сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-88-896

В.И.Возяков*, Г.М. Гавриленко

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ АДСОРБИРОВАННЫХ ПЛЕНОК

*Чувашский государственный университет
им. И.Н.Ульянова, г. Чебоксары

1988

Настоящая работа посвящена применению метода функционального интегрирования для исследования поведения электронной подсистемы адсорбционных пленок на подложке с регулярной структурой. Для описания электронных свойств хемосорбционных покрытий в последнее время начали использоваться составные модельные гамильтонианы типа Андерсона – Изинга. Вывод таких гамильтонианов из первых принципов приведен в работе /I/. Излагаемый ниже подход основан на схеме функционального интегрирования, примененной в работах /2/ для исследования квантовой кристаллизации ферми-системы.

Рассмотрим гамильтониан (постоянная Планка $\hbar$ = I) /I/

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{\vec{k}^2}{2m}-\mu\right)n_{\vec{k},\sigma} + \sum_{\alpha,\sigma} N_\alpha \Big\{(E-\mu)n_{\alpha,\sigma} + \frac{U}{2} n_{\alpha,\sigma} n_{\alpha,-\sigma} + \sqrt{\frac{2}{V}}\sum_{\vec{k}}\left(V_{\alpha,\vec{k}}\, a^{+}_{\alpha,\sigma} a_{\vec{k},\sigma} + \text{э.с.}\right)\Big\} , \qquad (\mathrm{I})$$

где μ – химический потенциал электронной подсистемы адсорбента (кристалла со свободной поверхностью), который определяется из условия сохранения числа электронов в системе;

$n_{\vec{k},\sigma} = a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}$, $n_{\alpha\sigma} = a^{+}_{\alpha\sigma} a_{\alpha\sigma}$; $a^{+}_{\vec{k}\sigma}, a_{\vec{k},\sigma}, a^{+}_{\alpha,\sigma}, a_{\alpha,\sigma}$ – ферми-операторы рождения и уничтожения электронов в состояниях $(\vec{k},\sigma)$ и (α,σ) соответственно; $\vec{k}$ – квазиимпульс электрона в подложке металла, отвечающий континиум-состояниям /3/; $\sigma = \pm$I – спиновый индекс; α нумерует все возможные центры адсорбции; N_α = 0 или N_α = = I, что характеризует числа заполнения ионами примеси этих центров. E – ионизационный потенциал примеси, находящейся на узле α ; $V_{\alpha,\vec{k}}$ – матричные элементы перехода валентных электронов адатомов (адсорбированных атомов) в зону кристаллической подложки. U – энергия отталкивания валентных электронов примеси α-го узла, $E-\mu = \varepsilon < 0$, $V/2$ – объем подложки, занимающей полупространство $z > 0$. Гамильтониан вида (I) описывает систему из адсорбента и адсорбата, состоящего из ионных остовов водородоподобных адатомов и их валентных электронов.

Далее положим N_α = I для заданного регулярного распределения примесей на подложке, т.е. ограничимся рассмотрением так называемой периодической модели Андерсона. В гамильтониане (I) введем "новый" набор операторов вместо $a^+_{\alpha,\sigma}$, $a_{\alpha,\sigma}$:

$$a^+_{\alpha,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec q} e^{i\vec R_\alpha \vec q} a^+_{\vec q,\sigma} \; ; \quad a_{\alpha,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec q} e^{-i\vec R_\alpha \vec q} a_{\vec q,\sigma} \, , \tag{2}$$

где $\vec R_\alpha$ - радиус-вектор узла α ; $\vec q$ - двухмерный импульс из первой зоны Бриллюэна электронов адсорбционной пленки, лежащей в плоскости подложки, а $2N$ - число состояний в этой зоне. Тогда получим

$$H = \sum_{\vec k,\sigma} \xi_{\vec k} a^+_{\vec k\sigma} a_{\vec k\sigma} + \sum_{\vec q,\sigma} \varepsilon a^+_{\vec q,\sigma} a_{\vec q,\sigma} + \frac{U}{2N}\sum_{\vec q,\sigma} \rho_{\vec q,\sigma} \times \tag{3}$$

$$\rho_{-\vec q,\sigma} + \sqrt{\frac{2}{V}}\sum_{\vec q,\sigma,\vec k}\left(V_{\vec q,\vec k} a^+_{\vec q,\sigma} a_{\vec k,\sigma} + э.с.\right) ,$$

где

$$\xi_{\vec k} = \frac{\vec k^2}{2m} - \mu \; ; \quad \rho_{\vec q,\sigma} = \sum_{\vec q_1} a^+_{\vec q_1,\sigma} a_{\vec q_1+\vec q,\sigma} \, ,$$

$$V_{\vec q,\vec k} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_\alpha V_{\alpha,\vec k}\, e^{-i\vec R_\alpha \vec q} . \tag{4}$$

Ферми-системе с гамильтонианом (3) сопоставим функционал действия

$$S = \sum'_{\vec k,\omega,\sigma}(i\omega - \xi_{\vec k}) a^+_{\vec k,\sigma} a_{\vec k,\sigma}(\omega) + \sum'_{\vec q,\omega,\sigma}(i\omega - \varepsilon)\, a^+_{\vec q,\sigma}(\omega)\, a_{\vec q,\sigma}(\omega)$$

$$- \frac{U}{2\beta N}\sum'_{P,\sigma}\rho_\sigma(P)\rho_{-\sigma}(-P) - \sqrt{\frac{2}{V}}\sum'_{\substack{\omega,\sigma\\ \vec q,\ \vec k}}\left(V_{\vec q,\vec k}\, a^+_{\vec q,\sigma}(\omega)\, a_{\vec k,\sigma}(\omega) + э.с.\right) , \tag{5}$$

где $\omega = (2n+1)\pi/\beta$ - ферми-частота, $\beta^{-1} = T$ - температура в энергетических единицах, n - целое число.

$$\rho_\sigma(P) = \sum_{\vec q_1,\omega_1} a^+_{\vec q_1,\sigma}(\omega_1)\, a_{\vec q_1+\vec q,\sigma}(\omega_1 + \omega') , \tag{6}$$

где ω_1 , $\omega_1 + \omega'$ - ферми-частоты, $P = (\vec q, \omega')$.

Дальнейшая наша задача заключается в получении функционала эффективного действия, определяющего многие свойства модельной системы (3).

2. ФУНКЦИОНАЛ ЭФФЕКТИВНОГО ДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ АДСОРБЦИОННОЙ ПЛЕНКИ

Рассмотрим функциональный интеграл по грассмановым переменным

$$\int \exp(S)\, \mathcal{D}a^+ \mathcal{D}a \, , \tag{7}$$

где S - действие (5), $\mathcal{D}a^+\mathcal{D}a$ - мера интегрирования. Следуя стандартной схеме[2], вставим в (7) интеграл по вспомогательному вещественному c - числовому полю

$$\int \mathcal{D}c \exp\left\{ i\sum_P c_\sigma(P)\, c_\sigma(-P)\right\} , \tag{8}$$

где i - мнимая единица.

c - числам приписан индекс σ , поскольку в моделях, описываемых гамильтонианом (3), возможны спинзависимые решения.

В интеграле (8) произведем сдвиг

$$c_\sigma(P) \Rightarrow c_\sigma(P) - i(\beta N)^{-1/2}\sqrt{U}\,\rho_\sigma(P) ,$$

$$c_{-\sigma}(-P) \Rightarrow c_{-\sigma}(-P) + (\beta N)^{-1/2}\sqrt{U}\,\rho_{-\sigma}(-P) , \tag{9}$$

где $\rho_\sigma(P)$ определяется (6).
В результате действие (5) принимает вид

$$\tilde S = i\sum_P c_\sigma(P)\, c_{-\sigma}(-P) + \sum_{\vec k,\omega,\sigma}(i\omega - \xi_{\vec k})\, a^+_{\vec k,\sigma}(\omega)\, a_{\vec k,\sigma}(\omega)$$

$$+ \sum'_{\vec q,\omega,\sigma}(i\omega - \varepsilon)\, a^+_{\vec q,\sigma}(\omega)\, a_{\vec q,\sigma}(\omega) - \sqrt{\frac{2}{V}}\sum_{\omega,\sigma,\vec q,\vec k}\Big(V_{\vec q,\vec k}\, a^+_{\vec q,\sigma}(\omega) \times \tag{10}$$

$$\times\, a_{\vec k,\sigma}(\omega) + э.с.\Big) + i\left(\frac{U}{\beta N}\right)^{1/2}\sum'_P\left(c_\sigma(P)\rho_{-\sigma}(-P) - i c_{-\sigma}(-P)\rho_\sigma(P)\right).$$

Действие (I0) квадратично по электронному грассманову ферми-полю, и по нему можно проинтегрировать в замкнутом виде. Проинтегрировав и регуляризовав определитель, получим функционал эффективного действия

$$S_{eff} = i\sum_{p} C_\sigma(p) C_{-\sigma}(-p) + \ln\det \frac{M(c, V_{\vec{q},\vec{k}}, u, \varepsilon)}{M(0,0,0,0)} ;$$

$$M(c, V_{\vec{q},\vec{k}}, u, \varepsilon) = \Big\{\Big[(i\omega - \xi_{\vec{k}})\delta_{\vec{k},\vec{k}_1}\delta_{\omega,\omega_1} + (i\omega - \varepsilon)\delta_{\vec{q},\vec{q}_1}\delta_{\omega,\omega_1}\Big] - \sqrt{\frac{2}{V}}\left(V_{\vec{q},\vec{k}} + V_{\vec{k},\vec{q}}\right)\delta_{\omega,\omega_1}\Big\}\left(\delta_{\sigma,\sigma_1} + \delta_{-\sigma,\sigma_1}\right) + i\left(\frac{u}{\beta N}\right)^{1/2} \times \tag{II}$$

$$\times \left(C_\sigma(p)\delta_{-\sigma,\sigma_1}\delta_{p,p_1} - i C_{-\sigma}(-p)\delta_{\sigma,\sigma_1}\delta_{p,p_1}\right) ,$$

где δ - символ Кронекера.

Здесь регуляризация произведена таким образом, чтобы выделить изменение поверхностных свойств подложки в результате адсорбции. Следует отметить, что в определение матрицы $M(c, V_{\vec{q},\vec{k}}, u, \varepsilon)$ входит химический потенциал, соответствующим образом перенормирующий одноэлектронный спектр системы. При этом, несмотря на то, что химические потенциалы до и после адсорбции отличаются на бесконечно малую величину, порядка отношения N/V, тем не менее эта поправка дает конечный вклад в расчет физических характеристик системы/4/.

Следуя работам/2/, представим $C_\sigma(p)$, $C_{-\sigma}(-p)$ в виде

$$C_\sigma(p) = i\sqrt{\beta N u}\,\delta_{p,0}\, b_\sigma ; \quad C_{-\sigma}(-p) = -\sqrt{\beta N u}\,\delta_{p,0}\, b_{-\sigma} . \tag{I2}$$

С учетом формулы $\ln\det A = \mathrm{Tr}\ln A$ эффективный функционал действия (II), с подставленными $C_\sigma(p)$, $C_{-\sigma}(-p)$ (I2), принимает вид

$$S_{eff} = \frac{u\beta N}{2}\sum_{\sigma} b_\sigma b_{-\sigma} + \mathrm{Tr}\ln\frac{M'(b, V_{\vec{q},\vec{k}}, u, \varepsilon)}{M'(0,0,0,0)} , \tag{I3}$$

где

$$M'(b, V_{\vec{q},\vec{k}}, u, \varepsilon) = \left[(i\omega - \xi_{\vec{k}})\delta_{\vec{k},\vec{k}_1} + (i\omega - \varepsilon_{-\sigma})\delta_{\vec{q},\vec{q}_1}\right]\times$$

$$\times\,\delta_{\sigma,\sigma_1}\delta_{\omega,\omega_1} - \sqrt{\frac{2}{V}}\left(V_{\vec{q},\vec{k}} + V_{\vec{k},\vec{q}}\right)\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1} , \qquad \varepsilon_\sigma = \varepsilon + u\, b_\sigma .$$

А для параметров b_σ, $b_{-\sigma}$ имеем систему уравнений

$$b_{\pm\sigma} = \frac{1}{\beta N}\mathrm{Tr}\Big[\left(\delta_{\pm\sigma,\sigma_1}\delta_{\vec{q},\vec{q}_1}\delta_{\omega,\omega_1}\right)\cdot$$

$$\cdot\Big\{(i\omega - \xi_{\vec{k}})\delta_{\vec{k}\vec{k}_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1} + (i\omega - \varepsilon_{\mp\sigma})\delta_{\pm\sigma,\sigma_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\vec{q},\vec{q}_1} -$$

$$- \sqrt{\frac{2}{V}}\left(V_{\vec{q},\vec{k}} + V_{\vec{k},\vec{q}}\right)\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}\Big\}^{-1}\Big] , \tag{I4}$$

где выбор знаков перед σ определен (I3). Такая система уравнений (I4) довольно сложна и может иметь как магнитное ($b_\sigma \neq b_{-\sigma}$), так и немагнитное ($b_\sigma = b_{-\sigma}$) решения. Далее сосредоточим внимание на расчете S_{eff} (I3) и его использовании для анализа свойств модельной системы.

3. РАСЧЕТ ФУНКЦИОНАЛА ЭФФЕКТИВНОГО ДЕЙСТВИЯ

Статистические суммы неидеальной и "идеальной" $V_{\vec{q},\vec{k}} = u = \varepsilon = 0$) систем Z, Z_0 связаны соотношением/5/

$$Z/Z_0 = \exp(-\beta\Omega)/\exp(-\beta\Omega_0) = \tag{I5}$$

$$= \int\exp(S)\mathcal{D}\bar{a}\mathcal{D}a \Big/ \int\exp(S_0)\mathcal{D}\bar{a}\mathcal{D}a = \exp\sum_i \mathcal{D}_i^c ,$$

где $\sum_i \mathcal{D}_i^c$ - сумма вкладов связных вакуумных диаграмм; $\Omega, \Omega_0 - \Omega$ - -потенциалы идеальной и неидеальных систем. Здесь разность ($\Omega - \Omega_0$) может быть интерпретирована как

$$(\Omega - \Omega_0) = (\alpha - \alpha_0)\cdot\Sigma , \tag{I6}$$

где α_0, α - соответствующие коэффициенты поверхностного натяжения, а Σ - площадь поверхности пленки. Образование пленки связано с "электронной" частью затрачиваемой минимальной работы (I6): $R_{min} = (\alpha - \alpha_0)\cdot\Sigma$, а теплота адсорбции определяется формулой/6/

$$Q = -T^2\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\alpha - \alpha_0}{T}\right)\right)\Sigma . \tag{I7}$$

В принятом приближении эффективного функционала действия (I3) имеем

$$R_{min} = -\beta^{-1} S_{eff}. \qquad (18)$$

Далее целесообразно функционал эффективного действия (I3) представить в виде

$$S_{eff} = -\frac{u\beta N}{2}\sum_{\sigma}{}' b_{\sigma} b_{-\sigma} + Tr\ln\frac{M'(b,0,u,\varepsilon)}{M'(0,0,0,0)} - \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n}\, Tr(\hat{u}\hat{G})^{2n}, \qquad (19)$$

где $\hat{G}^{-1} = \{(i\omega - \xi'_{\vec k})\delta_{\vec k \vec k_1} + (i\omega - \varepsilon_{-\sigma})\delta_{\vec q \vec q_1}\}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}$,

$$\hat{u} = \sqrt{\frac{2}{V}}\left(V_{\vec q,\vec k} + V_{\vec k,\vec q}\right)\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}.$$

Ограничившись квадратичными по $V_{\vec q,\vec k}$ членами, для правой части формулы (I9), получим выражение

$$S_{eff} = \frac{u\beta N}{2}\sum_{\sigma} b_{\sigma} b_{-\sigma} + Tr\ln\frac{M'(b,0,u,\varepsilon)}{M'(0,0,0,0)} -$$

$$- \frac{2}{V}\sum_{\vec q,\vec k,\sigma,\omega}{}' V^2_{\vec q,\vec k}\,(i\omega - \xi'_{\vec k})^{-1}(i\omega - \varepsilon_{\sigma})^{-1}, \qquad (20)$$

где в соответствии с вышесказанным (см. замечание после формулы (II))

$$M'(b,0,u,\varepsilon) = (i\omega - \xi_{\vec k})\delta_{\vec k,\vec k_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1} + (i\omega - \varepsilon_{-\sigma})\delta_{\vec q \vec q_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}\delta_{\omega,\omega_1};$$

$$M'(0,0,0,0) = (i\omega - \xi'_{\vec k})\delta_{\vec k,\vec k_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1} + i\omega\,\delta_{\vec q,\vec q_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}\delta_{\omega,\omega_1};$$

$$\xi_{\vec k} = \frac{\vec k^2}{2m} - \mu; \quad \varepsilon_{-\sigma} = E - \mu + u\, b_{-\sigma}; \quad \xi'_{\vec k} = \frac{\vec k^2}{2m} - \mu_0.$$

μ_0 – химический потенциал электронов в чистой подложке.
μ и μ_0 определяются соотношениями

$$-\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = N_c + N = N_0, \quad -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu_0} = N_c, \qquad (21)$$

где N_c – число свободных электронов в подложке, а N_0 равно общему числу свободных электронов подложки и валентных электронов примесей. В простейшем случае $V_{\vec q,\vec k} = 0$ уравнения (2I) принимают вид

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\left(\beta^{-1}S_{eff}\right) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega,\sigma,\vec q}{}' \frac{1}{i\omega - \varepsilon_{-\sigma}} + \frac{1}{\beta}\sum_{\omega,\vec k,\sigma}\frac{1}{i\omega - \xi_{\vec k}},$$

$$-\frac{\partial}{\partial\mu_0}\left(\beta^{-1}S_{eff}\right) = \frac{1}{\beta}\sum_{\omega,\vec k,\sigma}{}' \frac{1}{i\omega - \xi'_{\vec k}}. \qquad (22)$$

Как показано ниже, сумма $\sum_{\omega,\sigma,\vec q}(i\omega - \varepsilon_{-\sigma})^{-1}$ сводится к различным значениям, в зависимости от параметров системы (ε, u, $b_{\pm\sigma}$). Вследствие этого может произойти изменение химического потенциала электронов подложки μ_0.

Очевидно, что связь между химическими потенциалами можно задать в виде

$$\mu = \mu_0 + a\frac{N}{V}, \qquad (23)$$

где a – постоянная, зависящая от ε, u, $b_{\pm\sigma}$.

Воспользовавшись (23), в формуле (20) отношение $\frac{M'(b,0,u,\varepsilon)}{M'(0,0,0,0)}$ представим в виде

$$\frac{M'(b,0,u,\varepsilon)}{M'(0,0,0,0)} = I + \frac{a\frac{N}{V}\delta_{\vec k,\vec k_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1} - (\varepsilon + u\, b_{-\sigma})\delta_{\vec q,\vec q_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}}{M'(0,0,0,0)}, \qquad (24)$$

где I – единица.

С учетом представления (24), после простых преобразований, получим приближенное выражение для функционала эффективного действия

$$S_{eff} \simeq \frac{u\beta N}{2}\sum_{\sigma} b_{\sigma} b_{-\sigma} + \sum_{\omega,\vec q,\sigma}{}' \ln\frac{i\omega - \varepsilon_{-\sigma}}{i\omega} +$$

$$+ \frac{2aN}{V}\sum_{\vec k,\omega}{}' \frac{1}{i\omega - \xi'_{\vec k}} - \frac{2}{V}\sum_{\vec q,\vec k,\omega,\sigma} V^2_{\vec q,\vec k}\,(i\omega - \xi'_{\vec k})^{-1}(i\omega - \varepsilon_{\sigma})^{-1}, \qquad (25)$$

где сохранены только линейные, наиболее важные, по N/V члены. После суммирования по ферми-частоте в двух последних суммах в (25) имеем

$$S_{eff} = \frac{u\beta N}{2}\sum_{\sigma} b_{\sigma} b_{-\sigma} + \sum_{\omega,\vec q,\sigma}{}' \ln\frac{i\omega - \varepsilon_{\sigma}}{i\omega} +$$

$$+\frac{2a\beta N}{V}\sum_{\vec k}\frac{1}{e^{\beta\varepsilon'_{\vec k}}+1}-\frac{2\beta}{V}\sum_{\vec k,\sigma,\vec q}V^2_{\vec q,\vec k}\left(\varepsilon_{\vec k}-\xi_\sigma\right)^{-1}\times$$

$$\times\left\{\left(e^{\beta\xi_{\vec k}}+1\right)^{-1}-\left(e^{\beta\varepsilon_\sigma}+1\right)^{-1}\right\}. \qquad (26)$$

Анализ формулы (26) показывает, что теплоемкость адсорбционной пленки, определяемая электронами, как и следовало ожидать, при малых температурах пропорциональна T.

4. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ $b_{\pm\sigma}$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Прежде всего определим средние числа заполнения электронов узла α со спином σ. Воспользовавшись формулой (2), имеем

$$\langle n_{\alpha,\sigma}\rangle=\sum_{\vec q,\vec q',\alpha}\frac{1}{N^2}e^{i\vec R_\alpha(\vec q-\vec q')}\langle a^+_{\vec q'\sigma}a_{\vec q,\sigma}\rangle=$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\langle a^+_{\vec q,\sigma}a_{\vec q,\sigma}\rangle=b_\sigma. \qquad (27)$$

В случае $V_{\vec q,\vec k}=0$ система уравнений (I4) сведется к виду

$$b_{\pm\sigma}=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega}\frac{1}{(i\omega-\varepsilon_{\mp\sigma})}. \qquad (28)$$

После суммирования по ферми-частоте ω в (28) получим

$$b_{\pm\sigma}=\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mp\sigma}}+1}. \qquad (29)$$

При $T=0$, в зависимости от значений параметров ε, μ (29) может иметь пять решений:

I. $b_{\pm\sigma}=1/2$, $\varepsilon_{\pm\sigma}=0$; (30)

2. $b_{+\sigma}=1$, $b_{-\sigma}=0$, $\varepsilon_{-\sigma}<0$; $\varepsilon_\sigma>0$; (3I)

3. $b_{+\sigma}=0$, $b_{-\sigma}=1$, $\varepsilon_{-\sigma}>0$; $\varepsilon_\sigma<0$. (32)

4. $b_{\pm\sigma}=1$, $\varepsilon_{\pm\sigma}<0$; (33)

5. $b_{\pm\sigma}=0$, $\varepsilon_{\pm\sigma}>0$. (34)

В соответствии с (27) такие же результаты имеем и для $\langle n_{\alpha,\pm\sigma}\rangle$.

В более общем случае уравнения для параметров $b_{\pm\sigma}$ следуют из разложения в ряд для матриц в (I4):

$$\frac{1}{A+B}=\frac{1}{A}-\frac{1}{A}B\frac{1}{A}+\frac{1}{A}B\frac{1}{A}B\frac{1}{A}+\dots, \qquad (35)$$

где $A=(i\omega-\xi_{\vec k})\delta_{\vec k,\vec k_1}\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}+(i\omega-\varepsilon_\sigma)\delta_{\sigma,\sigma_1}\delta_{\vec q,\vec q_1}\delta_{\omega,\omega_1}$;

$B=-\left(V_{\vec q,\vec k}+V_{\vec k,\vec q}\right)\sqrt{\frac{2}{V}}\,\delta_{\omega,\omega_1}\delta_{\sigma,\sigma_1}$.

На основании формулы (35) вместо (I4) будем иметь

$$b_{\pm\sigma}=\frac{1}{\beta N}\sum_{q,\omega}G_{\mp\sigma}(\omega)+\frac{2}{V\beta N}\sum_{\omega,\vec k,\vec q}G^2_{\mp\sigma}G_{\vec k}(\omega)V^2_{\vec q,\vec k}+\dots, \qquad (36)$$

где $G_{\mp\sigma}=(i\omega-\varepsilon_{\mp\sigma})^{-1}$, $G_{\vec k}(\omega)=(i\omega-\xi_{\vec k})^{-1}$ -функции Грина. Просуммировав ряд (36), получим систему уравнений для $b_{\pm\sigma}$

$$b_{\pm\sigma}=\frac{1}{\beta N}\sum_{\omega,\vec q}\left\{i\omega-\varepsilon_{\mp\sigma}-\frac{2}{V}\sum_{\vec k}V^2_{\vec q,\vec k}\left(i\omega-\xi_{\vec k}\right)^{-1}\right\}^{-1}. \qquad (37)$$

Чтобы получить правильный результат, сумму в (37) по ферми-частоте следует понимать как предел

$$b_{\pm\sigma}=\lim_{\tau\to+0}\frac{1}{\beta N}\sum_{\omega,\vec q}e^{i\omega\tau}\left\{i\omega-\varepsilon_{\mp\sigma}-\frac{2}{V}\sum_{\vec k}V^2_{\vec q,\vec k}\left(i\omega-\xi_{\vec k}\right)^{-1}\right\}^{-1}. \qquad (38)$$

Такое переопределение (37) связано с учетом порядка расстановки ферми-операторов в гамильтониане (3). Будем считать τ сколь угодно малым, но конечным. Тогда ряд (40) сходится. В случае низких температур его можно привести к виду (см., например,[7])

$$b_{\pm\sigma}=\frac{1}{2}+\frac{2}{\beta N}\sum_{\vec q,\omega>0}\left[\left(-\varepsilon_{\mp\sigma}+\sum_{\vec k}\frac{2|V_{\vec q\vec k}|^2\xi_{\vec k}}{V(\omega^2+\xi^2_{\vec k})}\right)\right].$$

$$\left\{\omega^2\left(1+\sum_{\vec k}\frac{2V_{\vec q,\vec k}^2}{\sqrt{\omega^2+\xi_{\vec k}^2}}\right)^2+\left(\mathcal{E}_{\mp 6}-\sum_{\vec k}\frac{2V_{\vec q,\vec k}^2\,\xi_{\vec k}}{\sqrt{\omega^2+\xi_{\vec k}^2}}\right)^2\right\}^{-1}\Bigg]=$$

$$=\frac{1}{2}+\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\pi}\int_0^\infty d\omega\left[\left(\mathcal{E}_{\mp 6}+\sum_{\vec k}\frac{2\xi_{\vec k}V_{\vec q,\vec k}^2}{\sqrt{\omega^2+\xi_{\vec k}^2}}\right)\cdot\right.$$

$$\left.\left\{\omega^2\left(1+\sum_{\vec k}\frac{2V_{\vec q,\vec k}^2}{\sqrt{\omega^2+\xi_{\vec k}^2}}\right)^2+\left(\mathcal{E}_{\mp 6}-\sum_{\vec k}\frac{2\xi_{\vec k}V_{\vec q,\vec k}^2}{\sqrt{\omega^2+\xi_{\vec k}^2}}\right)^2\right\}^{-1}\right]. \tag{39}$$

Очевидно, что при $V_{\vec q \vec k}=0$ из (39) должны следовать решения (30)-(34). При этом будем иметь систему уравнений

$$b_{\pm 6}=-\frac{1}{\pi}\int_{+0}^{\infty}d\omega\,\frac{\mathcal{E}_{\mp 6}}{\omega^2+\mathcal{E}_{\mp 6}^2}+\frac{1}{2}. \tag{40}$$

Из (40) следует, что в случае $\mathcal{E}_{\pm 6}=0$ параметры $b_{\pm 6}=1/2$, т.е. мы имеем решение (30). $\mathcal{E}_{\pm 6}\neq 0$,

$$b_{\pm 6}=-\frac{\mathcal{E}_{\mp 6}}{\pi|\mathcal{E}_{\mp 6}|}\,\operatorname{arctg}\frac{\omega}{|\mathcal{E}_{\mp 6}|}\Bigg|_0^{\infty}+\frac{1}{2}, \tag{41}$$

что приводит к решениям (31)-(34).

Авторы глубоко благодарны В.Н. Попову за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gavrilenko G.M. Physica A, v.150 (1988), p. 137-158.
2. Возяков В.И., Попов В.Н.. Зап. научн. ЛОМИ, т.131 (1983), с.28-33; т. 145 (1985), с. 46-61; т.150 (1986), с. 7-16.
3. Inglesfield J.E., Halland R.W. "Electrons at Sustaces", p.183 in book "The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis", v.1, ed. D.A.King and D.D.Woodruff. Amsterdam, 1983.
4. Gavrilenko G.M. and others. Preprint JINR E17-88-669, Dubna, 1988.
5. Попов В.Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике, М., Атомиздат, 1976.
6. Ландау Л.Д. Статистическая физика, М., Наука, 1964.
7. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., Физматиздат, 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 декабря 1988 года.