

## НОВИЙ ВАРІАНТ КОЛЕКТИВНОГО ОПИСУ МОДЕЛІ СИЛЬНО НЕІДЕАЛЬНОЇ ЕЛЕКТРОННОЇ РІДИНИ

М. В. Ваврух, Н. Л. Тишко

*Львівський національний університет імені Івана Франка,  
кафедра астрофізики  
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна  
(Отримано 5 квітня 2007 р.)*

Сформульовано перенормовану теорію збурень для опису сильно неідеальної електронної рідини при колективному підході. Далекосяжні взаємодії враховано в межах електрон-плазмонної моделі, а базисною системою є модель, що складається з вільних електронів і невзаємодіючих плазмонів, чим забезпечується відсутність розбіжних діаграм теорії збурень. Перехід від канонічної моделі електронної рідини до електрон-плазмонної моделі здійснено за допомогою операторів переходу. У межах розвинутого підходу досліджено енергетичні та структурні характеристики моделі електронної рідини в широкій ділянці параметра неідеальності ( $0 < r_s \leq 30.0$ ).

**Ключові слова:** статистична сума, колективні змінні, електрон-плазмонна модель, поправка на локальне поле,  $n$ -частинкові динамічні кореляційні функції, базисний підхід, кореляційна енергія, структурний фактор, бінарна функція розподілу.

PACS number(s): 05.30.Fk

### I. ВСТУП

Модель електронної рідини є однією з найстаріших фундаментальних моделей фізики твердого тіла, а її дослідження тривають уже близько 80 років. Уперше модель вироджених нерелятивістських електронів без взаємодії використав Зоммерфельд для пояснення провідності металів [1], а Фаулер — при спробі обґрунтування стійкості вироджених карликів (див. [2]). На базі моделі повністю виродженого ідеального релятивістського електронного газу в працях Чандрасекхара [3] побудовано теорію механічної рівноваги вироджених карликів, яка витримала випробовування часом. При спробах урахувати міжчастинкову взаємодію в моделі електронної рідини за допомогою теорії збурень постала проблема розбіжностей діаграм, що зумовлено далекосяжним характером потенціалу Кулона.

У межах теорії збурень роль взаємодії характеризує параметр неідеальності, який для моделі електронної рідини можна означити як відношення середнього значення енергії взаємодії двох електронів до середнього значення кінетичної енергії електрона, а саме:

$$\gamma = \frac{e^2}{r_0} \langle \varepsilon_k \rangle^{-1}, \quad (1)$$

де  $r_0 = (3V/4\pi N)^{1/3}$  — радіус сфери, що припадає на один електрон (масштаб середньої віддалі між частинками),  $e$  — заряд електрона,

$$\langle \varepsilon_k \rangle = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} \varepsilon_k, \quad (2)$$

$$\varepsilon_k = \{m^2 c^4 + \hbar^2 k^2 c^2\}^{1/2} - m c^2,$$

$n_{\mathbf{k}, s}$  — розподіл Фермі,  $\mathbf{k}$  — хвильовий вектор,  $s$  — спінова змінна. Згідно з означеннями (1), (2) знаходимо, що при повному виродженні в нерелятивістській границі

$$\gamma = \frac{10}{3\eta^2} r_s \approx 0.9 \dots r_s, \quad \eta = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}, \quad (3)$$

а в ультрарелятивістському випадку

$$\gamma = \frac{4}{3\eta} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{2}{3} \frac{e^2}{\hbar c}. \quad (4)$$

Тут  $r_s = r_0 a_0^{-1} = \eta(a_0 k_F)^{-1}$  — параметр Вігнера-Бракнера ( $a_0$  — радіус Бора,  $k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$  — хвильове число Фермі). Як бачимо, у стані повного виродження модель однорідної електронної рідини не може бути ідеальною — параметр неідеальності за порядком величини більший за сталу тонкої структури. У центральних ділянках вироджених карликів  $\gamma \sim 10^{-2}$ , а в земних умовах  $\gamma \approx r_s > 1.0$ . За величиною параметра неідеальності прийнято таку класифікацію станів моделі електронної рідини: слабо неідеальні системи ( $r_s < 1.0$ ), проміжна ділянка ( $1.0 < r_s < 5.5$ ), ділянка сильної неідеальності ( $r_s > 5.5$ ). Ділянці проміжної неідеальності відповідає стан підсистеми електронів провідності в металах.

У сорокових роках минулого століття в працях Вігнера, Карра та інших авторів [4–6] було встановлено, що при досить великих значеннях параметра  $r_s$  у моделі електронної рідини реалізується кристалічна структура (квантовий кристал Вігнера), однак критичне значення параметра  $r_s$ , при якому реалізується цей фазовий перехід, було заниженим приблизно на порядок.

Як відомо, підсистема колективізованих електронів відповідальна за характерні особливості металічного стану речовини. Однією з них є наявність колективних збуджень, що співіснують із збудженнями одночастинковими. Усвідомлення цього факту привело до концепції колективного опису моделі електронної рідини й моделей металів. На відміну від звичайної теорії збуджень у методах колективного опису відсутні розбіжні діаграми. Історично першим був сформульований метод колективних змінних Бома–Пайнса ([7–9], а також [10]). Щоб виділити далекосяжні кореляції, які мають колективний характер і в межах теорії збуджень приводять до розбіжностей, оператор міжелектронних взаємодій у цьому методі розділявся на два складники:

$$\hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_q \theta(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q}) \{ \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - N \} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_s(\mathbf{r}_{ij}). \quad (5)$$

Тут  $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{j=1}^N \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j)$  є зображенням Фур'є оператора густини частинок,  $\theta(z)$  — тета-функція,  $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$ , а потенціал

$$V_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} V_q \theta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \quad (6)$$

описує “залишкову” короткосяжну взаємодію. Для опису моделі використано розширений простір координат і колективних змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$ , а з метою збереження кількості ступенів вільності накладаються додаткові умови — в'язі, оскільки  $\{ \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots \}$  і  $\{ \dots, \mathbf{r}_j, \dots \}$  не є незалежними. При цьому далекосяжний складник (5) описується в термінах колективних змінних. Слабкий короткосяжний складник, що описується в межах звичайної теорії збуджень, не дає розбіжних діаграм. Метод наближений, для діаграм вищого порядку, як правило, виконано оцінки, а точні розрахунки відсутні. Урахування додаткових умов також виконано наближено. Ділянка застосування — слабо неідеальні системи й метали.

Розв'язання проблеми розбіжностей у звичайній теорії збуджень шляхом підсумовування безмежних рядів найбільш розбіжних діаграм запропоновано у праці [11] ще до створення методу Бома–Пайнса. Однак через допущену помилку автора ця ідея була фактично реалізована лише через сім років у роботі [12] шляхом підсумовування поляризаційних (кільцевих) діаграм. Метод відомий як наближення хаотичних фаз і застосовний для ділянки слабкої неідеальності. Різні шляхи виходу за межі наближення хаотичних фаз стали основним напрямком розвитку теорії моделі електронної рідини й пізніше привели до створення концепції локального поля як наближеного способу врахування багаточастинкових кореляцій у сучасній теорії металів.

У працях [13,14] запропоновано ще один метод колективного опису моделі електронної рідини — метод зміщень і колективних змінних. Ідея методу полягала у використанні розширеного простору індивідуальних

і колективних координат (без виділення далекосяжних чи короткосяжних складових у взаємодії), а перехід до розширеного простору здійснювався строго, за допомогою функції переходу. Первісне зображення гамільтоніана моделі — координатне. Як базисна система використовується модель електронів без взаємодії. Перетворення статистичного оператора у колективних змінних еквівалентні до деякого перенормування його, у результаті чого виникають слабкі ефективні нелокальні міжчастинкові взаємодії, які не дають розбіжних діаграм. Основні наближення пов'язані з необхідністю розв'язання безмежного ланцюжка інтегро-диференціальних рівнянь для коефіцієнтних функцій так званого оператора зміщень [13]. Досліджена ділянка — слабка і проміжна неідеальність.

У серії праць [15–19] розвинутий так званий базисний підхід у теорії електронної рідини, що ґрунтується на використанні динамічних колективних змінних для розрахунку середнього значення  $S$ -матриці у межах звичайної теорії збуджень. Апарат колективних змінних дозволяє формалізувати підсумовування рядів діаграм теорії збуджень за потенціалом Кулона, унаслідок чого характеристики моделі зображаються як розклади за ефективними (екранованими) потенціалами і  $n$ -частинковими динамічними кореляційними функціями. Цей підхід є не що інше, як перенормована теорія збуджень, сформульована в термінах  $n$ -частинкових кореляційних функцій базисної системи (а не в термінах одночастинкових характеристик, як у традиційній теорії збуджень). Використання три- й чотиричастинкових кореляційних функцій дає надійні результати в ділянці  $0 < r_s \leq 10.0$ . У ділянці більших  $r_s$  необхідне підсумовування рядів діаграм, що пов'язано із значними технічними труднощами.

Завдяки своїй строгості й формалізованості методи підсумовування діаграм звичайної теорії збуджень витіснили метод колективного опису Бома–Пайнса в сучасній теорії металів. Через що ж причину не набув значного поширення метод зміщень і колективних змінних. Однак методи колективного опису ґрунтуються на глибокій фізичній ідеї про те, що колективні збудження відіграють роль одного з основних факторів, а не поправки, яку можна враховувати методами теорії збуджень. Тому колективний опис може бути ефективним для опису сильно неідеальних систем, де методи звичайної теорії збуджень стають громіздкими й ненадійними.

У цій статті запропоновано сучасний варіант колективного опису моделі електронної рідини, ідейно близький до методу Бома–Пайнса. Однак перехід до розширеного простору здійснюємо строго за допомогою оператора переходу [20]. Колективні змінні  $\rho_{\mathbf{q}}$  відіграють допоміжну роль і застосовуються лише для переходу до операторів породження і знищення плазмонів. При розрахунку статистичної суми моделі як базисну систему (reference system) використано модель, що складається з підсистем вільних електронів та невзаємодіючих плазмонів. Це забезпечує відсутність розбіжних діаграм при розрахунку середнього значення  $S$ -матриці й добру збіжність теорії збуджень. Кореля-

ційні ефекти враховано за допомогою  $n$ -частинкових динамічних кореляційних функцій та поправки на локальне поле для моделі з короткосяжною взаємодією.

## II. ПЕРЕХІД ДО РОЗШИРЕНОГО ПРОСТОРУ

Як первісне зображення гамільтоніяна нерелятивістської моделі електронної рідини використаємо зображення вторинного квантування на базисі плоских хвиль:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \\ \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_k a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}, \quad \hat{V} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_q \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \\ \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1},\end{aligned}\quad (7)$$

$\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Як і в методі Бома–Пайнса, оператор енергії міжелектронних взаємодій розбиймо на два складники,

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \hat{V}_s + \hat{V}_l, \\ \hat{V}_s &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_s(q) \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}), \\ \hat{V}_l &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_l(q) (\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}); \quad \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+ a_{\mathbf{k},s},\end{aligned}\quad (8)$$

де  $V_s(q) + V_l(q) = V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$ . Щоб уникнути нефізичних розривів на характеристиках моделі при наближених розрахунках, використаємо розбиття потенціалу на два складники за допомогою плавних  $\theta$ -подібних функцій

$$V_l(q) = V_q y(q/q_0), \quad V_s(q) = V_q \{1 - y(q/q_0)\}. \quad (9)$$

Як приклад наведемо двопараметричну функцію

$$y(q/q_0) = 1 - \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \frac{q}{q_0} \right)^n, \quad (10)$$

Нехай хвильова функція моделі, яка залежить як від індивідуальних, так і від колективних змінних, у зображенні вторинного квантування є  $\Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}, \dots)$ . У розширеному просторі їй відповідає зображення  $\Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots)$ ,

$$\Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}, \dots) = \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots), \quad (12)$$

$(d\rho) \equiv \prod' d\rho_{\mathbf{q}}^c d\rho_{\mathbf{q}}^s$ . Розгляньмо дію статистичного оператора моделі на рівність (12):

$$\begin{aligned}\exp(-\beta \hat{H}) \Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}, \dots) &= \int (d\rho) (d\omega) \exp \left( -\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \right) \\ &\times \exp(-\beta \hat{H}_{\omega}) \exp \left( \pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \right) \Psi(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots).\end{aligned}\quad (13)$$

де  $q_0$  має той самий зміст, що й у методі Бома–Пайнса і може розглядатися як варіаційний параметр. Параметр  $n$  виберімо з довгохвильової асимптотики плазмонного спектра. У межі  $n \rightarrow \infty$  функція  $y(q/q_0)$  прямує до  $\theta(q_0 - q)$ . Зміну характеру функцій  $y(q/q_0)$  при зміні параметра  $n$  ілюструє рис. 1.

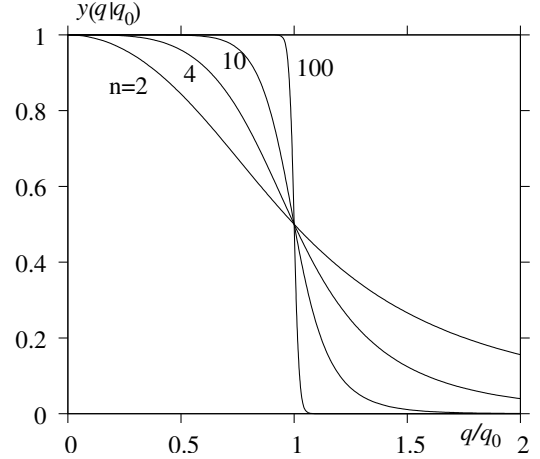


Рис. 1. Залежність функції  $y(q/q_0)$  від параметра  $n$ .

Як і в праці [21], перейдімо від канонічної форми (7) до зображення гамільтоніяна в розширеному просторі, тобто в термінах операторів  $a_{\mathbf{k},s}$  і колективних змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$ , за допомогою оператора переходу [20]

$$\begin{aligned}\hat{J}(\rho, \hat{\rho}) &= \prod'_{\mathbf{q}} \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \\ &= \int (d\omega) \exp \left\{ 2\pi i \sum'_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \right\},\end{aligned}\quad (11)$$

де  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}}^c - i\omega_{\mathbf{q}}^s$  — змінна, спряжена до  $\rho_{\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}}^c + i\rho_{\mathbf{q}}^s$ , а знак (') означає, що враховано лише половину можливих хвильових векторів  $\mathbf{q}$ , оскільки  $\rho_{\mathbf{q}}$  і  $\rho_{-\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}}^*$  не є незалежними.

При цьому

$$\begin{aligned} \hat{H}_\omega = \{ \exp(\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \} \hat{H} \exp(-\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) = \hat{H}_0 + \hat{V}_s + \hat{V}_l - \pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} [\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]_- \\ + \frac{(\pi i)^2}{2!} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \omega_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_2} [[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}]_-, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}]_-. \end{aligned} \quad (14)$$

Як бачимо, тут фігурують лише комутатори операторів  $\hat{H}_0$  і  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ , а через те зображення (14) і всі наступні зображення статистичної суми не залежать від способу розбиття (8). Комутатори, що фігурують у рівності (14), є такими:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]_- = \varepsilon_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} + \frac{\hbar^2}{m} \hat{f}_{\mathbf{q}}, \\ [[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}]_-, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}]_- = -2\hat{N} \varepsilon_{\mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0} + \frac{\hbar^2}{m} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}, \\ \hat{f}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k}, \mathbf{q}) a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}. \end{aligned} \quad (15)$$

Тотожність

$$\pi i \omega_{\mathbf{q}} \exp\left(\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}\right) = \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \exp\left(\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}\right) \quad (16)$$

дозволяє виконати інтегрування частинами за змінними  $\rho_{\mathbf{q}}$  і подати рівність (13) у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta \hat{H}) \Psi(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}, \dots) \\ = \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp\left\{-\beta \hat{H}_*(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots)\right\} \Psi(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots). \end{aligned} \quad (17)$$

Тут  $\hat{H}_*(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots)$  – зображення гамільтоніяна моделі в розширеному просторі:

$$\begin{aligned} \hat{H}_*(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots) = \hat{H}_0 + \hat{V}_s + \hat{V}_l + \sum_{\mathbf{q}} [\varepsilon_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} + \frac{\hbar^2}{m} \hat{f}_{\mathbf{q}}] \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \\ - \hat{N} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} + \frac{\hbar}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1} \partial \rho_{\mathbf{q}_2}}; \\ V_l = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_l(q) [\rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - \hat{N}]. \end{aligned} \quad (18)$$

Розгляньмо далі статистичну суму моделі у великому канонічному ансамблі

$$Z = \text{Sp} \exp\{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})\}. \quad (19)$$

Використовуючи зображення статистичного оператора в розширеному просторі, одержуємо таке зображення статистичної суми:

$$Z = \text{Sp} \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp\{-\beta[\hat{H}_*(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots) - \mu \hat{N}]\}. \quad (20)$$

Операція сліду належить, звичайно, до операторів вторинного квантування  $a_{\mathbf{k}, s}$ , при цьому  $a_{\mathbf{k}, s}$  та  $\rho_{\mathbf{q}}$  є формально незалежними, а оператор переходу регулює зв'язки між ними.

Для наступного переходу від змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$  до операторів породження і знищення плазмонів виконаймо циклічне перетворення статистичної суми, а саме:

$$\begin{aligned} Z = \text{Sp} \{ \exp[-\hat{\Phi}(\hat{\rho})] \exp[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})] \exp \hat{\Phi}(\hat{\rho}) \} = \text{Sp} \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp\{-\hat{\Phi}(\hat{\rho})\} \\ \times \exp\{-\beta[\hat{H}_*(\dots, a_{\mathbf{k}, s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots) - \mu \hat{N}]\} \exp\{\hat{\Phi}(\hat{\rho})\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Оператор  $\hat{\Phi}(\hat{\rho})$ , вибраний у вигляді

$$\hat{\Phi}(\hat{\rho}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}, \quad (22)$$

комує з операторами  $\hat{J}(\rho, \hat{\rho})$ ,  $\hat{N}$  та з оператором вза-

ємодії ( $\varphi(\mathbf{q})$  — невідома функція, що буде знайдена пізніше). Під знаком інтеграла за змінними  $\rho_{\mathbf{q}}$  за наявності оператора переходу можна замінити оператор  $\hat{\Phi}(\hat{\rho})$  його зображенням у колективних змінних  $\Phi(\rho) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}$ . Переставляючи  $\exp \Phi(\rho)$  наліво через оператор  $\exp\{-\beta[\hat{H}_*(\dots) - \mu\hat{N}]\}$ , отримуємо еквівалентне зображення статистичної суми:

$$Z = \text{Sp} \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp\{-\beta \hat{H}_{\Phi}(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots)\}; \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Phi}(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots) &= \hat{H}_s - \frac{\hat{N}}{2V} \sum_{\mathbf{q}} [V_l(q) + 2\varepsilon_q V \varphi(q)] + \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} [1 - 2\hat{N}\varphi(q)] \rho_{\mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{q}} \hat{f}_q \left[ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} + \varphi(q) \rho_{-\mathbf{q}} \right] - \hat{N} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \{V_l(q) + 2V\varphi(q)\varepsilon_{\mathbf{q}} [1 - \hat{N}\varphi(q)]\} \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1}} + \varphi(q_1) \rho_{-\mathbf{q}_1} \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_2}} + \varphi(q_2) \rho_{-\mathbf{q}_2} \right\}; \\ \hat{H}_s &= \hat{H}_0 + \hat{V}_s - \mu\hat{N}. \end{aligned} \quad (24)$$

Уведемо ще одну колективну змінну  $\rho_{\mathbf{q}=0} = \mathcal{N}$  за допомогою дельта-функції  $\delta(\mathcal{N} - \hat{N})$ . Тоді в гамільтоніані  $\hat{H}_{\Phi}(\dots, a_{\mathbf{k},s}, \dots | \dots, \rho_{\mathbf{q}}, \dots)$  можна замінити оператор  $\hat{N}$  на змінну  $\mathcal{N}$ . Визначаючи функцію  $\varphi(q)$  з умови

$$2\mathcal{N}\varphi(q) = 1, \quad (25)$$

приходимо до такого зображення статистичної суми:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp} \int (d\rho) d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_{\rho} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}]\}; \\ \hat{\mathcal{H}}_s &= \sum_{\mathbf{k},s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s} + \hat{V}_s; \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_k - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \left[ V_l(q) + \frac{V}{\mathcal{N}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \right]; \\ \hat{\mathcal{H}}_{\rho} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \left[ V_l(q) + \frac{V}{2\mathcal{N}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \right] \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - \mathcal{N} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1}} + \frac{\rho_{-\mathbf{q}_1}}{2\mathcal{N}} \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_2}} + \frac{\rho_{-\mathbf{q}_2}}{2\mathcal{N}} \right\}; \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{q}} \left( \frac{\rho_{-\mathbf{q}}}{2\mathcal{N}} + \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \right) \hat{f}_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (26)$$

Складники гамільтоніяна у формулі (26) мають чіткий фізичний зміст:  $\hat{\mathcal{H}}_s$  описує підсистему електронів з перенормованим (параболічним) одночастинковим спектром  $\epsilon_k$  і короткосяжною взаємодією,  $\hat{\mathcal{H}}_{\rho}$  — підсистему колективних збуджень (взаємодіючих осциляторів),  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$  — взаємодію двох підсистем.

### III. ПЕРЕХІД ДО ЕЛЕКТРОН-ПЛАЗМОННОЇ МОДЕЛІ

Перейдімо від змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$  до операторів вторинного квантування — операторів породження і знищення плазмонів згідно з такими співвідношеннями [22]:

$$b_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}} \tilde{\rho}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{-\mathbf{q}}} \right\}, \quad b_{-\mathbf{q}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}} \tilde{\rho}_{\mathbf{q}} - \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{-\mathbf{q}}} \right\}; \quad (27)$$

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{q}} \equiv \mathcal{N}^{-1/2} \rho_{\mathbf{q}}, \quad \alpha_{\mathbf{q}} = \left\{ \frac{\hbar \omega_{\mathbf{q}}}{2 \varepsilon_{\mathbf{q}}} \right\}^{1/2}, \quad \hbar \omega_{\mathbf{q}} = \left\{ 2 \frac{V_l(q)}{V} \mathcal{N} \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2 \right\}^{1/2}.$$

Уведені так оператори  $b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}^+$  підлягають статистиці Бозе. Формули оберненого переходу:

$$\tilde{\rho}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2} \alpha_{\mathbf{q}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+), \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{-\mathbf{q}}} = \frac{\alpha_{\mathbf{q}}}{\sqrt{2}} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+). \quad (28)$$

Щоб перехід від змінних  $\rho_{\mathbf{q}}$  до операторів  $b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}^+$  був строгим, уведемо оператор переходу

$$\hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) = \prod_{\mathbf{q}} \delta(\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} - \rho), \quad (29)$$

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} = \frac{\mathcal{N}^{1/2}}{\sqrt{2} \alpha_{\mathbf{q}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+),$$

а також скористайтесь тотожністю

$$\exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_{\rho} + \hat{H}_{\text{int}}]\} = \{\text{Sp}_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho)\}^{-1} \times \text{Sp}_b \{\hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_{\rho} + \hat{H}_{\text{int}})]\}, \quad (30)$$

де символ  $\text{Sp}_b$  означає операцію сліду за станами плазмонів. Під знаком інтеграла за змінними  $\rho_{\mathbf{q}}$  при

наявності оператора  $\hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho)$  перейдімо до операторів  $b_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}^+$  у складниках  $\hat{\mathcal{H}}_{\rho}$  та  $\hat{H}_{\text{int}}$  згідно з формулами (28). Після цього візьмімо інтеграл за змінними  $\rho_{\mathbf{q}}$ :

$$\int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) \{\text{Sp}_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho)\}^{-1} \quad (31)$$

$$= \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \hat{\rho}^{(a)}) \{\text{Sp}_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \hat{\rho}^{(a)})\}^{-1} \equiv \hat{J}_{a,b},$$

де  $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(a)} \equiv \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}$ . Використовуючи інтегральне зображення  $\delta$ -функції, розрахуємо величину

$$\text{Sp}_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \hat{\rho}^{(a)}) = \int (d\omega) \exp \left\{ -2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(a)} \right\} \quad (32)$$

$$\times \text{Sp}_b \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} \right\}.$$

Експоненту, що стоїть під знаком  $\text{Sp}_b$ , подамо у такому вигляді:

$$\exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} \right\} = \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( \frac{\mathcal{N}}{2} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \right\} = \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( \frac{\mathcal{N}}{2} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} [\omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + \omega_{-\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+] \right\}$$

$$= \exp \left\{ -\pi^2 \mathcal{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}}}{\alpha_{\mathbf{q}}^2} \right\} \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( \frac{\mathcal{N}}{2} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \omega_{-\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ \right\} \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left( \frac{\mathcal{N}}{2} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \right\}. \quad (33)$$

Остання рівність є частковим випадком формули Бейкера–Гаусдорфа (див. [23]). Тепер потрібний нам слід легко обчислити, а саме:

$$\text{Sp}_b \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} \right\} = \exp \left\{ -\pi^2 \mathcal{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}}}{\alpha_{\mathbf{q}}^2} [1 + 2n_{\mathbf{q}}] \right\}, \quad (34)$$

де  $n_{\mathbf{q}} = \{\exp(\beta \hbar \omega_{\mathbf{q}}) - 1\}^{-1}$  — розподіл плазмонів за енергіями. Інтегруючи за змінними  $\omega_{\mathbf{q}}$  у формулі (32), знаходимо шуканий вираз:

$$\text{Sp}_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \hat{\rho}^{(a)}) = \left\{ \prod_{\mathbf{q}}' [2\pi\mathcal{N}S_0(\mathbf{q})]^{-1} \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{q}}\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}}{S_0(\mathbf{q})} \right\}, \quad (35)$$

де

$$S_0(\mathbf{q}) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}} [1 + 2n_{\mathbf{q}}] \quad (36)$$

— “плазмонне наближення” структурного фактора моделі. У зв’язку з цим оператор  $\hat{J}_{a,b}$  набирає такого вигляду:

$$\hat{J}_{a,b} = \left\{ \prod_{\mathbf{q}}' [2\pi\mathcal{N}S_0(q)] \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{q}}\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}}{S_0(q)} \right\} \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \hat{\rho}). \quad (37)$$

Остаточно для статистичної суми одержуємо зображення:

$$Z = \text{Sp}_a \text{Sp}_b \int d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \hat{J}_{a,b} \exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep}]\}. \quad (38)$$

Вирази для операторів  $\hat{\mathcal{H}}_p$  та  $\hat{H}_{ep}$  отримуємо з  $\hat{\mathcal{H}}(\rho)$ ,  $\hat{H}_{\text{int}}$  унаслідок переходу від  $\rho_{\mathbf{q}}$ ,  $\frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}}$  до  $b_{\mathbf{q}}$ ,  $b_{\mathbf{q}}^+$ :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_p &= \hat{H}_p + \hat{H}_{pp}, & \hat{H}_p &= \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left( \frac{1}{2} + b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \right), \\ \hat{H}_{pp} &= \frac{\hbar^2}{16m\sqrt{2\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \alpha_{\mathbf{q}_1}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_2}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}^{-1} \hat{B}_{\mathbf{q}_1} \hat{B}_{\mathbf{q}_2} (b_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}^+ + b_{-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2}), \\ \hat{H}_{ep} &= \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{2\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} \hat{f}_{-\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{q}}; & \hat{B}_{\mathbf{q}} &= \left[ \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} + 1 \right] b_{\mathbf{q}} - \left[ \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right] b_{-\mathbf{q}}^+. \end{aligned} \quad (39)$$

Зображення (38) можна інтерпретувати як статистичну суму електрон-плазмонної моделі, при цьому  $\hat{H}_p$  є гамільтоніаном невзаємодіючих плазмонів із “первісним” спектром  $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$  (див. ф. (27)),  $\hat{H}_{pp}$  описує плазмонні ангармонізми, а  $\hat{H}_{ep}$  — електрон-плазмонну взаємодію. Оператор  $\hat{J}_{a,b}$  регулює співвідношення між операторами  $a_{\mathbf{k},s}$  та  $b_{\mathbf{q}}$ , він відображає додаткові умови або в’язі, що необхідні при такому підході. Одержаний вираз для статистичної суми є точним і не містить жодних наближень.

#### IV. БАЗИСНИЙ ПІДХІД У МЕЖАХ ЕЛЕКТРОН-ПЛАЗМОННОЇ МОДЕЛІ

Наступний розрахунок статистичної суми виконаймо в базисному підході, використовуючи як базисну систему модель, що складається з підсистеми невзаємодіючих плазмонів із гамільтоніаном  $\hat{H}_p$  і підсисте-

ми вільних електронів із перенормованим спектром із гамільтоніаном  $\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}$ , на відміну від методів звичайної теорії збурень, у яких базисною системою є модель невзаємодіючих електронів. Із цією метою перейдімо у статистичному операторі до зображення взаємодії:

$$\exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_s + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep}]\} = \exp\{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)\} T \hat{S}, \quad (40)$$

де  $T$  — символ хронологічного впорядкування, а  $\hat{S}$  — матриця визначається оператором “залишкових” короткосяжних взаємодій  $\hat{V}_s$ , оператором плазмонного ангармонізму  $\hat{H}_{pp}$  та оператором електрон-плазмонних нелокальних взаємодій  $\hat{H}_{ep}$ :

$$\hat{S} = \exp\left\{-\int_0^\beta [\hat{V}_s(\beta') + \hat{H}_{pp}(\beta') + \hat{H}_{ep}(\beta')] d\beta'\right\}. \quad (41)$$

Переставляючи статистичний оператор базисної системи наліво через оператор переходу  $\hat{J}_{a,b}$ , запишемо статистичну суму так:

$$Z = \text{Sp}_{a,b} \int d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \times \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)] T[\hat{J}_{a,b}(\beta)\hat{S}], \quad (42)$$

де

$$\begin{aligned} \hat{J}_{a,b}(\beta) &= \exp[\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)] \hat{J}_{a,b} \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)] \\ &= \left\{ \prod_{\mathbf{q}}' [2\pi\mathcal{N} S_0(\mathbf{q})] \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}}' \frac{\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta)\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}(\beta)}{S_0(q)} \right\} \\ &\times \int (d\omega) \exp \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q}}' \omega_{\mathbf{q}} [\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)}(\beta) - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta)] \right\}. \quad (43) \end{aligned}$$

Використовуючи інтегральне зображення дельта-функції  $\delta(\mathcal{N} - \hat{N})$ , зведемо вираз (42) до такої форми:

$$Z = \iint_{-\infty}^{+\infty} d\omega_0 d\mathcal{N} Z_0 \xi(\omega_0) R(\omega_0) \exp(2\pi i \omega_0 \mathcal{N}). \quad (44)$$

Тут використано такі позначення:

$$Z_0 = \text{Sp}_{a,b} \exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p]\} = \exp(-\beta\Omega_0) \quad (45)$$

— статистична сума базисної системи, а  $\Omega_0$  — її термодинамічний потенціал

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k},s} \ln \left[ 1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \right] \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[ 1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}; \quad (46) \end{aligned}$$

множник  $\xi(\omega_0)$  є середнім значенням оператора  $\exp(-2\pi i \hat{N})$  за станами базисної системи,

$$\xi(\omega_0) = \{\text{Sp}_a e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\}^{-1} \text{Sp}_a \{e^{-2\pi i \hat{N}} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\} \quad (47)$$

$$= \exp \left\{ -2\pi i \omega_0 N + \sum_{n \geq 2} \frac{1}{n!} \omega_0^n (-2\pi i)^n \langle \hat{N}^n \rangle_0^{\text{ЗВ}} \right\},$$

$$\langle \hat{N}^n \rangle_0^{\text{ЗВ}} = \beta^{1-n} \mu_n^0(0, \dots, 0) = \beta^{1-n} \frac{d^{n-1}}{d\mu^{n-1}} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}.$$

У стані, близькому до повного виродження, за допомогою методу Зоммерфельда одержуємо такі асимптотичні розклади:

$$\begin{aligned} \mu_n^0(0, \dots, 0) &= (-1)^n \frac{V}{\pi^2} \frac{\mu^{5/2-n}}{2^{n-1}} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (48) \\ &\times \left\{ R_n - \frac{\pi^2}{24} (\beta\mu)^{-2} (2n-3)!! + \dots \right\}, \end{aligned}$$

$R_2 = R_3 = 1$ ,  $R_n = -(2n-7)!!$  при  $n \geq 4$ . Як бачимо, при низьких температурах доданки, пропорційні  $\mu_n^0(0, \dots, 0)$ , даватимуть температурні поправки. Множник  $R(\omega_0)$  визначено так:

$$\begin{aligned} R(\omega_0) &= \left\{ \text{Sp}_{a,b} [e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)} e^{-2\pi i \omega_0 \hat{N}}] \right\}^{-1} \quad (49) \\ &\times \text{Sp}_{a,b} \left\{ e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)} e^{-2\pi i \omega_0 \hat{N}} T[\hat{J}_{a,b}(\beta)\hat{S}] \right\}. \end{aligned}$$

Використовуючи властивість циклічної перестановки добутку операторів під знаком  $\text{Sp}_{a,b}\{\dots\}$ , множник  $R(\omega_0)$  можна подати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} R(\omega_0) &= \left\{ \text{Sp}_{a,b} [e^{-\beta[(\hat{\mathcal{H}}_0(\omega_0) + \hat{H}_p)}]] \right\}^{-1} \quad (50) \\ &\times \text{Sp}_{a,b} \left\{ e^{-\beta[(\hat{\mathcal{H}}_0(\omega_0) + \hat{H}_p)]} T[\hat{J}_{a,b}(\beta|\omega_0)\hat{S}(\omega_0)] \right\}. \end{aligned}$$

Тут формально використано зображення взаємодії з оператором

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\omega_0) = \hat{\mathcal{H}}_0 + 2\pi i \omega_0 \hat{N}, \quad (51)$$

що еквівалентно заміні змінної хемічного потенціалу  $\mu$  на  $\mu(\omega_0) = \mu - 2\pi i \omega_0 \beta^{-1}$ . Відповідно  $\hat{J}_{a,b}(\beta|\omega_0)$  одержуємо з формули (43), замінюючи  $\mu \rightarrow \mu(\omega_0)$ . Таку саму заміну слід виконати і в  $\hat{S}$ -матриці (41).

Для зручності наступного розрахунку  $R(\omega_0)$  введемо лінійні комбінації операторів вторинного квантування для електронів і плазмонів у зображенні взаємодії, а саме [10]:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k},s}(\nu^*) &= \int_0^\beta a_{\mathbf{k},s}(\beta') \psi_{\nu^*}(\beta') d\beta', \quad (52) \\ b_{\mathbf{q}}(\nu) &= \int_0^\beta b_{\mathbf{q}}(\beta') \psi_{\nu}(\beta') d\beta', \end{aligned}$$

де  $\psi_{\mu}(\beta') = \beta^{-1/2} \exp(i\nu\beta')$  утворюють два базиси функцій змінної  $\beta'$  на інтервалі  $0 \leq \beta' \leq \beta$ , задовольняючи умови ортонормованості та повноти,

$$\begin{aligned} \int_0^\beta \psi_{\mu_1}^*(\beta') \psi_{\mu_2}(\beta') d\beta' &= \delta_{\mu_1, \mu_2}, \quad (53) \\ \sum_{\mu} \psi_{\mu}^*(\beta_1) \psi_{\mu}(\beta_2) &= \delta(\beta_1 - \beta_2). \end{aligned}$$

При цьому  $\mu = \nu = 2\pi n \beta^{-1}$  (частота Бозе-Мацубари), або ж  $\mu = \nu^* = \pi(2n+1)\beta^{-1}$  (частота Фермі-Мацубари),  $n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$ . У частотному зображенні, перехід до якого виконано за схемою роботи [15],  $S$ -матриця набирає такої експоненційної форми:



$$\begin{aligned}
 \hat{S}_\nu(\omega_0) &= \exp\{-\hat{V}_s(\nu) - \hat{H}_{pp}(\nu) - \hat{H}_{ep}(\nu)\}, \\
 \hat{V}_s(\nu) &= \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} V_s(q) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+(\nu_1^* + \nu) a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+(\nu_2^* - \nu) a_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2^*) a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*); \\
 \hat{H}_{pp}(\nu) &= \frac{\hbar^2}{16m\sqrt{2N}\beta} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sum_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 \neq 0} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \sum_{\nu_1, \nu_2} \alpha_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_1}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_2}^{-1} \hat{B}_{x_1} \hat{B}_{x_2} (b_{x_1 + x_2} + b_{-x_1 - x_2}^+), \\
 \hat{H}_{ep}(\nu) &= \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{2N}\beta} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} \hat{f}_{-\mathbf{q}, -\nu} \hat{B}_{\mathbf{q}, \nu}, \\
 \hat{f}_x &\equiv \hat{f}_{\mathbf{q}, \nu} = \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} (\mathbf{k}, \mathbf{q}) a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*); \\
 \hat{B}_x &\equiv \hat{B}_{\mathbf{q}, \nu} = \left( \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} + 1 \right) b_x - \left( \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right) b_{-x}^+; \quad b_x \equiv b_{\mathbf{q}}(\nu).
 \end{aligned} \tag{54}$$

Розрахунок середніх значень операторів у частотному зображенні ґрунтується на використанні функцій Гріна базисної системи

$$\begin{aligned}
 -\langle T \{ a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*) a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\nu_2^*) \} \rangle_0 &= G_{\mathbf{k}_1, s_1}^e(\nu_1^*) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{s_1, s_2} \delta_{\nu_1^*, \nu_2^*}; \\
 -\langle T \{ b_{x_1} b_{x_2}^+ \} \rangle_0 &= G_{\mathbf{q}_1}^p(\nu_1) \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \delta_{\nu_1, \nu_2}; \\
 G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) &= \{ i\nu^* - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu(\omega_0) \}^{-1}, \\
 G_{\mathbf{q}}^p(\nu) &= \{ i\nu - \hbar\omega_{\mathbf{q}} \}^{-1}.
 \end{aligned} \tag{55}$$

Для запису частотного зображення  $\hat{J}_{a,b}(\beta|\omega_0)$  скористаємось співвідношеннями

$$\begin{aligned}
 \hat{\rho}_{\mathbf{q}}(\beta) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \hat{\rho}_x, \\
 \hat{\rho}_x &= \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*), \\
 \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)}(\beta) &= \left( \frac{\mathcal{N}}{2\beta} \right)^{1/2} \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \sum_{\nu} \{ b_{\mathbf{q}}(\nu) + b_{-\mathbf{q}}^+(-\nu) \}.
 \end{aligned} \tag{56}$$

У цій праці ми розрахуємо характеристики моделі при абсолютному нулі температури. Як бачимо з формули (47), у цій межі  $\xi(\omega_0)$  прямує до  $\exp(-2\pi i\omega_0 N)$ ,  $R(\omega_0)$  можна замінити значенням  $R(0)$ , і розрахунок спрощується. У цьому наближенні інтеграл за змінною  $\omega_0$  дає  $\delta(\mathcal{N} - N)$ , а інтегрування за змінною  $\mathcal{N}$  приводить до заміни  $\mathcal{N} \rightarrow N$  у всіх виразах, залежних від  $\mathcal{N}$ .

Хоча метою роботи є опис сильно неідеальної моделі, ми розглянемо межу слабкої неідеальності як тест, що свідчить про загальний характер формалізму і придатність його до опису моделей з довільним значенням параметра неідеальності. Зауважимо, що в нашому підході розбіжні діаграми відсутні взагалі. Розглянемо наближення хаотичних фаз, нехтуючи оператором  $\hat{H}_{pp}(\nu)$ , коли

$$\begin{aligned}
 \hat{S}(\nu) &= \exp\{-\hat{V}_s(\nu) - \hat{H}_{ep}(\nu)\}, \\
 \hat{V}_s(\nu) &= \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}} v_s(q) \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} - \hat{N} \right\}, \\
 \hat{H}_{ep}(\nu) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_x r(q) \hat{f}_{-x} \hat{B}_x, \quad r(q) = \frac{\hbar^2}{2m\alpha_q \sqrt{2N}}, \\
 \hat{\rho}_x &\equiv \hat{\rho}_{\mathbf{q}, \nu} = \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k}, s}(\nu^*).
 \end{aligned} \tag{57}$$

Для розрахунку множника  $R(\omega_0 = 0)$  у формулі (50) обчислимо спочатку середнє значення добутку операторів  $\hat{J}_{a,b}(\beta|0) \exp(-\hat{H}_{ep}(\nu))$  за станами плазмонів:

$$\begin{aligned}
 &\left\langle \left\{ \hat{J}_{a,b}(\beta|0) \exp(-\hat{H}_{ep}(\nu)) \right\} \right\rangle_b \\
 &= \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta V} \sum_x c(x) V_l(q) \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \right. \\
 &\quad - \frac{1}{2N\beta^2} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_{\nu} S_0^{-1}(q) \hat{f}_x \hat{f}_{-x} (\varepsilon_q^2 + \nu^2) \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{-2} c^2(x) \\
 &\quad \left. + \frac{1}{N\beta^2} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_{\nu} S_0^{-1}(q) \hat{\rho}_{-x} \hat{f}_x (\varepsilon_q + i\nu) \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{-1} c(x) \right\}, \\
 c(x) &= \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^2 [\nu^2 + (\hbar\omega_q)^2]^{-1}.
 \end{aligned} \tag{58}$$

Перший доданок у показнику експоненти виникає з діаграми другого порядку для оператора  $\hat{H}_{ep}(\nu)$ , а другий і третій доданки — за рахунок зв'язних діаграм операторів  $\hat{J}_{a,b}(\beta|0)$  і  $\exp(-\hat{H}_{ep}(\nu))$ . Два останні доданки є малими порівняно з першим у ділянці низьких температур, оскільки мають “зайвий” степінь множника  $\beta^{-1}$ . Нехтування такими членами означає мультиплікативне наближення при розрахунку середнього (58). У цьому наближенні  $\langle T\hat{J}_{a,b}(0)\rangle_0 = 1$ , що відповідає незалежним електронам і плазмонам. Фізичне пояснення цього факту ґрунтується на тому, що в ділянці низьких температур плазмони “виморожені” (середні значення чисел заповнення плазмонів є експоненційно малими) і через це не можуть впливати на зміну кількості ступенів вільності підсистеми частинок.

Використовуючи це наближення, обчислимо середнє значення  $S$ -матриці у формі (57), узагальнюючи

метод динамічних колективних змінних [15]. Уведемо оператори переходу  $\hat{J}(\rho, \hat{\rho})$  та  $\hat{J}(f, \hat{f})$ , зображаючи  $S$ -матрицю як інтеграл за динамічними колективними змінними  $\rho_x$  та  $f_x$ :

$$\begin{aligned} \hat{S}(\nu) &= \int (d\rho)(df) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \hat{J}(f, \hat{f}) \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_s(q) \left[ \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \rho_x \rho_{-x} - \hat{N} \right] \right. \\ &\left. - \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_x r(q) f_{-x} \hat{B}_x \right\}. \end{aligned} \quad (59)$$

Тут  $\rho_x, f_x$  — колективні змінні ( $\rho_x = \rho_x^c + i\rho_x^s, f_x = f_x^c + if_x^s$ ), а оператори переходу визначені співвідношеннями

$$\begin{aligned} \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) &= \prod'_x \delta(\rho_x - \hat{\rho}_x) = \int (d\omega) \exp \left\{ 2\pi i \sum_x \omega_x (\rho_x - \hat{\rho}_x) \right\}, \\ \hat{J}(f, \hat{f}) &= \prod'_x \delta(f_x - \hat{f}_x) = \int (d\varphi) \exp \left\{ 2\pi i \sum_x \varphi_x (f_x - \hat{f}_x) \right\}, \end{aligned} \quad (60)$$

де  $\omega_x$  та  $\varphi_x$  є спряженими до  $\rho_x$  та  $f_x$  відповідно

$$\begin{aligned} \omega_x &= \omega_x^c - i\omega_x^s, \varphi_x = \varphi_x^c - i\varphi_x^s; \\ -\infty &< \omega_x^c, \omega_x^s, \varphi_x^c, \varphi_x^s < \infty; \\ -\infty &< \rho_x^c, \rho_x^s, f_x^c, f_x^s < \infty; \\ (d\omega) &= \prod'_x d\omega_x^c d\omega_x^s, \quad (d\varphi) = \prod'_x d\varphi_x^c d\varphi_x^s, \\ (d\rho) &= \prod'_x d\rho_x^c d\rho_x^s, \quad (df) = \prod'_x df_x^c df_x^s. \end{aligned} \quad (61)$$

Використовуючи основний множник формули (58), зведемо розрахунок середнього значення  $S$ -матриці

$$\begin{aligned} \langle T\hat{S}(\nu)\rangle_0 &= \int (d\rho)(df) \langle T[\hat{J}(\rho\hat{\rho})\hat{J}(f, \hat{f})]\rangle_0 \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta V} \sum_x c(x) V_l(q) f_x f_{-x} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_s(q) \left[ \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \rho_x \rho_{-x} - N \right] \right\} \end{aligned} \quad (62)$$

до обчислення середнього від добутку функцій переходу за станами частинок

$$\langle T\hat{J}(\rho, \hat{\rho})\hat{J}(f, \hat{f})\rangle_0 = \int (d\omega)(d\varphi) \exp \left\{ 2\pi i \sum_x [\omega_x \rho_x + \varphi_x f_x] \right\} \langle T \exp \left\{ -2\pi i \sum_x [\omega_x \hat{\rho}_x + \varphi_x \hat{f}_x] \right\} \rangle_0. \quad (63)$$

У наближенні хаотичних фаз

$$\begin{aligned} \left\langle T \exp \left\{ -2\pi i \sum_x [\omega_x \hat{\rho}_x + \varphi_x \hat{f}_x] \right\} \right\rangle_0^{RPA} &= \exp \left\{ -\frac{(2\pi)^2}{2!} \beta \sum_x [\omega_x \omega_{-x} \mu_2^0(x, -x) \right. \\ &\left. + \varphi_x \varphi_{-x} \eta_2^0(x, -x) + \omega_x \varphi_{-x} \zeta_2^0(x, -x) + \varphi_x \omega_{-x} \xi_2^0(x, -x)] \right\}. \end{aligned} \quad (64)$$

Тут уведено динамічні кореляційні функції

$$\begin{aligned}
 \mu_2^0(x, -x) &= \frac{1}{\beta} \langle T \{ \hat{\rho}_x \hat{\rho}_{-x} \} \rangle_0 = \frac{3N}{2\varepsilon_F} I_{2,0}(q, u), \\
 2I_{2,0}(q, u) &= 1 + (2q)^{-1} \left[ 1 - \frac{q^2}{4} + u^2 \right] \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma \ln \left[ u^2 + \left( 1 + \frac{\sigma}{2} \right)^2 \right] - u \sum_{\sigma=\pm 1} \arctg \left[ u^{-1} \left( 1 + q \frac{\sigma}{2} \right) \right]; \\
 q &\equiv |\mathbf{q}| k_F^{-1}, \quad u = \nu (2\varepsilon_F q)^{-1}; \\
 \eta_2^0(x, -x) &= \frac{1}{\beta} \langle T [\hat{f}_x \hat{f}_{-x}] \rangle_0 = \left( \frac{m}{\hbar^2} \right)^2 \{ (\nu^2 + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2) \mu_2^0(x, -x) - 2N\varepsilon_{\mathbf{q}} \}; \\
 \zeta_2^0(x, -x) &= \frac{1}{\beta} \langle T [\hat{\rho}_x \hat{f}_{-x}] \rangle_0 = -\frac{m}{\hbar^2} (\varepsilon_{\mathbf{q}} + i\nu) \mu_2^0(x, -x), \\
 \xi_2^0(x, -x) &= \frac{1}{\beta} \langle T [\hat{\rho}_{-x} \hat{f}_x] \rangle_0 = -\frac{m}{\hbar^2} (\varepsilon_{\mathbf{q}} - i\nu) \mu_2^0(x, -x).
 \end{aligned} \tag{65}$$

Інтегруючи за змінними  $\rho_x, f_x$ , а потім за змінними  $\omega_x, \varphi_x$ , одержуємо такий результат:

$$\begin{aligned}
 \langle T \hat{S}(\nu) \rangle_0^{\text{RPA}} &= \exp(-\beta \Omega_{\text{RPA}}), \\
 \Omega_{\text{RPA}} &= \frac{1}{2\beta} \sum_x \ln \Delta(x) - \frac{N}{2V} \sum_q V_s(q); \\
 \Delta(x) &= \left( 1 + \frac{V_s(q)}{V} \mu_2^0(x, -x) \right) \left( 1 + \frac{V_l(q)}{V} c(x) \eta_2^0(x, -x) \right) - \frac{V_s(q) V_l(q)}{V^2} c(x) \zeta_2^0(x, -x) \xi_2^0(x, -x).
 \end{aligned} \tag{66}$$

Підставляючи явні вирази для кореляційних функцій  $\zeta_2^0(x, -x)$  і  $\xi_2^0(x, -x)$  та спрощуючи вираз під знаком логарифма, а також враховуючи, що  $V_s(q) + V_l(q) = V_q$ , зведімо (66) до такої еквівалентної форми:

$$\begin{aligned}
 \Omega_{\text{RPA}} &= \frac{1}{2\beta} \sum_x \ln \left( 1 + \frac{V_q}{V} \mu_2^0(x, -x) \right) \\
 &+ \frac{1}{2\beta} \sum_x \ln \left( \frac{\nu^2 + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2}{\nu^2 + (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \right) - \frac{N}{V} \sum_q V_s(q).
 \end{aligned} \tag{67}$$

Перейдімо від термодинамічного потенціалу до середньої енергії моделі для абсолютного нуля температури. Врахуємо, що для цієї межі можна перейти від підсумовування за частотою до інтегрування, а тому

$$\frac{1}{2\beta} \sum_x \ln \left( \frac{\nu^2 + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2}{\nu^2 + (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \right) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (\hbar\omega_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}}). \tag{68}$$

Беручи до уваги, що

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \mu_2^0(x, -x) = \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}), \tag{69}$$

та виділяючи внесок Гартрі–Фока

$$E_{\text{HF}} = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}, \tag{70}$$

представмо енергію основного стану моделі електронної рідини в канонічній формі:

$$E = E_{\text{id}} + E_{\text{HF}} + E_{\text{corr}}. \tag{71}$$

Як впливає з виразів (68)–(71), у наближенні хаотичних фаз

$$E_{\text{corr}}^{\text{RPA}} = \frac{1}{2\beta} \sum_x \left\{ \ln \left[ 1 + \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_2^0(x, -x) \right] - \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mu_2^0(x, -x) \right\}, \tag{72}$$

що збігається з результатом традиційної теорії збурень. Отже, ми встановили, що підсумовування безмежних рядів *нерозбіжних* діаграм збігається із сумою ряду *найбільш розбіжних* діаграм (поляризаційних) звичайної теорії збурень. Це свідчить про те, що зображення статистичної суми в термінах електронів

і плазмонів, яке ми одержали, є правильним у межі слабо неідеальної системи.

Відмінність нашого підходу від канонічної теорії збурень полягає у виборі іншого нульового наближення (система вільних електронів і плазмонів). Через те після засереднення за станами плазмонів ми одержали ефективну  $S$ -матрицю зі слабкими двоелектронними взаємодіями

$$\langle T\hat{S}(\nu) \rangle_{0,b} = \exp\{-\hat{V}_s(\nu) - \hat{V}_l(\nu)\}, \quad (73)$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_s(\nu) &= \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q},\nu} V_s(q) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, s_1}^+(\nu_1^* + \nu) \\ &\quad \times a_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, s_2}^+(\nu_2^* - \nu) a_{\mathbf{k}_2, s_2}(\nu_2^*) a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*), \\ \hat{V}_l(\nu) &= \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q},\nu} \tilde{V}_l(x) \hat{f}_x \hat{f}_{-x}; \quad \tilde{V}_l(x) = V_l(q) c(x), \end{aligned}$$

яка не може породити розбіжних діаграм.

## V. НАБЛИЖЕННЯ ХАОТИЧНИХ ФАЗ ЗА ПЛАЗМОНАМИ

У цьому розділі ми вийдемо за межі наближення хаотичних фаз щодо електронних змінних, розраховуючи середнє значення  $\hat{S}$ -матриці у формі (73). Оскільки оператор  $\hat{V}_l(\nu)$  описує слабку двоелектронну взаємодію, то використаємо теорію збурень за степенями цього оператора. При цьому оператор  $\hat{V}_s(\nu)$  врахуємо так, як у звичайному базисному підході. Тоді з точністю до квадрата оператора  $\hat{V}_l(\nu)$  маємо такий розклад внеску до термодинамічного потенціалу:

$$-\frac{1}{\beta} \ln \langle T\hat{S}_\nu \rangle_{a,b} = \Omega_s + \Omega_1 + \Omega_2 + \dots, \quad (74)$$

де

$$\Omega_s = \Omega_{HF}^s + \Omega_{corr}^s \quad (75)$$

— парціальний внесок оператора  $\hat{V}_s(\nu)$ . Тут

$$\Omega_{HF}^s = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} V_s(q) \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s} \quad (76)$$

— внесок Гартрі–Фока від оператора  $\hat{V}_s(\nu)$ ; а  $\Omega_{corr}^s$  — кореляційний внесок оператора  $\hat{V}_s(\nu)$  у наближенні локального поля:

$$\Omega_{corr}^s = \frac{1}{2\beta V} \int_0^1 d\lambda \sum_x V_s(q) \{ \mu_2^s(x, -x|\lambda) - \mu_2^0(x, -x) \}. \quad (77)$$

При цьому

$$\begin{aligned} \mu_2^s(x, -x|\lambda) &= \mu_2^0(x, -x) \\ &\quad \left\{ 1 + \lambda \frac{V_q}{V} \mu_2^0(x, -x) [1 - y(q|q_0) - G_s(x|\lambda)] \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (78)$$

— парна двочастинкова кореляційна функція моделі системи з короткосяжним потенціалом двочастинкових взаємодій  $\lambda V_s(q)$ , а  $G_s(x|\lambda)$  — динамічна поправка на локальне поле цієї моделі.

$\Omega_1$  і  $\Omega_2$  — внески оператора  $\hat{V}_l(\nu)$  у першому і другому порядках теорії збурень, а також змішані внески від операторів  $\hat{V}_l(\nu)$  та  $\hat{V}_s(\nu)$ :

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \frac{1}{2\beta V} \sum_x \tilde{V}_l(x) \eta_2^0(x, -x) - \frac{1}{2\beta V^2} \sum_x V_s(q) \tilde{V}_l(x) \zeta_2^0(x, -x) \xi_2^0(x, -x) \left\{ 1 - \frac{V_s(q)}{V} \mu_2^s(x, -x) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{4\beta^2 V^2} \sum_{x_1, x_2} V_s(q_1) \tilde{V}_l(x_2) \xi_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) \left\{ 1 - \frac{V_s(q_1)}{V} \mu_2^s(x_1, -x_1) \right\} + \dots; \\ \Omega_2 &= -\frac{1}{4\beta V^2} \sum_x \{ \tilde{V}_l(x) \eta_2^0(x, -x) \}^2 - \frac{1}{8\beta^2 V^2} \sum_{x_1, x_2} \tilde{V}_l(x_1) \tilde{V}_l(x_2) \eta_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) + \dots \end{aligned} \quad (79)$$

У цих формулах  $\mu_2^s(x, -x) \equiv \mu_2^s(x, -x|1)$ , а множник

$$1 - \frac{V_s(q)}{V} \mu_2^s(x, -x) \quad (80)$$

є не що інше, як обернена функція діелектричної проникності модельної системи з потенціалом  $V_s(q)$ . У формулах (79) уведено кореляційні функції базисної системи четвертого порядку:

$$\begin{aligned}\eta_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) &= \frac{1}{\beta} \langle T \{ \hat{f}_{x_1} \hat{f}_{-x_1} \hat{f}_{x_2} \hat{f}_{-x_2} \} \rangle_0^{3B}; \\ \xi_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) &= \frac{1}{\beta} \langle T \{ \hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{-x_1} \hat{f}_{x_2} \hat{f}_{-x_2} \} \rangle_0^{3B}.\end{aligned}\quad (81)$$

Ці функції розраховано в роботі [24,25] шляхом зведення їх до  $\mu_3^0(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\beta} \langle T \{ \hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \hat{\rho}_{x_3} \} \rangle_0^{3B}$ ,  $\mu_4^0(x_1, -x_1, x_2, x_2) = \frac{1}{\beta} \langle T \{ \hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{-x_1} \hat{\rho}_{x_2} \hat{\rho}_{-x_2} \} \rangle_0^{3B}$  та функцій нижчого порядку, споріднених із  $\mu_2^0(x, -x)$  та  $\eta_2^0(x, -x)$ .

Ураховуючи внесок  $\Omega_0$ , у прийнятому наближенні одержимо такий вираз для кореляційної енергії моделі електронної рідини:

$$\begin{aligned}E_{\text{corr}} &= E_{\text{corr}}^s + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \{ \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} - V^{-1} V_l(q) \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}) \} + \frac{1}{2\beta V} \sum_x \tilde{V}_l(x) \eta_2^0(x, -x) \\ &- \frac{1}{4\beta V^2} \sum_x \{ \tilde{V}_l(x) \eta_2^0(x, -x) \}^2 - \frac{1}{2\beta V^2} \sum_x V_s(q) V_l(q) \frac{\nu^2 + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2}{\nu^2 + (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \{ \mu_2^0(x, -x) \}^2 \left\{ 1 - \frac{V_s(q)}{V} \mu_2^s(x, -x) \right\} \\ &- \frac{1}{4\beta V^2} \sum_{x_1, x_2} V_s(q_1) \left\{ 1 - \frac{V_s(q_1)}{V} \mu_2^s(x_1, -x_1) \right\} \tilde{V}_l(x_2) \xi_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) \\ &- \frac{1}{8\beta V^2} \sum_{x_1, x_2} \tilde{V}_l(x_1) \tilde{V}_l(x_2) \eta_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) + \dots\end{aligned}\quad (82)$$

Доданок  $E_{\text{corr}}^s$  є внеском до кореляційної енергії лише за рахунок короткосяжних взаємодій, а все решта породжене далекосяжними взаємодіями.

## VI. СТРУКТУРНИЙ ФАКТОР, БІНАРНА ФУНКЦІЯ РОЗПОДІЛУ І ПОПРАВКА НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

Як відомо, бінарна функція розподілу  $F_2(\mathbf{r})$  є чутливою до наближень, що використовують у розрахунках, а тому вона відіграє роль тесту для нових теоретичних підходів. Для розрахунку ми використаємо добре відоме співвідношення між бінарною функцією розподілу та структурним фактором  $S(q)$ :

$$F_2(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{N-1} \sum_{\mathbf{q}} [S(q) - 1] e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \quad (83)$$

Величина  $S(q) - 1$  є середнім значенням оператора  $\hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q})$  за станами системи й може бути зображена у вигляді варіаційної похідної термодинамічного потенціалу за фур'є-зображенням кулонівського потенціалу:

$$\begin{aligned}S(q) - 1 &= N^{-1} \langle \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \rangle_H \\ &= N^{-1} Z^{-1} \text{Sp} \{ \hat{I}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})] \} \\ &= -\frac{V}{N\beta} \frac{\delta}{\delta V_q} \ln Z = \frac{V}{N} \frac{\delta}{\delta V_q} \Omega.\end{aligned}\quad (84)$$

Згідно із прийнятим розбиттям потенціалу на два складники,  $\{S(q) - 1\}$  теж зобразимо як два доданки

$$\begin{aligned}S(q) - 1 &= \frac{V}{N} \left\{ y(q|q_0) \frac{\delta\Omega}{\delta V_l(q)} + [1 - y(q|q_0)] \frac{\delta\Omega}{\delta V_s(q)} \right\} \\ &\equiv \{S(q) - 1\}_s + \{S(q) - 1\}_l.\end{aligned}\quad (85)$$

Практичний розрахунок структурного фактора й бінарної функції розподілу вимагає конкретного вибору функції  $y(q|q_0)$ , тобто параметрів  $n$  та  $q_0$ , а також попереднього розрахунку поправки на локальне поле моделі з короткосяжною взаємодією  $V_s(q)$ . Параметр  $n$  доцільно вибрати таким, щоб перенормований (реальний) спектр плазмонів у ділянці малих хвильових векторів можна описати виразом  $\{\omega_0^2 + \frac{3}{5}q^2 v_F^2\}^{1/2}$ . Щоб коефіцієнт біля  $q^2$  був правильним, слід вибрати  $n \geq 4$ . Граничне хвильове число  $q_0$  повинно залежати від параметра неідеальності. У роботах Д. Пайнса, які стосувались слабо неідеального електронного газу, використано співвідношення

$$q_0 = k_F 0.47 r_s^{1/2}. \quad (86)$$

Ми встановили, що при виборі  $q_0$  у вигляді

$$\begin{aligned} q_0 &= k_F r_s^{1/2} [a + b r_s^{1/2}]^{-1}, \\ a &= 2.0; \quad b = 0.6 \end{aligned} \quad (87)$$

одержуємо добрі результати для кореляційної енергії, бінарної функції розподілу та структурного фактора як у ділянці слабкої, так і сильної неідеальности. Із загальних фізичних міркувань зрозуміло, що  $q_0$  не

може бути більшим за  $2k_F$ , адже в ділянці великих хвильових векторів плазмові коливання згасають. А тому вибір  $q_0$  у формі (87) є цілком прийнятним.

Оскільки потенціал  $V_s(q)$  є короткосяжним, має зміст розрахувати поправку на локальне поле  $G_s(x)$  у наближенні Гелдарта–Тейлора, тобто з точністю до базисної кореляційної функції  $\mu_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ . У цьому наближенні

$$\begin{aligned} G_s(x) &= V_q^{-1} [\mu_2^0(x, -x)]^{-2} \text{Re} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s V_s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) [n_{\mathbf{k}_1, s} - n_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, s}] [n_{\mathbf{k}_2, s} - n_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s}] \{i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}}\}^{-1} \\ &\times \{[i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}]^{-1} - [i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}}]^{-1}\}. \end{aligned} \quad (88)$$

Використовуючи циліндричні системи координат для векторів  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ , уводячи безрозмірні змінні  $q, u$  та проінтегрувавши за кутом  $\varphi_2$ , приведемо  $G_s(x)$  до різниці двох безрозмірних 5-вимірних інтегралів,

$$G_s(x) = R_1(q, u) - R_2(q, u). \quad (89)$$

При цьому

$$\begin{aligned} R_1(q, u) &= \frac{1}{2\pi} \{2I_{2,0}(q, u)\}^{-2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} dz_1 \int_{-1}^{+1} dz_2 \int_0^{\sqrt{1-z_1^2}} d\rho_1 \rho_1 \int_0^{\sqrt{1-z_2^2}} d\rho_2 \rho_2 f_{q,u}^{(1)}(z_1, z_2) w_1^{-2} \text{arctg}\left(\frac{w_1}{q_0^*}\right)^n; \\ w_1 &\equiv \{(z_1 - z_2)^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos \varphi\}^{1/2}; \\ f_{q,u}^{(1)}(z_1, z_2) &= \text{Re} \left\{ \left( iu + z_1 - \frac{q}{2} \right)^{-1} \left[ \left( iu + z_2 - \frac{q}{2} \right)^{-1} - \left( iu + z_1 - \frac{q}{2} \right)^{-1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (90)$$

Інтеграл  $R_2(q, u)$  визначений такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} R_2(q, u) &= \frac{1}{2\pi} \{2I_{2,0}(q, u)\}^{-2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} dz_1 \int_{-1}^{+1} dz_2 \int_0^{\sqrt{1-z_1^2}} d\rho_1 \rho_1 \int_0^{\sqrt{1-z_2^2}} d\rho_2 \rho_2 f_{q,u}^{(2)}(z_1, z_2) w_2^{-2} \text{arctg}\left(\frac{w_2}{q_0^*}\right)^n; \\ w_2 &= \{(z_1 - z_2 - q)^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos \varphi\}^{1/2}; \\ f_{q,u}^{(2)}(z_1, z_2) &= \text{Re} \left\{ \left( iu + z_1 - \frac{q}{2} \right)^{-1} \left[ \left( iu + z_2 + \frac{q}{2} \right)^{-1} - \left( iu + z_1 - \frac{q}{2} \right)^{-1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (91)$$

При цьому  $q_0^* \equiv k_F^{-1} q_0$ . Розрахунок поправки на локальне поле за формулами (90)–(91) можливий лише за допомогою чисельного інтегрування. Проте асимптотику поправки при великих хвильових векторах, що якраз і важливо в нашому варіанті, знайти легко. Із формули (88) при  $q \gg k_F$  одержуємо:

$$\begin{aligned} G_s(q, u) &\Rightarrow 4V_q^{-1} \{\varepsilon_{\mathbf{q}} \mu_2^0(x, -x)\}^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s n_{\mathbf{k}_1, s} n_{\mathbf{k}_2, s} V_s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \\ &+ 2V_q^{-1} \{\mu_2^0(x, -x)\}^{-2} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \varepsilon_{\mathbf{q}}^{-4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s n_{\mathbf{k}_1, s} n_{\mathbf{k}_2, s} V_s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) (\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (92)$$

Оскільки  $|\mathbf{k}_1|, |\mathbf{k}_2| \leq k_F$ , а  $|\mathbf{q}| \gg k_F$ , то в першому доданку (92) потенціал  $V_s(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q})$  можна замінити на  $V_s(q)$  і винести з-під знака суми. У другому доданку перейдімо від векторів  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  до  $\mathbf{k}, \mathbf{q}_1$  (покладаючи  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}_1$ ). Унаслідок цих перетворень одержуємо:

$$G_s(q, u) \Rightarrow 4\{\varepsilon_{\mathbf{q}}\mu_2^0(x, -x)\}^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_s n_{\mathbf{k}_1, s} n_{\mathbf{k}_2, s} \quad (93)$$

$$-2V^{-1}(q)\{\mu_2^0(x, -x)\}^{-2} \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2 \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} \sum_{\mathbf{q}_1} V_s(q_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1, s}.$$

Ураховуючи асимптотику  $\mu_2^0(x, -x)$  при великих хвильових векторах ( $\mu_2^0(x, -x) \rightarrow 2N\varepsilon_{\mathbf{q}}^{-1}$ ) і обчислюючи суму за вектором  $\mathbf{k}$  у другому доданку формули (93), а саме:

$$\sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1, s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1) \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_1, s} = \begin{cases} \frac{1}{2}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1)N \left\{1 - \frac{3}{4} \frac{q_1}{k_F} + \frac{1}{16} \left(\frac{q_1}{k_F}\right)^3\right\} & \text{при } q_1 \leq 2k_F, \\ 0 & \text{при } q_1 > 2k_F, \end{cases} \quad (94)$$

отримуємо такий остаточний вираз для асимптотики поправки на локальне поле в короткохвильовій ділянці:

$$G_s(q, u) \Rightarrow \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \int_0^2 dq q^2 \left\{1 - \frac{3}{4}q + \frac{1}{16}q^3\right\} \arctg\left(\frac{q}{q_0^*}\right)^n. \quad (95)$$

У випадку потенціалу Кулона для слабо неідеальної системи  $G(q, u)$  у такому наближенні не залежить від параметра  $r_s$  і є універсальною функцією змінних  $(q, u)$  [26]. Її короткохвильова асимптотика дорівнює  $1/3$  незалежно від значення частоти  $u$ . Асимптотика  $G_s(q, u)$  досягає цього значення при  $q_0^* \rightarrow 0$ . Функція  $G_s(q, u)$  залежить від параметра неідеальності, її асимптотика при  $q \gg 2k_F$  завжди більша за  $1/3$  і наближається до значення  $1/2$  при  $q_0^* \rightarrow 2$ . Така межа характерна для слабких потенціалів, як уперше показано у праці [27] на прикладі потенціалу Юкави. Зауважимо, що асимптотика поправки на локальне поле для потенціалу Кулона прямує до одиниці при великих  $r_s$  [17,28].

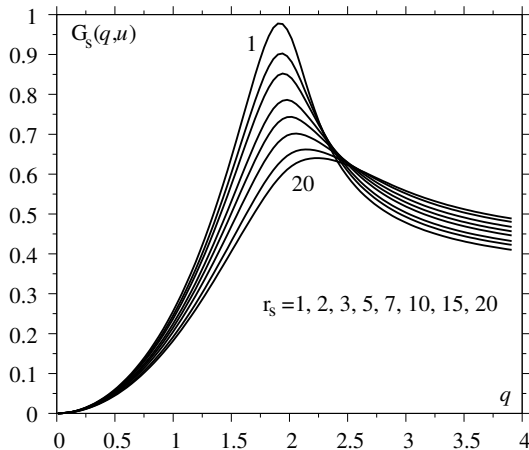


Рис. 2. Динамічна поправка на локальне поле модельної системи з короткосяжною взаємодією  $V_s(q)$  у випадку безрозмірної частоти  $u = 0.1$  для ділянки  $1 \leq r_s \leq 20$ .

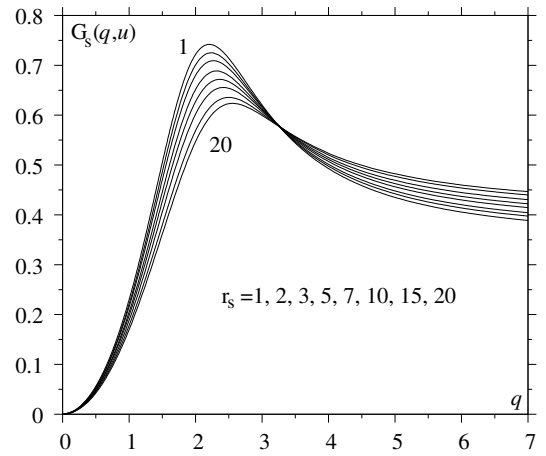


Рис. 3. Динамічна поправка на локальне поле модельної системи з короткосяжною взаємодією  $V_s(q)$  у випадку безрозмірної частоти  $u = 0.5$  для ділянки  $1 \leq r_s \leq 20$ .

На рис. 2, 3 наведено результати чисельного розрахунку  $G_s(q, u)$  для  $n = 4$  з вибором  $q_0^*$  за формулою (87) для ділянки  $1 \leq r_s \leq 20.0$ . Рис. 2 відповідає майже статичному випадку ( $u = 0.1$ ), а рис. 3 — проміжному значенню частоти ( $u = 0.5$ ). Як видно з рисунків, висота максимуму зменшується зі збільшенням  $r_s$ , а його положення зсувається в ділянку більших хвильових чисел. Залежність  $G_s(q, u)$  від частоти має аналогічний характер. Зауважимо, що розрахована поправка на локальне поле не перевищує значення одиниці для розглянутої ділянки параметра неідеальності. Ми розрахували тривимірний масив функції  $G_s(q, u)$  в ділянці  $1 \leq r_s \leq 40.0$  для чисельного розрахунку енергетичних та структурних характеристик моделі.

## VII. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКУ ХАРАКТЕРИСТИК МОДЕЛІ

На рис. 4 наведено результати розрахунку окремих складників розкладу (82) в наближенні  $\xi_4^0(\dots) = \eta_4^0(\dots) = 0$  на інтервалі  $0 < r_s < 40.0$  у рідбергах на електрон. При цьому крива 1 відповідає  $E_{\text{сорт}}^s$ , крива

2 — наступному доданку (одна сума за вектором  $\mathbf{q}$ ), крива 3 — внеску, пропорційному до  $\eta_2^0(x, -x)$ , крива 4 — внеску, пропорційному до  $\{\eta_2^0(x, -x)\}^2$ , крива 5 — внеску, пропорційному добутку  $V_l(q)V_s(q)$ . Для порівняння зображено також кореляційну енергію, розраховану методом Монте-Карло [29] (крива 6). Рисунок ілюструє добру збіжність розкладу (82), а також те, що при великих значеннях  $r_s$  визначальними є два перші члени розкладу. На рис. 5 наведено порівняння розрахованої кореляційної енергії (суцільна крива) з результатами праці [29] (точкова крива), а також з результатом розрахунку в наближенні хаотичних фаз (штрих-пунктирна крива). Парціальні внески короткосяжних ( $\varepsilon_s$ ) та далекосяжних взаємодій ( $\varepsilon_l = \sum_{i=2}^5 \varepsilon_i$ )

у кореляційну енергію зображено на рис. 6. Як бачимо, в ділянці  $r_s \geq 8$  внесок далекосяжних взаємодій переважає, що обґрунтовує вибір базисної системи й колективного опису в цілому. При цьому внесок далекосяжних взаємодій у повну енергію моделі перевищує за модулем внесок короткосяжних уже в ділянці  $r_s \geq 5$ .

Як видно з таблиці 1, розрахована кореляційна енергія в ділянці  $1 \leq r_s \leq 40.0$  відхиляється від результатів методу Монте-Карло [29] (а також роботи [30], у якій зроблено акуратну апроксимацію результатів праці [29]) набагато менше, ніж знайдена в багатьох інших роботах за допомогою напіваналітичних методів.

$r_s$	1	3	5	10	15	20	25	30	35	40
RPA	157.6	105.5	84.95	61.3	49.9	42.8				
NP	115	81	65							
H	131	86	69							
STLS	124	75	56	36		22				
TW	134	79	61							
VS	112	75		35		21	12			
EZ	122	73.8	56.0	37.0		23.6				
I	117.4	71.1	53.8	35.0	26.5	21.3				
CA	120.0		56.3	37.2		23.0				
VWN	120.0	73.8	56.3	37.1	29.08	23.1	19.7	17.6	15.7	14.1
VK	119.7	72.9	54.2	32.6	22.3	16.2				
(*)	133.30	76.48	57.05	37.10	28.44	23.46	20.20	17.92	16.28	15.09

Таблиця 1. Кореляційна енергія моделі електронної рідини ( $-10^3 \varepsilon_{\text{corr}}(r_s)$ )

VWN — [30]; NP — [31]; H — [32]; STLS — [33]; TW — [34]; VS — [35]; EZ — [36]; I — [37]; VK — [16]; (\*) — результати цієї роботи.

$r_s$	1	3	5	10	15	20	30
RPA	-0.12						
STLS	0.24	0.04	-0.02				
VS	0.19	-0.04					
Y	0.266	0.088	0.033				
L	0.269	0.102	0.042	0.006			
Z	0.302	0.143	0.081	0.032			
I	0.279	0.128	0.070	0.011			
O	0.264	0.111	0.066	0.022			
VK	0.273	0.136	0.071	0.010			
(*)	0.2895	0.1499	0.1022	0.0654	0.0484	0.0383	0.0219

Таблиця 2. Бінарна функція розподілу при  $r = 0$

STLS — [33]; VS — [35]; I — [37]; L — [38]; Z — [39]; O — [40]; Y — [41]; VK — [16]; (\*) — результати цієї роботи.



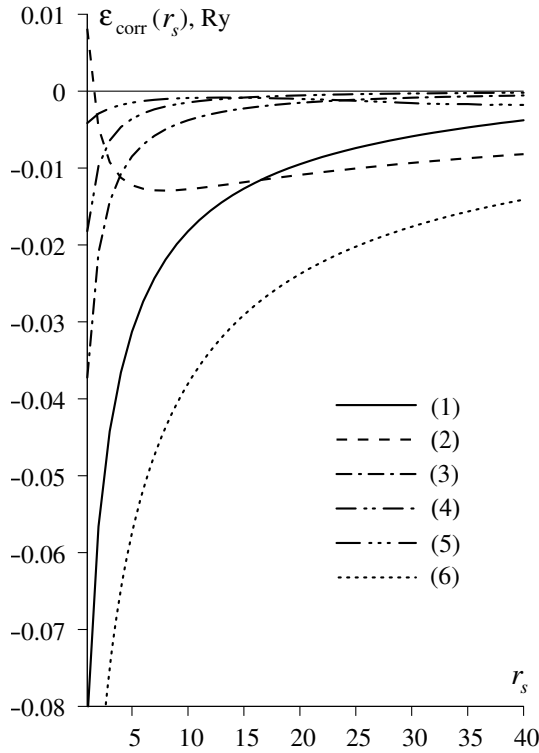


Рис. 4. Залежність складників кореляційної енергії моделі електронної рідини (див. ф.(82)) — криві 1–5 — від параметра неідеальності  $r_s$ . Крива 6 — результати розрахунку методом Монте-Карло [29].

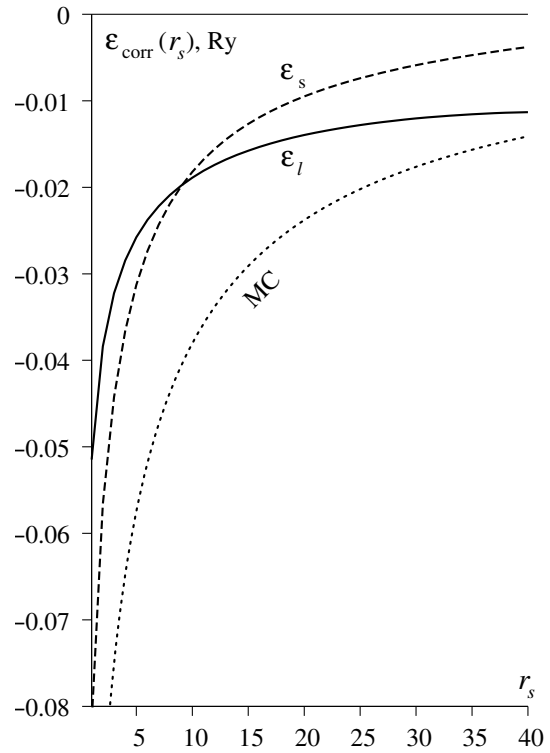


Рис. 6. Порівняння парціальних внесків до кореляційної енергії далекосяжних ( $\epsilon_l$ ) і короткосяжних ( $\epsilon_s$ ) взаємодій. MC — результати праці [29].

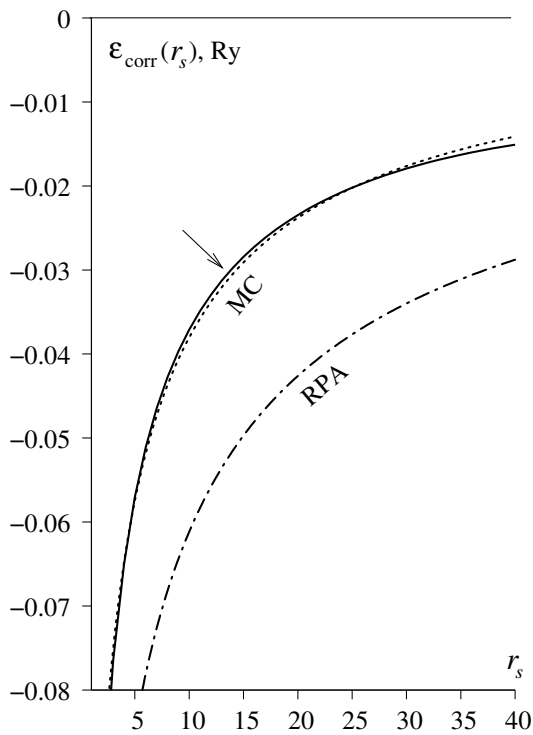


Рис. 5. Кореляційна енергія моделі електронної рідини як функція параметра неідеальності в різних наближеннях: штрих-пунктирна крива — наближення хаотичних фаз, точкова крива — результати праці [29], суцільна крива — дані цієї роботи.

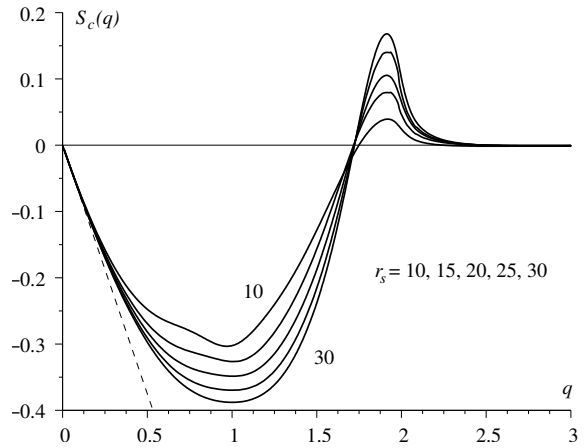


Рис. 7. Кореляційний складник структурного фактора моделі сильно неідеальної електронної рідини.

На рис. 7 зображено кореляційний складник структурного фактора

$$S_c(q) = S_q - S_{\text{HF}}(q), \quad (96)$$

де

$$S_{\text{HF}}(q) = \begin{cases} \frac{3}{4} \frac{q}{k_F} - \frac{1}{16} \left( \frac{q}{k_F} \right)^3 & \text{при } q \leq 2k_F, \\ 1 & \text{при } q > 2k_F. \end{cases} \quad (97)$$

Як видно з рисунка,  $S_c(q)$  у довгохвильовій ділянці має асимптотику  $-\frac{3}{4}\frac{q}{k_F}$  (точкова пряма), а тому  $S_q$

має асимптотику  $S_0(q) = \frac{\varepsilon_q}{\hbar\omega_q}$ , яка повністю визначається внеском плазмонів.

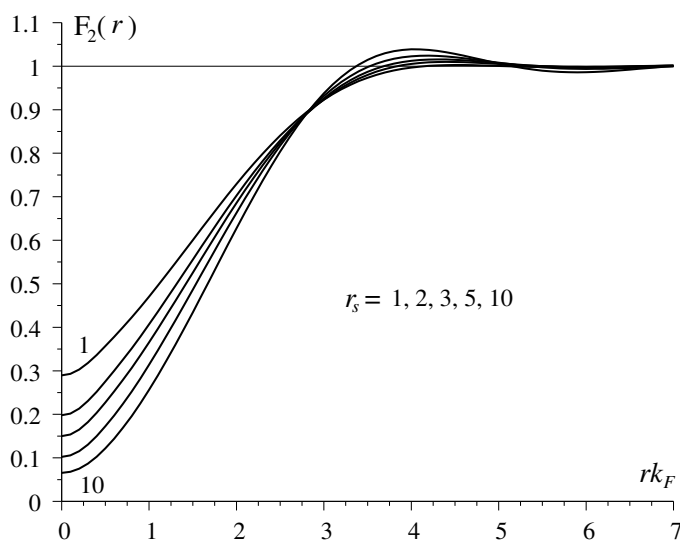


Рис. 8. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини на ділянці параметра неідеальності  $1 \leq r_s \leq 10$ .

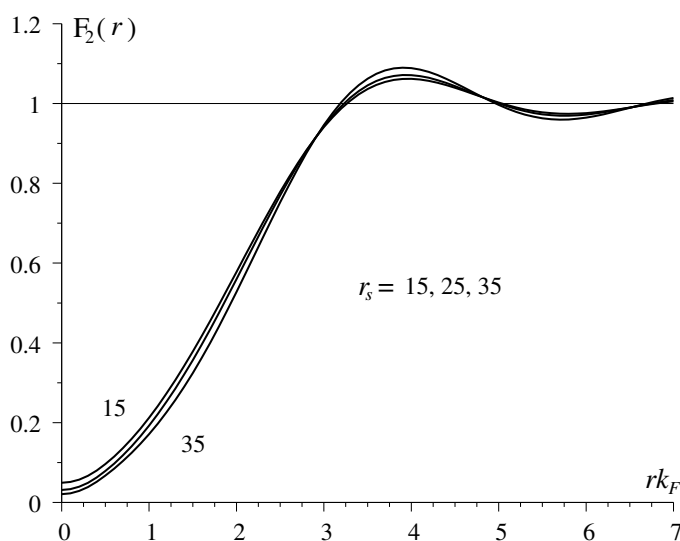


Рис. 9. Бінарна функція розподілу моделі електронної рідини в ділянці сильної неідеальності.

Обчислена за формулою (83) бінарна функція розподілу моделі зображена на рисунках 8 та 9. Вона не має нефізичних від'ємних значень на малих відстанях між електронами, а  $F_2(0)$  асимптотично наближається до нуля при дуже великих значеннях  $r_s$ . Як бачимо з рис. 9, бінарна функція розподілу в ділянці сильної неідеальності набуває рис, характерних для функції розподілу звичайних рідин — чітко виражених максимумів і мінімумів, амплітуда яких зростає зі збільшенням  $r_s$ . У таблиці 2 наведено наші, а також

із робіт інших авторів значення бінарної функції розподілу при  $r = 0$  ( $F_2(0)$ ) залежно від  $r_s$ , що є показником коректності використаних наближень і достовірності результатів розрахунку інших характеристик моделі.

Наведені результати розрахунку енергетичних і структурних характеристик при  $T = 0$  К свідчать про ефективність запропонованого варіанта колективного опису моделі електронної рідини в ділянці проміжної та сильної неідеальності.

- [1] Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Мир, Москва, 1966).
- [2] R. H. Fowler, Mon. Not. RAS **87**, 114 (1926).
- [3] С. Чандрасекар, *Введение в учение о строении звезд* (ИЛ, Москва, 1950).
- [4] Е. Р. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934).
- [5] W. J. Carr, Jr., Phys. Rev. **122**, 1437 (1961).
- [6] W. J. Carr, Jr., R. A. Goldwell-Horsfall, A. E. Fein, Phys. Rev. **124**, 747 (1961).
- [7] D. Bohm, D. Pines, Phys. Rev. **92**, 609 (1953).
- [8] D. Pines, Phys. Rev. **92**, 626 (1953).
- [9] P. Nozieres, D. Pines, Phys. Rev. **111**, 442 (1958).
- [10] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).
- [11] W. Z. Macke, Zh. Naturforsch. **50**, 192 (1950).
- [12] M. Gell-Mann, K. A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364 (1957). -368.
- [13] И. Р. Юхновский, Укр. фіз. журн. **9**, 702 (1964).
- [14] И. Р. Юхновский, Укр. фіз. журн. **9**, 827 (1964).
- [15] M. Vavruk, T. Krokhmalkii, Phys. Stat. Solidi (b) **168**, 519 (1991).
- [16] M. Vavruk T. Krokhmalkii, Phys. Stat. Solidi (b) **169**, 451 (1992).
- [17] M. Vavruk, V. Solovyan, N. Vavruk, Phys. Stat. Solidi (b) **177**, 361 (1993).
- [18] M. Vavruk, N. Vavruk, Phys. Stat. Solidi (b) **186**, 159 (1994).
- [19] M. Vavruk, O. Blazhyevskii, Phys. Stat. Solidi (b) **186**, 449 (1994).
- [20] М. В. Ваврух, Вісн. Львів. держ. ун-ту, сер. фіз. **3**, 26 (1968).
- [21] M. Vavruk, S. Slobodyan, Condens. Matter Phys. **8**, 453 (2005).
- [22] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Журн. эксп. теор. физ. **28**, 129 (1955).
- [23] R. Englman, Peretz Levi, J. Math. Phys. **4**, 105 (1963).
- [24] М. В. Ваврух, С. Б. Слободян, препринт ICMP-05-12U (Львів, 2005).
- [25] M. V. Vavruk, S. B. Slobodyan, N. L. Tyshko, Cond. Matt. Phys. **8**, 711 (2005).
- [26] М. Ваврух, Физ. низк. темп. **22**, 1005 (1996).
- [27] M. Vavruk, V. Paslavskii, Phys. Stat. Solidi (b) **208**, 91 (1998).
- [28] S. Ichimaru, K. Utsumi, Phys. Rev. B. **24**, 7385 (1981).
- [29] D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [30] S. H. Vosko, L. Wilk, N. Nussair, Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).
- [31] P. Nozieres, D. Pines, Nuovo Cimento **9**, 470 (1958).
- [32] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **243**, 336 (1958).
- [33] K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land, A. Sjolander, Phys. Rev. **176**, 589 (1968).
- [34] F. Toigo, T. O. Woodruff, Phys. Rev. B **2**, 3958 (1970).
- [35] P. Vashishta, K. S. Singwi, Phys. Rev. B **6**, 875 (1972).
- [36] K. Emrich, J. G. Zabolitsky, Phys. Rev. B **30**, 2049 (1984).
- [37] S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982).
- [38] L. J. Lantto, Phys. Rev. B **22**, 1380 (1980).
- [39] J. G. Zabolitsky, Phys. Rev. B **22**, 2353 (1980).
- [40] A. W. Overhauser, Zhu Xiaodong, Phys. Rev. B **30**, 3158 (1984).
- [41] H. Yasuhara, J. Phys. Soc. Jpn **36**, 361 (1974).

**A NEW VARIANT OF THE COLLECTIVE DESCRIPTION OF A STRONGLY NON-IDEAL ELECTRON LIQUID**

M. V. Vavruk, N. L. Tyshko

*Ivan Franko National University of Lviv, Department for Astrophysics,  
8 Kyryla i Mefodija St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

Formulated in this paper is a renormalized perturbation theory for the description of a strongly non-ideal electron liquid in the collective approach. Long-range interactions are accounted in the framework of an electron-plasmon model where the reference system is a model of free electrons and non-interacting plasmons that make up for the missing divergent diagrams of the perturbation theory. A transformation from a canonical model of the electron liquid to electron-plasmon model is performed within the transition operators. Within the developed approach energy and structural characteristics of the electron liquid model in a wide range of coupling parameters ( $0 < r_s \leq 30$ ) have been studied.