

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-12U

М.В.Ваврух, С.Б.Слободян*

РОЗРАХУНОК n -ЧАСТИНКОВИХ КОРЕЛЯЦІЙНИХ
ФУНКЦІЙ ЕЛЕКТРОН-ПЛАЗМОННОЇ МОДЕЛІ

*Львівський національний університет ім. Івана Франка, 79005, Львів,
вул. Кирила і Мефодія 8

ЛЬВІВ

УДК: 537.31; 538.945

PACS: 05.30.Fk, 71.45.Gm

Розрахунок n -частинкових кореляційних функцій електрон-плазмонної моделі

М. В. Ваврух, С. Б. Слободян

Анотація. Викладено загальні співвідношення запропонованого авторами варіанту електрон-плазмонної моделі в теорії електронної рідини. Досліджено, розраховано і представлено в елементарних функціях n -частинкові динамічні кореляційні функції нижчого порядку ($n=2, 3, 4$), що фігурують у нерозбіжних діаграмах теорії збурень відносно оператора нелокальної електрон-плазмонної взаємодії.

Calculation of the n -particles correlation functions of the electron-plasmon model

M. V. Vavruk, S. B. Slobodyan

Abstract. We present the general relationships of the description variant of the electron-plasmon model in the electron liquid theory which our proposed. n -particles dynamic correlation functions low orders ($n = 2, 3, 4$) were investigated, calculated and presented in the elementary functions. These correlation functions are figure in the non-divergent diagrams of the perturbation theory relative to operator of the non-local electron-plasmon interaction.

Подається в Український фізичний журнал
Submitted to Ukrainian Journal of Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2005
Institute for Condensed Matter Physics 2005

1. Вступ

Розробка методів дослідження сильно неідеальних електронних систем залишається однією з актуальних задач статистичної фізики. Співіснування колективних та індивідуальних рухів є характерною особливістю систем з колективізованими електронами, що зумовлена далекосяжним характером потенціалу Кулона. Ця обставина є підставою для формулювання простого підходу в теорії металів, який базується на концепції колективного опису міжелектронних взаємодій. Один з варіантів такого підходу розроблявся в роботах [1 – 6] (див. також [7], де перелічено майже всі роботи цього напрямку). Оскільки плазмони є добре визначеними збудженнями лише при малих значеннях хвильового вектора \mathbf{q} , то у згаданих роботах вводилися колективні змінні для області $0 \leq |\mathbf{q}| \leq k_c$, де k_c має порядок $k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$. Для збереження числа ступенів вільності на хвильову функцію системи накладалися додаткові умови [5]. Як правило у цитованих роботах розглядався основний стан системи, а одним з головних завдань було дослідження спектру плазмових коливань. З цією метою використовувались серії канонічних перетворень, у результаті чого розроблений формалізм набув наближеного характеру. Саме через це, на наш погляд, підхід Бома-Пайнса був поступово витіснений з теорії металів більш формальним підходом підсумовування рядів розбіжних діаграм звичайної теорії збурень, започаткованим роботами [8, 9]. Доповнений концепцією локального поля, цей підхід став загальноприйнятим у сучасній теорії металів.

В той же час є очевидним, що колективний опис міжелектронних взаємодій має переваги перед методами звичайної теорії збурень, особливо в області сильної неідеальності. Причина в тому, що при колективному описі в ролі нульового наближення виступає система вільних електронів і невзаємодіючих плазмонів, а не ідеальна система електронів. Концепція колективного опису має перспективу дальшого розвитку, а варіант, який розроблявся в роботах [1 – 6], є лише одним з можливих. Інший варіант колективного опису, що розвивався в роботах [10 – 13], паралельно із введенням розширеного простору індивідуальних і колективних координат використовує перетворення зміщень у статистичному операторі. Це приводить до безмежної системи нелінійних інтегро-диференціальних рівнянь, що також робить метод наближеним. На відміну від підходу Бома-Пайнса, у методі зміщень і колективних змінних перехід до розширеного простору виконується строго за допомогою функції переходу. В обох підходах є багато спільного, і не тільки в концептуально-

му плані. Характерною рисою обох підходів є відсутність розбіжних діаграм, на відміну від стандартних методів теорії збурень.

Нами запропоновано варіант колективного опису взаємодій у моделі електронної рідини, відмінний як від варіанту Бома-Пайнса, так і від варіанту зміщень і колективних змінних. Ми стартуємо із зображення вторинного квантування, а розширений простір вводимо за допомогою оператора переходу [14]. Колективні змінні є проміжним елементом і слугують для введення операторів породження і знищення плазмонів. Статистична сума моделі в термінах електронів і плазмонів не містить жодних наближень. Теорія збурень відносно нелокальної електрон-плазмонної взаємодії будується у термінах специфічних n -частинкових динамічних кореляційних функцій, а їх розрахунок є окремою задачею.

2. Загальні співвідношення

Розглянемо гамільтоніан моделі електронної рідини у зображенні вторинного квантування на базисі плоских хвиль

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},s} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},s}^+ a_{\mathbf{k},s}, \quad (2.1)$$

$$\hat{V} = (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1},$$

де $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, $V_{\mathbf{q}} = 4\pi e^2 \mathbf{q}^{-2}$, V – об'єм системи. Наявність взаємодій між електронами приводить до того, що антисиметрична хвильова функція системи Ψ залежить не тільки від індивідуальних змінних, а й від колективних. Хвильові функції такого типу використовувались в багатьох роботах (див. [15 – 17]). У вторинному квантуванні її можна записати у вигляді $\Psi \equiv \Psi(a_{\mathbf{k},s} | \hat{\rho}_{\mathbf{q}})$, де $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q},s}^+ a_{\mathbf{k},s}$ є зображенням Фур'є оператора електронної густини.

Перейдемо до розширеного простору індивідуальних та колективних змінних за допомогою оператора переходу [14]

$$\hat{J}(\rho, \hat{\rho}) = \prod_{C_{\mathbf{q}}} \delta(\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) = \int (d\omega) \left\{ 2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} (\rho_{\mathbf{q}} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \right\}, \quad (2.2)$$

де $\omega_{\mathbf{q}}$ – змінна, спряжена до $\rho_{\mathbf{q}}$, $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q},s}^+ a_{\mathbf{k},s}$, $(d\omega) = \prod_{C_{\mathbf{q}}} (d\omega_{\mathbf{q}})$,

а область хвильових векторів $C_{\mathbf{q}}$ включає половину всіх векторів зі сфери радіуса q_0 , наприклад

$$0 < |\mathbf{q}| \leq q_0, \quad q_z > 0.$$

Оператор переходу є квантовим аналогом функції переходу класичної статистики [18 – 19]. Будь-який оператор $\hat{f}(\hat{\rho})$, який є цілою функцією $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}$, має зображення в колективних змінних,

$$\hat{f}(\hat{\rho}) = \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \hat{F}(\rho), \quad (d\rho) \equiv \prod_{C_{\mathbf{q}}} d\rho_{\mathbf{q}}. \quad (2.3)$$

Рівності

$$\hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \hat{J}(\rho', \hat{\rho}) = \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \prod_{C_{\mathbf{q}}} \delta(\rho'_{\mathbf{q}} - \rho_{\mathbf{q}}), \quad (2.4)$$

$$Sp \left\{ \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \hat{J}(\rho', \hat{\rho}) \right\} = \prod_{C_{\mathbf{q}}} \delta(\rho_{\mathbf{q}'} - \rho_{\mathbf{q}}) Sp \hat{J}(\rho, \hat{\rho})$$

дозволяють знайти зображення $\hat{f}(\hat{\rho})$ в колективних змінних, а саме

$$\hat{F}(\rho) = \left\{ Sp \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \right\}^{-1} Sp \left\{ \hat{f}(\hat{\rho}) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \right\}. \quad (2.5)$$

За аналогією з роботами [1 – 6], оператор енергії міжелектронних взаємодій розділимо на далекосяжну та короткосяжну складові і запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}} (\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}) \\ & + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \notin C_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

де $\hat{N} \equiv \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}$ – оператор числа частинок. Другий доданок у формулі (2.6) описує ефективну короткосяжну взаємодію електронів з потенціалом

$$V_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \notin C_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} Si(q_0 r) \right\} \quad (2.7)$$

($Si(x)$ – інтегральний синус [20]).

Згідно з формулою (2.3) довільній хвильовій функції $\Psi(a_k|\hat{\rho})$ можна співставити зображення у розширеному просторі $\Psi(a_k|\rho)$,

$$\Psi(a_k|\hat{\rho}) = \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \Psi(a_k|\rho). \quad (2.8)$$

Розрахуємо дію оператора $\exp(-\beta\hat{H})$ на хвильову функцію $\Psi(a_k|\hat{\rho})$:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta\hat{H})\Psi(a_k|\hat{\rho}) &= \int (d\rho)(d\omega) \exp(-2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \\ &\times \exp(-\beta\hat{H}_{\omega}) \exp(2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}) \Psi(a_k|\rho). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Тут $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обернена температура,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\omega} &= \exp(2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \hat{H} \exp(-2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}) \\ &= \hat{H} - 2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} [\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]_{-} \\ &+ \frac{(2\pi i)^2}{2!} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}_1} \omega_{\mathbf{q}_2} [[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}]_{-}, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}]_{-}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Вираз (2.10) є точним. Наведемо явний вигляд комутаторів, які тут фігурують:

$$[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}]_{-} = \varepsilon_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} + \frac{\hbar^2}{m} \hat{f}_{\mathbf{q}}; \quad \hat{f}_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k}, \mathbf{q}) a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}; \quad (2.11)$$

$$\frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}]_{-}, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2}]_{-} = -\hat{N} \varepsilon_{\mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0} + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}.$$

Використовуючи тотожність

$$\left\{ 2\pi i \omega_{\mathbf{q}} - \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \right\} \exp \left(2\pi i \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \omega_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \right) = 0 \quad (2.12)$$

та інтегруючи частинами за змінними $\rho_{\mathbf{q}}$, приведемо рівність (2.9) до наступного вигляду:

$$\exp(-\beta\hat{H})\Psi(a_k|\hat{\rho}) = \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp(-\beta\hat{H}_1(a_k|\rho)) \Psi(a_k|\rho),$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(a_k|\rho) &= \hat{H} + \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} (\varepsilon_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} + \frac{\hbar^2}{m} \hat{f}_{\mathbf{q}}) \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} - \hat{N} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1} \partial \rho_{\mathbf{q}_2}}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

При цьому \hat{H} визначено формулою (2.1). Згідно з формулою (2.3) в операторі $\hat{H}_1(a_k|\rho)$ можна виконати заміну $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rightarrow \rho_{\mathbf{q}}$. Тому статистична сума моделі у великому канонічному ансамблі набуває вигляду

$$\begin{aligned} Z &= Sp \exp \left\{ -\beta (\hat{H} - \mu \hat{N}) \right\} \\ &= Sp \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp \left\{ -\beta (\hat{\mathcal{H}}(a|\rho) - \mu \hat{N}) \right\}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

де μ – змінна хімічного потенціалу, \hat{N} – оператор числа частинок. Оператор

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}(a|\rho) &= \hat{H}_s + \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \left\{ (\varepsilon_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} + \frac{\hbar^2}{m} \hat{f}_{\mathbf{q}}) \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \right. \\ &- \left. \hat{N} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} + (2V)^{-1} V_{\mathbf{q}} [\rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - \hat{N}] \right\} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1} \partial \rho_{\mathbf{q}_2}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

є гамільтоніаном системи у розширеному просторі індивідуальних і колективних змінних, a_k і $\rho_{\mathbf{q}}$ є незалежними, а оператор переходу регулює співвідношення між ними і забезпечує збереження числа ступенів вільності. Оператор

$$\hat{H}_s = \hat{H}_0 + (2V)^{-1} \sum_{\mathbf{q} \notin C_{\mathbf{q}}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, s_1}^+ a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, s_2}^+ a_{\mathbf{k}_2, s_2} a_{\mathbf{k}_1, s_1} \quad (2.16)$$

є гамільтоніаном системи електронів із залишковою короткосяжною взаємодією.

Розглянемо далі покращений варіант розрахунку статистичної суми, виконуючи циклічне перетворення її на основі оператора

$$\hat{W}(\hat{\rho}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} w(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}, \quad (2.17)$$

у якому $w(\mathbf{q})$ – невідома функція, що буде знайдена пізніше. Оскільки $\hat{W}(\hat{\rho})$ комутує з операторами \hat{N} та \hat{V} , то у перенормованій статистичній сумі

$$\begin{aligned} Z &= Sp \{ e^{-\hat{W}(\hat{\rho})} \exp(-\beta [\hat{H} - \mu \hat{N}]) e^{\hat{W}(\hat{\rho})} \} \\ &= Sp \left\{ \exp[-\beta (\hat{H}_W - \mu \hat{N})] \right\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

фігурує перенормований гамільтоніан

$$\begin{aligned} \hat{H}_W &= \hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{K} + \hat{L}; \\ \hat{K} &= [\hat{H}_0, \hat{W}]_- = \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} w(\mathbf{q}) \left\{ \varepsilon_{\mathbf{q}} [\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}] + \frac{\hbar^2}{m} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{f}_{-\mathbf{q}} \right\}; \\ \hat{L} &= \frac{1}{2} [[\hat{H}_0, \hat{W}]_-, \hat{W}]_- = -\hat{N} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \varepsilon_{\mathbf{q}} w^2(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) w(\mathbf{q}_1) w(\mathbf{q}_2) \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_2} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Дія оператора $\exp(-\beta \hat{H}_W)$ на функцію $\Psi(a_k|\hat{\rho})$ розраховується так само, як і дія $\exp(-\beta \hat{H})$ (див. ф. (2.9) – (2.14)). Аналогом формули (2.14) є такий вираз:

$$\begin{aligned} Z &= Sp \int (d\rho) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \exp \left\{ -\beta (\hat{\mathcal{H}}_W(a|\rho) - \mu \hat{N}) \right\}; \\ \hat{\mathcal{H}}_W(a|\rho) &= \hat{H}_s - \hat{N} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \left(\frac{V_{\mathbf{q}}}{2V} + w(\mathbf{q}) \varepsilon_{\mathbf{q}} \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \left\{ \frac{1}{2} \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \left[\frac{V_{\mathbf{q}}}{V} + 2\varepsilon_{\mathbf{q}} w(\mathbf{q}) (1 - \hat{N} w(\mathbf{q})) \right] \right. \\ &- \left. \hat{N} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} \right. \\ &+ \left. \frac{\hbar^2}{m} [w(\mathbf{q}) \rho_{-\mathbf{q}} + \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}}] \hat{f}_{\mathbf{q}} + [1 - 2\hat{N} w(\mathbf{q})] \varepsilon_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \right\} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \\ &\times \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1}} + \rho_{-\mathbf{q}_1} w(\mathbf{q}_1) \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_2}} + \rho_{-\mathbf{q}_2} w(\mathbf{q}_2) \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Щоб виділити в $\hat{\mathcal{H}}_W(a|\rho)$ колективну складову, введемо ще одну колективну змінну \mathcal{N} , яка відповідає оператору числа частинок \hat{N} ,

за допомогою дельта-функції $\delta(\mathcal{N} - \hat{N})$. Найпростіший вибір функції $w(\mathbf{q})$ з умови

$$1 - 2\mathcal{N}w(\mathbf{q}) = 0 \quad (2.21)$$

приводить до такого зображення статистичної суми:

$$\begin{aligned} Z &= Sp_a \int (d\rho) d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \hat{J}(\rho, \hat{\rho}) \\ &\times \exp \left\{ -\beta [\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}(\rho) + \hat{H}_{int}(a|\rho)] \right\}; \\ \hat{\mathcal{H}}(\rho) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \left\{ \left[\frac{V_{\mathbf{q}}}{V} + \frac{\varepsilon_{\mathbf{q}}}{2\mathcal{N}} \right] \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} - 2\mathcal{N} \varepsilon_{\mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_{\mathbf{q}} \partial \rho_{-\mathbf{q}}} \right\} \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rho_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} \\ &\times \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_1}} + \frac{\rho_{-\mathbf{q}_1}}{2\mathcal{N}} \right\} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}_2}} + \frac{\rho_{-\mathbf{q}_2}}{2\mathcal{N}} \right\}; \\ \hat{H}_{int}(a|\rho) &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \left(\frac{\rho_{-\mathbf{q}}}{2\mathcal{N}} + \frac{\partial}{\partial \rho_{\mathbf{q}}} \right) \hat{f}_{\mathbf{q}}; \\ \hat{H}(a) &\equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}_s; \quad \hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}, s} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}; \end{aligned} \quad (2.22)$$

де $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} [V_{\mathbf{q}} + \left(\frac{\mathcal{N}}{V}\right)^{-1} \varepsilon_{\mathbf{q}}]$ – перенормована одночастинкова енергія електрона. Символ Sp_a означає обчислення операції сліду за індивідуальними змінними.

Введемо замість змінних $\rho_{\mathbf{q}}$ Бозе-оператори породження і знищення плазмонів $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ за правилом:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}} \tilde{\rho}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{-\mathbf{q}}} \right\}, \\ b_{-\mathbf{q}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}} \tilde{\rho}_{\mathbf{q}} - \frac{1}{\alpha_{\mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{-\mathbf{q}}} \right\}; \\ \tilde{\rho}_{\mathbf{q}} &\equiv \mathcal{N}^{-\frac{1}{2}} \rho_{\mathbf{q}}; \quad \alpha_{\mathbf{q}} = \left\{ \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{2\varepsilon_{\mathbf{q}}} \right\}^{\frac{1}{2}}; \quad \hbar\omega_{\mathbf{q}} = \left\{ 2 \frac{V_{\mathbf{q}}}{V} \mathcal{N} \varepsilon_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{q}}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Перехід від змінних $\rho_{\mathbf{q}}$ до операторів $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ здійснимо за допомогою оператора переходу

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

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} = (2\mathcal{N})^{-\frac{1}{2}} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} \{b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+\}. \quad (2.24)$$

Згідно з формулою (2.5)

$$\begin{aligned} &\exp \left\{ -\beta [\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}(\rho) + \hat{H}_{int}(a|\rho)] \right\} \\ &= Sp_b \left\{ \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) \exp[-\beta(\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep})] \right\} \left\{ Sp_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Оператори $\hat{\mathcal{H}}_p$ та \hat{H}_{ep} одержуються із операторів $\hat{\mathcal{H}}(\rho)$ та $\hat{H}_{int}(a|\rho)$ в результаті переходу від $\tilde{\rho}_{\mathbf{q}}$, $\frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}_{\mathbf{q}}}$ до $b_{\mathbf{q}}^+$, $b_{\mathbf{q}}$ згідно з формулами (2.23):

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_p &= \hat{H}_p + \hat{H}_{pp}; \quad \hat{H}_p = \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}); \\ \hat{H}_{pp} &= -\frac{\hbar^2}{16m\sqrt{2\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_{\mathbf{q}}} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \alpha_{\mathbf{q}_1}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_2}^{-1} \alpha_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}^{-1} \\ &\times (b_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2}^+ + b_{-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2}) \hat{B}_{\mathbf{q}_1} \hat{B}_{\mathbf{q}_2}, \\ \hat{H}_{ep} &= \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{2\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} \hat{f}_{\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{q}}, \\ \hat{B}_{\mathbf{q}} &= \left[\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} + 1 \right] b_{\mathbf{q}} - \left[\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right] b_{-\mathbf{q}}^+. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Підставимо (2.25) у формулу (2.22) та проінтегруємо за змінними $\rho_{\mathbf{q}}$ за правилом

$$\begin{aligned} &\int (d\rho) \hat{J}(\hat{\rho}, \rho^{(a)}) \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)} - \rho) \left\{ Sp_b \hat{J}(\hat{\rho}^{(b)}, \rho) \right\}^{-1} = \hat{J}(b, a), \\ \hat{J}(b, a) &= \prod_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \delta(\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(b)} - \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(a)}) \end{aligned} \quad (2.27)$$

де $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^{(a)} \equiv \hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, s} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^+ a_{\mathbf{k}, s}$. В результаті одержуємо статистичну суму у такому вигляді:

$$Z = Sp \left\{ \int d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \hat{J}(b, a) \exp[-\beta(\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep})] \right\}. \quad (2.28)$$

Формально оператор $\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep}$ описує дві різні підсистеми об'єктів – електронів і плазмонів, а $\hat{J}(b, a)$ відображає додаткові умови або в'язі, необхідні при такому описі.

Дальший розрахунок статистичної суми виконаємо в рамках теорії збурень. З цією метою застосуємо у статистичному операторі зображення взаємодії

$$\exp[-\beta(\hat{H}(a) + \hat{\mathcal{H}}_p + \hat{H}_{ep})] = \exp\left\{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)\right\} T \hat{S}, \quad (2.29)$$

де T – символ хронологічного впорядкування, а \hat{S} -матриця визначається операторами взаємодії:

$$\hat{S} = \exp\left\{-\int_0^\beta d\beta' [\hat{V}_s(\beta') + \hat{H}_{pp}(\beta') + \hat{H}_{ep}(\beta')]\right\}. \quad (2.30)$$

Переставляючи оператор $\exp\left\{-\beta[\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p]\right\}$ через оператор переходу $\hat{J}(b, a)$, переведемо останній у зображення взаємодії:

$$\begin{aligned} Z &= Sp_{a,b} \left\{ \int d\mathcal{N} \delta(\mathcal{N} - \hat{N}) \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)] \right. \\ &\quad \times \left. T \left[\prod_{C_q} \delta(\hat{\rho}_q^{(b)}(\beta) - \hat{\rho}_q^{(a)}(\beta)) \hat{S} \right] \right\}, \\ \hat{\rho}_q^{(a)}(\beta) &\equiv \sum_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\beta) a_{\mathbf{k},s}(\beta); \\ \hat{\rho}_q^{(b)}(\beta) &\equiv 2^{-\frac{1}{2}} N^{\frac{1}{2}} \alpha_q^{-1} [b_q(\beta) + b_{-q}^+(\beta)]. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Для зручності наступного розрахунку діаграм теорії збурень перейдемо до так званого частотного зображення [21, 22], вводячи комбінації операторів $a_{\mathbf{k},s}(\beta')$ та $b_{\mathbf{q}}(\beta')$:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k},s}(\nu^*) &= \int_0^\beta a_{\mathbf{k},s}(\beta') \Psi_{\nu^*}(\beta') d\beta', \\ b_{\mathbf{q}}(\nu) &= \int_0^\beta b_{\mathbf{q}}(\beta') \Psi_\nu(\beta') d\beta', \end{aligned} \quad (2.32)$$

де $\Psi_\nu(\beta') = \beta^{-\frac{1}{2}} \exp(i\nu\beta')$, $\nu^* = (2n+1)\pi\beta^{-1}$, $\nu = 2\pi n\beta^{-1}$, $n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$. У новому зображенні

$$\hat{S} \equiv \hat{S}(\nu) = \exp\left\{-\hat{V}_s(\nu) - \hat{H}_{pp}(\nu) - \hat{H}_{ep}(\nu)\right\},$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_s(\nu) &= \frac{1}{2\beta V} \sum_{\mathbf{q} \in C_q} \sum_{\nu} V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{s_1, s_2} \sum_{\nu_1^*, \nu_2^*} a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},s_1}^+(\nu_1^* + \nu) \\ &\quad \times a_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},s_2}^+(\nu_2^* - \nu) a_{\mathbf{k}_2,s_2}(\nu_2^*) a_{\mathbf{k}_1,s_1}(\nu_1^*); \\ \hat{H}_{ep}(\nu) &= \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{2N}\beta} \sum_{\mathbf{q} \in C_q} \sum_{\nu} \alpha_q^{-1} \hat{f}_{\mathbf{q},\nu} \hat{B}_{\mathbf{q},\nu}; \\ \hat{B}_{\mathbf{q},\nu} &= \left\{ \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} + 1 \right) b_{\mathbf{q},\nu} - \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} - 1 \right) b_{-\mathbf{q},-\nu}^+ \right\}; \\ \hat{f}_{\mathbf{q},\nu} &= \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} (\mathbf{k}\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*); \\ \hat{H}_{pp}(\nu) &= \frac{\hbar^2}{4m\sqrt{2N}\beta} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \in C_q} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \sum_{\nu_1, \nu_2} \alpha_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}^{-1} (b_{x_1+x_2} + b_{-x_1-x_2}^+) \\ &\quad \times \prod_{j=1,2} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}_j} (b_{x_j} - b_{-x_j}^+) + \frac{1}{2\alpha_{\mathbf{q}_j}} (b_{-x_j} + b_{x_j}^+) \right\}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

де $b_x \equiv b_{\mathbf{q},\nu}$. Оскільки

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_q^{(a)}(\beta) &= \beta^{-1} \sum_{\nu} \hat{\rho}_{\mathbf{q},\nu}, \\ \hat{\rho}_{\mathbf{q},\nu} &\equiv \rho_x = \sum_{\mathbf{k},s} \sum_{\nu^*} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s}^+(\nu^* + \nu) a_{\mathbf{k},s}(\nu^*), \\ \hat{\rho}_q^{(b)}(\beta) &= \sqrt{\frac{N}{2\beta}} \alpha_q^{-1} \sum_{\nu} (b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},-\nu}^+), \end{aligned} \quad (2.34)$$

то, використовуючи інтегральне зображення δ -функції у формулі (2.31), одержуємо такий вираз для розрахунку статистичної суми:

$$\begin{aligned} Z &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{N} Z_0 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_0 \exp(2\pi i \omega_0 \mathcal{N}) \xi(\omega_0) \\ &\quad \times \left\langle T \left\{ \int (d\varphi) \exp\left(i\pi \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{q} \in C_q} \varphi_{\mathbf{q}} \left[\sqrt{\frac{N}{2\beta}} \alpha_q^{-1} (b_x + b_{-x}^+) - \frac{1}{\beta} \hat{\rho}_x \right] \right) \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \exp[-\hat{V}_s(\nu) - \hat{H}_{pp}(\nu) - \hat{H}_{ep}(\nu)] \right\} \right\rangle_0; \quad (d\varphi) \equiv \prod_{C_q} d\varphi_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Статистичне засереднення тут проводиться за станами вільних еле-

ктронів і вільних плазмонів,

$$Z_0 = Sp \left\{ \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{H}_p)] \right\} = \exp(-\beta\Omega_0) \quad (2.36)$$

– статистична сума вільних електронів і плазмонів, а Ω_0 – її термодинамічний потенціал

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k},s} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^*)} \right\} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \ln \left\{ 1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \hbar\omega_{\mathbf{q}}; \\ \mu^* &\equiv \mu + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} [V_{\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{q}} V N^{-1}]. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Множник $\xi(\omega_0)$ визначений таким співвідношенням:

$$\begin{aligned} \xi(\omega_0) &= Sp_a \exp \left\{ -\beta[\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{N}] - 2\pi i\omega_0\hat{N} \right\} \\ &\times \left\{ Sp_a \exp[-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{N})] \right\}^{-1} \\ &= \prod_{\mathbf{k},s} \{1 - n_{\mathbf{k},s} + n_{\mathbf{k},s} \exp(-2\pi i\omega_0)\}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

де $n_{\mathbf{k},s} = \{1 + \exp[\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^*)]\}^{-1}$ – розподіл Фермі в ідеальній системі електронів. З формули (2.38) видно, що у границі низьких температур, при повному виродженні ($\beta \rightarrow \infty$) $\xi(\omega_0) \rightarrow \exp(-2\pi i\omega_0 N)$, де N – число електронів у системі. В загальному випадку

$$\xi(\omega_0) = \exp \left\{ -2\pi i\omega_0 N + \sum_{n \geq 2} (-2\pi i)^n \frac{\omega_0^n}{n!} \beta^{1-n} \mu_n^0(0) \right\}, \quad (2.39)$$

де $\mu_n^0(0)$ є статичною довгохвильовою границею n -частинкових динамічних кореляційних функцій ідеальної системи [21], зв'язних (кумулянтних) середніх від добуток операторів $\hat{\rho}_x$:

$$\mu_n^0(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\beta} \langle \hat{\rho}_{x_1} \hat{\rho}_{x_2} \cdots \hat{\rho}_{x_n} \rangle_0^c. \quad (2.40)$$

У статичній довгохвильовій границі

$$\begin{aligned} \mu_n^0(0) &= \sum_{\mathbf{k},s} \frac{d^{n-1}}{d\mu^{n-1}} n_{\mathbf{k},s} \\ &= (-1)^n \frac{V}{\pi^2} \frac{\mu^{\frac{5}{2}-n}}{2^{n-1}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left\{ R_n - \frac{\pi^2}{24} (\beta\mu)^{-2} (2n-3)!! + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

де $R_2 = 1$, $R_3 = 1$, а при $n \geq 4$ маємо $R_n = -(2n-7)!!$.

Тотожність

$$\left\{ 2\pi i\omega_0 + \frac{\partial}{\partial N} \right\} \exp(-2\pi i\omega_0 N) = 0 \quad (2.42)$$

дає можливість проінтегрувати за змінними ω_0 та \mathcal{N} , зводячи розрахунок статистичної суми до такого вигляду:

$$\begin{aligned} Z &= \hat{\Lambda}(N) Z_0 \\ &\times \left\langle T \left\{ \int (d\varphi) \exp(i\pi \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \varphi_{\mathbf{q}} \left[\sqrt{\frac{\mathcal{N}}{2\beta}} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} (b_x + b_{-x}^+) - \frac{1}{\beta} \hat{\rho}_x \right] \right. \right. \\ &\times \left. \left. \exp[-\hat{V}_s(\nu) - \hat{H}_{pp}(\nu) - \hat{H}_{ep}(\nu)] \right\} \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (2.43)$$

При цьому у Z_0 , а також під знаком $\langle \dots \rangle_0$ замість змінної \mathcal{N} слід поставити скрізь число частинок N . Оператор $\hat{\Lambda}(N)$ виникає за рахунок доданків $n \geq 2$ у формулі (2.39) і враховує температурні поправки:

$$\hat{\Lambda}(N) = \exp \left\{ \sum_{n \geq 2} (n!)^{-1} \beta^{1-n} \mu_n^0(0) \frac{\partial^n}{\partial N^n} \right\}. \quad (2.44)$$

Формулу (2.43) доцільно переписати в еквівалентній формі, виділяючи статистичну суму Z_{ep} модельної системи, яка складається із взаємодіючих підсистем електронів і плазмонів, але без врахування додаткових умов, а саме

$$\begin{aligned} Z &= \hat{\Lambda}(N) Z_{ep} \left\langle \hat{J}(b, a) \right\rangle_{ep}; \\ Z_{ep} &= Z_0 \left\langle T \hat{S}(\nu) \right\rangle_0; \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{J}(b, a) \right\rangle_{ep} &= \left\langle \int (d\varphi) \exp \left\{ i\pi \sum_{\mathbf{q} \in C_{\mathbf{q}}} \sum_{\nu} \varphi_{\mathbf{q}} \right. \right. \\ &\times \left. \left. [N^{\frac{1}{2}} (2\beta)^{-\frac{1}{2}} \alpha_{\mathbf{q}}^{-1} (b_x + b_{-x}^+) - \frac{1}{\beta} \hat{\rho}_x] \right\} \right\rangle_{ep}; \\ \left\langle \hat{A} \right\rangle_{ep} &\equiv \left\langle T \left\{ \hat{A} \hat{S}(\nu) \right\} \right\rangle_0 \left\langle T \hat{S}(\nu) \right\rangle_0^{-1}. \end{aligned}$$

3. Теорія збурень і n -частинкові кореляційні функції

Врахування оператора слабкої короткосяжної міжелектронної взаємодії $\hat{V}_s(\nu)$ можна виконати за допомогою підходу локального поля. Врахування оператора нелокальної електрон-плазмонної взаємодії $\hat{H}_{ep}(\nu)$ виконаємо методом теорії збурень. У зв'язку з лінійністю оператора $\hat{H}_{ep}(\nu)$ відносно плазмонних операторів $b_{\mathbf{q},\nu}, b_{\mathbf{q},\nu}^+$ відмінні від нуля внески виникають лише у парних порядках теорії збурень. Іншою важливою особливістю є цілковита відсутність розбіжних діаграм у будь-якому порядку теорії збурень, що зумовлено структурою оператора $\hat{H}_{ep}(\nu)$. Для прикладу розгляньмо внесок до термодинамічного потенціалу єдиної діаграми другого порядку теорії збурень:

$$\begin{aligned} \Delta\Omega_2 &= -\frac{1}{2\beta} \left\langle T \hat{H}_{ep}(\nu) \right\rangle_0 \quad (3.1) \\ &= -\sum_{\mathbf{q},\nu} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 (4N\beta^2\alpha_{\mathbf{q}}^2)^{-1} \left\langle T \left\{ \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \right\} \right\rangle_0 \left\langle T \left\{ \hat{B}_x \hat{B}_{-x} \right\} \right\rangle_0. \end{aligned}$$

Середні, які тут фігурують, визначаються через спектральні зображення функцій Гріна електронів і плазмонів [22]

$$\begin{aligned} -\left\langle T \left\{ a_{\mathbf{k}_1, s_1}(\nu_1^*) a_{\mathbf{k}_2, s_2}^+(\nu_2^*) \right\} \right\rangle_0 &= G_{\mathbf{k}_1, s_1}^e(\nu_1^*) \delta_{s_1, s_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{\nu_1^*, \nu_2^*}; \\ G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) &= \{i\nu^* - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu^*\}^{-1}; \quad (3.2) \\ -\left\langle T \left\{ b_x b_x^+ \right\} \right\rangle_0 &= G_{\mathbf{q}}^p(\nu) = \{i\nu - \hbar\omega_{\mathbf{q}}\}^{-1}. \end{aligned}$$

Згідно з формулами (3.2)

$$\begin{aligned} \left\langle T \left\{ \hat{B}_x \hat{B}_{-x} \right\} \right\rangle_0 &= -2\hbar\omega_{\mathbf{q}} \left\{ \left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{\varepsilon_{\mathbf{q}}} \right)^2 - 1 \right\} \{ \nu^2 + (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 \}^{-1}; \quad (3.3) \\ \left\langle T \left\{ \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \right\} \right\rangle_0 &= \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} (\mathbf{k}, \mathbf{q})(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s}^e(\nu^* + \nu). \end{aligned}$$

Вираз (3.1) нагадує внесок у термодинамічний потенціал деякої модельної системи у першому порядку теорії збурень, причому роль локального потенціалу відіграє величина

$$-\frac{V}{2N} \varepsilon_F^2 \alpha_{\mathbf{q}}^{-2} \left\langle T \left\{ \hat{B}_x \hat{B}_{-x} \right\} \right\rangle_0 = 4V_{\mathbf{q}} \varepsilon_F^2 \{ \nu^2 + (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2 \}^{-1}, \quad (3.4)$$

що має властивість потенціалу зарядженого квантового пакета. Множник

$$\eta_2(x, -x) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \varepsilon_F^{-2} \beta^{-1} \left\langle T \left\{ \hat{f}_x \hat{f}_{-x} \right\} \right\rangle_0 \quad (3.5)$$

відіграє роль спектрального зображення двочастинкової кореляційної функції типу „густина–густина“. У діаграмах виникають функції типу

$$\eta_n(x_1, \dots, x_n) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^n \varepsilon_F^{-n} \beta^{-1} \left\langle T \left\{ \hat{f}_{x_1} \hat{f}_{x_2} \cdots \hat{f}_{x_n} \right\} \right\rangle_0, \quad (3.6)$$

що є аналогами n -частинкових кореляційних функцій звичайної теорії збурень з потенціалом Кулона [21].

Використовуючи функції Гріна базисної системи $G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*)$, зобразимо $\eta_n(x_1, \dots, x_n)$ у вигляді таких згорткок:

$$\begin{aligned} \eta_2(x_1, x_2) &= \beta^{-1} \delta_{x_1 + x_2, 0} \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^2 Re \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}^e(\nu^* + \nu_1) \\ &\quad \times (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1); \quad (3.7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_3(x_1, x_2, x_3) &= -2\beta^{-1} \delta_{x_1 + x_2 + x_3, 0} \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^3 Re \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) \\ &\quad \times G_{\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, s}^e(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, s}^e(\nu^* - \nu_2) \\ &\quad \times (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) \end{aligned}$$

і т. д., де символ Re відноситься до частот Бозе-Мацубари (ν_1, ν_2, \dots) . З формул (3.7) видно, що $\eta_n(x_1, \dots, x_n)$ є дійсними функціями своїх аргументів $(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n; \nu_1, \dots, \nu_n)$. Виконавши підсумовування за частотою ν^* за правилом [22]

$$\beta^{-1} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) = n_{\mathbf{k}, s} = \{1 + \exp[\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu^*)]\}^{-1}, \quad (3.8)$$

зобразимо $\eta_n(x_1, \dots, x_n)$ у вигляді суми за хвильовим вектором,

$$\begin{aligned} \eta_2(x, -x) &= 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^2 Re \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} y(x)(\mathbf{k}, \mathbf{q})(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}); \\ \eta_3(x_1, x_2, x_3) &= -2\delta_{x_1 + x_2 + x_3, 0} \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^3 Re \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} \\ &\quad \times \{ y(x_1)y(-x_2)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \\ &\quad + y(x_2)y(-x_3)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_3)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3) \\ &\quad + y(x_3)y(-x_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_3)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_1) \}; \quad (3.9) \end{aligned}$$

і т. д., де $y(x) \equiv \{i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}\}^{-1}$; $x \equiv (\mathbf{q}, \nu)$. Зробимо зауваження щодо симетрії виразу у фігурній дужці (3.9): другий і третій доданки

утворюються з першого шляхом циклічної перестановки. Розрахунок функції $\eta_2(x, -x)$ труднощів не складає. Переходячи від суми за вектором \mathbf{k} до інтегралу і використовуючи сферичну систему координат, вісь Oz якої паралельна до вектора \mathbf{q} , при абсолютному нулі температури одержуємо:

$$\begin{aligned} \eta_2(x, -x) &= -\frac{N}{2\varepsilon_F}q^2 + (u^2 + \frac{1}{4}q^2)\mu_2^0(x, -x) \\ &= -\frac{N}{2\varepsilon_F}q^2 \left\{ 1 - 3[u^2 + \frac{1}{4}q^2]I_{2,0}(q, u) \right\}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

де $q \equiv |\mathbf{q}|k_F^{-1}$; $u \equiv \nu(2\varepsilon_F q)^{-1}$, а $I_{2,0}(q, u)$ – безрозмірна функція цих змінних:

$$\begin{aligned} I_{2,0}(q, u) &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2q} \left(1 + u^2 - \frac{q^2}{4} \right) \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma \ln \left[\left(1 + \sigma \frac{q}{2} \right)^2 + u^2 \right] \right. \\ &\quad \left. - u \sum_{\sigma=\pm 1} \arctg \left[\frac{1}{u} \left(1 + \sigma \frac{q}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Наявністю добутку скалярних множників $(\mathbf{k}, \mathbf{q}_i)$ функції $\eta_n(x_1, \dots, x_n)$ відрізняються від $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$. Однак ця „дрібна деталь“ суттєво ускладнює розрахунок функцій $\eta_n(x_1, \dots, x_n)$ у випадку $n \geq 3$ і зумовлює принципову відмінність у залежності функцій (2.40) і (3.5) від хвильових векторів $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$, зокрема їх асимптотику:

$$\begin{aligned} \mu_n^0(x_1, \dots, x_n) &\rightarrow \begin{cases} N\varepsilon_F(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} \dots \varepsilon_{\mathbf{q}_n})^{-1} & \text{при } q_i \gg k_F; \\ N\varepsilon_F^{1-n} & \text{при } q_i \ll k_F; \nu_i = 0; \end{cases} \\ \eta_n(x_1, \dots, x_n) &= \begin{cases} N\varepsilon_F^{1-n} & \text{при } q_i \gg k_F; \\ N\varepsilon_F^{1-n} q_1 q_2 \dots q_n k_F^{-n} & \text{при } q_i \ll k_F; \nu_i = 0; \end{cases} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Цю асимптотику підтверджує рисунок 1, на якому зображено безрозмірні множники функцій $\eta_2(x, -x)$ та $\mu_2(x, -x)$ як функції хвильового вектора \mathbf{q} при заданих частотах. З рисунка видно, що $\eta_2(x, -x)$ є ще й знакозмінною функцією в області малих і середніх векторів, на відміну від $\mu_2^0(x, -x)$.

У наступних розділах виконано явний розрахунок функцій $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$ та $\eta_4(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ шляхом зведення їх до $\mu_3^0(x_1, x_2, x_3)$, $\mu_4^0(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ та споріднених функцій.

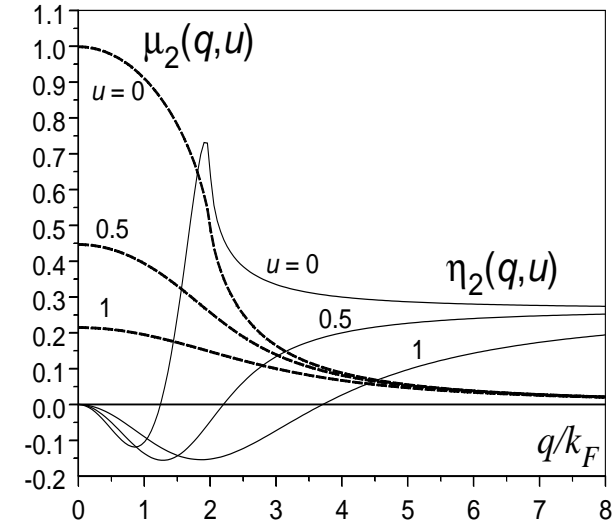


Рис. 1. Двочастинкові кореляційні функції $\eta_2(q, u) = 2\varepsilon_F(3N)^{-1}\eta_2(x, -x)$ та $\mu_2(q, u) = 2\varepsilon_F(3N)^{-1}\mu_2^0(x, -x)$ при різних значеннях безрозмірної частоти ($u = 0; 0.5; 1$).

4. Тричастинкова кореляційна функція

Спосіб розрахунку кореляційних функцій при $n \geq 3$ детально проілюструємо на прикладі тричастинкової функції. Насамперед у кожному з трьох доданків формули (3.9) виконаємо перетворення з метою зменшити число скалярних добутків, використовуючи тотожності типу

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) &= -\frac{1}{2} \{ \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} \}, \\ \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) &= -\frac{1}{2} \{ \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{q}_2} \}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

і т.д. В результаті таких перетворень із кожного з доданків (3.9) виникають складові без енергетичних знаменників, складові з одним енергетичним знаменником типу

$$\mu_2(x) = -2 \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} [i\nu + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}]^{-1}, \quad (4.2)$$

$$\zeta_2(x_1|\mathbf{q}_2) = -4 \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}, \mathbf{q}_2) [i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}]^{-1},$$

а також складові з двома енергетичними знаменниками, але без скалярних добутків у чисельнику дробу типу

$$\Gamma_3(x_1, -x_2) = \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} [i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}]^{-1} [-i\nu_2 + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_2}]^{-1}. \quad (4.3)$$

Розрахунок складових типу (4.2) легко виконується за допомогою інтегрування за вектором \mathbf{k} у сферичній системі координат. У безрозмірних змінних

$$\begin{aligned} \mu_2(x) &= \frac{3N}{2\varepsilon_F} R_{2,0}(q, u), \\ \zeta_2(x|\mathbf{q}_1) &= \frac{3N}{q^2} (\mathbf{q}, \mathbf{q}_1) C(q, u), \end{aligned} \quad (4.4)$$

де безрозмірні комплексні функції $R_{2,0}(q, u)$ та $C(q, u)$ наведено у Додатку 1. Вводячи для компактності запису позначення $\varepsilon(q, u) = q^2 + 2iuq$, представимо $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$ у безрозмірних змінних у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \eta_3(x_1, x_2, x_3) &= \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \delta_{x_1+x_2+x_3,0} \left\{ -\frac{1}{3}(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2) \right. \\ &+ \frac{1}{2} I_{2,0}(q_1, u_1) \text{Re}[\varepsilon^*(q_1, u_1)(\varepsilon^*(q_2, u_2) - \varepsilon^*(q_3, u_3))] \\ &+ \frac{1}{2} I_{2,0}(q_2, u_2) \text{Re}[\varepsilon^*(q_2, u_2)(\varepsilon^*(q_3, u_3) - \varepsilon^*(q_1, u_1))] \\ &+ \frac{1}{2} I_{2,0}(q_3, u_3) \text{Re}[\varepsilon^*(q_3, u_3)(\varepsilon^*(q_1, u_1) - \varepsilon^*(q_2, u_2))] \\ &+ \frac{\text{Re}}{4} [R_{2,0}(q_1, u_1)(\varepsilon(q_1, u_1)\varepsilon(q_3, u_3) + \varepsilon^*(q_1, u_1)\varepsilon(q_2, u_2))] \\ &+ \frac{\text{Re}}{4} [R_{2,0}(q_2, u_2)(\varepsilon(q_2, u_2)\varepsilon(q_1, u_1) + \varepsilon^*(q_2, u_2)\varepsilon(q_3, u_3))] \\ &+ \frac{\text{Re}}{4} [R_{2,0}(q_3, u_3)(\varepsilon(q_3, u_3)\varepsilon(q_2, u_2) + \varepsilon^*(q_3, u_3)\varepsilon(q_1, u_1))] \\ &- \frac{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)}{2} \text{Re}[\varepsilon^*(q_1, u_1)C(q_1, u_1)q_1^{-2} + \varepsilon^*(q_2, u_2)C^*(q_2, u_2)q_2^{-2}] \\ &- \frac{(\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3)}{2} \text{Re}[\varepsilon^*(q_2, u_2)C(q_2, u_2)q_2^{-2} + \varepsilon^*(q_3, u_3)C^*(q_3, u_3)q_3^{-2}] \\ &- \frac{(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_3)}{2} \text{Re}[\varepsilon^*(q_3, u_3)C(q_3, u_3)q_3^{-2} + \varepsilon^*(q_1, u_1)C^*(q_1, u_1)q_1^{-2}] \left. \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{4} \delta_{x_1+x_2+x_3,0} \text{Re} \{ \varepsilon^*(q_1, u_1) \varepsilon^*(q_2, u_2) \varepsilon^*(q_3, u_3) \\ & \times [\Gamma_3(x_1, -x_2) + \Gamma_3(x_2, -x_3) + \Gamma_3(x_3, -x_1)] \}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Зазначимо, що останній доданок у формулі (4.5) пов'язаний з функцією $\mu_3^0(x_1, x_2, x_3)$, оскільки

$$\begin{aligned} \mu_3^0(x_1, x_2, x_3) &= -2\delta_{x_1+x_2+x_3,0} \text{Re} \{ \Gamma_3(x_1, -x_2) \\ &+ \Gamma_3(x_2, -x_3) + \Gamma_3(x_3, -x_1) \}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

однак він вимагає розрахунку не тільки дійсних, але й уявних складових функцій $\Gamma_3(x_i, -x_j)$.

Труднощі розрахунку $\Gamma_3(x_i, -x_j)$ та аналогічних функцій вищого порядку (з більшим числом енергетичних знаменників) зумовлені необхідністю інтегрування за вектором \mathbf{k} при заданій конфігурації векторів $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$. Проте інтегрування за кутовими змінними вектора \mathbf{k} стає елементарним, якщо використати тотожність Фейнмана [23],

$$\prod_{j=1}^n A_j^{-1} = (n-1)! \int_0^1 \dots \int_0^1 d\alpha_1 \dots d\alpha_n \left\{ \sum_{j=1}^n \alpha_j A_j \right\}^{-n} \delta\left(\sum_{j=1}^n \alpha_j - 1\right). \quad (4.7)$$

Ми розглянемо тут розрахунок функції $\Gamma_3(x_1, x_2)$ для випадку частот ν_1 і ν_2 одного знаку, оскільки через те, що дійсна частина $\sum_j \alpha_j A_j$ може перетворюватися в нуль при деяких значеннях α , ви-

никає вимога додатньої визначеності уявної частини $\sum_j \alpha_j A_j$. У До-

датку 2 наведено формули зведення, які дозволяють одержати функцію $\Gamma_3(x_1, x_2)$ для частот різного знаку. Виходячи з означення (4.3), перейдемо до безрозмірних змінних $q_i = |\mathbf{q}_i| k_F^{-1}$, $u_i = \nu_i (2\varepsilon_F q_i)^{-1}$ і використаємо тотожність (4.7) при $n = 2$. В результаті цих перетворень одержуємо таке зображення:

$$\Gamma_3(x_1, x_2) = \frac{3N}{4\pi q_1 q_2 (2\varepsilon_F)^2} \int d\mathbf{k} n_{\mathbf{k},s} \int_0^1 d\alpha F_\alpha^{-2}; \quad (4.8)$$

$$F_\alpha = \alpha[(\mathbf{k}, \mathbf{e}_1) + \xi_1] + (1-\alpha)[(\mathbf{k}, \mathbf{e}_2) + \xi_2],$$

де $\mathbf{e}_i = \mathbf{q}_i |\mathbf{q}_i|^{-1}$, вектор \mathbf{k} вимірюється в одиницях k_F , $\xi_j = \frac{1}{2} q_j - i u_j$; $j = 1, 2$. Введемо вектор

$$\boldsymbol{\rho}_\alpha = \alpha \mathbf{e}_1 + (1-\alpha) \mathbf{e}_2, \quad (4.9)$$

а також позначення

$$\begin{aligned}\Omega_\alpha &= \alpha(\xi_2 - \xi_1) - \xi_2 = \Omega_\alpha^c - i\Omega_\alpha^s; \\ \Omega_\alpha^c &= \frac{1}{2}[\alpha(q_1 - q_2) + q_2], \quad \Omega_\alpha^s = \alpha(u_1 - u_2) + u_2,\end{aligned}\quad (4.10)$$

так що $\Omega_\alpha^c, \Omega_\alpha^s \geq 0$. У цих позначеннях

$$F_\alpha = (\mathbf{k}, \boldsymbol{\rho}_\alpha) + \Omega_\alpha, \quad (4.11)$$

а тому інтегрування за кутовими змінними вектора \mathbf{k} виконаємо у сферичній системі координат, вісь z якої паралельна вектору $\boldsymbol{\rho}_\alpha$. Після наступного інтегрування за модулем вектора \mathbf{k} одержуємо $\Gamma_3(x_1, x_2)$ у вигляді однократного інтеграла за параметром α :

$$\begin{aligned}\Gamma_3(x_1, x_2) &= -\frac{3N}{q_1 q_2 (2\varepsilon_F)^2} \int_0^1 \frac{d\alpha}{\rho_\alpha^2} \left\{ 1 - \frac{\Omega_\alpha}{2\rho_\alpha} \ln \left| \frac{\rho_\alpha + \Omega_\alpha}{\rho_\alpha - \Omega_\alpha} \right| \right\}, \\ \rho_\alpha &\equiv |\boldsymbol{\rho}_\alpha| = \{1 - 2\alpha(1-t) + 2\alpha^2(1-t)\}^{\frac{1}{2}},\end{aligned}\quad (4.12)$$

а $t \equiv t_{12} \equiv (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ є косинусом кута між векторами \mathbf{q}_1 і \mathbf{q}_2 .

Інтеграл за змінною α розіб'ємо на два. Той із них, у якому фігурує логарифм, інтегруємо частинами, після чого об'єднуємо його з тим інтегралом, підінтегральна функція якого дорівнює ρ_α^{-2} . В результаті цих перетворень інтеграл (4.12) суттєво спрощується, так що

$$\begin{aligned}\Gamma_3(x_1, x_2) &= \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} [2q_1 q_2 (1-t^2)]^{-1} \\ &\times \left\{ [\xi_2 - t\xi_1] \ln \left[\frac{1-\xi_1}{1+\xi_1} \right] + [\xi_1 - t\xi_2] \ln \left[\frac{1-\xi_2}{1+\xi_2} \right] \right\} \\ &- \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} [2q_1 q_2 (1-t^2)]^{-1} \delta(\xi, t) \int_0^1 \frac{d\alpha}{\rho_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2},\end{aligned}\quad (4.13)$$

де

$$\begin{aligned}\delta(\xi, t) &= 1 - t^2 - \xi_1 - \xi_2^2 + 2t\xi_1\xi_2; \\ \rho_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2 &= \alpha^2 \{2(1-t) - (\xi_1 - \xi_2)^2\} \\ &+ 2\alpha \{\xi_2(\xi_2 - \xi_1) - (1-t)\} + 1 - \xi_2^2.\end{aligned}\quad (4.14)$$

Нехай $\alpha_1 = \alpha_1^c + i\alpha_1^s$, $\alpha_2 = \alpha_2^c + i\alpha_2^s$ є коренями рівняння $\rho_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2 = 0$:

$$\alpha_1^c = \{p_c^2 + p_s^2\}^{-1} \{p_c(b_c - \eta) + p_s(b_s + \zeta)\};$$

$$\begin{aligned}\alpha_1^s &= \{p_c^2 + p_s^2\}^{-1} \{p_c(b_s + \zeta) - p_s(b_c - \eta)\}; \\ \alpha_2^c &= \{p_c^2 + p_s^2\}^{-1} \{p_c(b_c + \eta) + p_s(b_s - \zeta)\}; \\ \alpha_2^s &= \{p_c^2 + p_s^2\}^{-1} \{p_c(b_s - \zeta) - p_s(b_c + \eta)\}.\end{aligned}\quad (4.15)$$

Тут використано такі позначення:

$$\begin{aligned}p_c &= 2(1-t) - \frac{1}{4}(q_1 - q_2)^2 + (u_1 - u_2)^2; \\ p_s &= (q_1 - q_2)(u_1 - u_2); \\ b_c &= 1 - t - u_2(u_1 - u_2) + \frac{q_2}{4}(q_1 - q_2); \\ b_s &= \frac{u_2}{2}(q_2 - q_1) - \frac{q_2}{2}(u_1 - u_2); \\ [\delta(\xi, t)]^{\frac{1}{2}} &= \zeta + i\eta; \\ \zeta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \delta_c + [\delta_c^2 + \delta_s^2]^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{2}}; \quad \eta = \frac{\delta_s}{\sqrt{2}} \left\{ \delta_c + [\delta_c^2 + \delta_s^2]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-\frac{1}{2}}; \\ \delta_c &= 1 - t^2 - \frac{1}{4}(q_1^2 + q_2^2 - 2tq_1q_2) + (u_1^2 + u_2^2 - 2tu_1u_2); \\ \delta_s &= u_1(q_1 - tq_2) + u_2(q_2 - tq_1).\end{aligned}\quad (4.16)$$

Розділяючи підінтегральну функцію на прості множники, представимо інтеграл за змінною α у такому вигляді:

$$\begin{aligned}\delta(\xi, t) \int_0^1 \frac{d\alpha}{\rho_\alpha^2 - \Omega_\alpha^2} &= \gamma_3^c + i\gamma_3^s, \\ \gamma_3^c &= \frac{\zeta}{2}(\tilde{A}_1 - \tilde{A}_2) + \frac{\eta}{4}(\tilde{L}_1 - \tilde{L}_2); \\ \gamma_3^s &= \frac{\eta}{2}(\tilde{A}_1 - \tilde{A}_2) - \frac{\zeta}{4}(\tilde{L}_1 - \tilde{L}_2); \\ \tilde{A}_i &= \arctg \frac{1 - \alpha_i^c}{\alpha_i^s} + \arctg \frac{\alpha_i^c}{\alpha_i^s}; \\ \tilde{L}_i &\equiv \ln \frac{(1 - \alpha_i^c)^2 + (\alpha_i^s)^2}{(\alpha_i^c)^2 + (\alpha_i^s)^2}; \quad (i = 1, 2).\end{aligned}\quad (4.17)$$

Остаточно дійсна і уявна складові функції $\Gamma_3(x_1, x_2)$ визначаються такими формулами:

$$\Gamma_3^c(x_1, x_2) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} [2q_1 q_2 (1-t^2)]^{-1}$$

$$\times \left\{ -\frac{1}{4}(q_2 - tq_1)L(q_1, u_1) - (u_2 - tu_1)A(q_1, u_1) - \frac{1}{4}(q_1 - tq_2)L(q_2, u_2) - (u_1 - tu_2)A(q_2, u_2) - \gamma_3^c \right\}; \quad (4.18)$$

$$\Gamma_3^s(x_1, x_2) = -\frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} [2q_1q_2(1-t^2)]^{-1} \times \frac{1}{2} \{ (q_2 - tq_1) A(q_1, u_1) - (u_2 - tu_1) L(q_1, u_1) + (q_1 - tq_2) A(q_2, u_2) - (u_1 - tu_2) L(q_2, u_2) + \gamma_3^s \},$$

де функції $A(q, u)$ та $L(q, u)$ наведено у Додатку 1.

Формули (4.4), (4.5), (4.15) – (4.18) разом із формулами зведення (див. Додаток 2) в сукупності визначають функцію $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$.

5. Чотиричастинкова кореляційна функція

Розглянемо тут найбільш важливу чотиричастинкову кореляційну функцію, яка виникає у четвертому порядку теорії збурень і відповідає виродженій комбінації аргументів ($x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0$ при $x_1 + x_2 = 0$):

$$\eta_4(x_1, -x_1, x_2, -x_2) = \beta^{-1} \varepsilon_F^{-4} \left\langle T \left\{ \hat{f}_{x_1} \hat{f}_{-x_1} \hat{f}_{x_2} \hat{f}_{-x_2} \right\} \right\rangle_0^c = \eta_{4,1}(x_1, -x_1, x_2, -x_2) + \eta_{4,2}(x_1, x_2, -x_1, -x_2), \quad (5.1)$$

де перша складова є власноенергетичною,

$$\eta_{4,1}(x_1, -x_1, x_2, -x_2) = P_4(x_1, x_2) + P_4(x_2, -x_1),$$

$$P_4(x_1, x_2) = -2\beta^{-1} \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^4 Re \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} [G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*)]^2 G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1, s}^e(\nu^* + \nu_1) \times G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2, s}^e(\nu^* + \nu_2) (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) (\mathbf{k}, \mathbf{q}_2) (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1) (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2), \quad (5.2)$$

а друга – обмінною:

$$\eta_{4,2}(x_1, x_2, -x_1, -x_2) = R_4(x_1, x_2) + R_4(x_2, -x_1),$$

$$R_4(x_1, x_2) = -\beta^{-1} \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^4 Re \sum_{\mathbf{k}, s} \sum_{\nu^*} G_{\mathbf{k}, s}^e(\nu^*) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2, s}^e(\nu^* + \nu_2) \times G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1, s}^e(\nu^* + \nu_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2, s}^e(\nu^* + \nu_1 + \nu_2) \times (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1), \quad (5.3)$$

Для наочності зручно зображати функції $\eta_m(x_1, \dots, x_n)$, як і $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$, діаграмами у вигляді кільця з n відростками, що відповідають їх аргументам. Кожному сегменту кільця співставляється відповідна функція Гріна і добуток векторів $(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}_i)$; напрям обходу контура виберемо проти руху годинникової стрілки. Згідно з цими правилами

$$\eta_2(x, -x) = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{c} (\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^e(\nu^* + \nu) \\ -x \bigcirc x \\ (\mathbf{k}, \mathbf{q}) G_{\mathbf{k}}^e(\nu^*) \end{array} + \begin{array}{c} x \bigcirc -x \end{array} \right\};$$

$$\eta_3(x_1, x_2, x_3) = \delta_{x_1+x_2+x_3, 0} \left\{ Z_1 \begin{array}{c} x_1 \\ \bigcirc \\ x_2 \quad x_3 \\ Z_2 \end{array} + \begin{array}{c} -x_1 \\ \bigcirc \\ -x_2 \quad -x_3 \\ Z_7 \end{array} \right\};$$

$$P_4(x_1, x_2) = Z_4 \begin{array}{c} -x_1 \quad x_1 \\ \bigcirc \\ x_2 \quad -x_2 \\ Z_6 \end{array} + \begin{array}{c} x_1 \quad -x_1 \\ \bigcirc \\ -x_2 \quad x_2 \\ Z_5 \end{array}; \quad (5.4)$$

$$R_4(x_1, x_2) = Z_8 \begin{array}{c} -x_1 \quad -x_2 \\ \bigcirc \\ x_2 \quad x_1 \\ Z_{10} \end{array} + \begin{array}{c} x_1 \quad x_2 \\ \bigcirc \\ -x_2 \quad -x_1 \\ Z_9 \end{array}.$$

Тут введено такі позначення:

$$Z_1 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_3) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3}^e(\nu^* + \nu_1 + \nu_2 + \nu_3);$$

$$Z_2 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2}^e(\nu^* + \nu_2);$$

$$Z_3 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_3) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_3}^e(\nu^* + \nu_2 + \nu_3);$$

$$Z_4 = (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) G_{\mathbf{k}}^e(\nu^*);$$

$$Z_5 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2}^e(\nu^* + \nu_2);$$

$$Z_6 = (\mathbf{k}, \mathbf{q}_2) G_{\mathbf{k}}^e(\nu^*);$$

$$Z_7 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}^e(\nu^* + \nu_1);$$

$$Z_8 = (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) G_{\mathbf{k}}^e(\nu^*);$$

$$Z_9 = (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2}^e(\nu^* + \nu_2);$$

$$\begin{aligned} Z_{10} &= (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}^e (\nu^* + \nu_1 + \nu_2); \\ Z_{11} &= (\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}^e (\nu^* + \nu_1). \end{aligned}$$

Опишемо схему розрахунку власноенергетичної складової. Тотожність $G_{\mathbf{k},s}^2(\nu^*) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} G_{\mathbf{k},s}(\nu^*)$ дозволяє виконати обчислення суми за частотою ν^* таким самим способом, як у випадку $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$. Наступне диференціювання за $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ та рівність $\frac{\partial n_{\mathbf{k},s}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} = -\frac{\partial}{\partial \mu} n_{\mathbf{k},s}$ дають такий результат:

$$\begin{aligned} P_4(x_1, x_2) &= 2 \left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F} \right)^4 \\ &\times Re \sum_{\mathbf{k},s} \left\{ \frac{\partial n_{\mathbf{k},s}}{\partial \mu} (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) \right. \\ &\times y(x_1)y(x_2) \\ &+ n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) \\ &\times [y^2(x_1)y(x_2) + y^2(x_2)y(x_1)] \\ &- n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2) \\ &\times y^2(-x_1)y(x_2 - x_1) \\ &- n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1) \\ &\left. \times y^2(-x_2)y(x_1 - x_2) \right\}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Перший доданок у фігурній дужці (5.5) дає так звану „аномальну“ складову $\eta_4(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$, за аналогією до „аномальних“ складових функцій $\mu_n^0(x_1, \dots, x_n)$ [21]. При розрахунку фізичних характеристик моделі при $T = 0K$ такі складові цілком компенсуються зсувом хімічного потенціалу (за рахунок взаємодії) і в остаточних виразах не фігурують. Через те ми не будемо його розглядати. Проте зауважимо, що його розрахунок можна виконати за схемою розрахунку $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$.

Для розрахунку інших доданків $P_4(x_1, x_2)$ („нормальних“ складових) скористаємось тотожними перетвореннями типу (4.1), щоб максимально можливо звільнитись від скалярних добутків. Це приводить до появи функцій типу (4.2) та (4.3), а також виразів типу

$$\begin{aligned} -2 \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} y^2(x) &= i \frac{\partial}{\partial \nu} \mu_2(x), \\ -4 \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) y^2(x) &= i \frac{\partial}{\partial \nu} \zeta_2(x|\mathbf{q}_1), \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\tau_2(x|\mathbf{q}_1) = -4 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)^2 y(x),$$

а також функцій типу

$$\Gamma_4^c(x_1, x_1, x_2) = -2Re \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k},s} y^2(x_1) y(x_2), \quad (5.7)$$

розрахованих у роботі [21] для випадку $T = 0K$. Для „нормальної“ складової $P_4(x_1, x_2)$ одержуємо таке зображення:

$$\begin{aligned} P_4^n(x_1, x_2) &= \Phi(x_1, x_2) + \Phi(x_2, x_1), \\ \varepsilon_F^4 \Phi(x_1, x_2) &= -\frac{N}{8} \frac{\hbar^2}{2m} \{ q_1^2 + 2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \} \\ &- \frac{1}{4} \nu_1 (\nu_2^2 + \varepsilon_{q_2}^2) \Gamma_3^s(x_1, x_2) + \frac{1}{8} \tau_2^c(x_2 - x_1|\mathbf{q}_1) \\ &- \frac{1}{4} \{ \nu_1 (\nu_2^2 + \varepsilon_{q_2}^2) + \nu_2 (\nu_1^2 + \varepsilon_{q_1}^2) \} \Gamma_3^s(-x_1, x_2 - x_1) \\ &+ \frac{1}{16} (\nu_1^2 + \varepsilon_{q_1}^2) (\nu_2^2 + \varepsilon_{q_2}^2) \{ \Gamma_4^c(-x_1, -x_1, x_2 - x_1) - \Gamma_4^c(x_1, x_1, x_2) \} \\ &+ \frac{1}{8} \mu_2^c(x_1) \{ \varepsilon_{q_1}^2 + 2\nu_1^2 + 2\nu_1\nu_2 \} + \frac{1}{8} (\varepsilon_{\mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1}) \mu_2^s(x_1) \\ &+ \frac{1}{16} (\nu_2^2 + \varepsilon_{q_2}^2) \mu_2^c(x_2) - \frac{1}{16} (\varepsilon_{q_1}^2 + \varepsilon_{q_2}^2 + \nu_2^2 - \nu_1^2 + 2\nu_1\nu_2) \mu_2^s(x_2 - x_1) \\ &+ \frac{1}{8} (\nu_1 + \nu_2) \varepsilon_{q_1} \mu_2^s(x_2 - x_1) + \frac{1}{16} (\nu_1^2 + \varepsilon_{q_1}^2) (\nu_1 + 2\nu_2) \frac{\partial}{\partial \nu_1} \mu_2^c(x_1) \\ &+ \frac{1}{16} (\nu_1^2 + \varepsilon_{q_1}^2) (\varepsilon_{q_1}^2 - \varepsilon_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1}) \frac{\partial}{\partial \nu_1} \mu_2^s(x_1) - \frac{1}{8} (\nu_1 + \nu_2) \zeta_2^s(x_2 - x_1|\mathbf{q}_1) \\ &- \frac{1}{8} \nu_1 \{ \zeta_2^s(x_1|\mathbf{q}_2) - \zeta_2^s(x_1|\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \} \\ &+ \frac{1}{16} (\nu_1^2 + \varepsilon_{q_1}^2) \frac{\partial}{\partial \nu_1} \{ \zeta_2^s(x_1|\mathbf{q}_2) - \zeta_2^s(x_1|\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) \}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Тут використано розмірні змінні \mathbf{q}_i, ν_i індекс “c” означає дійсну частину відповідної функції, а “s” – уявну. Функція $\tau_2(x|\mathbf{q}_1)$ легко розраховується інтегруванням у сферичній системі координат. Вона наведена у Лодатку 1.

Тільки на перший погляд здається, що розрахунок обмінної складової громіздкіший, ніж власноенергетичної, оскільки після обчислення суми за частотою ν^* функція $R_4(x_1, x_2)$ має три різних енергетичних знаменники:

$$R_4(x_1, x_2) = \Psi_4(x_1, x_2) + \Psi_4(x_2, -x_1), \quad (5.9)$$

$$\Psi_4(x_1, x_2) = -2\left(\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon_F}\right)^4 Re \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} y(x_1) y(x_2) y(x_1 + x_2) \\ \times (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1).$$

Скориставшись тотожністю

$$y(x_1) y(x_2) y(x_1 + x_2) = \left\{ 2\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \right\}^{-1} \quad (5.10) \\ \times \{y(x_1) y(x_1 + x_2) + y(x_2) y(x_1 + x_2) - y(x_1) y(x_2)\}.$$

зведемо розрахунок $\Psi_4(x_1, x_2)$ до такої форми, у якій фігурують лише два енергетичні знаменники:

$$\Psi_4(x_1, x_2) = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 \varepsilon_F^{-3} (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)^{-1} Re \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k}, \mathbf{q}_1)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\ \times (\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_2)(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1) \quad (5.11) \\ \times \{y(x_1) y(x_2) - y(x_1) y(x_1 + x_2) - y(x_2) y(x_1 + x_2)\}.$$

Наступний розрахунок виконується за схемою розрахунку $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$, використовуючи тотожності типу

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) = -\frac{1}{2} \{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1}\}, \quad (5.12) \\ \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = -\frac{1}{2} \{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2}\} + \frac{1}{2} \{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}\} - \frac{1}{2} \varepsilon_{\mathbf{q}_2},$$

і т. д. Таким чином, функцію вдається зобразити у вигляді суми трьох доданків,

$$\Psi_4(x_1, x_2) = \Psi_4^{(1)}(x_1, x_2) + \Psi_4^{(2)}(x_1, x_2) + \Psi_4^{(2)}(x_2, x_1), \quad (5.13)$$

де $\Psi_4^{(1)}(x_1, x_2)$ відповідає $y(x_1) y(x_2)$, $\Psi_4^{(2)}(x_1, x_2)$ – доданку $y(x_1) y(x_1 + x_2)$, $\Psi_4^{(2)}(x_2, x_1)$ – доданку $y(x_2) y(x_1 + x_2)$. Для компактності запису використаємо позначення $\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$, а також введемо ще одну функцію типу $\zeta_2(x_1|\mathbf{q}_2)$, $\tau_2(x_1|\mathbf{q}_2)$, а саме

$$S_2(x_1|\mathbf{q}_2) = -8\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 Re \sum_{\mathbf{k}, s} n_{\mathbf{k}, s} (\mathbf{k}, \mathbf{q}_2)^3 y(x_1), \quad (5.14)$$

результати розрахунку якої наведено в Додатку 1. Складова $\Psi_4^{(1)}(x_1, x_2)$ зображаються у такому вигляді:

$$16\Psi_4^{(1)}(x_1, x_2)\varepsilon_F^4\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \\ = N \left\{ 2(\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1})\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} - [\varepsilon_{\mathbf{q}_1}\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + \nu_1\nu_2] + 4\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}[\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} + \frac{1}{5}\varepsilon_F] \right\} \\ + Re \left\{ -(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)[2\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + i\nu_1][\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}\mu_2(x_1) + \frac{1}{2}\zeta_2(x_1|\mathbf{q}_2)] \right. \\ \left. + (\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2)[2\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2][(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})\mu_2(x_2) + \frac{1}{2}\zeta_2(x_2|\mathbf{q}_1)] \right. \\ \left. - (\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2)(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)[\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} + \frac{1}{2}\varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \frac{1}{2}i\nu_1]\mu_2(x_1) \right. \quad (5.15) \\ \left. - (\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2)(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)[\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} - \frac{1}{2}\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + \frac{1}{2}i\nu_2]\mu_2(x_2) \right. \\ \left. - (\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2)[2\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + i\nu_1] \right. \\ \left. \times [2\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_2} + i\nu_2]\Gamma_3(x_1, x_2) \right\};$$

Аналогічним чином зображається складова $\Psi_4^{(2)}(x_1, x_2)$,

$$16\Psi_4^{(2)}(x_1, x_2)\varepsilon_F^4\varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \\ = N \left\{ \nu_1\nu_2 - [\varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}][\varepsilon_{\mathbf{q}_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}] + \frac{4}{5}\varepsilon_F[\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}] \right\} \\ + Re \left\{ \frac{1}{2}\mu_2(x_1)(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})(i\nu_2 + \varepsilon_{\mathbf{q}_2} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \\ \left. - \frac{1}{2}\zeta_2(x_1|\mathbf{q}_2)(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \quad (5.16) \\ \left. + \tau_2(x_1 + x_2|\mathbf{q}_1)[2(i\nu_2 - i\nu_1 - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) - 3(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)] \right. \\ \left. + \frac{1}{2}\zeta_2(x_1 + x_2|\mathbf{q}_1)[4(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(i\nu_2 - i\nu_1 - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) - \frac{3}{2}(\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)^2 \right. \\ \left. + (\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \\ \left. + (2i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})(2i\nu_2 - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) + (\varepsilon_{\mathbf{q}_2} - i\nu_2)(i\nu_2 + \varepsilon_{\mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \\ \left. + \frac{1}{2}\mu_2(x_1 + x_2)[(\varepsilon_{\mathbf{q}_2} - i\nu_2)(i\nu_2 + \varepsilon_{\mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})(2\varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \\ \left. - S_2(x_1 + x_2|\mathbf{q}_1) \right. \\ \left. - (\varepsilon_{\mathbf{q}_1} - i\nu_1)(\varepsilon_{\mathbf{q}_2} - i\nu_2)(i\nu_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1} + \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}) \right. \\ \left. \times (i\nu_2 + \varepsilon_{\mathbf{q}_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})\Gamma_3(x_1, x_1 + x_2) \right\}.$$

Таким чином $\eta_4(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ також зображається в елементарних функціях.

6. Висновок

Структура діаграм теорії збурень за оператором електрон-плазмонної взаємодії цілком подібна до структури діаграм звичайної теорії збурень за кулонівською взаємодією. Однак тепер роль зображення Фур'є слабкого потенціалу відіграє плазмонний корелятор (3.4)

$$4V_{\mathbf{q}} \left\{ \left(\frac{\nu}{\varepsilon_F} \right)^2 + \frac{16r_s}{3\pi\eta} + \left(\frac{q}{k_F} \right)^4 \right\}^{-1}, \quad (6.1)$$

що має властивості регуляризованого потенціалу типу потенціалу квантового пакету. Залежність потенціалу (6.1) від параметра r_s є причиною доброї збіжності ряду теорії збурень у випадку сильно неідеальних систем. Розраховані кореляційні функції $\eta_2(x, -x)$, $\eta_3(x_1, x_2, x_3)$, $\eta_4(x_1, -x_1, x_2, -x_2)$ значно спрощують розрахунок діаграм теорії збурень за електрон-плазмонною взаємодією. Зокрема, розрахунок внесків у кореляційну енергію діаграм до шостого порядку включно зводиться до трикратних інтегралів.

Література

1. Bohm D., Pines D. A collective description of electron interactions: I. Magnetic interactions // *Phys. Rev.* - 1951. - **82**, No. 4. - P. 625–634.
2. Bohm D., Pines D. A collective description of electron interactions: II. Collective as individual particle aspects of the interactions // *Phys. Rev.* - 1952. - **85**, No. 2. - P. 338–353.
3. Bohm D., Pines D. A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas // *Phys. Rev.* - 1953. - **92**, No. 3. - P. 609–625.
4. Pines D. A collective description of electron interactions: IV. Electron interactions in metals // *Phys. Rev.* - 1953. - **92**, No. 3. - P. 626–636.
5. Bohm D., Huang K. and Pines D. Role of subsidiary conditions in the collective description of electron interactions // *Phys. Rev.* - 1957. - **107**, No. 1. - P. 71–80.
6. Nozieres P., Pines D. Correlation energy of a free electron gas // *Phys. Rev.* - 1958. - **111**, No. 2. - P. 442–454.
7. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. - М.: Мир, 1965. - 382 с.
8. Macke W. Z. Uber die Wechselwirkungen im fermi-gas // *Zs. Naturf.* - 1950. - **5a**, No. 4. - P. 192–208.

9. Gell-Mann M., Brueckner K. A. Correlation energy of an electron gas at high density // *Phys. Rev.* - 1957. - **106**, No. 2. - P. 364–368.
10. Юхновский И. Р. Статистический оператор и коллективные переменные // *УФЖ.* - 1964. - **9**, No. 7. - С. 702–714.
11. Юхновский И. Р. Квантовая статистическая сумма и коллективные переменные // *УФЖ.* - 1964. - **9**, No. 8. - С. 827–838.
12. Юхновский И. Р., Цыганенко В. В., Ваврух М. В. // *УФЖ.* - 1965. - **10**, No. 2. - С. 135–146.
13. Юхновский И. Р., Петрашко Р. Н. Бинарная функция распределения вырожденных ферми-систем // *ТМФ.* - 1973. - **17**, No. 1. - С. 118–130.
14. Ваврух М. В. Колективні зміни в двосортній системі // *Вісник Львів. держ. ун-ту, серія фізична.* - 1968. - **3**. - С. 26–33.
15. Feenberg E. *Theory of quantum fluids.* New-York: Academic, 1969.
16. Sinanoglu O. // *J. Chem. Phys.*, 1962, vol. 36, No. 3, p. 706–717.
17. Sinanoglu O. and Tuan D. F. // *J. Chem. Phys.*, 1963, vol. 38, No. 7, p. 1740–1748.
18. Зубарев Д. Н. Вычисление конфигурационных интегралов для системы частиц с кулоновским взаимодействием // *Док. Академии Наук СССР.* - 1954. - **95**, No. 4. - С. 757–760.
19. Юхновский И. Р., Головки М. Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. - Киев: Наукова думка, 1980. - 372 с.
20. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стиган И. - М.: Наука, 1979. - 830 с.
21. Vavruk M., Krokhmalskii T. Reference system approach in the electron liquid theory. I. General relations // *Phys. Stat. Sol. (b).* - 1991. - **168**. - P. 519–532.
22. Ваврух М. В., Слободян С. Б. Спектральне зображення статистичного оператора і температурних функцій Гріна // *ЖФД.* - 2003. - **7**, No. 3. - С. 275–282.
23. Хуа Р., Теплиц В. Гомология и фейнмановские интегралы. - Москва: Мир, 1969. - 233 с.

Додаток 1

Функції $\mu_2(x)$ та $\zeta_2(x|\mathbf{q}_1)$.

Наведемо тут явні вирази для функцій (4.2) у безрозмірних змінних $q = |\mathbf{q}|k_F^{-1}$, $u = \nu(2\varepsilon_F q)^{-1}$:

$$\mu_2(x) = \frac{3N}{2\varepsilon_F} R_{2,0}(q, u),$$

$$R_{2,0}(q, u) = I_{2,0}(q, u) + iJ_{2,0}(q, u);$$

$$J_{2,0}(q, u) = -\frac{1}{2q} \left\{ u - \frac{1}{2}(1 + u^2 - \frac{q^2}{2})A(q, u) \right\};$$

$$\zeta_2(x|\mathbf{q}_1) = \frac{3N}{q^2}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1)C(q, u),$$

$$C(q, u) = C^c(q, u) + iC^s(q, u),$$

$$C^c(q, u) = \frac{2}{3} + (u^2 - \frac{q^2}{4}) - \frac{q}{8}(1 + 3u^2 - \frac{q^2}{4})L(q, u)$$

$$- \frac{u}{2}(1 + u^2 - \frac{3}{4}q^2)A(q, u);$$

$$C^s(q, u) = qu + \frac{u}{4}(1 + u^2 - \frac{3}{4}q^2)L(q, u)$$

$$- \frac{1}{4}q(1 + 3u^2 - \frac{q^2}{4})A(q, u).$$

$$L(q, u) = \ln \frac{u^2 + (1 + \frac{q}{2})^2}{u^2 + (1 - \frac{q}{2})^2} :$$

$$A(q, u) = \arctg \frac{1 + \frac{q}{2}}{u} + \arctg \frac{1 - \frac{q}{2}}{u}.$$

Функції $\tau_2(x|\mathbf{q}_1)$ та $S_2(x|\mathbf{q}_1)$ мають зображення, аналогічні до функцій $\mu_2(x)$ та $\zeta_2(x|\mathbf{q}_1)$. У безрозмірних змінних:

$$\tau_2(x|\mathbf{q}_1) = \tau_2^c(x|\mathbf{q}_1) + i\tau_2^s(x|\mathbf{q}_1),$$

$$\tau_2^c(x|\mathbf{q}_1) = \frac{3}{2}N\varepsilon_F q^{-1} q_1^2 \left\{ (1 - \alpha^2)I_1^c(q, u) + (3\alpha^2 - 1)I_2^c(q, u) \right\},$$

$$\tau_2^s(x|\mathbf{q}_1) = \frac{3}{2}N\varepsilon_F q^{-1} u q_1^2 \left\{ (1 - \alpha^2)I_1^s(q, u) + (3\alpha^2 - 1)I_2^s(q, u) \right\}.$$

Тут α є косинус кута між векторами \mathbf{q} і \mathbf{q}_1 , а безрозмірні функції $I_j^c(q, u)$ та $I_j^s(q, u)$ визначені такими співвідношеннями:

$$I_1^c(q, u) = \int_0^1 dk k^4 \int_{-1}^1 \frac{(kt + \frac{q}{2})dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2}$$

$$= \frac{1}{12}q(1 + \frac{3}{4}q^2 - 9u^2) + \frac{1}{8}(1 + \frac{3}{2}q^2u^2 - u^4 - \frac{1}{16}q^4)L(q, u)$$

$$- \frac{1}{8}qu(q^2 - 4u^2)A(q, u);$$

$$I_2^c(q, u) = \int_0^1 dk k^4 \int_{-1}^1 \frac{t^2(kt + \frac{q}{2})dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2}$$

$$= \frac{1}{24}q(3q^2 - 36u^2 - 8) - \frac{1}{4}(u^4 - \frac{3}{2}q^2u^2 + \frac{1}{16}q^4 - \frac{1}{4}q^2 + u^2)L(q, u)$$

$$+ \frac{1}{4}qu(4u^2 + 2 - q^2)A(q, u);$$

$$I_1^s(q, u) = \int_0^1 dk k^4 \int_{-1}^1 \frac{dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2}$$

$$= \frac{1}{24}(12u^2 - 9q^2 - 4) - \frac{q}{16}(4u^2 - q^2)L(q, u)$$

$$+ \frac{1}{16u}(4 - \frac{1}{4}q^4 - 4u^4 + 6u^2q^2)A(q, u);$$

$$I_2^s(q, u) = \int_0^1 dk k^4 \int_{-1}^1 \frac{t^2 dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2}$$

$$= \frac{2}{3} + u^2 - \frac{3}{4}q^2 - \frac{1}{8}q(2 + 4u^2 - q^2)L(q, u)$$

$$+ \frac{1}{8u}(q^2 - 4u^4 + 6u^2q^2 - 4u^2 - \frac{1}{4}q^4)A(q, u).$$

Аналогічне зображення має і функція $S_2(x|\mathbf{q}_1)$:

$$S_2(x|\mathbf{q}_1) = 3N\varepsilon_F^2 \frac{\mathbf{q}_1^3}{q} \left\{ 3\alpha(1 - \alpha^2)J_1(q, u) + \alpha(5\alpha^2 - 3)J_2(q, u) \right\},$$

$$J_1(q, u) = \int_0^1 dk k^5 \int_{-1}^1 \frac{t(kt + \frac{q}{2})dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2}$$

$$= \frac{2}{5} + \frac{1}{6}u^2 - \frac{1}{24}q^2 - \frac{1}{32}q^4 - \frac{1}{2}u^4 + \frac{3}{4}q^2u^2$$

$$- \frac{1}{16}q(1 + \frac{5}{2}q^2u^2 - 5u^4 - \frac{1}{16}q^4)L(q, u)$$

$$- \frac{u}{4}(1 - u^4 - \frac{5}{16}q^4 + \frac{5}{2}q^2u^2)A(q, u);$$

$$\begin{aligned}
J_2(q, u) &= \int_0^1 dk k^5 \int_{-1}^1 \frac{t^3 (kt + \frac{q}{2}) dt}{(kt + \frac{q}{2})^2 + u^2} \\
&= \frac{2}{15} + \frac{1}{6}q^2 - \frac{2}{3}u^2 - \frac{1}{16}q^4 - u^4 + \frac{3}{2}q^2u^2 \\
&+ \frac{q}{32} \left(\frac{1}{4}q^4 + 20u^4 - 10q^2u^2 - q^2 + 12u^2 \right) L(q, u) \\
&+ \frac{u}{32} (5q^4 - 12q^2 + 16u^4 + 16u^2 - 40q^2u^2) A(q, u).
\end{aligned}$$

Додаток 2

Виходячи з означення (4.3) та явного виразу $\Gamma_3(x_1, x_2) \equiv \Gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1; \mathbf{q}_2, \nu_2)$ при $\nu_1, \nu_2 \geq 0$ або $\nu_1, \nu_2 < 0$, шляхом елементарних перетворень одержуємо формули зведення, які дозволяють записати $\Gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1; \mathbf{q}_2, \nu_2)$ для додатніх та від'ємних хвильових векторів та частот. Нехай $\Gamma_3(x_1, x_2)$ для випадку одного знаку частот ν_1, ν_2 записується у безрозмірній формі:

$$\Gamma_3(x_1, x_2) \equiv \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \gamma_3(q_1, q_2, t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2})$$

де $t \equiv t_{12} = \cos(\widehat{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2})$, $\bar{\nu}_i \equiv \nu(2\varepsilon_F)^{-1}$.

Тоді

$$\Gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1 | -\mathbf{q}_2, \nu_2) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \gamma_3(q_1, q_2, -t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2}) \quad (\nu_1, \nu_2 > 0)$$

$$\Gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1 | -\mathbf{q}_2, -\nu_2) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \gamma_3(q_1, -q_2, t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2}) \quad (\nu_1, \nu_2 > 0)$$

$$\Gamma_3(\mathbf{q}_1, \nu_1 | \mathbf{q}_2, -\nu_2) = \frac{3N}{(2\varepsilon_F)^2} \gamma_3(q_1, -q_2, -t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2}) \quad (\nu_1, \nu_2 > 0)$$

Аналогічні співвідношення виконуються і для функцій $\Gamma_4(x_1, x_1, x_2)$:

$$\Gamma_4(x_1, x_1, x_2) = \frac{3N}{(4\varepsilon_F)^3} \gamma_4(q_1, q_1, q_2, t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2}) \quad (\nu_1, \nu_2 > 0)$$

$$\Gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, \mathbf{q}_1, \nu_1 | -\mathbf{q}_2, \nu_2) = \frac{3N}{(4\varepsilon_F)^3} \gamma_4(q_1, q_1, q_2, -t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2})$$

$$\Gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, \mathbf{q}_1, \nu_1 | -\mathbf{q}_2, -\nu_2) = \frac{3N}{(4\varepsilon_F)^3} \gamma_4(q_1, q_1, -q_2, t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2})$$

$$\Gamma_4(\mathbf{q}_1, \nu_1, \mathbf{q}_1, \nu_1 | \mathbf{q}_2, -\nu_2) = \frac{3N}{(4\varepsilon_F)^3} \gamma_4(q_1, q_1, -q_2, -t | \frac{\bar{\nu}_1}{q_1}, \frac{\bar{\nu}_2}{q_2})$$

де $(\nu_1, \nu_2 > 0)$.

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
Сергій Борисович Слободян

РОЗРАХУНОК n -ЧАСТИНКОВИХ КОРЕЛЯЦІЙНИХ ФУНКЦІЙ
ЕЛЕКТРОН-ПЛАЗМОННОЇ МОДЕЛІ

Роботу отримано 22 листопада 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені