i\eta^* - E_{\mathbf{k}}\}^{-1} e^{i\eta^* \delta} \quad (66)$$

спектральні зображення одночастинкових або квазіодночастинкових електронних функцій Гріна моделі з гамільтоніаном $\hat{\mathcal{H}}_0(\delta \rightarrow +0)$ [18]. Урахування обмінних ефектів між електронами різних підсистем вимагає складніших кореляційних функцій, побудованих на операторах $\rho_x^{\beta\gamma}$. Обчислення сум за частотами η^* при розрахунку функцій (65) виконуємо за правилами:

$$\begin{aligned}
 \beta^{-1} \sum_{\eta^*} G_{\mathbf{k}, s}^\gamma(\eta^*) &= n_{\mathbf{k}, s}^\gamma = \{\exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)] + 1\}^{-1}, \\
 \beta^{-1} \sum_{\eta^*} G_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha(\pm\eta^*) &= \left\{ \begin{array}{l} n_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha \\ n_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha - 1 \end{array} \right\}, \\
 n_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha &= \{\exp[\beta E_{\mathbf{k}}] + 1\}^{-1}.
 \end{aligned} \quad (67)$$

Наведемо тут двочастинкові кореляційні функції для γ - та β -підсистем:

$$\begin{aligned}
 \mu_2^{\gamma\gamma}(x, -x) &= \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x) \left\{ 1 + \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x) [1 - G_\gamma(x)] \right\}^{-1}; \\
 \mu_2^{\beta\beta}(x, -x) &= \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \eta^*} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(\eta^* + \eta) - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \eta^*} d_{\mathbf{k}}(\eta^*) d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\eta^* + \eta); \\
 g_{\mathbf{k}}^\pm(\eta^*) &= G_{\mathbf{k}}^\alpha(\eta^*) \pm G_{\mathbf{k}}^\alpha(-\eta^*); \\
 d_{\mathbf{k}}(\eta^*) &= u_{\mathbf{k}}^2 G_{\mathbf{k}}^\alpha(\eta^*) - v_{\mathbf{k}}^2 G_{\mathbf{k}}^\alpha(-\eta^*).
 \end{aligned} \quad (68)$$

Тут $\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x)$ — спектральне зображення двочастинкової кореляційної функції ідеальної γ -підсистеми (без взаємодії),

$$\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x) = -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}, s, \eta^*} G_{\mathbf{k}, s}^\gamma(\eta^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^\gamma(\eta^* + \eta) = -\lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_{\mathbf{k}, s} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - i\eta)^{-1} \{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^\gamma e^{-i\delta\eta} - n_{\mathbf{k}, s}^\gamma e^{i\delta\eta}\}, \quad (69)$$

а $G_\gamma(x)$ — динамічна поправка на локальне поле γ -підсистеми.

Урахування складових оператора $\hat{V}_{ep}(\eta)$ вимагає фононної функції Гріна, яку ми означимо так:

$$\begin{aligned}
 -P \left\langle \left\{ b_{\mathbf{q}_1, \nu_1}(\eta_1) b_{\mathbf{q}_2, \nu_2}^+(\eta_2) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} &= G_{ph}(\mathbf{q}_1, \nu_1 | \eta_1) \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \delta_{\eta_1, \eta_2} \delta_{\nu_1, \nu_2}, \\
 G_{ph}(\mathbf{q}, \nu | \eta) &= \{i\eta - \hbar\omega_{\mathbf{q}, \nu}\}^{-1} e^{i\eta\delta}.
 \end{aligned} \quad (70)$$

Термодинамічний потенціал моделі $\Omega(\mu)$ є функціоналом від $E_{\mathbf{k}}, \omega_{\mathbf{k}, \nu}, u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$. При врахуванні всіх діаграм теорії збурень $\Omega(\mu)$ був би інваріантним щодо вибору цих функцій:

$$\frac{\delta\Omega(\mu)}{\delta E_{\mathbf{k}}} = 0, \quad \frac{\delta\Omega(\mu)}{\delta\omega_{\mathbf{k}, \nu}} = 0, \quad \frac{\delta\Omega(\mu)}{\delta v_{\mathbf{k}}} = 0 \quad \text{при умові} \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (71)$$

Оскільки практично можна здійснити лише наближене врахування діаграм теорії збурень, то рівняння (71) є умовами екстремуму для термодинамічного потенціалу, які визначають $E_{\mathbf{k}}, \omega_{\mathbf{k}, \nu}, v_{\mathbf{k}}$.

Відзначимо дві важливі особливості теорії збурень за степенями операторів $\hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)$, $\hat{\Phi}_p(\eta)$. По-перше, зі зростанням порядку теорії збурень дуже зростає кількість різних діаграм, що зумовлено складною структурою згаданих операторів. По-друге, діаграми вищого порядку об'єднуються з діаграмами нижчого, внаслідок чого виникає екранування взаємодій і внески типу власної енергії для β -електронів. Зокрема екранування взаємодій β -електронів виникає при об'єднанні діаграми першого порядку від оператора $\hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta)$ та діаграми другого порядку від $\hat{V}_{ee}^{\beta\gamma}(\eta)$,

$$-\left\langle \hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta) \right\rangle_R + \frac{1}{2} \left\langle [\hat{V}_{ee}^{\beta\gamma}(\eta)]^2 \right\rangle_R^{\text{ЗВ}}.$$

При цьому в операторі $\hat{V}_{ee}^{\beta\gamma}(\eta)$ досить обмежитись головним членом

$$V^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \eta} V_{\mathbf{q}} \rho_x^{\beta\beta} \rho_{-x}^{\gamma\gamma}.$$

Аналогічно, беручи до уваги обмінні діаграми першого та другого порядків, слід враховувати

$$-\left\langle \hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) \right\rangle_{\text{обм}} + \frac{1}{2} \left\langle [\hat{V}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)]^2 \right\rangle_{\text{обм}}^{\text{ЗВ}}.$$

Екранування електрон-фононних взаємодій виникає при об'єднанні складових із діаграм другого, третього та четвертого порядків за схемою:

$$+\frac{1}{2} \left\langle \hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\eta) \hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\eta) \right\rangle_R^{\text{ЗВ}} - \frac{1}{2} \left\langle \hat{V}_{ep}^{\beta\beta}(\eta) \hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}(\eta) \hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta) \right\rangle_R^{\text{ЗВ}} + \frac{1}{4} \left\langle [\hat{V}_{ep}^{\gamma\gamma}(\eta) \hat{V}_{ee}^{\beta\beta}(\eta)]^2 \right\rangle_R^{\text{ЗВ}},$$

причому в діаграмах третього та четвертого порядків достатньо брати до уваги лише складові, що виражаються через парні кореляційні функції $\mu_2^{\gamma\gamma}(x)$, $\mu_2^{\beta\beta}(x)$, оскільки в цій статті ми обмежуємося врахуванням лише парних кореляцій.

Теорія збурень за степенями операторів $\hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)$, $\hat{\Phi}_p(\eta)$ застосовна, якщо ділянка $\delta(\mathbf{k})$ становить невелику частку сфери Фермі.

V. МЕХАНІЗМ ЕЛЕКТРОННИХ КОРЕЛЯЦІЙ

Розглянемо спочатку модель електронної рідини без урахування взаємодій електронів з фононами і нерухомою ґраткою, беручи до уваги лише оператор $\hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta)$. Його внески в $\Omega(\mu)$ у першому і другому порядку теорії збурень є такими:

$$\begin{aligned} \Omega_1^{\gamma\beta}(\mu) &= \beta^{-1} \left\langle \hat{\Phi}_{ee}^{\gamma\beta}(\eta) \right\rangle_R^{\text{ЗВ}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \{ (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) [v_{\mathbf{k}}^2 (1 - n_{\mathbf{k}}^\alpha) + u_{\mathbf{k}}^2 n_{\mathbf{k}}^\alpha] - E_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^\alpha \} \\ &\quad - \frac{1}{V\beta^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}; s} V_{\mathbf{q}} \sum_{\eta, \eta^*} G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, s}^\gamma (\eta^* - \eta) d_{\mathbf{k}}(\eta^*) \\ &\quad + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_2} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha) (1 - 2n_{\mathbf{k}_2}^\alpha) \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2} \{ v_{\mathbf{k}_1}^2 (1 - n_{\mathbf{k}_1}^\alpha) + u_{\mathbf{k}_1}^2 n_{\mathbf{k}_1}^\alpha \} \{ v_{\mathbf{k}_2}^2 (1 - n_{\mathbf{k}_2}^\alpha) + u_{\mathbf{k}_2}^2 n_{\mathbf{k}_2}^\alpha \}; \\ \Omega_2^{\gamma\beta}(\mu) &= -\frac{1}{2} \beta^{-1} \left\langle [\hat{V}_{ee}^{\beta\gamma}(\eta)]^2 \right\rangle_R^{\text{ЗВ}} = -\frac{1}{2\beta V^2} \sum_{\mathbf{q}, \eta} V_{\mathbf{q}}^2 \mu_2^{\gamma\gamma}(x, -x) \mu_2^{\beta\beta}(x, -x) + \dots \end{aligned} \quad (72)$$

Тут $n_{\mathbf{k}}^\alpha \equiv n_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha$, оскільки, згідно з вибором оператора \hat{h} , функція $n_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha$ від σ фактично не залежить.

Третя з умов (71) у явному вигляді зводиться до рівняння:

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^e = (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha), \quad (73)$$

де ядро $Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ має зміст екранованого потенціалу взаємодії, взятого з протилежним знаком:

$$Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = -V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \{1 - V^{-1} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} [1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha]^{-1} [1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha]^{-1} \beta^{-2} \sum_{\eta, \eta^*} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^* + \eta) \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | \eta)\}; \quad (74)$$

$$g_{\mathbf{k}}^\pm(\eta^*) \equiv G_{\mathbf{k}}^\alpha(\eta^*) \pm G_{\mathbf{k}}^\alpha(-\eta^*).$$

Оскільки

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{\eta^*} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) = 1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha,$$

ядро $Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ можна зобразити в еквівалентній формі, зручній для наступних обчислень:

$$Q_e(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -V_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha)^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}_2}^\alpha)^{-1} \beta^{-2} \sum_{\eta_1^*, \eta_2^*} g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta_1^*) g_{\mathbf{k}_2}^+(\eta_2^*) \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 | \eta_1^* + \eta_2^*) \right\}. \quad (75)$$

Використовуючи наближення локального поля для $\mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | \eta_1^* + \eta_2^*)$ (див. (68)), бачимо, що тут фігурує динамічно екранований потенціал, засереднений за частотами, через те, що множник

$$\mathcal{E}(\mathbf{q}, \eta) \equiv \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q} | \eta) \right\}^{-1} = \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q} | \eta) G(\mathbf{q} | \eta) \right\}^{-1} \left\{ 1 + \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q} | \eta) [1 - G(\mathbf{q} | \eta)] \right\} \quad (76)$$

є функцією діелектричної проникності. Розгляньмо ядро $Q_e(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ в ділянці $\delta(\mathbf{k})$, де $E_{\mathbf{k}_1}, E_{\mathbf{k}_2}$ є малими, для абсолютного нуля температури. Переходячи від сум за частотами до інтегралів та використовуючи наближення

$$\frac{E_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^2 + \eta^2} = \pi \delta(\eta - E_{\mathbf{k}}), \quad (77)$$

справедливе для $E_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, одержуємо

$$Q_e(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \Rightarrow Q_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2),$$

$$Q_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -V_{\mathbf{q}} \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) \tilde{G}(\mathbf{q}) \right\}^{-1} \left\{ 1 + \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) [1 - \tilde{G}(\mathbf{q})] \right\}, \quad (78)$$

де $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$, а функції $\tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}), \tilde{G}(\mathbf{q})$ враховують ефекти запізнення, а саме:

$$\tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) \equiv \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, \eta) |_{\eta=E_{\mathbf{k}_1}+E_{\mathbf{k}_2}},$$

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) \equiv G(\mathbf{q}, \eta) |_{\eta=E_{\mathbf{k}_1}+E_{\mathbf{k}_2}}. \quad (79)$$

Формально при $E_{\mathbf{k}_1} = E_{\mathbf{k}_2} = 0$ ядро $Q_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ збігається зі статично екранованим потенціалом, узятим зі знаком "мінус". В околі точки $E_{\mathbf{k}_1} = E_{\mathbf{k}_2} = \text{мін}$ знак ядра може бути додатним (при досить великих r_s), оскільки в цій ділянці доданок $\frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) \tilde{G}(\mathbf{q})$ приймає максимальне значення.

У наближенні другого порядку теорії збурень функція $\xi_{\mathbf{k}}$ має такий вигляд:

$$\xi_{\mathbf{k}}^e = \xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} + \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 | \eta^*) d_{\mathbf{k}_1}(\eta^*),$$

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) = V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \beta^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha)^{-1} \sum_{\eta} g_{\mathbf{k}}^+(\eta + \eta^*) \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|\eta) \right\},$$

$$\xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1, s} \sum_{\eta^*} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) G_{\mathbf{k}_1}^{\gamma}(\eta^*). \quad (80)$$

Перше з рівнянь (71), записане у явному вигляді, визначає спектр збуджень:

$$E_{\mathbf{k}} = 2 \frac{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}}{V\beta} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} \Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^*) + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \left\{ \xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} + \frac{1}{V\beta} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) d_{\mathbf{k}_1}(\eta^*) \right\},$$

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) = \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \left\{ \frac{dn_{\mathbf{k}}^\alpha}{dE_{\mathbf{k}}} \right\}^{-1} \frac{1}{\beta} \sum_{\eta} \gamma_{\mathbf{k}}(\eta + \eta^*) \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|\eta) \right\}; \quad (81)$$

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) = -V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \left\{ \frac{dn_{\mathbf{k}}^\alpha}{dE_{\mathbf{k}}} \right\}^{-1} \frac{1}{\beta} \sum_{\eta} [i\eta^* + i\eta + E_{\mathbf{k}}]^{-2} \left\{ 1 - \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{V} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|\eta) \right\},$$

$$\gamma_{\mathbf{k}}(\eta^*) = \frac{d}{dE_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) = 2 \frac{E_{\mathbf{k}}^2 - \eta^{*2}}{(E_{\mathbf{k}}^2 + \eta^{*2})^2}.$$

З формул (80), (81) видно, що $\xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma}$ і $E_{\mathbf{k}}$ також побудовані на динамічно екранованому потенціалі, засередненому за частотами.

Перейдімо від невідомих $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ до нових незалежних функцій $C_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}}$ за допомогою традиційної підстановки [13]

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^2 \\ v_{\mathbf{k}}^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{(\xi_{\mathbf{k}}^2 + C_{\mathbf{k}}^2)^{\frac{1}{2}}} \right\}. \quad (82)$$

Замість (73), (80), (81) одержуємо систему трьох інтегральних рівнянь:

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1} Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) C_{\mathbf{k}_1} (\xi_{\mathbf{k}_1}^2 + C_{\mathbf{k}_1}^2)^{-\frac{1}{2}} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha),$$

$$\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} + \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) \left\{ g_{\mathbf{k}_1}^-(\eta^*) + \frac{\xi_{\mathbf{k}_1}}{(\xi_{\mathbf{k}_1}^2 + C_{\mathbf{k}_1}^2)^{\frac{1}{2}}} g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^*) \right\},$$

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2V\beta} C_{\mathbf{k}} (C_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}})^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} C_{\mathbf{k}_1} (C_{\mathbf{k}_1}^2 + \xi_{\mathbf{k}_1})^{-\frac{1}{2}} \Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^*) \quad (83)$$

$$+ \xi_{\mathbf{k}} (C_{\mathbf{k}}^2 + \xi_{\mathbf{k}})^{-\frac{1}{2}} \left\{ \xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} + \frac{1}{2V\beta} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*) \left[g_{\mathbf{k}_1}^-(\eta^*) + \frac{\xi_{\mathbf{k}_1}}{(C_{\mathbf{k}_1}^2 + \xi_{\mathbf{k}_1}^2)^{\frac{1}{2}}} g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^*) \right] \right\}.$$

Рівняння (83) відрізняються від рівнянь праці [6] тим, що ядра $Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$, $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*)$, $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*)$ та $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\eta^*)$ записані точно, вони придатні для всіх значень хвильових векторів \mathbf{k}, \mathbf{k}_1 та температури.

Перейдімо до безрозмірної форми рівнянь (83), вводячи безрозмірні змінні $k^* = \frac{\mathbf{k}}{k_F}$, $k_1^* = \frac{\mathbf{k}_1}{k_F}$ та безрозмірні функції $C_k^* = \frac{C_{\mathbf{k}}}{\epsilon_F}$, $\xi_k^* = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\epsilon_F}$, $E_k^* = \frac{E_{\mathbf{k}}}{\epsilon_F}$, де $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$, $\hbar k_F$ — імпульс Фермі. Переходячи від суми за вектором \mathbf{k}_1 до інтеграла та використовуючи сферичну систему координат для векторів \mathbf{k}, \mathbf{k}_1 у припущенні сферично-симетричної ділянки $\delta(k)$, зведемо перше з рівнянь до такого вигляду:

$$C_k^* = \int_{\delta(k)} dk_1 k_1^2 (1 - 2n_{k_1}^\alpha) C_{k_1}^* \{C_{k_1}^{*2} + \xi_{k_1}^{*2}\}^{-\frac{1}{2}} Q^*(k, k_1). \quad (84)$$

Тут опущено знак (*) біля k та k_1 , а безрозмірне двовимірне ядро визначене співвідношенням

$$Q^*(k, k_1) = \frac{k_F^3}{8\pi\epsilon_F} \int_{-1}^{+1} Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) dt, \quad (85)$$

де t — косинус кута між векторами \mathbf{k} та \mathbf{k}_1 . Дослідимо ядро $Q^*(k, k_1)$ у наближенні (77)–(79), справедливому для малої ділянки $\delta(k)$, використовуючи замість $\tilde{G}(\mathbf{q})$ статичну поправку на локальне поле для парамагнетної фази моделі електронної рідини та парну кореляційну функцію базисної системи — ідеальної системи електронів:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(q) &= \frac{3N}{2\epsilon_F} I_2(q, u), \\ I_2(q, u) &= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2q} \left(1 - \frac{q^2}{4} - u^2 \right) \ln \frac{u^2 + (1 - \frac{q}{2})^2}{u^2 + (1 + \frac{q}{2})^2} + u \left[\arctg \frac{1 + \frac{q}{2}}{u} + \arctg \frac{1 - \frac{q}{2}}{u} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (86)$$

де $u \equiv (E_k + E_{k_1}) \{2\epsilon_F q\}^{-1}$, а $q = \frac{|\mathbf{q}|}{k_F}$. Таким чином, у наближенні (77) маємо такий вираз для ядра (85):

$$Q_0^*(k, k_1) = -\frac{r_s}{\pi\eta} \int_{-1}^{+1} dt \left\{ 1 - \frac{4r_s}{\pi\eta} I_2(q, u) G_q q^{-2} \right\} \left\{ q^2 + \frac{4r_s}{\pi\eta} I_2(q, u) [1 - G_q] \right\}^{-1}, \quad (87)$$

де $q = [k^2 + k_1^2 - 2kk_1 t]^{\frac{1}{2}}$, r_s — параметр неідеальності (параметр Вігнера–Бракнера), $\eta = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}}$. На

рис. 1 зображене ядро $Q_0^*(k, k_1)$ як функція k при фіксованих k_1 для декількох значень r_s . Слід зауважити, що $Q_0^*(k, k_1)$ дуже чутливе до вибору поправки на локальне поле G_q . Ми використали статичну версію поправки з праці [19]. У цьому наближенні в ділянці $r_s \geq 7$ ядро $Q_0^*(k, k_1)$ є знакозмінною функцією k, k_1 , яка приймає додатні значення лише за умови, що $|\mathbf{k}|$ і $|\mathbf{k}_1|$ близькі до k_F . В інших ділянках ядро є від'ємним, хоч ці ділянки не видаються нам цікавими — ділянку $\delta(k)$ слід вибирати самоузгоджено, так, щоб ядро там приймало додатні значення. З цією метою на рис. 2 зображено сім'ю кривих $Q_0^*(k, k_1) = 0$ для декількох значень параметра r_s . Криві визначають конфігурацію ділянок, у яких ядро має сталий знак: $Q_0^*(k, k_1) > 0$ всередині відповідної кривої, $Q_0^*(k, k_1) < 0$ — зовні неї. При використанні динамічної поправки на локальне поле роботи [20] ядро $Q_0^*(k, k_1)$ набуває додатних значень, якщо $r_s > 6$.

Додатний знак ядра $Q_0^*(k, k_1)$ в околі поверхні Фермі зумовлений урахуванням кореляційних ефектів (у наближенні хаотичних фаз ($G_q = 0$) ядро від'ємне при довільних r_s), а зміна знака викликана урахуванням “запізнення”, у зв'язку з чим в ділянці $Q_0^*(k, k_1) > 0$ функція $\tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(q)$ близька до статичної

функції $\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(q)$, а в ділянках $Q_0^*(k, k_1) < 0$ функція $\tilde{\mu}_{2,0}^{\gamma\gamma}(q)$ набагато менша за $\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(q)$.

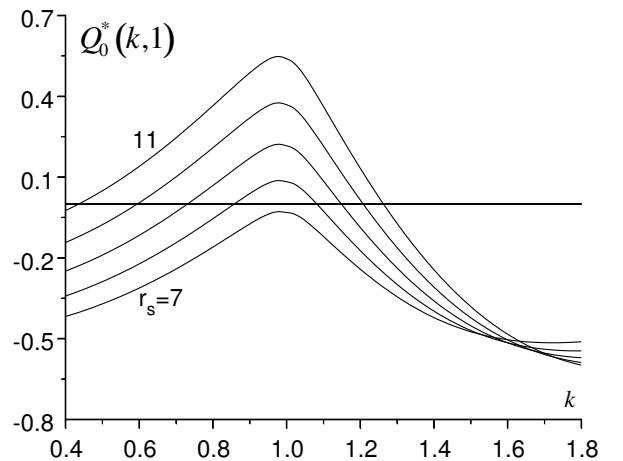


Рис. 1. Безрозмірне ядро $Q_0^*(k, 1)$, розраховане за формулою (87), для ділянки $7 \leq r_s \leq 11$.

Як відомо, врахування кореляційних ефектів дає змогу описати концентраційну залежність стисливос-

ти \varkappa_γ моделі електронної рідини в парамагнетній фазі на основі довгохвильової границі поляризаційного оператора,

$$\varkappa_\gamma = \lim_{\mathbf{q}, \eta \rightarrow 0} \left\{ \frac{V}{N^2} M_2^\gamma(\mathbf{q}, \eta) \right\}. \quad (88)$$

Оскільки в наближенні локального поля

$$M_2^\gamma(\mathbf{q}, \eta) = \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, \eta) \{1 - Z(\mathbf{q}, \eta)\}^{-1},$$

$$Z(\mathbf{q}, \eta) \equiv \frac{V\mathbf{q}}{V} \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, \eta) G_\gamma(\mathbf{q}, \eta), \quad (89)$$

то стисливість змінює знак за умови $Z(0, 0) = 1$, що досягається при $r_s^0 = 5, 25, \dots$. Функція $Z(\mathbf{q}, 0)$ є плавною функцією хвильового вектора, через те додатне значення ядра (87) можливе в тій ділянці, де стисливість від'ємна. Отже, додатність ядра $Q_0^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ (що допускає існування надпровідної фази) пов'язана з концентраційною нестійкістю моделі однорідної електронної рідини в парамагнетному стані. Стійкість фізичної системи, одна з підсистем якої описується гамільтоніаном $(\hat{H}_0 + \hat{V}_{ee})$, забезпечується іншими її підсистемами. Друге з рівнянь системи (83) може бути "лінеаризоване" шляхом використання наближення $[C_k^{*2} + \xi_k^{*2}]^{\frac{1}{2}} \rightarrow [C_k^{*2} + (\xi_k^{\gamma\gamma})^2]^{\frac{1}{2}}$, де $\xi_k^{\gamma\gamma}$ — відповідна функція для парамагнетної фази. В такому наближенні це рівняння зводиться до лінійного неоднорідного рівняння Фредгольма другого роду зі симетричним додатним ядром і має єдиний розв'язок [21, 22]. При відомих C_k та ξ_k третє з рівнянь (79) дає змогу визначити спектр збуджень системи E_k .

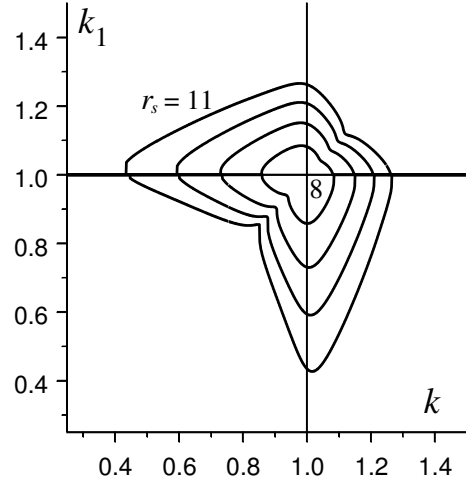


Рис. 2. Криві, що визначають конфігурацію ділянок сталого знака ядра $Q_0^*(k, k_1)$, в ділянці параметра неідеальності $8 \leq r_s \leq 11$.

VI. ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ЙОННИХ ТА ЕЛЕКТРОН-ФОНОННИХ ВЗАЄМОДІЙ

Розгляньмо тепер внески до термодинамічного потенціалу системи за рахунок нелокальних електрон-йонних та електрон-фонових взаємодій. Розкладаючи $S^{\gamma\gamma}$ -матрицю (див. ф. (54)) у ряд Тейлора, засереднюючи почленно та приводячи результат до експонентної форми, зобразимо внесок оператора взаємодії γ -електронів з йонами у вигляді розкладу за степенями матричного елемента

$$P(\mathbf{k} + \mathbf{q}|\mathbf{k}) \equiv \sum_c v_2^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) S_{-\mathbf{q}}^c, \quad (90)$$

а саме:

$$\Delta\Omega_{ei}^\gamma = \sum_{n \geq 1} \Delta\Omega_{ei}^\gamma(n),$$

$$\Delta\Omega_{ei}^\gamma(1) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, s} P(\mathbf{k}|\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}, s}^\gamma; \quad (91)$$

$$\Delta\Omega_{ei}^\gamma(2) = -\frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k} + \mathbf{q}|\mathbf{k}) P(\mathbf{k}|\mathbf{k} + \mathbf{q}) \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k});$$

$$\Delta\Omega_{ei}^\gamma(3) = \frac{1}{3!V^3} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} P(\mathbf{k}|\mathbf{k} - \mathbf{q}_2) P(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2|\mathbf{k} + \mathbf{q}_1) P(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1|\mathbf{k}) \mu_3^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1; 0, 0, 0|\mathbf{k}); \dots$$

Тут використано такі позначення: $n_{\mathbf{k}, s}^\gamma$ — середні значення чисел заповнення γ -електронів базисної системи, яка описується оператором \hat{H}_R ; $\mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k})$ — \mathbf{k} -компонента двочастинкової статичної кореляційної функції $\mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0)$, так що

$$\begin{aligned}\mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0) &= \sum_{\mathbf{k}} \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k}), \\ \mu_2^{\gamma\gamma}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k}) &= -\mathcal{E}^{-1}(\mathbf{q})\beta^{-1} \sum_{s;\eta^*} G_{\mathbf{k},s}^{\gamma}(\eta^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^{\gamma}(\eta^*); \quad (92)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mu_3^{\gamma\gamma\gamma}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3; 0, 0, 0|\mathbf{k}) &\text{— } \mathbf{k}\text{-компонента тричастинкової статичної кореляційної функції } \mu_3^{\gamma\gamma\gamma}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3; 0, 0, 0), \\ \mu_3^{\gamma\gamma\gamma}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3; 0, 0, 0|\mathbf{k}) &= 2\beta^{-1}\mathcal{E}^{-1}(\mathbf{q}_1)\mathcal{E}^{-1}(\mathbf{q}_2)\mathcal{E}^{-1}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \sum_{s;\eta^*} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,s}^{\gamma}(\eta^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,s}^{\gamma}(\eta^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3,s}^{\gamma}(\eta^*); \quad (93)\end{aligned}$$

$\mathcal{E}(\mathbf{q})$ — функція статичної діелектричної проникності.

Аналогічне зображення має внесок оператора взаємодії β -електронів з ґраткою йонів $\hat{V}_{ei}^{0\beta}$:

$$\begin{aligned}\Delta\Omega_{ei}^{\beta} &= \sum_{n \geq 1} \Delta\Omega_{ei}^{\beta}(n), \\ \Delta\Omega_{ei}^{\beta}(1) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k}|\mathbf{k}) \sum_{\sigma=0,1} \{v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2)n_{\mathbf{k},\sigma}^{\alpha}\}, \quad (94) \\ \Delta\Omega_{ei}^{\beta}(2) &= -\frac{1}{2V^2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} P(\mathbf{k} + \mathbf{q}|\mathbf{k}) P(\mathbf{k}|\mathbf{k} + \mathbf{q}) \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{q}) \mu_2^{\beta\beta}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k}),\end{aligned}$$

де $\mu_2^{\beta\beta}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k})$ — \mathbf{k} -компонента двочастинкової статичної кореляційної функції $\mu_2^{\beta\beta}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0)$ (див. ф.(68)). Внесок оператора змішаної взаємодії $\hat{V}_{ei}^{0\beta\gamma}$ у другому порядку теорії збурень одержуємо з $\Delta\Omega_{ei}^{\beta}(2)$, замінюючи $\mu_2^{\beta\beta}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0|\mathbf{k})$ \mathbf{k} -компонентою функції

$$\mu_2^{\beta\beta}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}; 0, 0) = \frac{1}{\beta} \left\langle \rho_{\mathbf{q},0}^{\beta\gamma} \rho_{-\mathbf{q},0}^{\gamma\beta} + \rho_{\mathbf{q},0}^{\gamma\beta} \rho_{-\mathbf{q},0}^{\beta\gamma} \right\rangle_R^{\text{ЗВ}}, \quad (95)$$

яка є статичною границею динамічної функції $\mu_2^{\beta\beta}(x, -x)$ (ф. (97)).

\mathbf{k} -компоненти динамічних кореляційних функцій визначають внески операторів нелокальних електрон-фононних взаємодій. У другому порядку теорії збурень отримуємо такий результат:

$$\begin{aligned}\Delta\Omega_{ep}(2) &= \frac{1}{2\beta V^2} \sum_{\mathbf{q};\nu;\eta} \mathcal{E}^{-2}(x) g_{ph}^+(\mathbf{q}, \nu|\eta) \sum_{\mathbf{k}} D_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) D_{\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \\ &\times \left\{ \mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x|\mathbf{k}) + \mu_2^{\beta\beta}(x, -x|\mathbf{k}) + \mu_2^{\gamma\beta}(x, -x|\mathbf{k}) \right\}, \quad (96)\end{aligned}$$

де $\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x|\mathbf{k})$ та $\mu_2^{\beta\beta}(x, -x|\mathbf{k})$ — \mathbf{k} -компоненти динамічних функцій $\mu_{2,0}^{\gamma\gamma}(x, -x)$ та $\mu_2^{\beta\beta}(x, -x)$ відповідно, а $\mu_2^{\gamma\beta}(x, -x|\mathbf{k})$ — \mathbf{k} -компонента змішаної функції

$$\mu_2^{\gamma\beta}(x, -x) = \frac{1}{\beta} \left\langle \rho_x^{\gamma\beta} \rho_{-x}^{\beta\gamma} + \rho_x^{\beta\gamma} \rho_{-x}^{\gamma\beta} \right\rangle_0^{\text{ЗВ}} = -\frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \eta^*} \left\{ G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\gamma}(\eta^* + \eta) + G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\gamma}(\eta^* - \eta) \right\} d_{\mathbf{k}}(\eta^*). \quad (97)$$

Тут використано також позначення

$$g_{ph}^+(\mathbf{q}, \nu|\eta) \equiv G_{ph}^+(\mathbf{q}, \nu|\eta) + G_{ph}^+(\mathbf{q}, \nu|-\eta) = -2\hbar\omega_{\mathbf{q},\nu} \{(\hbar\omega_{\mathbf{q},\nu})^2 + \eta^2\}^{-1}. \quad (98)$$

При записі формули (96) ураховано рівності

$$D_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) D_{\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = D_{\nu}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{k}) D_{\nu}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) = D_{\nu}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) D_{\nu}(-\mathbf{k} - \mathbf{q}, -\mathbf{k}), \quad (99)$$

що впливають із означення функції $D_\nu(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ та структури матричних елементів $v_2^e(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k})$ (див. ф.(30), (31)). Урахування взаємодій β -електронів з фононами приводить до такого додаткового внеску до ядра рівняння (73):

$$Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \{1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha\}^{-1} \{1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha\}^{-1} V^{-1} \beta^{-2} \sum_{\eta^*, \eta_1^*} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta_1^*) \quad (100)$$

$$\times \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | \eta^* + \eta_1^*) \sum_{\nu} D_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) D_\nu(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \frac{2\hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1, \nu}}{(\hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1, \nu})^2 + (\eta^* + \eta_1^*)^2},$$

де

$$\mathcal{E}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | \eta^* + \eta_1^*) = 1 - \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{V} \mu_2^{\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | \eta^* + \eta_1^*). \quad (101)$$

У наближенні (77) маємо

$$Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \Rightarrow \tilde{\mathcal{E}}^{-1} V^{-1} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \sum_{\nu} D_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) D_\nu(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \frac{2\hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1, \nu}}{(\hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1, \nu})^2 + (E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}_1})^2},$$

$$\tilde{\mathcal{E}}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \equiv 1 - \frac{V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}{V} \mu_2^{\gamma}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 | E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}_1}). \quad (102)$$

Урахування електрон-фононої взаємодії в наближенні (96) дає таку добавку до функції $\xi_{\mathbf{k}}^e$ рівняння (73):

$$\xi_{\mathbf{k}}^{ep} = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}_1, \eta^*} d_{\mathbf{k}_1}(\eta^*) \Gamma_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 | \eta^*),$$

$$\Gamma_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 | \eta^*) = (\beta V)^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha)^{-1} \sum_{\nu} D_\nu(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) D_\nu(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \sum_{\eta} g_{ph}^+(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k} | \eta) \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k} | \eta) g_{\mathbf{k}}^+(\eta + \eta^*). \quad (103)$$

Взаємодія β -електронів з нерухомою ґраткою приводить до такого внеску в рівняння (73):

$$Q_{ei}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = (\beta V)^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha)^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^\alpha)^{-1} P(\mathbf{k} | \mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1 | \mathbf{k}) \sum_{\nu} g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) g_{\mathbf{k}_1}^+(\eta^*),$$

$$\xi_{\mathbf{k}}^{ei} = V^{-1} P(\mathbf{k} | \mathbf{k}) - 2\beta^{-1} V^{-2} (1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha)^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1; \eta^*} \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) P(\mathbf{k} | \mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1 | \mathbf{k}) g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*) d_{\mathbf{k}_1}(\eta^*)$$

$$- (\beta V^2)^{-1} (1 - 2n_{\mathbf{k}}^\alpha)^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1; s} P(\mathbf{k}_1 | \mathbf{k}) P(\mathbf{k} | \mathbf{k}_1) \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \sum_{\eta^*} G_{\mathbf{k}_1, s}^{\gamma}(\eta^*) g_{\mathbf{k}}^+(\eta^*). \quad (104)$$

Отже, умова $\frac{\delta\Omega(\mu)}{\delta v_{\mathbf{k}}} = 0$ зводиться до рівняння (73), у якому тепер фігурують внески від міжелектронних кореляцій, взаємодії електронів з ґраткою та електрон-фононних взаємодій.

VII. ВИСНОВКИ

У цій статті побудовано загальну схему мікроскопічного опису надпровідної фази багатосортних металічних систем. У межах квантовомеханічного базисного підходу одержано гамільтоніан, що описує підсистему електронів провідності в полі нерухомої ґратки йонів і в полі фононів. Запропоновано двокомпонентний модельний опис електронів провідності, при якому підсистема частинок з імпульсами, далекими від поверхні Фермі ($\mathbf{k} \notin \delta(\mathbf{k})$), вважається парамагнетною і виконує роль середовища, яке разом із системою фононів та ґраткою йонів формує ефективні взаємодії для електронів “активної” підсистеми, імпульси яких близькі до поверхні Фермі ($\mathbf{k} \in \delta(\mathbf{k})$). Для опису надпровідної підсистеми використано опис за методом (u, v) -перетворення Бого-

любова. На основі самоузгодженого статистичного базисного підходу, що є перенормованою теорією збурень щодо електрон-фононої та електрон-йонної взаємодії, а також взаємодії між електронами двох згаданих вище підсистем, одержано систему інтегральних рівнянь, які визначають спектр збуджень та температуру переходу до надпровідного стану і дають змогу розрахувати вільну енергію системи в парамагнетній та надпровідній фазах. Теорія збурень застосовна, поки ділянка $\delta(\mathbf{k})$ є малою порівняно з об'ємом \mathbf{k} -простору, який охоплює поверхня Фермі. Ядро рівняння компенсації,

$$\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2V} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}_1} Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} (1 - 2n_{\mathbf{k}_1}^{\alpha}), \quad (105)$$

є сумою трьох складових

$$Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) + Q_{ei}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) + Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1), \quad (106)$$

породжених взаємодіями електронів „активної“ підсистеми з трьома підсистемами термостату: $Q_e(\dots)$ враховує екрановані міжелектронні взаємодії, а $Q_{ei}(\dots)$ — вплив ґратки, а $Q_{ep}(\dots)$ — фононів ($\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \in \delta(\mathbf{k})$). Функція $\xi_{\mathbf{k}}$ також складається з парціальних внесків, зумовлених взаємодіями „активної“ підсистеми з підсистемами термостату. При наближених розрахунках вона може бути зображена у вигляді:

$$\xi_{\mathbf{k}} \cong \xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \left\{ \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) + \sum_{\nu} D_{\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) D_{\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \mathcal{E}^{-2}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \right\} \{ u_{\mathbf{k}_1}^2 n_{\mathbf{k}_1}^{\alpha} + v_{\mathbf{k}_1}^2 (1 - n_{\mathbf{k}_1}^{\alpha}) \} + \dots, \quad (107)$$

де $\xi_{\mathbf{k}}^{\gamma\gamma} = E_{\mathbf{k}}^{\gamma} - \mu$, а $E_{\mathbf{k}}^{\gamma}$ визначається рівнянням

$$E_{\mathbf{k}}^{\gamma} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V} P(\mathbf{k}|\mathbf{k}_1) + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, s} n_{\mathbf{k}_1, s}^{\gamma} \mathcal{E}^{-1}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1} - \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}_1} P(\mathbf{k}|\mathbf{k}_1) P(\mathbf{k}_1|\mathbf{k}) [E_{\mathbf{k}_1}^{\gamma} - E_{\mathbf{k}}^{\gamma}]^{-1} + \dots \quad (108)$$

і є енергією електрона в ідеальній ґратці в парамагнетній фазі. При цьому $\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \equiv \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|0)$ є статично екранованим кулонівським потенціалом. У такому наближенні спектр ферміївських збуджень

$$E_{\mathbf{k}} \cong 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \xi_{\mathbf{k}} = \{ \xi_{\mathbf{k}}^2 + C_{\mathbf{k}}^2 \}^{\frac{1}{2}}, \quad (109)$$

як і функція щільності $C_{\mathbf{k}}$, має анізотропію, зумовлену структурою ґратки йонів. Рівняння (105), або, згідно з підстановкою (82), рівняння для $C_{\mathbf{k}}$, є суттєво нелінійним інтегральним рівнянням, оскільки ядро $Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ також залежить від спектра збуджень (109). Це рівняння належить до рівнянь власне гаммерштейнового типу [22], а умовою існування та єдиності його розв'язків є додатність симетричного ядра $Q(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$. Складова $Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$, зумовлена впливом фононів, має додатний знак і сприяє виникненню надпровідності. Складова $Q_{ei}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$, породжена взаємодією електронів з ґраткою нерухомих йонів, теж є додатною величиною. Складова $Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$, що відповідає за міжелектронні кореляції, в ділянці сильної неідеальності є знакозмінною функцією, яка приймає додатні значення в ділянці $\mathbf{k}, \mathbf{k}_1 \in \delta(\mathbf{k})$. Отже, у системах із сильно неідеальною підсистемою електронів провідності виникає додатко-

вий механізм надпровідності, доповнювальний до електрон-фононного. Рисунок 3 ілюструє характер ядра $Q^*(k, k_1) \equiv Q_e^*(k, k_1) + Q_{ep}^*(k, k_1)$, проінтегрованого за косинусом кута між векторами \mathbf{k}, \mathbf{k}_1 у наближенні однієї гілки поздовжніх дебаївських фононів, як функцію модулів векторів \mathbf{k} та \mathbf{k}_1 для $r_s = 6.2$. Рисунок відповідає односортному металу з валентністю йона $Z = 2$ та відношенню мас $\frac{m}{M} = 10^{-4}$, де M — маса йона. При розрахунку використано динамічну поправку на локальне поле [20], що спричиняє додатність внеску $Q_e^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ в ділянці $r_s > 6.0$ (див. розділ V). Світла (незаштрихована) частина поверхні відповідає додатним значенням ядра, темна (заштрихована) — від'ємним. На незаштрихованій частині поверхні виділяються дві ділянки: невелика центральна, яка формується двома механізмами, і набагато більша — периферійна, яка формується механізмом електронних кореляцій. Звідси випливає, що у випадку навіть не дуже високих значень r_s визначальну роль відіграє не електрон-фононний механізм, а механізм міжелектронних кореляцій.

Як видно з рисунків 1–3, величина $\delta(\mathbf{k})$ сильно залежить від значення параметра неідеальності r_s , а також від прийнятого наближення для поправки на локальне поле. З рисунка 3 бачимо, що електрон-фононна взаємодія не впливає на вибір ділянки $\delta(\mathbf{k})$

при $r_s > 6.0$. За ділянку $\delta(\mathbf{k})$ можна вибрати ту частину сфери Фермі, у якій повне ядро (106) приймає додатні значення. Конфігурацію ділянки $\delta(\mathbf{k})$ визначає рисунок 2. З іншого боку, $\delta(\mathbf{k})$ можна вибрати за допомогою варіаційного принципу, з умови мінімуму вільної енергії всієї системи, так що $\delta(\mathbf{k})$ може становити лише частину ділянки, яка обмежена відповідною кривою рисунка 2 при заданому r_s . Така варіаційна оцінка була зроблена в праці [6] для моделі сильно неідеальної електронної рідини. Ділянку $\delta(\mathbf{k})$ вибрано у вигляді сферичного шару ($k_F - \delta_1 \leq |\mathbf{k}| \leq k_F + \delta_2$). Показано, що енергія надпровідної фази моделі при $T = 0$ К має мінімум щодо параметра $\delta = \delta_1 + \delta_2$ в ділянці $r_s > 6.2$.

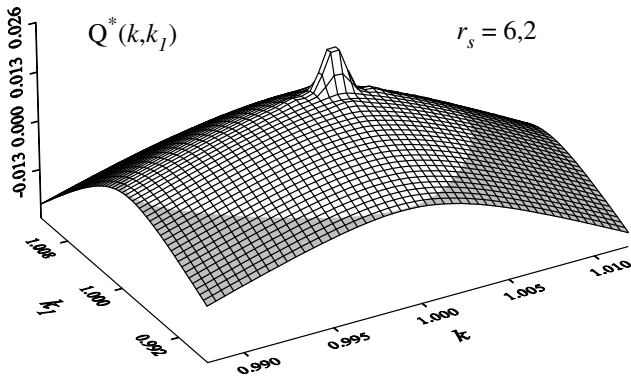


Рис. 3. Оцінка безрозмірного ядра рівняння (105) при врахуванні міжелектронних кореляцій за ф.(87) та модельного врахування електрон-фононої взаємодії.

На завершення зробимо оцінку впливу двох механізмів надпровідності на величину критичної температури T_c . Згідно з рисунком 3, виберемо ділянку для кожного механізму у вигляді сферичного шару і замінимо в рівнянні (105) складові $Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ та $Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ їх засередненими значеннями

$$\begin{aligned} \bar{Q}_e &= \frac{1}{2} \delta_e^{-2} \int_{a_{ee}}^{b_{ee}} dk \int_{a_{ee}}^{b_{ee}} dk_1 \int_{-1}^{+1} Q_e(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) dt, \\ \bar{Q}_{ep} &= \frac{1}{2} \delta_{ep}^{-2} \int_{a_{ep}}^{b_{ep}} dk \int_{a_{ep}}^{b_{ep}} dk_1 \int_{-1}^{+1} Q_{ep}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) dt, \end{aligned} \quad (110)$$

де $\delta_e \equiv \delta_e^{(1)} + \delta_e^{(2)}$, $a_e = k_F - \delta_e^{(1)}$, $b_e = k_F + \delta_e^{(2)}$, $\delta_{ep} \equiv \delta_{ep}^{(1)} + \delta_{ep}^{(2)}$, $a_{ep} = k_F - \delta_{ep}^{(1)}$, $b_{ep} = k_F + \delta_{ep}^{(2)}$. Переходячи до незалежних функцій $C_{\mathbf{k}}$, $\xi_{\mathbf{k}}$ в рівнянні (105), знайдемо T_c з умови $C_{\mathbf{k}} = 0$. Як показують чисельні розрахунки (див. [6]), при критичній температурі функція $C_{\mathbf{k}}$ прямує до нуля одночасно в усій ділянці хвильових векторів. Однак в області $\delta_{ep}(k)$ чи за її межами вона може приймати різні значення. Тому введемо параметр $\eta = \lim C_2/C_1$ при $C_1, C_2 \rightarrow 0$, де

$C_1 \equiv C_{\mathbf{k}}$ в ділянці $\delta_{ep}(k)$, а $C_2 \equiv C_{\mathbf{k}}$ за межами цієї ділянки. За фізичним змістом $\eta \sim \bar{Q}_e(\bar{Q}_e + \bar{Q}_{ep})^{-1}$. Рівняння для критичної температури набирає такого вигляду:

$$\begin{aligned} \eta \bar{Q}_e \int_{a_{ee}}^{b_{ee}} dk k^2 |\xi_k|^{-1} \text{th} \left(\frac{\beta_c}{2} |\xi_k| \right) \\ + [\bar{Q}_{ep} + (1 - \eta) \bar{Q}_e] \int_{a_{ep}}^{b_{ep}} dk k^2 |\xi_k|^{-1} \text{th} \left(\frac{\beta_c}{2} |\xi_k| \right) = 1, \end{aligned} \quad (111)$$

де $\beta_c = (k_B T_c)^{-1}$. Використаємо для ξ_k наближення вільних електронів ($\xi_k = \varepsilon_k - \varepsilon_F$), приймаючи, що середня енергія фонона $\hbar\bar{\omega}$ набагато більша за $k_B T_c$, як і в моделі БКШ [23]. У межах цих наближень одержуємо узагальнення відомої формули моделі БКШ:

$$\begin{aligned} k_B T_c &= C \exp(-\rho^{-1}) \varepsilon_F k_F^{-1} \left\{ \delta_e^{(1)} \delta_e^{(2)} \right\}^{\gamma_e} \left\{ \delta_{ep}^{(1)} \delta_{ep}^{(2)} \right\}^{\gamma_{ep}}, \\ \gamma_{ep} &= \frac{1}{2} \left(1 - \eta \frac{Q_e}{Q_e + Q_{ep}} \right), \quad \gamma_e = \frac{\eta}{2} \frac{Q_e}{Q_e + Q_{ep}}; \\ \rho &= (\bar{Q}_e + \bar{Q}_{ep}) k_F^3 \varepsilon_F^{-1}; \end{aligned} \quad (112)$$

$$C = \exp \left\{ -2 \int_0^{\infty} dx [e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}}]^{-2} \ln x \right\} = 1.13386 \dots$$

В ділянці параметра неідеальності, де $\bar{Q}_e \ll \bar{Q}_{ep}$, показник γ_e прямує до нуля. Ураховуючи, що $\delta_{ep}^{(1)} \approx \delta_{ep}^{(2)} \cong \hbar\bar{\omega}(\varepsilon_F)^{-1} k_F$, з формули (112) одержуємо традиційний вираз для критичної температури за наявності одного лише електрон-фононного механізму: $k_B T_c \equiv C \hbar\bar{\omega} \exp(-\rho_{ep}^{-1})$, де $\rho_{ep} = \bar{Q}_{ep} k_F^3 \varepsilon_F^{-1}$. В умовах, коли \bar{Q}_e значно переважає \bar{Q}_{ep} , маємо $k_B T_c \approx C \exp(-\rho_e^{-1}) \varepsilon_F (\delta_e^{(1)} \delta_e^{(2)})^{\frac{1}{2}} k_F^{-1}$, де $\rho_e = \bar{Q}_e k_F^3 \varepsilon_F^{-1}$, а $\delta_e^{(i)} k_F^{-1}$ має порядок 0.1, (як це видно з рисунка 2) і є набагато більшим за $\delta_{ep}^{(i)}$. У ділянці традиційних металічних надпровідників $\bar{Q}_e < 0$ і механізм електронних кореляцій приводить до зменшення T_c (у цьому випадку $\delta_e^{(i)} = \delta_{ep}^{(i)}$). Як видно з рисунка 2, в ділянці $r_s > 6.2$ параметр $\frac{\delta_e}{k_F}$ пропорційний до r_s^2 , параметри $\varepsilon_F \frac{\delta_e}{k_F^{-1}}$ та ρ_e пропорційні до різниці $(r_s - 6.2)$.

Отже, вплив міжелектронних кореляцій приводить до швидкого збільшення критичної температури зі зростанням неідеальності виродженої електронної підсистеми.

Відзначимо, що застосований у цій статті базисний підхід дає змогу виділити внесок міжелектронних кореляцій у ядро рівняння для щільності і водночас врахувати їх вплив на формування одноелектронного спек-

тра в нормальній фазі $E_{\mathbf{k}}^{\gamma}$, що важко виконати, використовуючи стандартне блохівське зображення, принаймні практично. Зауважимо також, що складова $Q_{ei}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ дає внесок лише тоді, коли вектор оберненої

ґратки кристала є меншим від $2k_F$. У протилежному разі вплив $Q_{ei}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ буде малим або ж цілком відсутнім. Це зумовлено наявністю структурних факторів $S_{\mathbf{q}}^c$ у множини $P(\mathbf{k}|\mathbf{k}_1)$ (див. (80)).

-
- [1] И. Р. Юхновский, М. В. Ваврух, Физ. низк. темп. **13**, 1225 (1987).
 [2] Я. Довгий, *Чарівне явище надпровідність* (Євросвіт, Львів, 2000).
 [3] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu, Nature **410**, 63 (2001).
 [4] P. Szabo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 137005-1 (2001).
 [5] H. J. Choi, D. Roundy, H. Sun, M. L. Cohen, S. G. Louie, Nature **418**, 758 (2002).
 [6] М. В. Ваврух, Н. М. Ваврух, Физ. низк. темп. **21**, 738 (1995).
 [7] Г. М. Еліашберг, Журн. експ. теор. фіз. **38**, 966 (1960).
 [8] Э. А. Пашицкий, *Физические проблемы высокотемпературной сверхпроводимости: Сб. науч. тр.* (Наук. думка, Київ, 1990).
 [9] М. В. Ваврух, П. Н. Якибчук, С. П. Коваль, Металлофиз. нов. технол. **22**, 5 (2000).
 [10] Н. Н. Боголюбов *Лекції з квантової статистики* (Рад. шк., Київ, 1949).
 [11] М. В. Ваврух, Я. М. Мулява, Журн. фіз. досл. **1**, 257 (1997).
 [12] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).
 [13] Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, *Новый метод в теории сверхпроводимости* (Изд-во АН СССР, Москва, 1958).
 [14] М. В. Ваврух, Укр. физ. журн. **36**, 150 (1991).
 [15] М. Vavruk, T. Krokhmal'skii, Phys. Status Solidi (b) **168**, 519 (1991).
 [16] М. В. Ваврух, Теор. мат. физ. **50**, 438 (1982).
 [17] М. В. Ваврух, Т. Е. Крохмальський, Укр. физ. журн. **32**, 621 (1987).
 [18] М. Ваврух, С. Слободян, Журн. фіз. досл. **7**, 275 (2003).
 [19] S. Ichimaru, K. Utsumi, Phys. Rev. B. **24**, 7385 (1981).
 [20] M. Vavruk, N. Vavruk, V. Solovyan, Phys. Status Solidi (b) **177**, 361 (1993).
 [21] М. Л. Краснов, А. Н. Киселев, Г. Н. Макаренко, *Интегральные уравнения* (Наука, Москва, 1976).
 [22] Ф. Трикоми, *Интегральные уравнения* (Изд-во иностр. лит., Москва, 1960).
 [23] J. Bardeen, L. Cooper, J. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).

MICROSCOPIC THEORY OF SUPERCONDUCTIVITY THE METALLIC SYSTEMS

M. V. Vavruk, S. B. Slobodyan
 Ivan Franko National University of Lviv, Department for Astrophysics,
 8 Kyrylo and Methodii St., Lviv, UA-79005, Ukraine

The reference system many-electron approach for describing superconducting phase models of the metallic systems is suggested. The degenerate subsystem electron is a part of these metallic systems. The electron correlation in the strong nonideal region involves a transition to the superconducting phase of the electron subsystems as well as the electron-phonon interaction. The conformity of the pending model diluted metal and the real superconducting systems is under discussion.