

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

Представлення зміщень і апроксимаційний статистичний оператор неідеальних фермі систем

М.Ваврух, Я.Куштай

Анотація. На основі модифікованого методу зміщень розроблено спосіб побудови ефективного статистичного оператора, що відіграє роль апроксимаційного і призначений для дослідження сильно неідеальних фермі-систем без використання методів теорії збурень. Загальна схема застосована до моделі однорідної електронної рідини при низьких температурах без обмеження на значення параметра неідеальності.

Approximating Statistical Operator for Strongly Non-Ideal Fermi Systems

M.Vabrukha, Ya.Kushtay

Abstract. On the ground of the modified displacement transformation a method of the construction of the effective statistical operator for strongly non-ideal Fermi systems investigation has been developed. The general scheme is adopted to the homogeneous electron liquid model at the low temperatures without the limitation on the nonideality parameter r_s .

Подается до Журналу фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

ICMP-96-10U

М.Ваврух, Я.Куштай*

ПРЕДСТАВЛЕННЯ ЗМІЩЕНЬ І АПРОКСИМАЦІЙНИЙ
СТАТИСТИЧНИЙ ОПЕРАТОР НЕІДЕАЛЬНИХ ФЕРМІ
СИСТЕМ

*Львівський торговий коледж, 290000, Львів, вул. Менцинського 8

Вступ

Дослідження властивостей фермі-систем займає одне з центральних місць у статистичній фізиці і фізиці твердого тіла. Якщо слабко неідеальні системи до цього часу в основному вивчено методами теорії збурень, то вивчення їх в області сильної неідеальності вимагає застосування нестандартних підходів. Одним з них є метод зміщень і колективних змінних, запропонований в роботах [1,2] для моделі електронної рідини і розвинутий у серії робіт, присвячених фермі-і бозе-системам [3-6].

Метою даної роботи є розробка спеціального варіанту методу зміщень [7] для моделей фермі-систем з локальною двочастинковою взаємодією, відмінного від методу роботи [1]. Встановлено нерівності для термодинамічного потенціалу. Побудовано апроксимаційний статистичний оператор, який дозволяє проводити розрахунок фізичних характеристик без використання традиційних методів теорії збурень.

1. Модифіковане представлення зміщень і апроксимаційний статистичний оператор

Розглянемо фермі-систему з гамільтоніаном загального виду

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} , \quad (1.1)$$

де \hat{H}_0 – оператор кінетичної енергії, а \hat{V} – локальної взаємодії між частинками. Беручи до уваги умову стабільності, будемо припускати для означеності, що статистичне середнє оператора \hat{V} – від’ємне. Фізичній системі (1.1) співставимо модельну систему з гамільтоніаном

$$\hat{H}_\zeta = \hat{H}_0 + \zeta \hat{V} , \quad (1.2)$$

де ζ – параметр включення взаємодії ($0 < \zeta \leq 1$). Маючи на увазі наступний розрахунок статистичної суми у великому канонічному ансамблі та узагальнюючи перетворення роботи [7], виконаємо представлення зміщень у статистичному операторі модельної системи

$$\hat{P}_\zeta = \exp\{-\beta[\hat{H}_\zeta - \mu\hat{N}]\} = \{\exp \hat{U}_\zeta\} \hat{\sigma}_\zeta . \quad (1.3)$$

Тут β – обернена температура, μ – змінна хімічного потенціалу, \hat{N} – оператор числа частинок. Будемо вимагати, щоб невідомий оператор зміщень \hat{U}_ζ задовільняв умові ермітовості і комутував з операторами

\hat{N} та \hat{V} , тобто був би оператором ефективних багаточастинкових локальних взаємодій. Диференціюючи (1.3) за змінною β , одержуємо операторну рівність

$$-\left\{\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_\zeta\right\}\hat{\sigma}_\zeta - \frac{\partial}{\partial\beta}\hat{\sigma}_\zeta = \{\hat{H}_0 + \zeta\hat{V} - \mu\hat{N} + \hat{K}_\zeta + \hat{L}_\zeta\}\hat{\sigma}_\zeta ,$$

$$\hat{K}_\zeta = [\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \quad \hat{L}_\zeta = \frac{1}{2}[[\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \hat{U}_\zeta]_- . \quad (1.4)$$

Згідно із зробленими вище припущеннями, \hat{K}_ζ – антиермітів оператор, \hat{L}_ζ – ермітів.

Нехай оператор \hat{U}_ζ задовільняє рівнянню

$$-\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_\zeta = \zeta\hat{V} + \hat{L}_\zeta . \quad (1.5)$$

У відповідності з рівністю (1.4)

$$-\frac{\partial}{\partial\beta}\hat{\sigma}_\zeta = \{\hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \hat{K}_\zeta\}\hat{\sigma}_\zeta . \quad (1.6)$$

З (1.3) випливає гранична умова: $\hat{U}_\zeta \rightarrow 0, \hat{\sigma}_\zeta \rightarrow 1$ при $\beta \rightarrow 0$. Це відповідає класичній границі, в якій $\hat{P}_\zeta \rightarrow \exp(-\beta\zeta\hat{V}) \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu\hat{N}]\}$. Використовуючи представлення взаємодії на основі оператора \hat{H}_0 , запишемо статистичний оператор модельної системи в такому вигляді :

$$\hat{P}_\zeta = \hat{P}_\zeta^0 \cdot \hat{S}_\zeta, \quad \hat{P}_\zeta^0 = \exp \hat{U}_\zeta \exp\{-\beta[\hat{H}_0 - \mu\hat{N}]\},$$

$$\hat{S}_\zeta = T \exp \left\{ - \int_0^\beta \hat{K}_\zeta(\beta') d\beta' \right\} , \quad (1.7)$$

$$\hat{K}_\zeta(\beta') = \exp(\beta' [\hat{H}_0 - \mu\hat{N}]) \hat{K}_\zeta \exp(-\beta' [\hat{H}_0 - \mu\hat{N}]) ,$$

а T – символ звичайного хронологічного впорядкування. Статистичний оператор \hat{P}_ζ^0 відповідає деякій модельній системі, що має статистичну суму

$$Z_\zeta^0 = Sp \hat{P}_\zeta^0 = \exp[-\beta\Omega_\zeta^0(\mu)] . \quad (1.8)$$

До цієї системи близька інша модельна система, яка описується статистичним оператором

$$\hat{P}_\zeta^\Gamma = \exp\{-\beta[\hat{\Gamma}_\zeta - \mu\hat{N}]\} , \quad \hat{\Gamma}_\zeta = \hat{H}_0 - \frac{\partial}{\partial\beta}\hat{U}_\zeta . \quad (1.9)$$

Її термодинамічний потенціал

$$\Omega_{\zeta}^{\Gamma}(\mu) = -\beta^{-1} \ln Sp \hat{P}_{\zeta}^{\Gamma} \quad (1.10)$$

пов'язаний з термодинамічним потенціалом системи (1.1)

$$\Omega(\mu) = -\beta^{-1} \ln Sp \hat{P}_1 \quad (1.11)$$

такою нерівністю :

$$0 \leq \Omega(\mu) - \Omega_1^{\Gamma}(\mu) \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \rangle_{P_1^{\Gamma}} . \quad (1.12)$$

При цьому символ $\langle \dots \rangle_P$ означає звичайне статистичне середнє: $\langle \hat{A} \rangle = \{Sp \hat{P}\}^{-1} Sp \{\hat{A} \hat{P}\}$. Згідно з (1.12) термодинамічний потенціал моделі, що описується оператором \hat{P}_1^{Γ} , обмежує знизу термодинамічний потенціал фізичної системи (1.1). Для доведення скористаємось відомим методом [8] оцінки термодинамічного потенціалу. Оскільки він ґрунтується на використанні гамільтоніанів, а не статистичних операторів, розглянемо допоміжну модельну систему з "гамільтоніаном"

$$\hat{\mathcal{H}}_1(t) = \hat{\Gamma}_{\zeta} + t \hat{K}_{\zeta} , \quad (1.13)$$

де $0 < t \leq 1$. При $t = 1$ оператор $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ приймає значення

$$\hat{\mathcal{H}}_1(1) = \hat{H}_0 - \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta} + \hat{K}_{\zeta} = e^{-\hat{U}_{\zeta}} \hat{H}_{\zeta} e^{\hat{U}_{\zeta}} . \quad (1.14)$$

Завдяки властивості циклічності шпура статистична сума системи з "гамільтоніаном" $\hat{\mathcal{H}}_1(1)$ співпадає із статистичною сумою модельної системи (1.2), оскільки

$$\begin{aligned} Sp \{ \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_1(1) - \mu \hat{N})] \} &= \\ &= Sp \{ \exp[-\beta(\hat{H}_{\zeta} - \mu \hat{N})] \} = Z_{\zeta}(\mu) = \exp[-\beta \Omega_{\zeta}(\mu)] . \end{aligned} \quad (1.15)$$

В цьому сенсі оператори $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ еквівалентний "гамільтоніан"

$$\hat{\mathcal{H}}_2(t) = \hat{\Gamma}_{\zeta} - t^2 \hat{L}_{\zeta} = e^{t \hat{U}_{\zeta}} \hat{\mathcal{H}}_1(t) e^{-t \hat{U}_{\zeta}} , \quad (1.16)$$

який при $t = 1$ співпадає з \hat{H}_{ζ} . Обидві складові "гамільтоніану" (1.16) – ермітові.

Гамільтоніан фізичної системи (1.1) представимо у вигляді таких двох доданків :

$$\hat{H} = \hat{\Gamma}_{\zeta} + \left\{ \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta} \right\} . \quad (1.17)$$

З відомої нерівності Боголюбова (див. [5]) знаходимо, що

$$\langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta} \rangle_{P_1} \leq \Omega(\mu) - \Omega_{\zeta}^{\Gamma}(\mu) \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta} \rangle_{P_{\zeta}^{\Gamma}} . \quad (1.18)$$

Розглянемо статистичну суму $Z(\mu|t)$ і термодинамічний потенціал $\Omega(\mu|t)$ допоміжної модельної системи (1.13) при $\zeta = 1$

$$Z(\mu|t) = Sp \{ \exp[-\beta(\hat{\Gamma}_1 - \mu \hat{N} + t \hat{K}_1)] \} = \exp[-\beta \Omega(\mu|t)] . \quad (1.19)$$

У відповідності з (1.11), (1.14) $\Omega(\mu|1) = \Omega(\mu)$, $\Omega(\mu|0) = \Omega_1^{\Gamma}(\mu)$. Для оцінки зміни $\Omega(\mu|t)$ за рахунок оператора \hat{K}_1 за методом [5] на основі тотожності

$$\Omega(\mu|t) - \Omega(\mu|0) = \int_0^t \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) dt \quad (1.20)$$

розрахуємо похідні

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Omega(\mu|t) &= \langle \hat{K}_1 \rangle_{P_1(t)} , \\ \beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2} \Omega(\mu|t) &= \langle \hat{K}_1 \rangle_{P_1(t)}^2 - \\ &- Z^{-1}(\mu|t) \int_0^1 Sp \{ \hat{K}_1 e^{-\beta \gamma \hat{\mathcal{H}}_1} \hat{K}_1 e^{-\beta(1-\gamma) \hat{\mathcal{H}}_1} \} d\gamma , \\ \hat{P}_1(t) &= \exp\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_1(t) - \mu \hat{N}]\} \equiv \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_1) . \end{aligned} \quad (1.21)$$

В Додатку доведено, що $\frac{d}{dt} \Omega(\mu|t)$ є монотонною неспадною функцією параметра t , рівною нулеві при $t = 0$. Внаслідок цього з тотожності (1.20) випливає нерівність

$$0 \leq \Omega(\mu) - \Omega_1^{\Gamma} \leq \{ \langle \hat{K}_1 \rangle_{P_1(t)} \}_{t=1} , \quad (1.22)$$

яка визначає знак різниці $\Omega(\mu) - \Omega_1^{\Gamma}(\mu)$, на відміну від нерівності (1.18). Комбінуючи ці дві нерівності, одержуємо нерівність (1.12). Відмітимо, що вона має місце для квантових систем з гамільтоніанами типу (1.1) незалежно від статистики і конкретного вигляду оператора \hat{V} .

Нерівність (1.12) є підставою для побудови такого статистичного оператора \hat{P}_{ζ}^{Γ} , який відіграє роль апроксимаційного для даної фізичної системи. Припустимо, що статистичне середнє оператора взаємодії від'ємне. Порівнюючи нерівності (1.12) та (1.18), знаходимо, що

$$0 \leq \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \rangle_{P_1^{\Gamma}} . \quad (1.23)$$

При умові, що $\langle \hat{V} \rangle_{P_1^\Gamma} < 0$, одержуємо нерівність

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_1 \right\rangle_{P_1^\Gamma} \geq 0. \quad (1.24)$$

Як впливає з рівняння (1.5), його розв'язок можна представити у вигляді

$$\hat{U}_\zeta = \zeta^{1/2} \hat{\varphi}(\beta^*), \quad \beta^* \equiv \beta \zeta^{1/2}, \quad (1.25)$$

де оператор $\hat{\varphi}(\beta^*)$ задовільняє рівнянню

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\varphi}(\beta) = \hat{V} + \frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \varphi(\beta)]_-, \varphi(\beta)]_-. \quad (1.26)$$

Отже, в тих областях параметрів системи, де залежність $\hat{\varphi}(\beta)$ від β є монотонною, оператор \hat{U}_ζ має монотонну залежність від параметра ζ . Таку ж залежність має $\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_1^\Gamma}$.

В силу нерівностей (1.23), (1.24) і монотонності $\langle \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_\zeta \rangle_{P_1^\Gamma}$ існує можливість регулювати границі відхилення $\Omega_\zeta^\Gamma(\mu)$ від $\Omega(\mu)$ відповідним вибором параметра $\zeta < 1$. Визначаючи ζ_0 умовою

$$-\langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_1} = \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_1^\Gamma} \quad (1.27)$$

і вводячи величину

$$\Delta(\zeta_0) = \langle \hat{V} + \frac{\partial}{\partial \beta} \hat{U}_{\zeta_0} \rangle_{P_1^\Gamma}, \quad (1.28)$$

представимо нерівність (1.18) у такій формі:

$$-\Delta(\zeta_0) \leq \Omega(\mu) - \Omega_{\zeta_0}^\Gamma(\mu) \leq \Delta(\zeta_0). \quad (1.29)$$

$\Delta(\zeta_0)$ встановлює мінімальні симетричні границі для різниці термодинамічних потенціалів фізичної системи і модельної (1.9): $|\Omega_{\zeta_0}^\Gamma(\mu) - \Omega(\mu)| \leq \Delta(\zeta_0)$. Через малізну $\Delta(\zeta_0)$ статистичний оператор \hat{P}_ζ^Γ відіграє роль апроксимаційного для системи (1.1). В класичній границі з нерівності (1.12) впливає очевидна рівність $\Omega(\mu) = \Omega_1^\Gamma(\mu)$, оскільки $\hat{U}_1 \rightarrow -\beta \hat{V}$.

Покажемо, що статистичний оператор $\hat{P}_{\zeta_0}^\Gamma$ близький до \hat{P}_ζ^0 . Дійсно, використовуючи властивість циклічності шпуру і рівняння (1.5), знаходимо

$$\begin{aligned} Sp\{\exp[-\beta(\hat{\Gamma}_\zeta - \mu\hat{N})]\} &= \\ &= Sp\{\exp\hat{U}_\zeta \cdot \exp[-\beta(\hat{\Gamma}_\zeta - \mu\hat{N})] \exp(-\hat{U}_\zeta)\} = \\ &= Sp\{\exp[-\beta(\hat{H}_\zeta - \mu\hat{N} - \hat{K}_\zeta + 2\hat{L}_\zeta)]\}. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Над оператором під знаком шпуру виконаємо перетворення зміщень

$$\exp\{-\beta[\hat{H}_\zeta - \mu\hat{N} - \hat{K}_\zeta + 2\hat{L}_\zeta]\} = \{\exp\hat{U}_\zeta\} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)} \quad (1.31)$$

з оператором \hat{U}_ζ , який задовільняє рівнянню (1.5). Для невідомого $\hat{\sigma}_\zeta^{(1)}$ знаходимо таке операторне рівняння:

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)} = \left\{ \hat{H}_0 - \mu\hat{N} + \beta \frac{\partial \hat{K}_\zeta}{\partial \beta} - \beta [\hat{K}_\zeta, \frac{\partial \hat{U}_\zeta}{\partial \beta}]_- \right\} \hat{\sigma}_\zeta^{(1)}. \quad (1.32)$$

Як буде показано далі, оператори $\frac{\partial \hat{K}_\zeta}{\partial \beta}, [\hat{K}_\zeta, \frac{\partial \hat{U}_\zeta}{\partial \beta}]_-$ є експоненційно малими в області низьких температур. Нехтуючи ними, знаходимо, що $\hat{\sigma}_\zeta^{(1)} \simeq \exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})]$, а $\hat{P}_\zeta^\Gamma \simeq \hat{P}_\zeta^0$.

2. Оператор зміщень для моделі електронної рідини

Побудуємо оператор \hat{U}_ζ для моделі електронної рідини, використовуючи зображення вторинного квантування для гамільтоніану (1.1):

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k},s} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}, \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}, \\ \hat{V} &= (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Тут $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, $V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 / q^2$ – фур'є-образ потенціалу Кулона, V – об'єм системи, $a_{\mathbf{k},s}$ – оператори вторинного квантування на базисі плоских хвиль. Рівнянню (1.5) задовільняє оператор у вигляді суми багаточастинкових локальних взаємодій

$$\begin{aligned} \hat{U}_\zeta &= \hat{N} \nu_1(\zeta, \beta, \mu) + \sum_{n \geq 2} \hat{u}_n(\zeta, \beta, \mu), \\ \hat{u}_n(\zeta, \beta, \mu) &= (n!)^{-1} V^{1-n} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \zeta, \beta, \mu) \times \\ &\times \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0}, \\ \hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) &= \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n} \sum_{s_1, \dots, s_n} \times \\ &\times a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}_1, s_1}^+ \dots a_{\mathbf{k}_n + \mathbf{q}_n, s_n}^+ a_{\mathbf{k}_n, s_n} \dots a_{\mathbf{k}_1, s_1}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Має місце умова $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \neq 0$. Невідомі $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \zeta, \beta, \mu)$ можна інтерпретувати як фур'є-образи n -частинкових ефективних взаємодій, які не зводяться до взаємодій нижчого порядку. Вони залежать від змінної хімічного потенціалу μ , оскільки ми використовуємо великий канонічний ансамбль. Обчислюючи комутатор $[[\hat{H}_0, \hat{U}_\zeta]_-, \hat{U}_\zeta]_-$ у явному вигляді, виконаємо заміну $\hat{N} \hat{I}_n(\dots) \rightarrow N(\mu) \hat{I}_n(\dots)$, де $N(\mu) = \langle \hat{N} \rangle$ є статистичне середнє оператора числа частинок. Така заміна обґрунтована тим, що перетворення (1.3) має місце під знаком $Spr\{\dots\}$. Похибка, що при цьому виникає, має порядок N^{-1} . Прирівнюючи коефіцієнти при однакових операторах $\hat{I}_n(\dots)$ у рівнянні (1.5), одержуємо ланцюжок рівнянь типу згортки для коефіцієнтних функцій (далі для скорочення позначень $\xi = (\zeta, \beta, \mu)$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \nu_1(\xi) &= N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi), \\ \frac{\partial}{\partial \beta} \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) &= -V_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) + \\ &+ \sum_{m \geq 2} \Psi_n^{(m)}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) + 2N(\mu) V^{-1} \nu_2^2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \times \\ &\times \epsilon_{\mathbf{q}_1} \delta_{n,2} + (1 - \delta_{n,2}) \nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi). \end{aligned} \quad (2.3)$$

При записі цієї системи рівнянь використано такі позначення:

$$\begin{aligned} V_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= \zeta V_{\mathbf{q}}, \\ V_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 | \xi) &= h^2 (2m)^{-1} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, 0} \times \\ &\times \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i | \xi) \nu_2(\mathbf{q}_j, -\mathbf{q}_j | \xi), \\ V_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2 | \xi) &= -4h^2 m^{-1} \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 | \xi) \times \\ &\times \{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) + (\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_2 | \xi)\}, \\ \Psi_2^{(2)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= h^2 m^{-1} V^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \times \\ &\times \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q} | \xi), \\ \Psi_2^{(3)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= 2h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_1} \{\mathbf{q}_1^2 + (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q})\} \times \\ &\times \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \nu_3(-\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q} | \xi), \\ \Psi_2^{(4)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= h^2 N^2 m^{-1} V^{-3} \sum_{\mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1^2 \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \times \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} &\times \nu_4(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi), \\ &\dots\dots\dots \\ \Phi_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi) &= h^2 m^{-1} N(\mu) V^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i^2 \nu_2(\mathbf{q}_i, -\mathbf{q}_i | \xi). \end{aligned}$$

Рівняння для функцій $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n | \xi)$ при $n \geq 3$ мають однакову структуру. Рівняння ж для парної функції $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$ відзначається більш сильною нелінійністю. Системі рівнянь (2.3) відповідає гранична умова: $\nu_n(\dots) \rightarrow 0$ при $\beta \rightarrow 0$.

Для складної системи суттєво нелінійних інтегро - диференціальних рівнянь (2.3) - (2.4) має зміст знаходження наближених розв'язків. В цій системі особливе місце займає рівняння для $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$. Як видно з аналізу рівняння, в області невеликих хвильових векторів можна знехтувати його інтегральними складовими $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$ при $m \geq 2$. В цьому наближенні воно зводиться до диференціального рівняння, а його розв'язком є

$$\begin{aligned} \nu_2^{(0)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) &= -\zeta^{1/2} V_{\mathbf{q}} (h\omega_0)^{-1} \{1 - R(\beta)\} \{1 + R(\beta)\}^{-1}, \\ R(\beta) &= \exp\{-2\beta \zeta^{1/2} h\omega_0\}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

де $\omega_0 = \{4\pi e^2 N(\mu) m^{-1} V^{-1}\}^{1/2}$. При $\mu = \mu^*$ (де μ^* - хімічний потенціал системи) ω_0 співпадає з частотою плазових коливань. Хоч розв'язок (2.5) справедливий в асимптотиці малих хвильових векторів, він визначає характер залежності $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$ від температури: експоненційно слабку залежність в області низьких температур ($k_B T \leq h\omega_0$). Це дає підставу розглядати рівняння для $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$ як інтегральне, нехтуючи похідною $\frac{\partial}{\partial \beta} \nu_2(\dots)$:

$$\begin{aligned} &-\zeta V_{\mathbf{q}} + 2N(\mu) V^{-1} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) - h^2 (mV)^{-1} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}_1} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q} - \mathbf{q}_1) \nu_2(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1 | \xi) \times \\ &\times \nu_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q} | \xi) + \sum_{m \geq 3} \Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi) = 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

Інтегральні складові $\Psi_2^{(m)}(\dots)$ при $m \geq 3$ можна враховувати методом послідовних наближень. Через це розглянемо спочатку нелінійне інтегральне рівняння при $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$. Для аналізу і наближеного розв'язування його введемо безрозмірні змінні $x = qa_0 n^{-1/3}$ і функцію $y_2(x) = \zeta^{-1/2} (4\pi a_0^3)^{-1} n^{7/6} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q} | \xi)$, де a_0 - радіус Бора, $n = 4\pi a_0^3 N(\mu) / V$. В цих змінних при $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$ маємо таке

нелінійне рівняння

$$x^2 y_2^2(x) - x^{-2} - (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{x}_1 (\mathbf{x}_1, \mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \times \quad (2.7)$$

$$\times y_2(x_1) y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|) = 0 .$$

Виконуючи перетворення Фур'є до змінних ρ , спряжених змінним \mathbf{x} ,

$$y_2(x) = \int f_2(\rho) e^{-i\mathbf{x}\rho} d\rho , \quad (2.8)$$

запишемо еквівалентне рівняння в координатному представленні :

$$\{4\pi \nabla f_2(\rho)\}^2 - \rho^{-1} - 4\pi \int f_2(\rho_1) \nabla_\rho^2 f_2(|\rho - \rho_1|) d\rho_1 = 0 . \quad (2.9)$$

З аналізу рівняння (2.7) видно, що $y_2(x) \sim -x^{-2}$ при $x \rightarrow 0$ ($f_2(\rho) \sim -\rho^{-1}$ при $\rho \rightarrow \infty$). З рівняння (2.9) знаходимо, що

$$\{\nabla f_2(\rho)\}^2 \sim \rho^{-1} + \text{const при } \rho \rightarrow 0 , \quad (2.10)$$

через те $f_2(\rho) \simeq C + C_1 \rho^{1/2} + C_2 \rho^{3/2} + \dots$ при $\rho \rightarrow 0$. Використовуючи цю асимптотику, знайдемо наближений – асимптотично точний – розв'язок рівняння (2.7) методом пробних функцій. Функцію з невеликим числом параметрів можна задати або в координатному, або в імпульсному представленні:

$$f_2^{(0)}(\rho) = -B\rho^{-1} [1 - e^{-p\rho}] [1 + b\rho^{1/2} e^{-\gamma\rho}] , \quad (2.11)$$

$$y_2^{(0)}(x) = -Ax^{-2} [1 + ax^2 - bx^4 (1 + ax^2)^{-1}]^{-3/4} , \quad a^2 > b .$$

Безпосередній розрахунок показує, що $y_2^{(0)}(x)$ має таку ж асимптотику в координатному представленні, як і $f_2^{(0)}(\rho)$. В імпульсному представленні обидві функції теж мають подібну асимптотику, а саме:

$$y_2^{(0)}(x) \sim \begin{cases} -x^{-2} + \text{const} + \dots , & x \ll 1 , \\ -\text{const} x^{-7/2} + \dots , & x \gg 1 . \end{cases} \quad (2.12)$$

Параметри функції $y_2^{(0)}(x)$ знайдено з умови, щоб у рівнянні (2.7) компенсувались члени виду x^{-2} при $x \gg 1$, а також x^{-2} і x^0 при $x \ll 1$:

$$A = 1 , \quad a = 4(9\pi)^{-2/3} (1 - \xi_0)^{-1} , \quad b = \xi_0 a^2 . \quad (2.13)$$

При цьому ξ_0 є розв'язком рівняння

$$(1 - \xi_0)^{3/2} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_0^n (2n+1)! 2^{-n} (n!)^{-1} (2n + \frac{1}{2})^{-1} = 4/3 \quad (2.14)$$

і наближено рівне 0,2929... . Параметри функції $f_2^{(0)}(\rho)$ знайдені з тих самих умов, а також з вимоги, щоб рівняння (2.7) точно виконувалося при фіксованому значенні змінної ($x = p$)

$$B = (4\pi)^{-1} , \quad b = -2p^{-1} , \quad \gamma = p \cdot 0,5758... , \quad p = 2,7008... . \quad (2.15)$$

$y_2^{(0)}(x)$ і $f_2^{(0)}(\rho)$ дуже близькі між собою у всьому інтервалі $0 \leq x \leq \infty$. На рис. 1 представлено $Z_2(x) = x^2 y_2^{(0)}(x)$ в різних наближеннях. Крива 1 відповідає функції $y_2^{(0)}(x)$, а крива 2 – розв'язку рівняння (2.7), знайденому чисельним методом. Відмітимо, що $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ є фур'є-образом потенціалу взаємодії квантових пакетів. Виходячи з функції $f_2^{(0)}(\rho)$, маємо при абсолютному нулі температури

$$\nu_2(\mathbf{r}|\xi) = V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \quad (2.16)$$

$$-(\zeta r_s)^{1/2} 3^{-1/6} \rho^{-1} [1 - e^{-p\rho}] [1 - \frac{2}{p} \rho^{1/2} e^{-\gamma\rho}] ,$$

де $\rho = 3^{1/3} (a_0 r_s)^{-1} r$, а $r_s(\mu) = a_0^{-1} \left(\frac{3V}{4\pi N(\mu)} \right)^{1/3}$ при $N(\mu) = N$ співпадає з параметром Вігнера-Бракнера [9]. При цьому $\nu_2(0|\zeta) = -(\zeta r_s)^{1/2} 3^{-1/6} p$.

В області низьких температур рівняння для функцій

$$y_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = \zeta^{-1/2} n^{m-5/6} (4\pi a_0)^{1-m} \nu_m(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_m|\xi) \quad (2.17)$$

також не містять жодних параметрів, як і (2.7) :

$$y_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) \tilde{\Phi}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) + \quad (2.18)$$

$$+ \sum_{l \geq 2} \tilde{\Psi}_m^{(l)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) = \tilde{V}_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m) .$$

Методом пробних функцій одержуємо асимптотичні розв'язки цих рівнянь :

$$y_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \simeq -\tilde{V}_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \{ \eta(x_1) + \quad (2.19)$$

$$+ \eta(x_2) + \eta(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \}^{-1} ,$$

$$y_4(\mathbf{x}_1, -\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, -\mathbf{x}_2) \simeq 2y_3(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \{ \eta(x_1) +$$

$$+\eta(x_2)\}^{-1}\{(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)y_2(x_1) + (\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)y_2(x_2)\}$$

$$\dots\dots\dots$$

$$\tilde{V}_3(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^3 (\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)y_2(x_i)$$

$$y_2(x_j), \quad \eta(x) = -[x^2 y_2(x)]^{-1}.$$

Використовуючи (2.19), знайдемо наближені вирази для інтегральних складових $\Psi_2^{(m)}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ і, таким чином, замкнуте інтегральне рівняння для функції $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$. Записане в безрозмірних змінних, воно не містить ніяких параметрів і визначає універсальну функцію $y_2(x)$:

$$-x^{-2} + x^2 y_2^2(x) - (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{x}_1 (\mathbf{x}_1, \mathbf{x} - \mathbf{x}_1)y_2(x_1) \times$$

$$\times y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|) + \quad (2.20)$$

$$+ \sum_{m \geq 3} \tilde{\Psi}_2^{(m)}(\mathbf{x}, -\mathbf{x}) = 0.$$

Ми дослідили аналітично і чисельно рівняння (2.20) при врахуванні внеску тричастинкових взаємодій

$$\Psi_2^{(3)}(\mathbf{x}) = \pi^{-2} \int d\mathbf{x}_1 [x_1^2 + (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x})]y_2(x_1) \times$$

$$\times \{\eta(x) + \eta(x_1) + \eta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|)\}^{-1} \times \quad (2.21)$$

$$\times \{(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1)y_2(x)y_2(x_1) + (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x})y_2(x_1)y_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}|) +$$

$$+ (\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{x}_1)y_2(x)y_2(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1|)\}.$$

Чисельно знайденому розв'язку в цьому наближенні відповідає крива 3 на рис. 1. Відносне відхилення кривої 3 від кривої 2 досягає величини порядку 20 % в основній області змінної x . Розв'язку рівняння (2.20) при врахуванні $\Psi_2^{(3)}(\mathbf{x})$ і $\Psi_2^{(4)}(\mathbf{x})$ (має місце їх значна взаємна компенсація) відповідає крива 4.

Щоб наближено розв'язати рівняння для $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)$ при скінчених температурах беремо до уваги асимптотичний розв'язок (2.6) і зробимо підстановку: $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) = \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)f_{\mathbf{q}}(\beta)$, де $\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)$ є розв'язком рівняння (2.7), $f_{\mathbf{q}}(\beta)$ прямує до одиниці при $\beta \rightarrow \infty$, а при $\beta \rightarrow 0$ функція $f_{\mathbf{q}}(\beta)$ прямує до нуля. Наближено рівняння для $f_{\mathbf{q}}(\beta)$ має такий вигляд:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} f_{\mathbf{q}}(\beta) = \zeta V_{\mathbf{q}}[\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^{-1} \{f_{\mathbf{q}}^2(\beta) - 1\}. \quad (2.22)$$

Його розв'язком є

$$f_{\mathbf{q}}(\beta) = \{1 - R_{\mathbf{q}}(\beta)\} \{1 + R_{\mathbf{q}}(\beta)\}, \quad (2.23)$$

$$R_{\mathbf{q}}(\beta) = \exp\{2\beta \zeta V_{\mathbf{q}}[\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^{-1}\}.$$

Такий розв'язок має сенс в області малих значень вектора \mathbf{q} , де показник експоненти може бути записаний як

$$-2\beta \zeta^{1/2} h \omega_{\mathbf{q}}, \quad (2.24)$$

а $\omega_{\mathbf{q}}$ визначає спектр плазмових коливань:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 \{1 + \alpha(q/k_F)^2 + \dots\}. \quad (2.25)$$

Використовуючи $y_2^{(0)}(x)$, для коефіцієнта дисперсії одержуємо значення $\alpha = \frac{1}{2}(\frac{3}{2})^{1/3}[1 - \xi_0]^{-1} \sim 1$. Він не залежить від параметра неідеальності, на відміну від наближення слабо неідеальних систем. Тут $k_F = (3\pi^2 \frac{N}{V})^{1/3}$ - хвильове число Фермі.

Підставляючи (2.23) у перше з рівнянь (2.4), знаходимо наближений розв'язок для функції $\nu_1(\xi)$:

$$\nu_1(\xi) \cong N(\mu)V^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} [\nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu)]^2 \times \quad (2.26)$$

$$\times \{\beta + [\zeta V_{\mathbf{q}}]^{-1} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\zeta, \infty, \mu) [1 - R_{\mathbf{q}}(\beta)] [1 + R_{\mathbf{q}}(\beta)]^{-1}\}.$$

Переходячи до безрозмірних змінних, маємо:

$$\nu_1(\xi) \cong \beta \frac{Ryd}{r_s(\mu)} \zeta d(\beta^*), \quad (2.27)$$

$$d(\beta^*) = \frac{2}{\pi} 3^{1/3} \int_0^{\infty} dx x^4 y_2^2(x) \left\{ 1 + \frac{x^2 y_2(x)}{\beta^*} \cdot \frac{1 - R(x|\beta^*)}{1 + R(x|\beta^*)} \right\},$$

$$R(x|\beta^*) = \exp\{2\beta^* [x^2 y_2(x)]^{-1}\}.$$

Отже, при низьких температурах функція $\nu_1(\xi)$ пропорційна β , а всі інші коефіцієнтні функції $\nu_n(\dots)$ мають слабу експоненційну залежність від цієї змінної, з чого випливає експоненційна малість операторів $\frac{\partial \hat{K}_{\zeta}}{\partial \beta}$ і $[\hat{K}_{\zeta}, \frac{\partial \hat{U}_{\zeta}}{\partial \beta}]$.

3. Розрахунки і оцінки

Завершення схеми побудови апроксимаційного статистичного оператора для моделі електронної рідини вимагає розрахунку ζ_0 як функції параметра неідеальності. З цією метою розглянемо статистичну

суму $Z_\zeta^0(\mu)$ в околі точки $\mu = \mu^*$, де μ^* – хімічний потенціал моделі (корінь рівняння $N = -\frac{d}{d\mu}\Omega_\zeta^0(\mu)$). Виконуючи зсув змінної хімічного потенціалу, маємо :

$$\begin{aligned} Z_\zeta^0(\mu) &= Z_0(\tilde{\mu}) \langle \exp \hat{U}(\hat{\rho}|\xi) \rangle_0, \\ \tilde{\mu} &\equiv \mu + \beta^{-1} \{ \nu_1(\xi) - (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) + \\ &+ (3V^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \neq 0} \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2|\xi) + \dots \}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

де $Z_0(\tilde{\mu})$ – статистична сума ідеальної системи (яка відіграє роль базисної), а символ $\langle \dots \rangle_0$ означає засереднення за станами цієї системи. При цьому

$$\begin{aligned} \hat{U}(\hat{\rho}|\xi) &= \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \tilde{\nu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi) \prod_{j=1}^n \hat{\rho}_{\mathbf{q}_j}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

є оператором ефективних багаточастинкових взаємодій, записаним в термінах операторів електронної густини

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}. \quad (3.3)$$

У зв'язку з переходом від $\hat{I}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ до $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ функції $\tilde{\nu}_n(\dots)$ є лінійними комбінаціями $\nu_n(\dots)$, наприклад:

$$\begin{aligned} \tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) &= \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) - V^{-1} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3, 0} \nu_3(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) + \\ &+ V^{-2} \sum_{\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_4, 0} \nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4|\xi) + \dots, \\ \tilde{\nu}_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) &= \\ &= \nu_3(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) - V^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \nu_4(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3|\xi) + \dots \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для розрахунку середнього у формулі (3.1) перейдемо до простору колективних змінних $\rho_{\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}}^c + i\rho_{\mathbf{q}}^s$ за допомогою оператора переходу [10]

$$\hat{J}(\rho - \hat{\rho}) = \prod_{c(\mathbf{q})} \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}), \quad (3.5)$$

що є аналогом функції переходу в класичній статистиці [11,12]. Оскільки $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$ та $\hat{\rho}_{-\mathbf{q}}$ не є незалежними ($\hat{\rho}_{-\mathbf{q}} = \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^+$), область $c(\mathbf{q})$ включає половину всіх можливих значень \mathbf{q} . Змінні $\rho_{\mathbf{q}}$ не пов'язані з представленням взаємодії і через це є прямими аналогами колективних координат у статистиці класичних систем. Використовуючи співвідношення

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \int (d\rho) \hat{J}(\rho - \hat{\rho}) \rho_{\mathbf{q}}, \quad (d\rho) = \prod_{c(\mathbf{q})} d\rho_{\mathbf{q}}^c d\rho_{\mathbf{q}}^s \quad (3.6)$$

та інтегральне зображення δ -функції, знаходимо :

$$\begin{aligned} Z_\zeta^0(\mu) &= Z_0(\tilde{\mu}) \int (d\rho) \exp U(\rho|\xi) \times \\ &\times \int (d\omega) J(\omega) \exp[i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Тут

$$\begin{aligned} U(\rho|\xi) &= \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} V^{1-n} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \tilde{\nu}_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi) \prod_{j=1}^n \rho_{\mathbf{q}_j} - \end{aligned} \quad (3.8)$$

представлення оператора $\hat{U}(\hat{\rho}|\xi)$ в колективних змінних,

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \langle \exp[-i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}] \rangle_0 = \exp \sum_{n \geq 2} D_n(\omega), \\ D_n(\omega) &= (-i\pi)^n (n!)^{-1} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \omega_{\mathbf{q}_1} \dots \omega_{\mathbf{q}_n} S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \end{aligned} \quad (3.9)$$

а функції $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ визначені як зв'язні середні від добутку операторів (3.3)

$$S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \equiv S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\tilde{\mu}) = \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2} \dots \hat{\rho}_{\mathbf{q}_n} \rangle_0^{\text{SB}} \quad (3.10)$$

і пов'язані з багаточастинковими структурними факторами базисної системи. При цьому змінні $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}}^c - i\omega_{\mathbf{q}}^s$ спряжені до змінних $\rho_{\mathbf{q}}$, $(d\omega) = \prod_{c(\mathbf{q})} d\omega_{\mathbf{q}}^c d\omega_{\mathbf{q}}^s$.

Інтегруючи за змінними $\rho_{\mathbf{q}}$ у формулі (3.7), приведемо статистичну суму до такого зображення в ω -просторі:

$$Z_\zeta^0(\mu) = Z_0(\tilde{\mu}) \int (d\omega) J(\omega) f(\omega). \quad (3.11)$$

Множник

$$f(\omega) = \int (d\rho) \exp \left\{ U(\rho|\xi) + i\pi \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \right\} \quad (3.12)$$

у наближенні двочастинкових взаємодій може бути розрахований точно:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_2 = & \left\{ \prod_{c(\mathbf{q})} [-V^{-1} \tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi)] \right\}^{-1} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{\pi^2}{2} V \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}} \tilde{\nu}_2^{-1}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Врахування ж багаточастинкових взаємодій (що відіграють роль поправок) може бути зроблено наближено, методом моментів.

Інтегрування в (3.11) також не може бути виконано точно через складну залежність $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ від своїх аргументів. Найпростіший спосіб наближеного інтегрування полягає у виділенні базового розподілу

$$\begin{aligned} W_0(\omega) = & \exp \left\{ -\frac{\pi^2 V}{2} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \omega_{-\mathbf{q}} g^{-1}(\mathbf{q}) \right\}, \\ g(\mathbf{q}) = & -\tilde{\nu}_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi) \epsilon_0^{-1}(\mathbf{q}), \\ \epsilon_0(\mathbf{q}|\xi) = & 1 - V^{-1} S_2^0(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \nu_2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}|\xi), \end{aligned} \quad (3.14)$$

який допускає точне інтегрування, і в наступному врахуванні множника $J(\omega) f(\omega) W_0^{-1}(\omega)$ методом моментів відносно базового розподілу. Таким чином виникає представлення термодинамічного потенціалу у вигляді квантових групових розкладів. У цій роботі ми обмежимося наближенням двочастинкових взаємодій в $U(\rho|\xi)$, замінюючи $\tilde{\nu}_2(\dots)$ на $\nu_2(\dots)$ у формулах (3.13), (3.14). В цьому наближенні

$$\begin{aligned} \Omega_{\zeta}^0(\mu) = & \Omega_0(\tilde{\mu}) + \frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q}} \ln \epsilon_0(\mathbf{q}) + \sum_{n \geq 1} B_n(\tilde{\mu}), \\ B_1(\tilde{\mu}) = & -\beta^{-1} \sum_{n \geq 2} (-1)^n V^{-n} [(2n)!!]^{-1} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} S_{2n}^0(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, -\mathbf{q}_n) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \prod_{j=1}^n g(\mathbf{q}_j); \\ B_2(\tilde{\mu}) = & -(4\beta V^2)^{-1} \sum_{\mathbf{q}} R_2^2(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) g^2(\mathbf{q}) - \\ & - (2\beta)^{-1} \sum_{n \geq 3} (-V)^{-n} (n!) \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} R_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \times \\ & \times R_n(-\mathbf{q}_1, \dots, -\mathbf{q}_n) \prod_{j=1}^n g(\mathbf{q}_j); \\ & \dots \dots \dots \\ R_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = & S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) + \sum_{l \geq 1} (-V)^{-l} [(2l)!!]^{-1} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_l} S_{n+2l}^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, \mathbf{q}'_1, -\mathbf{q}'_1, \dots, \mathbf{q}'_l, -\mathbf{q}'_l) \prod_{j=1}^l g(\mathbf{q}'_j). \end{aligned} \quad (3.15)$$

За своєю структурою групові коефіцієнти $B_n(\tilde{\mu})$ співпадають з груповими коефіцієнтами класичної статистики у базисному підході до врахування короткодійних взаємодій [12]. Специфічні риси, характерні для квантової моделі, відображають кумулянти $S_n^0(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$ базисної системи.

Беручи до уваги температурну залежність $\nu_n(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n|\xi)$, бачимо, що термодинамічний потенціал основного стану моделі визначається складовою $\Omega_0(\tilde{\mu})$ при $\tilde{\mu} = \mu + \beta^{-1} \nu_1(\xi)$, а всі інші складові (3.15) вносять температурні поправки, які перетворюються в нуль при $\beta \rightarrow \infty$. З рівняння

$$-N = \frac{\partial}{\partial \tilde{\mu}} \Omega_0(\tilde{\mu}) \quad (3.16)$$

знаходимо хімпотенціал моделі у випадку абсолютного нуля температури

$$\mu_{\zeta}^* = \epsilon_F - NV^{-2} \sum_{\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{q}} \nu_2^2(\mathbf{q}|\zeta, \infty, \epsilon_F) = \left\{ \frac{\eta^2}{r_s^2} - \frac{\zeta d}{r_s} \right\} Ry, \quad (3.17)$$

де $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 (2m)^{-1}$ – енергія Фермі. Середня енергія основного стану моделі рівна

$$E_{\zeta} = \Omega_0(\epsilon_F) + N \mu_{\zeta}^* = \left\{ \frac{3}{5} \frac{\eta^2}{r_s^2} - \frac{\zeta d_0}{r_s} \right\} N Ry. \quad (3.18)$$

Тут d_0 – універсальна постійна, незалежна від фізичних параметрів. Різним наближенням для функції $y_2(x)$ відповідають такі значення d_0 : асимптотичний розв'язок $y_2^{(0)}(x)$ приводить до значення 1,3044..., чисельний розв'язок рівняння (2.20) при $\Psi_2^{(m)}(x) = 0$ для $m \geq 3$ дає значення $d_0(2) = 1,3872...$, в наближенні $\Psi_2^{(m)}(x) = 0$ при $m \geq 4$ одержуємо $d_0(3) = 1,9600...$, врахування $\Psi_2^{(m)}(x)$ при $2 \leq m \leq 4$ дає $d_0(4) = 1,6873...$ і т.д. В таблиці 1 приведено значення $d_0(n)$ як функції числа $n(2 \leq n \leq 6)$.

Таблиця 1

n	2	3	4	5	6
$d_0(n)$	1,3872	1,9600	1,6873	1,8417	1,7704

Як видно з аналізу кривих рис. 1 та функцій $\Psi_2^{(m)}(x)$, врахування складових $\Psi_2^{(m)}(x)$ при $m > 6$ може змінити $y_2(x)$ в незначній мірі, та й то лише в області малих значень змінної x . Отже вплив $\Psi_2^{(m)}(x)$ при $m > 6$ на значення d_0 теж буде незначним.

Як відомо, енергія основного стану електронної рідини в області низьких густин ($r_s \gg 1$) досить добре досліджена. Вігнер показав [13, 14], що у цьому випадку вигідним є утворення об'ємноцентрованої кубічної ґратки, електростатична енергія якої в границі сильного зв'язку рівна $E_w = -N Ry 1,79185...$. На основі квантовомеханічного опису динаміки ґратки Вігнера в роботах [15, 16] було одержано такий розклад для енергії основного стану за степенями параметра $r_s^{-1/2}$:

$$E_0 = N Ry \left\{ \sum_{n \geq 0} A_{1+n} r_s^{-(1+1/2n)} + 0(\exp[-\alpha r_s^{1/2}]) \right\}. \quad (3.19)$$

При цьому $A_1 = -1,79815...$, $A_2 = 2,65724...$, $A_3 = -0,73...$, $A_n = -0,8...$; $\alpha = 2,06...$. Таким чином знайдене нами значення енергії основного стану E_ζ при $\zeta = 1$ асимптотично точно визначає енергію ґратки Вігнера при великих r_s і обмежує знизу значення енергії електронної рідини при довільних значеннях параметра неідеальності.

Розглянемо далі питання про вибір параметра включення ζ_0 для випадку основного стану моделі. Щоб розв'язати рівняння (1.37), необхідно знати не лише

$$\left\langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \right\rangle_{P_1} = \left\langle \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \right\rangle_{P_{\zeta_0}^0} = N Ry \frac{\zeta_0 d_0}{r_s}, \quad (3.20)$$

але також $\langle \hat{V} \rangle_{P_1}$ та $\langle \hat{V} \rangle_{P_{\zeta_0}^0}$. Коректний розрахунок останньої величини можна виконати на основі парної кореляційної функції моделі з статистичним оператором $\hat{\rho}_{\zeta_0}^0$, що, однак, виходить за рамки цієї статті. Тут ми покажемо, що можливий такий вибір параметра $\zeta_0 = \zeta_0(r_s)$, який забезпечує точне співпадіння E_ζ з енергією моделі при всіх значеннях параметра неідеальності r_s . При цьому величина $\Delta_1 = \langle \hat{V} + \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1}$ буде від'ємною, у відповідності до рівняння (1.37) і малою.

Для розрахунку середнього $\langle \hat{V} \rangle_{P_1}$ скористуємось таким прийомом. Як відомо, середнє значення енергії моделі (1.1) може бути представлено у вигляді [17] :

$$E = E_{id} + \int_0^{\epsilon^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)}, \quad (3.21)$$

де E_{id} – середнє значення енергії ідеальної системи, а $\langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)}$ – середнє значення енергії взаємодії у системі, де заряд електрона рівний e_1 . Внесок взаємодії в (3.21) може бути приведений до такої форми:

$$\int_0^{\epsilon^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)} = N \hbar^2 [2m \langle r \rangle^2]^{-1} r_s^2 \epsilon(r_s), \quad (3.22)$$

де $\langle r \rangle = (3V/4\pi N)^{1/3}$, а $\epsilon(r_s)$ – безрозмірна функція параметра r_s , а саме

$$\epsilon(r_s) = \epsilon_{HF}(r_s) + \epsilon_c(r_s). \quad (3.23)$$

Тут $\epsilon_{HF}(r_s) = -3\eta(2\pi r_s)^{-1}$ – внесок, зумовлений ідеальними кореляціями, $\epsilon_c(r_s)$ – так звана кореляційна енергія (внесок неідеальних кореляцій). З тотожності

$$\langle \hat{V} \rangle_{P_1} = e^2 \frac{d}{de^2} \left\{ \int_0^{\epsilon^2} \frac{de_1^2}{e_1^2} \langle \hat{V}_{e_1^2} \rangle_{P_1(e_1^2)} \right\} \quad (3.24)$$

знаходимо, що

$$\langle \hat{V} \rangle_{P_1} = N Ry d r_s^{-1} \frac{d}{dr_s} [r_s^2 \epsilon(r_s)]. \quad (3.25)$$

Виберемо тепер параметр ζ_0 з умови

$$-\frac{\zeta_0 d_0}{r_s} = \epsilon(r_s), \quad (3.26)$$

яка забезпечує співпадіння E_{ζ} з точним значенням енергії моделі (1.1) при $T = 0K$. При такому виборі ζ_0 знаходимо, що

$$\begin{aligned} \Delta_1(\zeta_0) &= \langle \hat{V} + \frac{\partial \hat{U}_{\zeta_0}}{\partial \beta} \rangle_{P_1} = -d_0 \frac{d\zeta_0(r_s)}{dr_s} = \\ &= \frac{d}{dr_s} [r_s \epsilon_c(r_s)] . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Виділяючи енергію взаємодії з (3.19), знаходимо розклад за степенями $r_s^{-1/2}$ для параметра $\zeta_0(r_s)$ в області низьких густин :

$$\zeta_0(r_s) = 1 - a_1 r_s^{-1/2} + a_2 r_s^{-1} + a_3 r_s^{-3/2} + \dots \quad (3.28)$$

Коефіцієнти $a_n > 0$ визначаються такими співвідношеннями: $a_1 = -A_2 A_1^{-1} = 1,47776$, $a_2 = A_1^{-1} [A_3 - 3/5 \eta^2] = 1,6461$, $a_3 = A_1^{-1} A_4 = 0,44490$ і т.д. Відповідно для $\Delta_1(\zeta_0)$ маємо:

$$\Delta_1(\zeta_0) = -1,32862 r_s^{-3/2} + 2,94 r_s^{-2} + 1,2 r_s^{-5/2} + \dots \quad (3.29)$$

З розкладів (3.28), (3.29) видно, що $\zeta_0(r_s) < 1$ і прямує до одиниці при $r_s \rightarrow \infty$. Функція $\Delta_1(\zeta_0)$ є від'ємною і малою порівняно з $\epsilon(r_s)$: відношення $\Delta_1(\zeta_0) \epsilon^{-1}(r_s)$ має порядок $-A_2(2A_1)^{-1} r_s^{-1/2}$ і прямує до нуля в границі великих r_s . При розрахунку $\zeta_0(r_s)$ було прийнято, що $d_0 = -A_1 = 1,79815\dots$

В області високих густин використовуємо відомий вираз для кореляційної енергії [17]

$$\epsilon_c(r_s) = 0,0622 \ln r_s - 0,096 + O(r_s) . \quad (3.30)$$

З формул (3.26) та (3.27) знаходимо в границі малих r_s :

$$\begin{aligned} \zeta_0(r_s) &= 3\eta(2\pi d_0)^{-1} - 0,0622 d_0^{-1} r_s \ln r_s + 0,096 r_s + \dots (3.31) \\ \Delta_1(\zeta_0) &= 0,0622 \ln r_s - 0,034 + O(r_s) . \end{aligned}$$

Таким чином $\zeta_0(r_s)$ прямує до значення $\zeta_0(0) = 3\eta(2\pi d_0)^{-1} = 0,509596\dots$ в границі слабо неідеальної системи ($r_s \rightarrow 0$). Відношення $\Delta_1(\zeta_0) \epsilon^{-1}(r_s) \rightarrow 0$ при $r_s \rightarrow 0$, хоч $\Delta_1(\zeta_0)$ має такий самий порядок величини, що й $\epsilon_c(r_s)$. Все це свідчить про недоцільність використання апроксимаційного статистичного оператора для опису слабо неідеальних систем . На рис. 2 представлено залежність параметра ζ_0 від параметра неідеальності r_s в наближенні (3.31) (крива 1), а також в наближенні (3.28) (крива 2). Крива 3 побудована за формулою (3.26), причому для кореляційної енергії використано апроксимаційну формулу, справедливу в області проміжних r_s також:

$$\epsilon_c(r_s) = -2b_0 \int_a^\infty dx (b_1 + x^{-1}) [1 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3]^{-1} \quad (3.32)$$

при $a = r_s^{1/2}$, $b_0 = 0,0621814$, $b_1 = 9,81379$, $b_2 = 2,82214$, $b_3 = 0,69699$, що відповідає апроксимації результатів методу Монте-Карло [18], зробленій у роботі [19] для $\frac{d}{dr_s} \epsilon_c(r_s)$. Як видно з рисунка, наближення низьких густин (3.28) справедливе вже в області $r_s \leq 10$.

4. Закінчення

Запропоноване у цій роботі узагальнення методу зміщень є деякою альтернативою до методів теорії збурень, які традиційно використовуються в теорії систем взаємодіючих частинок. Нерівності (1.12), (1.18) дають підстави для побудови модельного статистичного оператора $\hat{P}_{\zeta_0}^0$, який відіграє роль апроксимаційного для досліджуваної фізичної системи (1.1). На прикладі моделі електронної рідини нами проілюстровано можливість такої побудови, а також можливість регулювання границь відхилень розрахованих термодинамічних характеристик від їх точних значень. Для визначення параметра ζ_0 ми скористались результатами розрахунку середньої енергії електронної рідини методом Монте-Карло [18]. Однак цієї мети можна було б досягти, використавши добре відому асимптотичну залежність $\epsilon(r_s)$ при малих та великих значеннях r_s , а також числові розрахунки цієї характеристики в області проміжної неідеальності [20]. Статистичний оператор $\hat{P}_{\zeta_0}^0$ дає змогу розрахувати всі характеристики моделі, в тому числі і при скінчених температурах. Відсутність представлення взаємодії у значній мірі полегшує цю задачу і дозволяє скористатись методами класичної статистики.

На основі $\hat{P}_{\zeta_0}^0$ будуть досліджені фазові стани моделі однорідної електронної рідини (парамагнітний, надпровідний [21], феромагнітний [18]), а також можливі структурні перетворення (виникнення хвиль зарядової густини, решітка Вігнера [9]). Апроксимаційний оператор може бути застосований також для дослідження споріднених моделей сильно неідеальних фермі-систем, зокрема моделей металів, надпровідників, електрон-діркової рідини. Особливий інтерес представляє можливість застосування цього підходу для вивчення характеристик просторово неоднорідних та обмежених фермі-систем.

Література

- [1] Юхновський І.Р. // УФЖ **9**, 702 (1964).
- [2] Юхновський І.Р. // УФЖ **9**, 827 (1964).

- [3] Южновский И.Р., Петрашко Р.Н. // ТМФ, **17**, 118 (1973).
 [4] Вакарчук И.А. // ТМФ, **18**, 90 (1974).
 [5] Вакарчук И.А. // ТМФ, **23**, 260 (1975).
 [6] Ваврух М.В. // ТМФ, **35**, 263 (1978).
 [7] Ваврух М.В. // ДАН УРСР, сер. А, № 6, 48 (1985).
 [8] Боголюбов Н.Н. *Метод исследования модельных гамильтонианов* (Наука, Москва, 1974).
 [9] Марч Н., Янг У., Сампантхар С. *Проблема многих тел в квантовой механике* (Мир, Москва, 1969).
 [10] Ваврух М.В. // Вісник Львівського університету, **3**, 26 (1968).
 [11] Зубарев Д.Н. // ДАН СССР, **95**, 757 (1954).
 [12] Южновский И.Р., Головкин М.Ф. *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Київ, 1980).
 [13] Wigner E.P. // Phys. Rev., **46**, 1002 (1934).
 [14] Wigner E.P. // Trans. Faraday Soc., **34**, 678 (1938).
 [15] Carr W.J., Jr. // Phys. Rev., **122**, 1437 (1961).
 [16] Carr W.J., Jr., Goldwell-Horsfall R.A., Fein A.E. // Phys. Rev., **124**, 747 (1961).
 [17] Пайнс Д. *Элементарные возбуждения в твердых телах* (Мир, Москва, 1965).
 [18] Ceperley D.M., Alder B.J. // Phys. Rev. Lett., **45**, 566 (1980).
 [19] Vosko S.H., Wilk L., Nusair N. // Can. J. Phys., **58**, 1200 (1980).
 [20] Vavruk M., Vavruk N., Solovyan V. // Phys. Stat. Sol. B, **177**, 361 (1993).
 [21] Ваврух М.В., Ваврух Н.М. // Физ. низ. темп., **21**, 572 (1995).

Додаток

Через антиермітовість оператора \hat{K}_1 похідну $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)$ зручніше обчислити на основі оператора $\hat{H}_2(t)$:

$$\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t) = -2t\langle\hat{L}_1\rangle_{P_2(t)}, \quad (\text{Д.1})$$

$$\hat{P}_2(t) = \exp[-\beta(\hat{H}_2(t) - \mu\hat{N})] = \exp[-\beta\hat{H}'_2].$$

Звідси випливає, що $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t) = 0$ при $t = 0$, а перший доданок другої похідної (див. (1.21)) є невід'ємною величиною при всіх t .

Для обчислення другого доданку похідної $\frac{d^2}{dt^2}\Omega(\mu|t)$ використаємо властивість циклічності операції $Sp\{\dots\}$, переходячи від неермітового оператора \hat{H}'_1 до ермітового \hat{H}'_2

$$Sp\left\{\hat{K}_1 e^{-\beta\gamma\hat{H}'_1} \hat{K}_1 e^{-\beta(1-\gamma)\hat{H}'_1}\right\} = \quad (\text{Д.2})$$

$$= Sp\left\{\hat{B}(t)e^{-\beta\gamma\hat{H}'_2} \hat{B}(t)e^{-\beta(1-\gamma)\hat{H}'_2}\right\},$$

де $\hat{B}(t) = \exp(t\hat{U}_1)\hat{K}_1 \exp(-t\hat{U}_1)$. Перейдемо до представлення, в якому \hat{H}'_2 діагональний, враховуючи при цьому, що для матричних елементів \hat{K}_1 має місце рівність: $(\hat{K}_1)_{ij} = -(\hat{K}_1)_{ji}$. Вводячи матричні елементи $\alpha_{kl}^{(\pm)} = [\exp(\pm t\hat{U}_1)]_{kl}$, одержуємо:

$$\beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2}\Omega(\mu|t) = \left\{\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)\right\}^2 + \quad (\text{Д.3})$$

$$Z^{-1}(\mu|t) \sum_{l_1, l_2, k_1, k_2} (\hat{K}_1)_{l_1, k_1} (\hat{K}_1)_{k_2, l_2}^* A(l_1, l_2, k_1, k_2),$$

де

$$Z(\mu|t) = \sum_n \exp(-\beta E_n^t),$$

$$A(l_1, l_2, k_1, k_2) = \sum_{n, m} A_{m, n}(t) \alpha_{k_1, n}^{(-)} \alpha_{nl_2}^{(+)} \alpha_{ml_1}^{(+)} \alpha_{k_2, m}^{(-)}, \quad (\text{Д.4})$$

$$A_{m, n}(t) = \{E_n^t - E_m^t\}^{-1} \cdot \{\exp(-\beta E_m^t) - \exp(-\beta E_n^t)\},$$

а E_n^t – власні значення оператора $\hat{H}'_2 = \hat{H}_2(t) - \mu\hat{N}$. Беручи до уваги, що $A_{m, n}(t)$ – додатня функція і

$$\sum_n \alpha_{nl}^{(+)} \alpha_{kn}^{(-)} = \delta_{l, k}, \quad (\text{Д.5})$$

знайдемо такі m_0, n_0 , що

$$A(l_1, l_2, k_1, k_2) \geq A_{m_0, n_0}(t) \delta_{k_1, l_2} \delta_{l_1, k_2}. \quad (\text{Д.6})$$

Через це

$$\beta^{-1} \frac{d^2}{dt^2}\Omega(\mu|t) \geq \left\{\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)\right\}^2 + \quad (\text{Д.7})$$

$$+ A_{m_0, n_0}(t) Z^{-1}(\mu|t) \sum_{l_1, l_2} |(\hat{K}_1)_{l_1, l_2}|^2 \geq 0.$$

Отже, похідна $\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)$ є монотонною неспадною функцією параметра t ($0 \leq t \leq 1$), рівною нулеві при $t = 0$. З цієї причини

$$0 \leq \int_0^1 dt \frac{d}{dt}\Omega(\mu|t) \leq \left\{\frac{d}{dt}\Omega(\mu|t)\right\}_{|_{t=1}}, \quad (\text{Д.8})$$

звідки випливає нерівність (1.22).

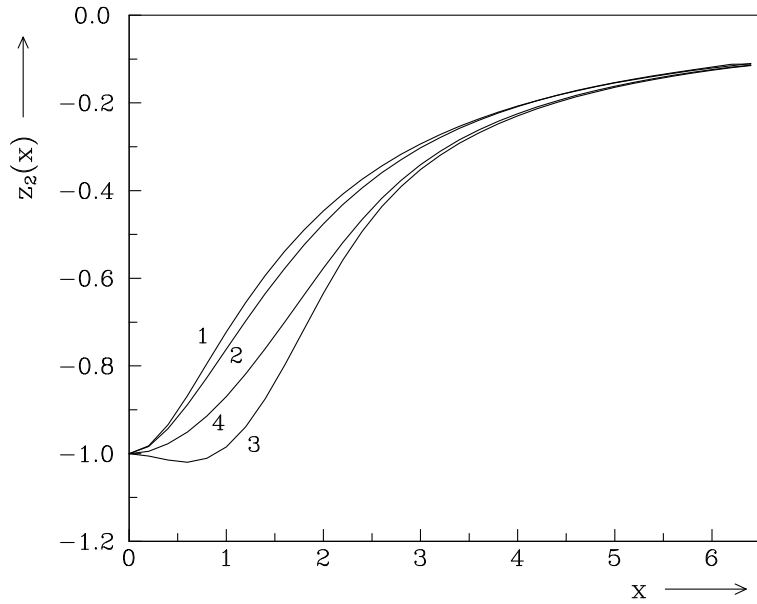


Рис. 1: Функція $Z_2(x) = x^2 y_2(x)$ при $T = 0K$ в різних наближеннях: крива 1 відповідає $y_2^{(0)}(x)$, 2 – розв’язку рівняння (2.7), 3 – розв’язку (2.20) при врахуванні $\Psi_2^{(2)}(\dots)$ та $\Psi_2^{(3)}(\dots)$, 4 – розв’язку цього ж рівняння в наближенні $\Psi_2^{(m)}(\dots) = 0$ при $m \geq 5$.

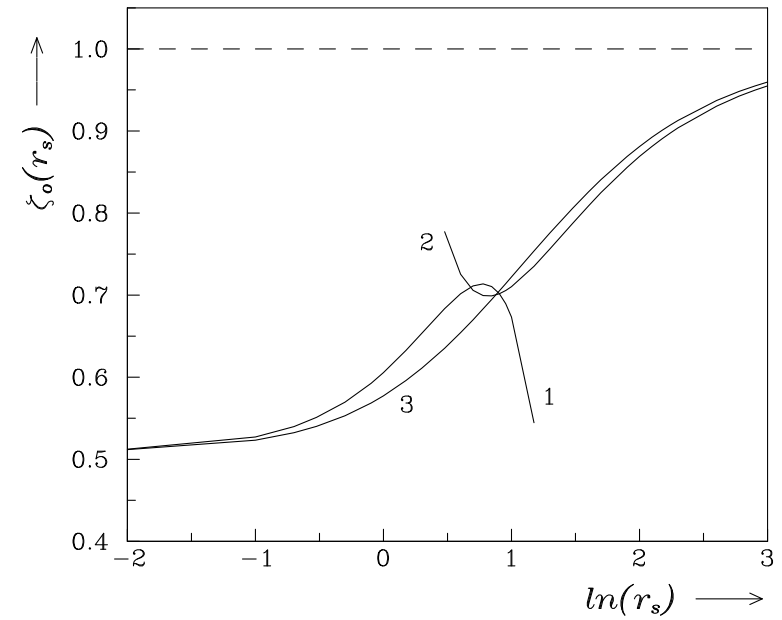


Рис. 2: Залежність параметра ζ_0 від параметра неідеальності r_s : крива 1 – наближення високих густин (3.31), 2 – наближення низьких густин (3.28), крива 3 відповідає формулі (3.26) при використанні інтерполяційної формули (3.32) для $\epsilon_c(r_s)$.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Маркіян Васильович Ваврух
Ярослав Васильович Куштай

ПРЕДСТАВЛЕННЯ ЗМІЩЕНЬ І АПРОКСИМАЦІЙНИЙ СТАТИСТИЧНИЙ
ОПЕРАТОР НЕІДЕАЛЬНИХ ФЕРМІ СИСТЕМ

Роботу отримано 30 квітня 1996 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних
спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені