

тягання, яке може привести до фазового переходу, і розглянули деякі питання, які при цьому виникають. Розрахунок же як структурних характеристик системи відліку, так і статистичної суми в цілому може бути виконаний з більшою точністю. Метою даного підходу є його наступне застосування в області $T < T_c$ та в околі критичної точки, дослідження параметра порядку та розрахунок критичних індексів для реальних речовин. Метод колективних змінних при цьому створює суттєві зручності, оскільки сукупність змінних містить змінну ρ_0 , що безпосередньо пов'язана з параметром порядку.

1. Юхновский И. Р., Идзик И. М., Коломиец В. А. Постановка задачи о критической точке системы жидкость — газ в методе коллективных переменных. — Киев, 1987. — 29 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-87-16Р).
2. Юхновский И. Р., Идзик И. М., Коломиец В. А. Свободная энергия системы жидкость — газ в методе коллективных переменных. — Киев, 1987. — 32 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-87-15Р).
3. Юхновский И. Р. Функционал статистической суммы в большом каноническом ансамбле с выделенной функцией отсчета. — Киев, 1988. — 23 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-88-30Р).
4. Юхновский И. Р., Головкин М. Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. — Киев : Наук. думка, 1980. — 372 с.
5. Идзик И. М., Коломиец В. А. Термодинамика системы с дальнедействующими и короткодействующими межчастичными взаимодействиями в гауссовом приближении. — Киев, 1986. — 21 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-86-134Р).
6. Wertheim M. S. Exact solution of the Percus—Yevick integral equation for hard spheres // Phys. Rev. Lett. — 1963. — 10, N 8. — P. 321—323.
7. Barker J. A., Henderson D. Perturbation theory and equation of state for fluids. II. A successful theory of liquids // J. Chem. Phys. — 1967. — 47, N 11. — P. 4714—4721.
8. Weeks E. D., Chandler D., Andersen H. C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids // Ibid. — 1971. — 54, N 12. — P. 5237—5246.
9. Юхновский И. Р. Фазовые переходы второго рода. Метод коллективных переменных. — Киев : Наук. думка, 1985. — 223 с.
10. Юхновский И. Р., Козловский М. П. Решение задачи о фазовом переходе в трехмерной модели Изинга // Проблемы физической кинетики и физики твердого тела. — Киев : Наук. думка, 1990. — С. 424—443.
11. Козловский М. П., Пылюк И. В., Коломиец В. А. Численное исследование статистической суммы трехмерной модели Изинга на основе шестерного базисного распределения. — Киев, 1984. — 41 с. — (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики; ИТФ-84-177Р).
12. Misawa M. Effective diameter of molecules and liquid — gas critical point // J. Chem. Phys. — 1990. — 93, N 11. — P. 8401—8402.
13. Aziz R. A., Slaman M. J. The repulsive wall of the Ar—Ar interatomic potential reexamined // Ibid. — 92, N 2. — P. 1030—1035.
14. Peters C. J., Lichtenthaler R. N. Calculation of thermodynamic properties from a parametric integral equation // Physica A. — 1989. — 156. — P. 417—435.
15. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — М. : Наука, 1972. — 720 с.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 537.31.311; 536.75

**М. В. ВАВРУХ, Н. М. ВАВРУХ,
Т. Є. КРОХМАЛЬСЬКИЙ, В. Б. СОЛОВ'ЯН**

РОЗРАХУНОК ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ МОДЕЛІ ВЗАЄМОДІЮЧОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ БАЗИСНИМ МЕТОДОМ

На основі розвинутого авторами базисного підходу досліджено одну з фундаментальних характеристик моделі взаємодіючого виродженого електронного газу — поправку на локальне поле — в різних областях параметра неідеальності. Знайдено чисельні розв'язки системи нелінійних інтегральних рівнянь, що визначають цю функцію як у статичному, так і в динамічному випадках. Показано, що має місце зміна форми статичної поправки на локальне поле в околі точки $q_0 = 2k_F$ залежно від параметра неідеальності: пік у випадку слабо неідеального систем, монотонна поведінка в області густин, що відповідають металам, а також для меншої густини. З метою тестування знайдених розв'язків виконано розрахунки важливих енергетичних та структурних характеристик основного стану моделі.

© М. В. Ваврух, Н. М. Ваврух, Т. Є. Крохмальський, В. Б. Солов'ян, 1993

1. Вступ

Як відомо, підсистема колективізованих електронів відіграє значну роль у формуванні енергетичних, структурних та електромагнітних характеристик металів. Ця обставина визначає центральне місце в багатоелектронній теорії металів моделі однорідного електронного газу — системи N взаємодіючих за законом Кулона електронів в об'ємі V на фоні рівномірно розподіленого компенсуючого позитивного заряду в термодинамічній границі $N, V \rightarrow \infty, N/N = \text{const}$. У той же час названа модель належить до фундаментальних моделей статистичної фізики, на яких проходять апробацію нові методи в теорії багаточастинкових систем. Роль взаємодії у цій моделі характеризує параметр неідеальності, який в області сильного виродження співпадає з параметром Бракнера $r_s = a_0^{-1} (3V/4\pi N)^{1/3}$, де a_0 — радіус Бора. Теорія слабо неідеального електронного газу в основному побудована [1, 2], хоч коректного розрахунку деяких характеристик не зроблено ще й у цій області. У задачі дослідження характеристик сильно неідеальної моделі знайдено наближені розв'язки, переважно у рамках діелектричного формалізму [3—9].

Енергетичні характеристики електронного газу (кореляційна енергія, хімічний потенціал, стисливість та ін.) — інтегральні і через це мало чутливі до наближень того чи іншого методу. Найбільш чутливі структурні характеристики, серед них: бінарна функція розподілу, структурний фактор і особливо поправка на локальне поле. Завдяки своїй простоті та універсальності концепція локального поля завоювала пріоритетне положення в сучасній теорії електронного газу, а поправка на локальне поле належить до найважливіших характеристик систем багатьох взаємодіючих частинок [10—12].

Як зазначено вище, однією з важливих характеристик моделі є бінарна функція розподілу $F_2(\mathbf{r})$ або парна кореляційна функція $\mu_2(\mathbf{r}) = F_2(\mathbf{r}) - 1$. У відповідності з методикою праць [13—16] використаємо спектральне представлення

$$\mu_2(\mathbf{r}) = [N(N-1)\beta]^{-1} \sum_{\mathbf{v}; \mathbf{q} \neq 0} \mu_2(x) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

Тут $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обернена температура; $x = (\mathbf{q}, \mathbf{v})$, де \mathbf{q} — хвильовий вектор; $\mathbf{v} = 2\pi n \beta^{-1}$ — парні частоти Мацубари ($n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$).

В цій статті обмежимося розглядом основного стану моделі при $\beta \rightarrow \infty$. Співвідношення

$$\mu_2(x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) [1 + V_q V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) (1 - G_x)]^{-1} \quad (1.2)$$

узагальнює наближення хаотичних фаз на системи з довільним значенням параметра неідеальності і може розглядатися як означення поправки на локальне поле G_x . При цьому $V_q = 4\pi e^2 q^{-2}$, а $\tilde{\mu}_2^0(x, -x)$ — парна кореляційна функція ідеальної системи, що співпадає з її поляризаційним оператором (див. формули (1.7), (1.8)).

З формули (1.2) випливає таке співвідношення між поправкою на локальне поле та функцією діелектричної проникності $\epsilon(x)$:

$$\epsilon(x)^{-1} = 1 - V_q V^{-1} \mu_2(x) = [1 - Z(x) G_x] [1 + Z(x) (1 - G_x)]^{-1}, \quad (1.3)$$

де $Z(x) \equiv V_q V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x)$.

Поправка на локальне поле визначає також структурний фактор моделі S_q , оскільки згідно з (1.1)

$$S_q = S_{id}(q) + S_c(q), \quad (1.4)$$

$$S_c(q) = (N\beta)^{-1} \sum_{\mathbf{v}} \{\mu_2(x) - \tilde{\mu}_2^0(x, -x)\} = -[N\beta V]^{-1} V_q \sum_{\mathbf{v}} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^2 \times \\ \times [1 - G_x] [1 + V_q V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x) (1 - G_x)]^{-1},$$

де $S_{id}(q)$ — внесок ідеальних кореляцій ($S_{id}(q) = \frac{3}{4} q/k_F - \frac{1}{16} (q/k_F)^3$ при $q \leq 2k_F$, $S_{id}(q) = 1$ при $q > 2k_F$), а $S_c(q)$ — неідеальних.

Наведемо ще формулу для енергії основного стану моделі:

$$E = E_0 + F_0,$$

$$E_c = (2\beta V)^{-1} \sum_{q: \nu_0} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} V_q [\mu_2(x) - \tilde{\mu}_2^0(x, -x)], \quad (1.5)$$

де E_0 — енергія в наближенні Хартрі — Фока (внесок ідеальних кореляцій); E_c — так звана кореляційна енергія.

Слід зазначити, що для розрахунку деяких одночастинкових характеристик (спектра збуджень, розподілу електронів за імпульсами та ін.) необхідна не тільки поправка на локальне поле, але також її варіаційні похідні. Це, проте, не звужує концепцію локального поля, а вимагає розрахунку ще інших характеристик того самого типу, що й поправка на локальне поле. Коректний мікроскопічний розрахунок цієї функції є фундаментальною проблемою теорії систем багатьох взаємодіючих частинок.

На жаль, у переважній більшості праць розглядається лише статична границя або використовується статичний варіант поправки на локальне поле. Різними авторами одержано лише якісно близькі результати [17]. Непрямі наближені методи розрахунку не дають надійної і достовірної інформації про деталі та особливості цієї функції, зокрема про її поведінку в околі точки $q_0 = 2k_F$, про залежність її від параметра неідеальності в різних його областях, частотну залежність і т. п. Досить добре вивчені загальні властивості і асимптотика функції G_x :

$$G(q, \nu) \rightarrow \begin{cases} \gamma(r_s | \nu) (q/k_F)^2 & \text{при } q \ll k_F, \\ G_\infty(r_s) & \text{при } q \gg k_F. \end{cases} \quad (1.6)$$

Параметр $\gamma(r_s/0)$ пов'язаний із стисливістю κ

$$\left(\frac{2}{3} \epsilon_F \kappa \frac{N}{V} = [1 - 4\pi\alpha_0 r_s \gamma(r_s | 0)]^{-1}; \quad \alpha_0 = \pi^{-2} (4/9\pi)^{1/3} \right), \quad \text{а } G_\infty(r_s) —$$

зі значенням бінарної функції розподілу при $r = 0$ ($G_\infty(r_s) = a(r_s) [1 - F_2(0)]$), де $a(r_s) \rightarrow 2/3$ при $r_s \rightarrow 0$, $a(r_s) \approx 1$ при $r_s \gg 1$. З метою наближеного дослідження G_x використовувались різні методи: рівняння руху для операторів електрон-діркових пар [8, 18], кореляційні функції [6, 7], функції Гріна [5], діаграми теорії збурень [19] та ін. Навіть у статичному наближенні поправка на локальне поле є складною функцією імпульсу. Є дві характерні області, де $G(q, 0)$ має різну поведінку: $q \leq 2k_F$ та $q > 2k_F$. На врахуванні цієї обставини, асимптотики при малих та великих імпульсах, а також інтегральних характеристик (кореляційної енергії, стисливості) ґрунтується ще один напрям, пов'язаний з параметризацією $G(q, 0)$ невелике число параметрів дозволяє побудувати апроксимаційні формули у всій області [10, 20] або ж дістати просту асимптотичну формулу [7, 21].

Інший напрям досліджень пов'язаний з послідовним мікроскопічним розрахунком на основі діаграм теорії збурень. Цей напрям започатковано у праці [4], де виконано розрахунок статичного поляризаційного оператора у першому порядку теорії збурень щодо взаємодії, що відповідає границі $r_s \rightarrow 0$ при обчисленні $G(q, 0)$. У праці [9] вивчалась та сама задача, але з більш точним потенціалом взаємодії (екранованим в наближенні хаотичних фаз). На прикладі внеску найбільш важливої діаграми другого порядку теорії збурень, що вимагало використання значних спрощень, продемонстровані труднощі безпосереднього розрахунку діаграм навіть невисокого порядку. Вихід з цієї ситуації запропоновано у праці [13—16] на шляху формулювання теорії збурень у термінах не одночастинкових величин (одночастинкового спектра та чисел заповнення одночастинкових станів), а багаточастинкових кореляційних функцій базисної системи —

виродженого ідеального електронного газу. У праці [15] шляхом підсумовування діаграм теорії збурень одержано систему інтегральних рівнянь, що визначають G_x . Ядра їх побудовані на багаточастинкових кореляційних функціях базисної системи

$$\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n) = \beta^{-1} \langle \tilde{T} [\hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \dots \hat{\rho}_{x_n}]^c \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle \quad (1.7)$$

Тут використано такі позначення: \tilde{T} — узагальнений символ T -впорядкування [14, 16] операторів вторинного квантування на базі плоских хвиль у представленні взаємодії;

$$a_{k,s}(\beta') = \exp(\beta' \hat{\mathcal{H}}_0) a_{k,s} \exp(-\beta' \hat{\mathcal{H}}_0), \quad 0 \leq \beta' \leq \beta;$$

$$\hat{\rho}_x \equiv \hat{\rho}_{q,v} = \sum_{v^*; k, s} a_{k+q, s}^+(v^* + v) a_{k, s}(v^*) \quad (1.8)$$

— спектральне представлення оператора електронної густини, причому

$$a_{k, s}(v^*) = \beta^{-1/2} \int_0^\beta d\beta' a_{k, s}(\beta') \exp(i v^* \beta'); \quad (1.9)$$

$v^* \equiv (2n + 1) \pi \beta^{-1}$ — непарні частоти Мацубари; символ $\langle \dots \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}^c$ означає зв'язане статистичне середнє, розраховане за станами базисної системи у великому канонічному ансамблі ($\hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \hat{H}_0 - \mu_0 \hat{N}$, де \hat{H}_0 — гамільтоніан базисної системи; μ_0 — її хімічний потенціал). Функції (1.7) досліджені у працях [22, 23].

2. Система рівнянь для поправки на локальне поле та її розв'язки

Парна кореляційна функція $\mu_2(x)$ пов'язана з поляризаційним оператором взаємодіючої системи $M_2(x)$:

$$\mu_2(x) = M_2(x) [1 + V_q V^{-1} M_2(x)]^{-1} \quad (2.1)$$

У праці [15] виконано прямий розрахунок $\mu_2(x)$ методом динамічних колективних змінних [14], внаслідок чого вона представлена в формі рядів діаграм перенормованої теорії збурень, побудованих на функціях (1.7) та екранованих потенціалах взаємодії. На основі співвідношення (2.1) одержано аналогічні ряди діаграм для поляризаційного оператора:

$$M_2(x) = \text{Diagram 1} + \sum_{n \geq 1} (-1)^n [(2n)!!]^{-1} \text{Diagram 2} +$$

$$+ \sum_{\substack{s \geq 2 \\ n, m \geq 0}} (-1)^{s+n+m} [s! (2n)!! (2m)!!]^{-1} \text{Diagram 3} +$$

$$+ \sum_{\substack{s \geq 3 \\ n, m \geq 0}} (-1)^{s+n+m} [s! (2n)!! (2m)!!]^{-1} \text{Diagram 4} +$$

$$+ \sum_{n, m, l \geq 0} (-1)^{n+m+l} [(2n)!! (2m)!! (2l)!!]^{-1} \times$$

$$\times \left[\sum_{s_1, s_2 \geq 2} (-1)^{s_1+s_2} (s_1! s_2!)^{-1} \text{Diagram 5} + \right] \quad (2.2)$$

цього ряду через вершинну частину:

$$M_2^{(2)}(x) = \beta^{-2} V^{-1} \sum_{\rho_1, \rho_2} G_{\rho_1}^0 G_{\rho_2}^0 G_{\rho_1-x}^0 G_{\rho_2+x}^0 \Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x, \rho_2 + x). \quad (2.8)$$

Тут $G_{\rho+x}^0 \equiv G_{k+q,s}^0$ ($v^* + v$) — одночастинкова функція Гріна для базисної системи [15]:

$$G_{k,s}^0(v^*) = - \langle \tilde{T} [a_{k,s}(v^*) a_{k,s}^+(v^*)] \rangle_{\mathcal{H}_0} = [iv^* - \varepsilon_k + \mu_0]^{-1}, \quad (2.9)$$

де $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Вершинна частина $\Gamma(\dots)$ у формулі (2.8) зображається безмежним рядом, сума якого задовольняє інтегральне рівняння:

$$\begin{aligned} \Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x, \rho_2 + x) &= 2(\beta V)^{-1} \sum_{x_1} V(x - x_1) \times \\ &\times G_{\rho_1-x_1}^0 G_{\rho_2+x_1}^0 [V(x_1) - \Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x_1, \rho_2 + x_1)]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Аналогічно підсумуємо діаграми в доданку $M_2^{(1)}(x)$, внутрішні частини яких містять елементи драбинчатих діаграм:

$$\begin{aligned} M_2^{(1)}(x) &= -\beta^{-1} \sum_{\rho, x_1} (\beta V)^{-1} G_{\rho}^0 G_{\rho+x_1}^0 G_{\rho+x}^0 \{ G_{\rho+x+x_1}^0 [V(x_1) - \\ &- \Gamma(-\rho, \rho+x | -\rho-x_1, \rho+x+x_1)] - 2G_{\rho}^0 [V(x_1) - \\ &- \Gamma(\rho, -\rho | \rho+x_1, -\rho-x_1)] \}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Вершинна частина є функцією багатьох змінних, через що розв'язання рівняння (2.10) пов'язане з величезними труднощами. У той же час $\Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x, \rho_2 + x)$ містить занадто детальну інформацію, насправді ж потрібна не сама ця функція, а величина від її усереднення з ваговими множниками, побудованими на добутках функцій Гріна. Це підказує спосіб «локалізації» вершинної частини, тобто заміни її функцією, залежною лише від змінних x і незалежною від змінних $\rho_1 \equiv (\mathbf{k}_1; s_1; v_1^*)$, $\rho_2 \equiv (\mathbf{k}_2; s_2; v_2^*)$. Домножуючи $\Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x, \rho_2 + x)$ на добутки функцій Гріна і підсумовуючи за ρ_1, ρ_2 , дістанемо таку послідовність функцій:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(x) &= \left[\sum_{\rho} G_{\rho}^0 G_{\rho+x}^0 \right]^{-2} \sum_{\rho_1, \rho_2} \Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x, \rho_2 + x) G_{\rho_1}^0 G_{\rho_2}^0 G_{\rho_1-x}^0 G_{\rho_2+x}^0; \\ \Gamma_2(x_1 | x_2) &= \left[\sum_{\rho} G_{\rho}^0 G_{\rho+x_1}^0 G_{\rho-x_2}^0 \right]^{-2} \sum_{\rho_1, \rho_2} G_{\rho_1}^0 G_{\rho_2}^0 G_{\rho_1-x_1}^0 G_{\rho_2+x_1}^0 G_{\rho_1+x_2}^0 \times \\ &\times G_{\rho_2-x_2}^0 \Gamma(\rho_1, \rho_2 | \rho_1 - x_1, \rho_2 + x_1) \end{aligned} \quad (2.12)$$

і т. ін. Застосовуючи цю процедуру «локалізації» до обох сторін рівняння (2.10), знаходимо ланцюжок інтегральних рівнянь для функцій $\Gamma_1(x)$, $\Gamma_2(x_1 | x_2)$, ... Як приклад наведемо перше з них:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(x) &= (2\beta V)^{-1} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-2} \sum_{x_1} V(x+x_1) \tilde{\mu}_3^0(x, x_1, -x-x_1) \times \\ &\times \tilde{\mu}_3^0(-x, -x_1, x+x_1) [V(x_1) - \Gamma_2(x_1 | x)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Обриваючи ланцюжок цих рівнянь на n -му, тобто покладаючи $\Gamma_n(x_1 | x_2 \dots | x_n) \approx \Gamma_{n+1}(x_1 | \dots | x_{n+1})$, одержуємо замкнуту систему n інтегральних рівнянь. Зіставляючи формули (2.6), (2.8) та (2.13), знаходимо

$$\Gamma_1(x) = V_q G_2(x). \quad (2.14)$$

У найпростішому варіанті, при обриві ланцюжка на $n = 1$, отримуємо таке інтегральне рівняння для складової $G_2(x)$:

$$\begin{aligned} G_2(x) &= (2\beta V V_q)^{-1} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-2} \sum_{x_1} V(x+x_1) \tilde{\mu}_3^0(x, x_1, -x-x_1) \times \\ &\times \tilde{\mu}_3^0(-x, -x_1, x+x_1) [V(x_1) - V_{q_1} G_2(x_1)]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

У тому ж наближенні з формул (2.6), (2.11) одержуємо

$$G_1(x) = -(2\beta V_q)^{-1} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-2} \sum_{x_1} \tilde{\mu}_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1) \times \\ \times [V(x_1) - V_q G_2(x_1)]. \quad (2.16)$$

Тут $\tilde{\mu}_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1)$ — так звана «нормальна» складова чотиричас-тинкової кореляційної функції базисної системи. Оскільки $V(x) = V_q e^{-1}(x)$ визначається функцією $G_x = G_1(x) + G_2(x)$ (див. (1.3)), то (2.15), (2.16) — система нелінійних інтегральних рівнянь. Розв'язання її полегшується тим, що відповідні ядра побудовано на функціях $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n)$, для яких відомі аналітичні вирази в елементарних функціях [22, 23]. Проте функції $\tilde{\mu}_n^0(x_1, \dots, x_n)$ занадто складні, щоб можна було ставити питання про аналітичні розв'язки системи (2.15), (2.16). Навіть асимптотику розв'язків відносно змінних q, v та параметра r_s можна дослідити лише чисельно.

2.1. У границі слабо неідеальної системи ($r_s \rightarrow 0$) складова $G_2(x)$ зникає, а $G_1(x)$ переходить у

$$G_{id}(x) = -(2\beta V_q)^{-1} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-2} \sum_{x_1} V_{q_1} \tilde{\mu}_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1), \quad (2.17)$$

яка не залежить від параметра неідеальності й визначається чотиричастинковою кореляційною функцією базисної системи. Оскільки статичний поляризаційний оператор в цій границі

$$M_2^{GT}(x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) [1 + G_{id}(x) V_q V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x)] \quad (2.18)$$

вперше розрахований у праці [4], то наближення (2.17) можна назвати також наближенням Гелдарта — Тейлора. Функція $G_{id}(x)$ досліджена у праці [24].

Для зручності перейдемо до безрозмірної форми функцій (1.7):

$$\tilde{\mu}_2^0(x, -x) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} I_{2,0}(q; \tilde{v}/q), \\ \tilde{\mu}_3^0(x_1, x_2, -x_1 - x_2) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} I_{3,0}(q_1, q_2; \tilde{v}_1/q_1, \tilde{v}_2/q_2; t), \quad (2.19) \\ \tilde{\mu}_{4,1}^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2) = -2 \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^3} I_{4,0}(q_1, q_2; \tilde{v}_1/q_1, \tilde{v}_2/q_2; t),$$

де $I_{n,0}(\dots)$ — безрозмірні функції безрозмірних змінних $q \equiv |\mathbf{q}| k_F^{-1}$, $\tilde{v} \equiv v (2\varepsilon_F)^{-1}$, $t = \cos(\widehat{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})$; $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$.

У безрозмірній формі

$$G_{id}(x) = q^2 I_{2,0}^{-2}(q, \tilde{v}/q) (4\pi)^{-1} \int_0^\infty dq_1 \int_0^\infty d\tilde{v}_1 \int_{-1}^{+1} dt I_{4,0}(q, q_1; \tilde{v}/q, \tilde{v}_1/q_1; t). \quad (2.20)$$

Ще одне зображення $G_{id}(x)$ можна одержати, якщо скористатися методикою праці [25], виходячи з виразу $\tilde{\mu}_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1)$ через функції Гріна базисної системи $G_{k,s}^0(v^*)$ та виконуючи підсумовування за частотами у (2.17):

$$M_2^{GT}(x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) + V^{-1} \text{Re} \sum_{k_1, k_2, s} V_{k_1 - k_2} (n_{k_1, s} - n_{k_1 - q, s}) \times \\ \times (n_{k_2, s} - n_{k_2 - q, s}) [i v + \varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_1 - q}]^{-1} [(i v + \varepsilon_{k_2} - \varepsilon_{k_2 - q})^{-1} - \\ - (i v + \varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_1 - q})^{-1}], \quad (2.21)$$

де

$$n_{k,s} = \beta^{-1} \sum_{v^*} G_{k,s}^0(v^*) = [1 + \exp\{\beta(\varepsilon_k - \mu_0)\}]^{-1} \quad (2.22)$$

— числа заповнення електронних станів у базисній системі.

Перейдемо від сум за k_1, k_2 до інтегралів, використовуючи циліндричну систему координат ($k = (\rho, z, \varphi)$). Інтегруючи за ρ_1 та ρ_2 , а також за азимутальними кутами, зводимо $G_{id}(x)$ до такої форми:

$$G_{id}(x) = \frac{1}{4} q^2 I_{2,0}^{-2}(q, \tilde{v}/q) \int_{-1}^{+1} dz_1 dz_2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \sigma_1 \sigma_2 \times \\ \times \Phi_{q, \tilde{v}} \left(z_1 + \sigma_1 \frac{q}{2}; z_2 + \sigma_2 \frac{q}{2}; 1 - z_1^2; 1 - z_2^2 \right); \\ \Phi_{q, \tilde{v}}(a; b; u; v) = \frac{1}{8} q^2 (a-b)^2 J([a-b]^2; u; v) (b^2 q^2 + \tilde{v}^2)^{-1} \times \\ \times (a^2 q^2 + \tilde{v}^2)^{-2} [a^2 b q^2 - \tilde{v}^2 (2a+b)]; \quad (2.23)$$

$$J(s^2; u; v) = \frac{1}{2} [\omega(s^2, u, v) - u - v - s^2] + u \ln \{(2s^2)^{-1} [s^2 + v - u + \\ + \omega(s^2, u, v)]\} + v \ln \{(2s^2)^{-1} [s^2 + u - v + \omega(s^2, u, v)]\}; \\ \omega(s^2, u, v) = [s^4 + 2s^2(u+v) + (u-v)^2]^{1/2}.$$

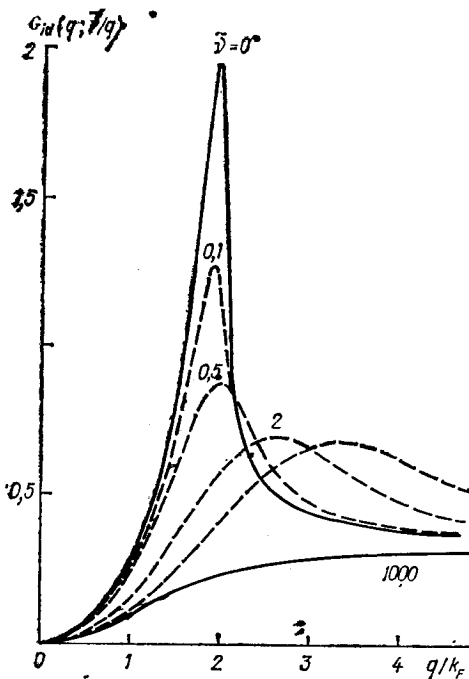


Рис. 1. Динамічна поправка на локальне поле в границі слабо неідеальної системи ($r_s \rightarrow \infty$) $G_{id}(q; \tilde{v}/q)$

На рис. 1 наведено криві функції $G_{id}(x)$ при декількох заданих значеннях безрозмірної частоти ($0 \leq \tilde{v} \leq 1000$). З рисунка видно, що $G_{id}(x)$ як функція імпульсу має максимум, форма і положення якого залежать від значення \tilde{v} : при невеликих \tilde{v} максимум знаходиться в околі точки $q_0 = 2k_F$, при $\tilde{v} > 1$ максимум сильно зсувається в бік великих імпульсів при зростанні \tilde{v} . Висота максимуму різко зменшується при зростанні \tilde{v} в області $\tilde{v} \leq 1$, а в області $\tilde{v} > 1$ повільно спадає із зростанням \tilde{v} . Асимптотика в області великих імпульсів не залежить від значення частоти і дорівнює $1/3$. Зазначимо, що в цій області імпульсів

$G_{id}(q; \tilde{v}/q) > G_{id}(q; 0)$ при $\tilde{v} \neq 0$, а в області $q \leq 2k_F$ маємо протилежну нерівність: $G_{id}(q; \tilde{v}/q) < G_{id}(q; 0)$. У границі дуже великих частот $G_{id}(q; \tilde{v}/q)$ є монотонною функцією хвильового вектора,

яка не перевищує значення $1/3$. Асимптотику цієї функції в границі малих та великих значень аргументів легко знайти безпосередньо з виразу 2.20). Зокрема, в області $q \leq 1,0$

$$G_{id}(q; 0) = \frac{1}{4} q^2 + \frac{5}{144} q^4 + \dots, \quad (\text{див. [24]})$$

$$G_{id}(q; \tilde{v}/q) = \frac{3}{20} q^2 - \frac{1}{12} q^4 + \frac{1}{27} q^6 + \dots \quad (2.24)$$

в границі великих \tilde{v} .

2.2. В області слабо неідеальних систем при скінченному значенні параметра неідеальності ($0 < r_s \leq 1,0$) використаємо найпростіше наближення, покладаючи під знаком суми за змінною $x_1 = (q_1, v_1)$ в рівняннях

(2.15), (2.16) $G_2(x_1) = 0$, а потенціал $V(x_1)$ замінюючи екранованим потенціалом в наближенні хаотичних фаз $v(x_1) = V_{q_1} [1 + V_{q_1} V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x_1, -x_1)]$ — що еквівалентно умові $G_x = 0$. Це наближення хаотичних фаз для поправок на локальне поле

$$G_{RPA}(x) = G_1^{RPA}(x) + G_2^{RPA}(x),$$

$$G_n^{RPA}(x) = VV_q^{-1} [\tilde{\mu}_2^0(x, -x)]^{-2} \mathfrak{M}_{2,n}(x); \quad n = 1, 2; \quad (2.25)$$

$$\mathfrak{M}_{2,1}(x) = -(2\beta V)^{-1} \sum_{x_1} v(x_1) \tilde{\mu}_{4,1}^0(x, -x, x_1, -x_1),$$

$$\mathfrak{M}_{2,2}(x) = (2\beta V^2)^{-1} \sum_{x_1} v(x_1) v(x + x_1) \tilde{\mu}_3^0(x, x_1, -x - x_1) \times$$

$$\times \tilde{\mu}_3^0(-x, -x_1, x + x_1).$$

Формули (2.25) відповідають поляризаційному оператору, розрахованому в наближенні хаотичних фаз

$$M_2^{RPA}(x) = \tilde{\mu}_2^0(x, -x) + \sum_{n=1,2} \mathfrak{M}_{2,n}(x) =$$

$$= \tilde{\mu}_2^0(x, -x) [1 + G_{RPA}(x) V_q V^{-1} \tilde{\mu}_2^0(x, -x)]. \quad (2.26)$$

У працях [26, 27] досліджено і розраховано чисельно безрозмірні функції

$$I_{2,n}(q, \tilde{v}/q | r_s) = \left[\frac{3N}{2\varepsilon_F} \right]^{-1} (\pi\alpha_0 r_s)^{-n} \mathfrak{M}_{2,n}(x), \quad (2.27)$$

що дає можливість розрахувати поправку на локальне поле слабо неідеальних систем

$$G_{RPA}(x) = \frac{1}{4} q^2 I_{2,0}^{-2}(q, \tilde{v}/q) [I_{2,1}(q, \tilde{v}/q | r_s) + \pi\alpha_0 r_s I_{2,2}(q, \tilde{v}/q | r_s)]. \quad (2.28)$$

Коефіцієнт $\gamma(r_s/0)$, що визначає довгохвильову асимптотику $G_{RPA}(x)$ в статичній границі

$$\gamma_{RPA}(r_s | 0) = \frac{1}{4} \sum_{n=1,2} (\pi\alpha_0 r_s)^{n-1} I_{2,n}(0, 0 | r_s), \quad (2.29)$$

дуже добре корелює зі стисливістю моделі κ , обчисленою з термодинамічних співвідношень, тобто з достатньою точністю задовольняє «правило сум для стисливості» [28].

Асимптотика $G_{RPA}(x)$ в короткохвильовій границі не залежить від q та v і майже пропорційна значенню r_s , як це видно з рис. 2 ($G_{RPA}(\infty | r_s) = \lim G_{RPA}(x)$ при $q \gg 1$). Через це наближення (2.25) незастосовне в області великих хвильових векторів при $r_s \geq r_s^0 \approx 0,8\dots$, коли $G_{RPA} \times (\infty | r_s) > 1$. Область застосування наближення (2.25) цілком узгоджується з відповідною областю при розрахунку бінарної функції розподілу $F_2^{RPA}(r)$. Як показує розрахунок, при $r_s \geq 0,25$ з високою точністю виконується рівність $G_{RPA}(\infty | r_s) = 1 - F_2^{RPA}(0)$. Через це r_s^0 — границя області слабой неідеальності.

2.3. Як відомо, енергія основного стану взаємодіючого електронного газу як функція параметра неідеальності досягає мінімуму при $r_s^m \simeq 4,18\dots$ Інтервал $r_s^0 \leq r_s \leq r_s^m$ можна вважати через це областю проміжною, а $r_s > r_s^m$ — областю сильної неідеальності. Вище зазначено, що довгохвильова асимптотика $G_{RPA}(x)$ коректна при будь-яких значеннях параметра неідеальності. Щоб одержати наближений вираз для короткохвильової асимптотики функції G_x , розглянемо рівняння (2.15), (2.16) як незалежні, замінюючи $V(x_1)$ на $v(x_1)$. Враховуючи, що при великих значеннях хвильового вектора q в сумах за змінними q_1 важливими є області $q_1 \approx q$, та

скориставшись теоремою про середні значення, трансформуємо рівняння до такої алгебраїчної форми:

$$G_n(x) \approx G_n^{RPA}(x) [1 - f(x|r_s) G_2(x)], \quad (2.30)$$

де $f(x|r_s)$ — функція змінних (q, v) та r_s ($f(x|r_s) \approx 1$).

Із (2.30) знаходимо

$$\begin{aligned} G_n(x) &\approx G_n^{RPA}(x) [1 + f(x|r_s) G_2^{RPA}(x)]^{-1}, \\ G_x &\approx G_{RPA}(x) [1 + f(x|r_s) G_2^{RPA}(x)]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Оскільки $\lim G_1^{RPA}(x)$ при $q \gg 1$ не перевищує $1/3$, то $G_x < 1$ в короткохвильовій границі. Друге із співвідношень (2.31) можна розглядати як апроксимаційну формулу для всієї області зміни хвильового вектора [15, 16]. Формули (2.31) можуть бути використані в ролі нульового наближення при ітераційному методі розв'язування системи рівнянь (2.15), (2.16).

2.4. У цій праці дослідимо статичний варіант розв'язку рівнянь (2.15), (2.16), при якому розглядається випадок статичної границі функцій $G_1(x)$, $G_2(x)$, а під знаком суми за змінною $x_1 \equiv (q_1, v_1)$ виконується заміна $G_2(x_1) \rightarrow G_2(q_1; 0)$, $G(x_1) \rightarrow G(q_1; 0)$. Знайдений таким чином розв'язок, звичайно, не є строго статичною границею G_x , але він близький до неї. Необхідність дослідження статичного варіанта розв'язку зумовлена тим, що це наближення є загальноприйнятим у сучасній теорії електронного газу. Дослідження динамічних розв'язків буде зроблено в окремій праці.

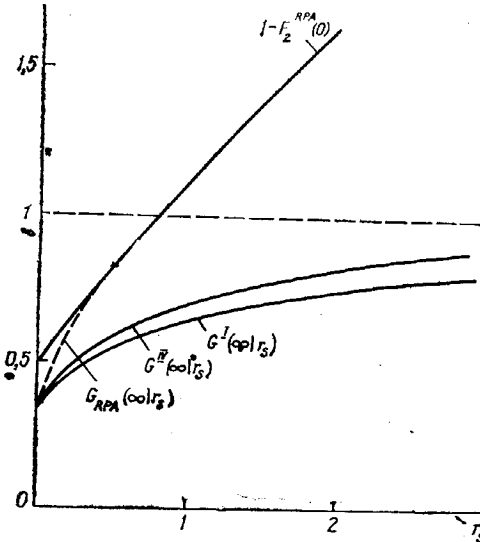


Рис. 2. Короткохвильова асимптотика функції $G(x)$ в різних наближеннях як функція параметра неідеальності

Найпростіший варіант статичного розв'язку реалізовано у праці [29] на основі таких набли-

жень: 1) заміна динамічного потенціалу $V(x_1)$ статичним, екранованим у наближенні хаотичних фаз $v(q_1, 0)$, внаслідок чого рівняння для $G_2(x)$ стає лінійним інтегральним, а $G_1(x)$ визначається через його розв'язок; 2) заміна $G_2(x_1)$ на $G_2(q_1; 0)$ при знаходженні статичної границі G_x . Розв'язки рівняння (2.15) знаходилися методом ітерацій, причому в ролі нульового наближення використано $G_2^{RPA}(q; 0) [1 + f(r_s) \times G_2^{RPA}(q; 0)]^{-1}$ при $f(r_s) = 0,75 + r_s \cdot 0,015$. В області слабкої неідеальності досить однієї-двох ітерацій, в області проміжної — декількох, бо ітераційний процес збігається досить швидко. В області сильної неідеальності ми використовували розв'язок, знайдений для заданого значення r_s , як нульове наближення для $r_s + \Delta r_s$. Як показують розрахунки, навіть в області невеликих r_s короткохвильова асимптотика розв'язків суттєво відрізняється від $G_2^{RPA}(q; 0)$. Має місце зміна форми поправки на локальне поле в околі точки $q_0 = 2k_F$ залежно від параметра неідеальності: при $r_s \leq 2,0$ вона зберігає особливості поведінки $G_{td}(q; 0)$ і має максимум, висота і форма якого визначаються значенням r_s ; при $r_s \geq 2,0$ вона є монотонною функцією хвильового вектора. Однак в короткохвильовій області асимптотика знайденого розв'язку $G(q; 0) = \gamma(r_s|0) q^2 + \dots$ не узгоджується з так званим правилом сум для стисливості, згідно з яким має виконуватися умова $\gamma(r_s^{(1)}|0) > \gamma(r_s^{(2)}|0)$ при $r_s^{(1)} > r_s^{(2)}$. У прийнятому наближенні ця умова порушується, а $\gamma(r_s|0)$ набуває занижених

значень. Знайдені розв'язки використані як нульове наближення при більш точному розв'язуванні системи (2.15), (2.16). Таблиця ілюструє зміну розв'язку в залежності від використовуваних наближень на прикладі складової $G_2(q; 0)$ для випадку $r_s = 3,75$. Розв'язок лінійного рівняння для $G_2(q; 0)$ при заміні $V(x_1)$ на $v(q_1, 0)$ зображено як $G_2^I(q; 0)$. Складова $G_2^{II}(q; 0)$

q/k_F	$G_2^{RPA}(q; 0)$	$G_2^I(q; 0)$	$G_2^{II}(q; 0)$	$G_2^{III}(q; 0)$	$G_2^{IV}(q; 0)$
0,4	0,020608	0,008267	0,013000	0,012792	0,012543
0,8	0,080028	0,032959	0,048593	0,047784	0,046824
1,2	0,180087	0,076342	0,106337	0,104453	0,102188
1,6	0,333055	0,146477	0,191881	0,187588	0,182896
2,0	0,574420	0,265735	0,319963	0,313636	0,302035
2,4	0,919276	0,446349	0,517219	0,498118	0,476806
2,8	1,247000	0,591384	0,669860	0,652565	0,630168
3,2	1,511890	0,688861	0,763792	0,747721	0,730521
3,6	1,707760	0,736950	0,799783	0,789314	0,778331
4,0	1,839870	0,754489	0,801505	0,795081	0,788711

0) є розв'язком лінійного рівняння при заміні $V(x_1)$ на $v(x_1)$, тобто з урахуванням динамічного екранування в наближенні хаотичних фаз. Складова $G_2^{III}(q; 0)$ — розв'язок лінійного рівняння (2.15), в якому зроблено наближення $G_1(x_3, 0) =$ тобто

$$V(x_1) \rightarrow V_{q_1} [1 - V_{q_1} V^{-1} \mu_2^0(x_1, -x_1) G_2(q; 0)] \times \\ \times [1 + V_{q_1} V^{-1} \mu_2^0(x_1, -x_1) [1 - G_2(q_1; 0)]]^{-1}. \quad (2.32)$$

Складова $G_2^{IV}(q; 0)$ — розв'язок для складової $G_2(q; 0)$, знайдений на основі розв'язування системи нелінійних інтегральних рівнянь (2.15) (2.16) без будь-яких наближень. Як видно з порівняння $G_2^I(q; 0)$ та $G_2^{II}(q; 0)$, перехід від статичного екранованого потенціалу до динамічно екранованого; го приводить до суттєвого зростання розв'язку при всіх значеннях хвильового вектора, яке особливо значне при малих q (при $r_s = 3,75$ воно складає близько 20 %). Врахування нелінійності мало змінює асимптотику розв'язку $G_2^{II}(q; 0)$ як при малих, так і при великих q , але приводить до зменшення його в основній області ($1,0 \leq q \leq 4,0$), де воно досягає 5 % у випадку $r_s = 3,75$. Ці невеликі зміни $G_2(q; 0)$ суттєво впливають на складову $G_1(q; 0)$, особливо в області малих хвильових векторів. Зазначимо, що описані тут зміни розв'язків тим більші, чим більший параметр неідеальності. На рис. 3 зображено сім'ю кривих $G(q; 0)$, розрахованих з урахуванням нелінійності рівнянь і динамічного екранування потенціалів взаємодії. Короткохвильову асимптотику $G^I(q; 0)$ та $G^{IV}(q; 0)$ як функцій параметра r_s наведено на рис. 2. Як видно з рис. 3, функція $G^{IV}(q; 0)$ має ті ж самі властивості в околі точки $q_0 = 2k_F$, що й $G^I(q; 0)$: пік при малих значеннях r_s ; монотонна поведінка при великих. Значно покращується довгохвильова асимптотика $G^{IV}(q; 0)$ порівняно з асимптотикою $G^I(q; 0)$ (див. нижче, де наведена залежність функції $\gamma(r_s | 0)$ від параметра неідеальності в різних наближеннях).

r_s	1	2	3	4	5	6	7
$\gamma_{RPA}(r_s 0)$	0,2611	0,2703	0,2784	0,2857	0,2924	0,2986	0,3044
$\gamma^I(r_s 0)$	0,1950	0,1678	0,1491	0,1351	0,1240	0,1150	0,1075
$\gamma^{IV}(r_s 0)$	0,2524	0,2306	0,2130	0,2002	0,1887	0,1789	0,1704

2.5. У літературі відомі результати наближених розрахунків поправки на локальне поле, які на перший погляд взаємно суперечать: в одних працях $G(q; 0)$ є монотонною функцією, а в інших — зберігає риси, характерні

для слабо неідеальних систем (див., наприклад, [10, 11, 17]). Зроблені нами розрахунки показують, що дійсно можлива різна поведінка, але в різних областях параметра неідеальності. Цим встановлюються межі засто- сування результатів інших праць. Як відомо, найкращі результати при розрахунку інтегральних характеристик забезпечує інтерполяційна фор- мула в праці [10], сконструйована на основі поправки на локальне поле

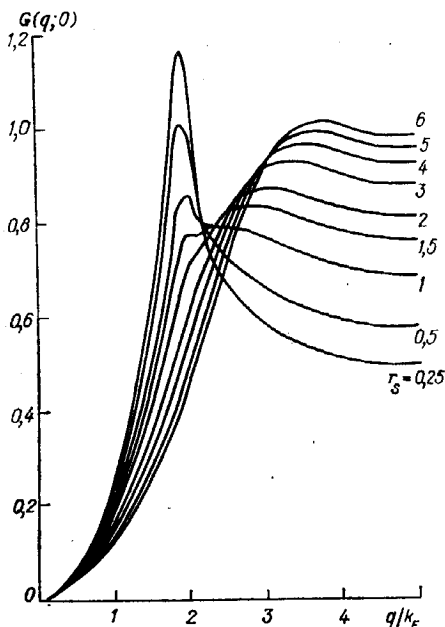


Рис. 3. Статичний варіант розв'язку рівнянь (2.15), (2.16) з врахуванням їх нелінійності і динамічного екранування взаємодії

поведінка в цій області є некоректною, прийнятні в інтервалі малих r_s . У зв'язу з цим виконані в цій праці розрахунки характеристик електронного та у ненадійні в області малих r_s .

Як зазначалося вище, знайдений тут статичний варіант розв'язку рівнянь (2.15), (2.16) не співпадає із статичною границею поправки на локальне поле: $G(q; 0)$ можна інтерпретувати як результат деякого усереднення за частотами динамічної поправки на локальне поле. Знайдена функція близька до статичної границі G_x в області великих хвильових векторів, в якій не залежить від частоти.

3. Деякі характеристики основного стану моделі

Крім асимптотики поправки на локальне поле та її особливостей в околі точки $q_0 = 2k_F$ суттєве значення мають її властивості в цілому (інтегральні), які проявляються при інтегруванні за змінними (q, v) . Внаслідок цього розрахунок енергетичних та структурних характеристик моделі має не лише самостійне значення, але є ще й тестом для поправки на локальне поле.

На рис. 4 зображено залежність кореляційної енергії основного стану моделі в розрахунку на одну частинку $\epsilon_c(r_s) = E_c (Ne^2/2a_0)^{-1}$ від параметра неідеальності в різних наближеннях. Крива 1 відповідає традиційному наближенню хаотичних фаз $\epsilon_c^{RPA}(r_s)$ ($G_x = 0$). Відхилення $\epsilon_c^{RPA}(r_s)$ від «точних» результатів праці [30], одержаних методом Монте-Карло, навіть при $r_s = 1$ досягає близько 30%. Наближення (2.18) значно покращує результати, особливо в області малих r_s (крива 2): відхилен-

слабо неідеальної системи, асимптотик при малих та великих значеннях хвильового вектора, розрахунків енергії моделі методом Монте-Карло [3] та ін. Згідно з нашими розрахунками, знайдена там поправка на локальне поле якісно невірно описує поведінку цієї функції в області середніх значень хвильового вектора, в тому числі в околі точки $q_0 = 2k_F$.

У праці [11] також запропонована інтерполяційна схема розрахунку $G(q)$, що зводиться до лінійного інтегрального рівняння типу (2.15). Знайдений там розв'язок має коректну поведінку в довгохвильовій області при всіх r_s в інтервалі $0 \leq r_s \leq 6,0$, а в короткохвильовій — при проміжних значеннях. Проте знайдена там функція $G(q)$ в області $q \geq 2,0$ не має граничного переходу до $G_{id}(q, 0)$ ($G(q) \rightarrow \frac{1}{2}$ при $q \gg 1$ і $r_s = 0$, $G(q) < 1$ при всіх значеннях q та r_s , максимум в околі $q = 2,0$ дуже слабо залежить від величини r_s). Хоч при $r_s \geq 5,0$ функція $G(q)$ змінює форму в околі $q = 2,0$, на наш погляд, її

ня становить 2 % при $r_s = 1,15$ % при $r_s = 5$. Крива 4 відповідає наближенню (2.26), яке дає дещо завищені результати (відхилення від результатів [30] не перевищує 3 % в області металічних густин). Крива 5, розрахована в наближенні Гелдарта — Тейлора із статичною поправкою на локальне поле $G_{id}(q; 0)$, ілюструє некоректність заміни G_x на $G(q; 0)$ в області малих r_s . Кореляційна енергія, розрахована на основі статичного варіанта розв'язку системи рівнянь (2.15), (2.16) $G(q; 0)$ (див. рис. 3), зображається кривою 3. В області малих r_s відхилення цієї кривої від точних значень є невеликим (≤ 3 % при $r_s \leq 2$). Значне відхилення при великих r_s пояснюється заниженим значенням довгохвильової асимптотики розв'язку. Цей висновок підтверджує розрахунок $\epsilon_c(r_s)$ на основі модельної поправки на локальне поле, яка співпадає з $G(q; 0)$ в області $q \geq 2$, але має асимптотику $G_{RPA}(q; 0)$ в області малих хвильових векторів (крива 6):

$$G_M(q) = \begin{cases} \gamma_{RPA}(r_s | 0) q^2 & \text{при } \gamma_{RPA}(r_s | 0) q^2 \leq G(q; 0), \\ G(q; 0) & \text{при } \gamma_{RPA}(r_s | 0) q^2 > G(q; 0). \end{cases}$$

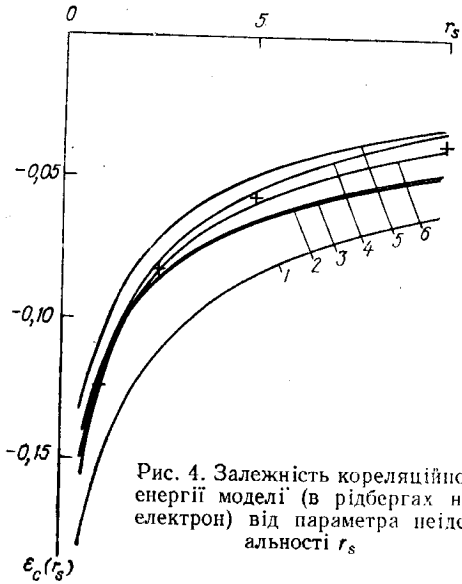


Рис. 4. Залежність кореляційної енергії моделі (в рідбергах на електрон) від параметра неідеальності r_s

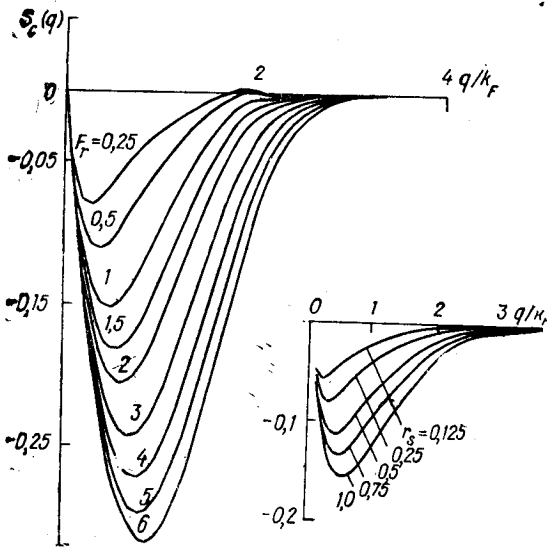


Рис. 5. Кореляційна складова структурного фактора $S_c(q)$

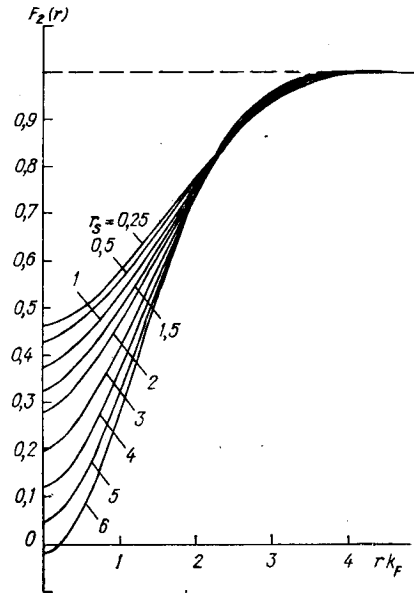


Рис. 6. Бінарна функція розподілу моделі, розрахована на основі знайденої поправки на локальне поле

Результати розрахунку кореляційної складової структурного фактора на основі $G(q; 0)$ наведено на рис. 5. Вони дуже близькі до результатів праці [11] в інтервалі досить великих r_s , як при малих, так і при великих значеннях хвильового вектора. Деяке спотворення кривих в області $q \geq 2k_F$ для слабонеідеальних систем пояснюється заміною G_x на $G(q; 0)$. Розрахунок в наближенні (2.18) дає монотонні криві (див. врізку на рис. 5), що не мають максимуму в околі $q_0 = 2k_F$.

Як видно з рис. 6, знайдена поправка на локальне поле $G(q; 0)$ приводить до хороших результатів в області малих і проміжних значень параметра, які добре узгоджуються з даними інших праць [10, 31, 32]. Проте в області сильної неідеальності, а саме при $r_s \geq 6,0$, бінарна функція $F_2(r)$ набуває невеликих від'ємних значень в околі $r = 0$ та на малих відстанях.

Оцінюючи знайдений у цій праці статичний варіант розв'язку рівнянь (2.15), (2.16), слід зазначити, що він придатний для розрахунку характеристик моделі в області малих та проміжних значень параметра неідеальності. Разом з тим виконані у цьому пункті розрахунки показують, що заміна динамічної поправки G_x статичною $G(q; 0)$ не завжди коректна. Звідси впливає необхідність знаходження динамічних розв'язків системи (2.15), (2.16) та виконання розрахунків характеристик моделі на її основі, що буде видано в окремії праці.

1. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах.— М.: Мир, 1965.— 382 с.
2. Достижения электронной теории металлов. Т. I (пер. с нем.) / Под ред. П. Цише, Г. Леманна.— М.: Мир, 1984.— 284 с.
3. Geldart D. J. M., Vosko S. H. The screening function of an interacting electron gas // Can. J. Phys.— 1966.— 44, N 9.— P. 2137—2171.
4. Geldart D. J. M., Taylor R. Wave-number dependence of the static screening function of an interacting electron gas // Com. J. Phys.— 1970.— 48, N 2.— P. 155—175.
5. Toigo F., Woodruff T. O. Calculation of the dielectric function for a degenerate electron gas with interactions // Phys. Rev. B.— 1970.— 2, N 10.— P. 3958—3966; *ibid.*— 1971.— 4, N 12.— P. 4312—4315.
6. Singwi K. S., Tosi M. P., Land R. H.; Sjolander A. Electron correlation at metallic densities // Phys. Rev.— 1968.— 176, N 2.— P. 589—599.
7. Vashishta P., Singwi K. S. Electron correlation at metallic densities // Phys. Rev. B.— 1972.— 6, N 3.— P. 875—887.
8. Ichimaru S., Utsumi K. Analytic expression for dielectric screening function of strongly coupled electron liquids at metallic and lower densities // *Ibid.*— 1981.— 24, N 12.— P. 7385—7388.
9. Nakamura T., Nagara H. and Miyagi H. Structural expansion for the ground-state energy of simple metals. 1. // Prog. Theor. Phys.— 1980.— 63, N 2.— P. 358—386; N 5.— P. 1509—1527.
10. Ichimaru S. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids // Rev. Mod. Phys.— 1982.— 54, N 4.— P. 1017—1059.
11. Suehiro H., Ousaka Y. and Yasuhara H. A new interpolation between long- and short-range correlations in an electron liquid // J. Phys. C.— 1986.— P. 4247—4277.
12. Langreth D. C. and Vosko S. H. Exact electron-gas response function at high density // Phys. Rev. Lett.— 1987.— 59, N 4.— P. 497—500.
13. Ваврух М. В. n -Частичные корреляционные функции взаимодействующего электронного газа // ТМФ.— 1982.— 51, № 1.— С. 438—449.
14. Ваврух М. В. Базисний підхід в теорії фермі-систем взаємодіючих частинок // УФЖ.— 1991.— 36, № 1.— С. 150—157.
15. Ваврух М. В., Ваврух Н. М. Прямий розрахунок поляризаційного оператора та функції корекції локального поля взаємодіючого електронного газу.— К., 1990.— 44 с.— (Препр./ АН УРСР. Ін-т теорет. фізики; ІТФ-90-70У).
16. Vaurukh M. and Krokhmal'skii T. Reference system approach in the electron liquid theory // Phys. status solidi (b).— 1991.— 168, N 2.— P. 519—532; 1992.— 169, N 2.— P. 451—462.
17. Wang Y. R., Ashraf M. and Overhauser A. W. Behavior of the electron-gas dielectric function near $q = 2K_F$ // Phys. Rev. B.— 1984.— 30, N 10.— P. 5580—5585.
18. Utsumi K. and Ichimaru S. Dielectric formulation of strongly coupled electron liquids at metallic densities // *Ibid.*— 1980.— N 11.— P. 5203—5212.
19. Yasuhara H. Electron correlation and dielectric function of electron gas at metallic densities // J. Phys. Soc. Jap.— 1974.— 36, N 2.— P. 361—369.
20. Taylor R. A simple, useful analytical form of the static electron gas dielectric function // J. Phys. F.: Metal Phys.— 1978.— 8, N 8.— P. 1699—1702.
21. Singwi K. S., Sjolander A., Tosi M. P., Land R. H. Electron correlation at metallic densities // Phys. Rev. B.— 1970.— 1, N 3.— P. 1044—1053.
22. Ваврух М. В., Крохмальський Т. Е. Простейшие динамические кумулянты идеального электронного газа // УФЖ.— 1987.— 32, № 4.— С. 621—625.
23. Ваврух М. В., Крохмальський Т. Е. Динамические кумулянты вырожденного электронного газа.— Киев, 1985.— 37 с.— (Препр./ АН УССР. Ін-т теорет. фізики; ІТФ-85-69Р).
24. Ваврух Н. М. Мікроскопічний розрахунок функції локального поля взаємодіючого електронного газу.— К., 1991.— 24 с.— (Препр./ АН УРСР. Ін-т теорет. фізики; ІТФ-91-57У).
25. Brosens F., Decresse J. T., Lemmens L. F. Frequency-dependent exchange correction to the dielectric function of the electron gas // Phys. status solidi (b).— 1977.— 80.— P. 99—107.

26. *Ваєрух М. В., Крохмальський Т. Е.* Двойное приближение хаотических фаз в теории электронного газа.— Киев, 1986.— 48 с.— (Препр./ АН УССР. Ин-т теорет. физики: ИТФ-86-14Р).
27. *Ваєрух М. В., Крохмальський Т. Е.* Розрахунок характеристик електронного газу в області проміжних густин // УФЖ.— 1991.— 36, № 2.— С. 296—302.
28. *Горобченко В. Д., Максимов Е. Г.* Диэлектрическая проницаемость взаимодействующего электронного газа // УФН.— 1980.— 130, № 1.— С. 65—111.
29. *Ваєрух М. В., Крохмальський Т. Е., Ваєрух Н. М.* Розрахунок функції локального поля взаємодіючого електронного газу // Доп. АН України. Сер. А.— 1992.— № 2.— С. 54—59.
30. *Ceperley D. M., Alder B. J.* Ground state of the electron gas by a stochastic method // Phys. Rev. Lett.— 1980.— 45, N 7.— P. 566—569.
31. *Zabolitsky J. C.* Hypernetted-chain Euler—Lagrange equations and the electron fluid // Phys. Rev. B.— 1980.— 22, N 5.— P. 2352—2372.
32. *Lanto L. J.* Fermi hypernetted-chain calculations of the electron-gas correlations // Ibid.— N 3.— P. 1380—1393.

Інститут фізики конденсованих систем
АН України, Львів

Одержано 9.07.92

УДК 539.192:539.211.001.57

**М. Ф. ГОЛОВКО, А. Ф. КОВАЛЕНКО,
Б. М. СОВ'ЯК**

КВАНТОВІ ВЛАСТИВОСТІ ЧАСТИНОК ПОБЛИЗУ НЕМЕТАЛІЧНИХ ПОВЕРХОНЬ

В адиабатичному наближенні одержано точний розв'язок рівняння Шредінгера для воднеподібного атома біля абсолютно твердої стінки. Досліджено енергетичний спектр і хвильові функції. Вивчається вплив обмеженості потенціального бар'єра та сил електростатичного відображення на квантові властивості атома водню. Знайдено достатньо прості апроксимації для енергії та хвильової функції в основному стані. На основі отриманих результатів досліджено квантові властивості воднеподібної молекули та гелієподібного атома поблизу ідеальної поверхні.

Вступ

Теоретичні дослідження поверхневих властивостей твердих тіл мають важливе значення у зв'язку з застосуванням результатів цих досліджень у різноманітних областях сучасної електронної техніки. Мініатюризація працюючих елементів, наприклад, у напівпровідникових приладах приводить до зростання впливу властивостей поверхонь та меж поділу на їх властивості. З іншого боку, на основі поверхневих ефектів можуть бути створені принципово нові електронні прилади.

Значні відхилення від об'ємних властивостей виникають уже при класичному описі меж поділу фаз. Такий підхід дозволяє досліджувати ефекти нерозподілу зарядів поблизу поверхні, структурне та орієнтаційне впорядкування молекул, а також інші поверхневі ефекти [1].

Зрозуміло, що врахування електронної підсистеми приповерхневих частинок можна виконати лише на квантово-механічному рівні на основі рівняння Шредінгера для частинки поблизу поверхні. Оскільки така модель зіставляється з локалізованою на поверхні напівпровідника домішкою, то межа вибирається у вигляді нескінченного бар'єра. Останнє приводить до того, що виникає модельна задача про розв'язок рівняння Шредінгера для воднеподібного атома в напівпросторі [2, 3]. Показано, що енергія основного стану такого атома відповідає енергії першого збудженого рівня атома в об'ємі, а хвильові функції є половинками хвильових функцій об'ємного атома [4].

Оскільки у праці [4] розглядався випадок, коли ядро атома розташоване безпосередньо на поверхні, у [5—7] здійснено спробу розв'язку аналогічної задачі для довільного розташування ядра щодо межі середовищ. Тут було знайдено залежність енергій основного та першого збудженого станів

© М. Ф. Головка, А. Ф. Коваленко, Б. М. Сов'як, 1993