

ТЕОРИЯ
МЕТАЛЛОВ

УДК 537.9.001

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ЖИДКОСТИ

© 2020 г. В. Б. Бобров*

Объединенный институт высоких температур РАН, ул. Ижорская, 13, стр. 2, Москва, 125412 Россия

*e-mail: vic5907@mail.ru

Поступила в редакцию 03.06.2019 г.

После доработки 18.06.2019 г.

Принята к публикации 28.06.2019 г.

С использованием теоремы вириала и уравнения движения для одночастичной функции Грина получены явные точные выражения для термодинамических функций электронной жидкости через одночастичную функцию Грина, а также сформулированы условия самосогласования для этих функций.

Ключевые слова: электронная жидкость, термодинамические функции, теорема вириала, одночастичная функция Грина

DOI: 10.31857/S0015323019120027

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании металлического состояния, которое характеризуется слабым взаимодействием между электронами проводимости и ионами, в качестве исходного приближения широко применяется модель электронной жидкости (ЭЖ) (однокомпонентной электронной плазмы), которая представляет собой квантовую систему электронов, находящихся в компенсирующем фоне ионов [1–3]. Модель ЭЖ имеет существенное значение и при исследовании металлических кластеров (см., напр., [4]). В последние годы интерес к изучению этой модельной системы возрос в связи с возможностями численного моделирования и результатами исследований так называемой warm dense matter (теплого плотного вещества, см. подробнее [5–10] и цитированную там литературу).

Сложности в теоретическом рассмотрении свойств ЭЖ обусловлены необходимостью одновременного учета коллективных эффектов, прежде всего экранирования кулоновского взаимодействия, и квантового описания, включая эффекты тождественности электронов [1–3]. Принципиальная возможность разрешения возникающих проблем основана на использовании различных вариантов диаграммной техники теории возмущений по кулоновскому взаимодействию электронов, разработанных в рамках методов квантовой теории поля (см., напр., [11, 12]). В этом случае основополагающим объектом является одночастичная функция Грина (ОФГ), что обусловлено возможностью представления термодинамического потенциала для ЭЖ как функционала ОФГ. На этой основе может быть построена динамическая вариационная процедура

Латтинжера–Уорда [13] и Каданова–Бейма [14]. Однако явный вид подобных функционалов может быть представлен только в виде бесконечного функционального ряда теории возмущений по кулоновскому взаимодействию электронов (см. подробнее [15, 16]). Тем самым возникает традиционная проблема “обрыва” такого ряда, т.е. обоснования методов последовательного приближенного вычисления как ОФГ, так и термодинамических функций ЭЖ. В этой ситуации особое значение приобретают точные соотношения между функциями Грина (ФГ) и термодинамическим потенциалом ЭЖ вне рамок теории возмущений.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ
И ТЕОРЕМА ВИРИАЛА

Рассмотрим пространственно однородную и изотропную систему точечных электронов с массой m и спином $s = 1/2$, которая занимает объем V и характеризуется гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}, \quad \hat{H}_0 = \sum_p \varepsilon_0(p) \hat{a}_p^+ \hat{a}_p,$$

$$\hat{U} = \frac{1}{2V} \sum_{p,k,q \neq 0} v(q) \hat{a}_p^+ \hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{p+q}, \quad (1)$$

$$\varepsilon_0(p) = \hbar^2 p^2 / 2m.$$

Здесь и далее \hat{H}_0 – гамильтониан невзаимодействующих электронов, \hat{U} – гамильтониан кулоновского взаимодействия электронов,

$$p \equiv (\mathbf{p}, \sigma_1), \quad k \equiv (\mathbf{k}, \sigma_2), \quad q \equiv \mathbf{q}, \quad (2)$$

\hat{a}_p^+ и \hat{a}_p – соответственно, операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии, которое

характеризуется импульсом $\hbar\mathbf{p}$ и проекцией спина $\sigma_1, \sigma_1, \sigma_2 = -1/2, +1/2$; $v(q) = 4\pi e^2/q^2$ – фурье-компонента потенциала кулоновского взаимодействия электронов $\varphi(r)$:

$$v(q) = \int d^3r \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \varphi(|\mathbf{r}|), \quad \varphi(r) = e^2/r. \quad (3)$$

Термодинамический потенциал $\Omega(V, T, \mu)$ для ЭЖ при температуре T (в энергетических единицах) равен

$$\Omega(V, T, \mu) = -T \ln \text{Tr} \exp(-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T), \quad (4)$$

где μ – химический потенциал, $\hat{N} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p$ – оператор полного числа электронов в рассматриваемой системе.

Как было отмечено выше, термодинамический потенциал $\Omega(V, T, \mu)$, который полностью определяет термодинамические свойства ЭЖ, является функционалом ОФГ $g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n)$: $\Omega = \Omega[g]$ [11–14]. Здесь и далее

$$g(\hat{A}, \hat{B}; i\omega_n) \equiv -\frac{1}{2} \int_{-1/T}^{1/T} d\tau \exp(i\omega_n \tau) \langle \hat{T}_\tau(\hat{A}(\tau) \hat{B}(0)) \rangle, \quad (5)$$

$$\hat{A}(\tau) = \exp((\hat{H} - \mu \hat{N})\tau) \hat{A} \exp(-(\hat{H} - \mu \hat{N})\tau), \quad (6)$$

\hat{T}_τ – оператор τ – упорядочения, угловые скобки обозначают усреднение с большим каноническим распределением Гиббса (см. (4)), $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ где n – целое число, включая нуль [11].

Соотношения (4)–(6) имеют смысл только после перехода к термодинамическому пределу $\text{Lim}_T : V \rightarrow \infty, \langle \hat{N} \rangle \rightarrow \infty, \bar{n} = \langle \hat{N} \rangle / V = \text{const}$ [17]. В результате соотношение (4) принимает вид

$$P(T, \mu) = -\text{Lim}_T \Omega(V, T, \mu) / V, \quad (7)$$

где $P(T, \mu)$ – давление в ЭЖ, которая характеризуется средней плотностью числа частиц \bar{n} :

$$\bar{n}(T, \mu) = \text{Lim}_T \frac{1}{V} \sum_p f(p) = \sum_\sigma \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\mathbf{p}, \sigma), \quad (8)$$

$f(\mathbf{p}, \sigma) = \langle \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma} \rangle$ – точная одночастичная функция распределения по импульсам $\hbar\mathbf{p}$ и проекциям спина σ , которая в приближении идеального газа соответствует распределению Ферми–Дирака.

С другой стороны, согласно теореме вириала, которая имеет место для любого из распределений Гиббса (см. [17, 18] и цитированную там литературу), справедливо равенство

$$P(T, \mu) = \frac{2\langle k \rangle}{3} - \text{Lim}_T \frac{\langle \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varphi(|\mathbf{r}|) \rangle}{3V}, \quad (9)$$

где $\langle k \rangle$ – средняя кинетическая энергия электронов, приходящаяся на единицу занимаемого ею объема V :

$$\begin{aligned} \langle k \rangle &= \text{Lim}_T \frac{1}{V} \sum_p \varepsilon_0(p) f(p) = \\ &= \sum_\sigma \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \varepsilon_0(p) f(\mathbf{p}, \sigma), \end{aligned} \quad (10)$$

а величина $\langle \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varphi(|\mathbf{r}|) \rangle$ является вириалом для потенциальной энергии,

$$\text{Lim}_T \frac{1}{V} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varphi(r) \rangle = \frac{1}{2} \bar{n}^2 \int d^3r (\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varphi(r)) g_2(r). \quad (11)$$

Здесь $g_2(r)$ – точная парная корреляционная функция. Учитывая в (11) явный вид потенциала кулоновского взаимодействия электронов $\varphi(r)$ (3), нетрудно убедиться, что в ЭЖ

$$\begin{aligned} \text{Lim}_T \frac{1}{V} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \varphi(r) \rangle &= -\langle u \rangle, \\ \langle u \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{p, k, q \neq 0} v(q) \langle \hat{a}_p^+ \hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{p+q} \rangle, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\langle u \rangle$ – средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электронов, приходящаяся на единицу занимаемого ею объема V (см. (1)).

Таким образом, согласно теореме вириала для определения термодинамических функций ЭЖ достаточно вычислить среднюю кинетическую и среднюю потенциальную энергии.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И ОДНОЧАСТИЧНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Чтобы упростить дальнейшее рассмотрение, используем спектральное представление для ОФГ (см. подробнее [11])

$$g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\text{Im} G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{E - i\omega_n}, \quad (13)$$

где $G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)$ – запаздывающая ОФГ, которая является аналитической функцией в верхней полуплоскости комплексных значений E ,

$$\begin{aligned} G^R(\hat{A}, \hat{B}; E) &= \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \exp(iEt/\hbar) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_+ \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \hat{A}(t) &= \exp(i(\hat{H} - \mu \hat{N})t/\hbar) \times \\ &\times \hat{A} \exp(-i(\hat{H} - \mu \hat{N})t/\hbar), \quad [\hat{A}, \hat{B}]_{\pm} \equiv \hat{A}\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A}. \end{aligned} \quad (15)$$

При этом [19, 20]:

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G^R(\hat{A}, \hat{B}; E)}{\exp(E/T) + 1} dE; \quad (16)$$

$$\begin{aligned} EG^R(\hat{A}, \hat{B}; E) = \\ = \langle [\hat{A}, \hat{B}]_+ \rangle + G^R([\hat{A}, \hat{H} - \mu\hat{N}]_-, \hat{B}; E). \end{aligned} \quad (17)$$

Из (16), (17), учитывая (1), (13)–(17), а также коммутационные соотношения для операторов \hat{a}_p^+ и \hat{a}_p , получаем [21]:

$$f(p) = \langle \hat{a}_p^+ \hat{a}_p \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\text{Im}G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} (E - \varepsilon_0(p) + \mu) G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E) = \\ = 1 + \frac{1}{V} \sum_{k,q} v(q) G^R(\hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{p+q}, \hat{a}_p^+; E), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_p^+ \hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{p+q} \rangle = \\ = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\text{Im}G^R(\hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_k \hat{a}_{p+q}, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Из (19), (20) с учетом (12) непосредственно следует, что

$$\begin{aligned} \langle u \rangle = \sum_{\sigma} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{dE}{2\pi} (E - \varepsilon_0(p) + \mu) \times \\ \times \frac{\text{Im}G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Другими словами, в ЭЖ для вычисления как средней кинетической, так и средней потенциальной энергии достаточно ОФГ [12]. Подставляя (18), (21) в (9)–(12), находим

$$\begin{aligned} P(T, \mu) = \frac{1}{3} \sum_{\sigma} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \times \\ \times \int \frac{dE}{2\pi} (E + 3\varepsilon_0(p) + \mu) \frac{\text{Im}G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}. \end{aligned} \quad (22)$$

Таким образом, согласно (22) задача определения термодинамических свойств ЭЖ сводится к вычислению ОФГ.

Обратим внимание, что возможность установления точного соотношения (22), связывающего давление и ОФГ в ЭЖ, является прямым следствием кулоновского взаимодействия между электронами. Только в этом случае вириал для потенциальной энергии (11) в термодинамическом пределе равен средней потенциальной энергии взаимодействия электронов (см. (12)). Для произвольного парного взаимодействия между частицами термо-

динамические функции однокомпонентной системы определяются двухчастичной ФГ [21].

Отметим также, что для вычисления термодинамического потенциала в рамках теории возмущений по межэлектронному взаимодействию обычно используется совершенно иная процедура. Гамильтониан ЭЖ записывается в виде (см. (1))

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{U}, \quad (23)$$

где λ – некоторый безразмерный непрерывный параметр. Тогда из (4), (23) непосредственно следует

$$d\Omega(\lambda)/d\lambda = \langle \hat{H}(\lambda) \rangle_{\lambda}, \quad \Omega = \Omega_0 + \int_0^1 d\lambda \langle \hat{U} \rangle_{\lambda}, \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_{\lambda} \rangle = Z^{-1}(\lambda) \text{Tr} \exp\{(-\hat{H}(\lambda) - \mu\hat{N})/T\} \hat{A}, \\ Z(\lambda) = \text{Tr} \exp(-\hat{H}(\lambda) - \mu\hat{N})/T. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь $\Omega_0(V, T, \mu)$ – термодинамический потенциал для идеального газа электронов. В свою очередь, величина $\langle \hat{U} \rangle_{\lambda}$ в (24) определяется точным соотношением (см. (11–13))

$$\begin{aligned} \frac{\langle \hat{U} \rangle_{\lambda}}{V} = \frac{1}{2} \bar{n} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v(q) \{S_{\lambda}(q) - 1\}, \quad S_{\lambda}(q) = 1 + \\ + \bar{n} \int d^3 r \exp(-iq \cdot \mathbf{r}) \{g_2(r; \lambda) - 1\}. \end{aligned} \quad (26)$$

Для вычисления статического структурного фактора $S_{\lambda}(q)$ для ЭЖ с гамильтонианом (23) используется его связь с продольной диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{\lambda}^l(q, \omega)$ (см. подробнее [1–3]):

$$\begin{aligned} \bar{n} v(q) S_{\lambda}(q) = \\ = -\frac{\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{1 - \exp(-\hbar\omega/T)} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon_{\lambda}^l(q, \omega)}. \end{aligned} \quad (27)$$

Это означает, что в рамках традиционного подхода определение термодинамических свойств ЭЖ непосредственно связано с вычислением продольной диэлектрической проницаемости, что является чрезвычайно сложной задачей при учете межэлектронного взаимодействия [1–3].

В свою очередь, для вычисления ОФГ обычно используется уравнение Дайсона

$$\begin{aligned} g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) = g_0(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) + \\ + g_0(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) \Sigma(p, i\omega_n) g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n), \end{aligned} \quad (28)$$

где $g_0(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) = \{i\omega_n - \varepsilon_0(p) + \mu\}^{-1}$ – ОФГ для идеального газа электронов, $\Sigma(p, i\omega_n)$ – так называемая собственно-энергетическая функция или массовый оператор (см. подробнее [11, 12]).

При вычислении ОФГ именно для функции $\Sigma(p, i\omega_n)$ традиционно используется то или иное

приближение в рамках теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. При этом уравнение (28) рассматривается как алгебраическое:

$$g(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; i\omega_n) = \{i\omega_n - \varepsilon_0(p) + \mu - \Sigma(p, i\omega_n)\}^{-1}. \quad (29)$$

Однако следует иметь в виду, что уравнение Дайсона является следствием процедуры частичного суммирования диаграмм определенного вида (класса). Такая процедура широко используется в квантовой теории поля и является основой функциональных методов в теории возмущений. С этой точки зрения собственно-энергетическая функция является функционалом ОФГ, а уравнение Дайсона (28) – функциональным, а не алгебраическим уравнением. Именно это обстоятельство служит одним из оснований для утверждения о том, что термодинамический потенциал ЭЖ является функционалом ОФГ (см. подробнее [13–16]). При установлении явного вида соответствующих функционалов возникает традиционная проблема “обрыва” функциональных рядов теории возмущений. Другими словами, необходимо установить требования для выбора тех или иных приближений для ОФГ.

С этой целью обратим внимание, что согласно (1), (10), (12), (18), (21) средняя (внутренняя) энергия ЭЖ $\varepsilon_V = \langle k \rangle + \langle u \rangle$, приходящаяся на единицу объема, равна

$$\begin{aligned} \varepsilon_V &= \text{Lim}_T \langle \hat{H} \rangle / V = \\ &= \sum_{\sigma} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} (E + \varepsilon_0(p) + \mu) \\ &\quad \times \frac{\text{Im} G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}. \end{aligned} \quad (30)$$

Учитывая далее основное термодинамическое равенство (см., например, [22])

$$\varepsilon_V = T s_V - P + \mu \bar{n}, \quad (31)$$

нетрудно убедиться, что удельная энтропия ЭЖ s_V , приходящаяся на единицу объема, также определяется через ОФГ при заданной температуре T и химическом потенциале μ :

$$\begin{aligned} s_V &= \frac{1}{3T} \sum_{\sigma} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{\pi} (2E + 3\varepsilon_0(p) - \mu) \times \\ &\quad \times \frac{\text{Im} G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1}. \end{aligned} \quad (32)$$

Таким образом, в рамках большого канонического распределения Гиббса термодинамические свойства ЭЖ могут быть определены на основе ОФГ вне рамок теории возмущений. Этот результат находится в согласии с полученным в рамках

теории возмущений по межчастичному взаимодействию утверждением Латтинджера и Уорда [13], что термодинамический потенциал Гиббса для однокомпонентной системы является функционалом ОФГ. Явный вид такого функционала может быть установлен только в рамках теории возмущений, хотя предпринимаются попытки решить эту проблему в рамках термодинамически самосогласованных приближений (см. [23, 24] и цитированную там литературу).

УСЛОВИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

В связи с этим учтем, что целью вычисления ОФГ является ее последующее использование для определения термодинамических функций ЭЖ. Поэтому вполне естественно предположить, что искомое условие самосогласования непосредственно связано с термодинамическими соотношениями.

Действительно, как следует из проведенного рассмотрения выбранного приближения для ОФГ $G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)$ достаточно, чтобы согласованно определить давление $P(T, \mu)$ (22), плотность числа электронов $\bar{n}(T, \mu)$ (8), (18), а также удельную внутреннюю энергию $\varepsilon_V(T, \mu)$ (30) и энтропию $s_V(T, \mu)$ (32).

С другой стороны, согласно законам термодинамики давление $P(T, \mu)$ должно удовлетворять дифференциальному соотношению [25]

$$dP(T, \mu) = s_V(T, \mu) dT + \bar{n}(T, \mu) d\mu, \quad (33)$$

из которого непосредственно следует

$$\begin{aligned} s_V(T, \mu) &= (\partial P(T, \mu) / \partial T)_{\mu}, \\ \bar{n}(T, \mu) &= (\partial P(T, \mu) / \partial \mu)_T. \end{aligned} \quad (34)$$

Таким образом, функции $P(T, \mu)$, $\bar{n}(T, \mu)$, $s_V(T, \mu)$, найденные по выбранному приближению для ОФГ $G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)$, должны удовлетворять соотношениям (34). Если это условие самосогласования не выполняется, то соответствующее приближение для ОФГ является некорректным.

Подчеркнем, что представленные выше результаты, устанавливающие связь между термодинамическими функциями ЭЖ и ОФГ, справедливы вне рамок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию и имеют место исключительно для кулоновского потенциала взаимодействия.

Эти результаты корректны только после перехода к термодинамическому пределу. По этой причине они не могут быть получены из формального разложения для ОФГ (см. (14), (15)) по собственным волновым функциям гамильтониана ЭЖ (1) в макроскопическом, но конечном объеме V .

В частности, для идеального электронного газа, для которого

$$\text{Im}G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E) = \pi\delta(E - \varepsilon_0(p) + \mu), \quad (35)$$

справедливость соответствующих результатов может быть показана только после перехода к термодинамическому пределу, когда давление $P_0(T, \mu)$ представимо в виде (см. подробнее [25])

$$P_0(T, \mu) = \frac{2}{3}\varepsilon_0(T, \mu) = T^{5/2}\Phi(\mu/T), \quad (36)$$

$$\Phi(\alpha) = \frac{2\sqrt{2}m^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{dx x^{3/2}}{\exp(x - \alpha) + 1}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В отличие от традиционного подхода (23)–(27), который основан на применении теории возмущений по межэлектронному взаимодействию при вычислении термодинамического потенциала ЭЖ, представленные выше результаты позволяют основное внимание уделить вопросу о самосогласованном вычислении ОФГ.

При этом возникает вопрос о связи с результатами феноменологической теории Силина для вырожденной ЭЖ [26], обобщающей теорию ферми-жидкости Ландау [27] с учетом дальнего действия характера кулоновского взаимодействия между электронами.

Согласно теории Ландау–Силина, в нормальной ферми-жидкости роль частиц выполняют квазичастицы (элементарные возбуждения), обладающие определенной энергией. При этом их число равно числу исходных частиц (электронов). Кроме того, предполагается, что взаимодействие квазичастиц может быть описано с помощью самосогласованного поля окружающих частиц так, что энергия рассматриваемой системы является функционалом от функции распределения квазичастиц. Такие предположения имеют место только в пределе сильного вырождения, когда $T \ll \mu$.

В рамках формализма ФГ это означает, что полюса ОФГ в окрестности поверхности Ферми определяют энергетический спектр квазичастиц (см. (35)). На этой основе может быть найдена корреляционная функция Ландау, определяющая функционал для энергии ЭЖ (см., напр., [11]). Однако остается проблема вычисления коэффициентов разложения для корреляционной функции Ландау, что требует реализации определенной процедуры самосогласования (см. подробнее [28]). Это тем более актуально для равновесной ЭЖ, так как экспериментальное подтверждение теории Ландау–Силина в основном имеет место в отношении неравновесных свойств

металлов, прежде всего, их электромагнитных характеристик [29].

С этой точки зрения, несомненный интерес представляет применение теории Ландау–Силина в формализме ФГ для анализа полученных выше результатов в пределе сильного вырождения. В этом случае, в частности, соотношение (31) принимает вид

$$\varepsilon_V(T \rightarrow 0, \mu) + P(T \rightarrow 0, \mu) - \mu\bar{n}(T \rightarrow 0, \mu) = 0, \quad (37)$$

где переход к пределу $T \rightarrow 0$ следует понимать в смысле $T \ll \mu$.

Следовательно, в вырожденной ЭЖ, для описания которой применима теория Ландау–Силина, условие самосогласования для энтропии (34) заменяется предельным равенством (см. (32))

$$\lim_{T \rightarrow 0} \sum_{\sigma} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{dE}{\pi} (2E + 3\varepsilon_0(p) - \mu) \times \frac{\text{Im}G^R(\hat{a}_p, \hat{a}_p^+; E)}{\exp(E/T) + 1} = 0. \quad (38)$$

С другой стороны, положения феноменологической теории Ландау–Силина не могут быть использованы при рассмотрении *warm dense matter* [5–10]. В этой ситуации представленные выше выражения для термодинамических функций ЭЖ, полученные через точную ОФГ, имеют преимущество по сравнению с традиционным подходом (23)–(27). Это преимущество заключается в наличии условий самосогласования (34).

Дальнейшее развитие полученных выше результатов связано с построением самосогласованных приближений для ФГ в рамках предложенной в [20] схемы с использованием правил сумм для моментов ОФГ (см. подробнее [30]). Результаты использования этого подхода будут представлены в отдельной публикации.

Автор признателен С.А. Тригеру за полезные обсуждения.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-08-00238-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ichimaru S.* Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids // *Rev. Mod. Phys.* 1982. V. 54. № 4. P. 1017–1059.
2. *Коваленко Н.П., Красный Ю.П., Тригер С.А.* Статистическая теория жидких металлов. М.: Наука, 1990. 204 с.
3. *Giuliani G., Vignale G.* Quantum theory of the electron liquid. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005. 798 p.
4. *Погосов В.В., Рева В.И.* К расчету энергий диссоциации, когезии, образовании вакансии, прилипа-

- ния электронов и потенциала ионизации малых металлических кластеров, содержащих моновакансию // ФММ. 2017. Т. 118. № 9. С. 871–882.
5. *Brown E., Clark B., DuBois J., Ceperley D.* Path-integral Monte Carlo simulation of the warm dense homogeneous electron gas // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110. № 14. P. 146405 (1–5).
 6. *Baguet L., Delyon F., Bernu B., Holzmann M.* Hartree-Fock ground state phase diagram of jellium // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 111. № 16. P. 166402 (1–5).
 7. *Pavlyukh Y., Uimonen A.-M., Stefanucci G., van Leeuwen R.* Vertex corrections for positive-definite spectral functions of simple metals // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. № 20. 206402 (1–6).
 8. *McClain J., Lischner J., Watson Th., Matthews D.A., Ronca E., Louie S.G., Berkelbach T.C., Chan G.K.-L.* Spectral functions of the uniform electron gas via coupled-cluster theory and comparison to the *GW* and related approximations // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 93. № 23. P. 235139 (1–6).
 9. *Valenzuela J.C., Krauland C., Mariscal D., Krasheninnikov I., Niemann C., Ma T., Mabey P., Gregori G., Wiewior P., Covington A.M., Beg F.N.* Measurement of temperature and density using non-collective X-ray Thomson scattering in pulsed power produced warm dense plasmas // *Scient. Rep.* 2018. V. 8. P. 8432 (1–8).
 10. *Dornheim T., Groth S., Bonitz M.* The uniform electron gas at warm dense matter conditions // *Phys. Rep.* 2018. V. 744. P. 1–86.
 11. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ, 1962. 444 с.
 12. *Kadanoff L.P., Baym G.* Quantum statistical mechanics. Green's function methods in equilibrium and nonequilibrium problems. New York: Benjamin, 1962. 203 p.
 13. *Luttinger J.M., Ward J.C.* Ground-state energy of a many-fermion system. II // *Phys. Rev.* 1960. V. 118. № 5. P. 1417–1427.
 14. *Baym G., Kadanoff L.P.* Conservation laws and correlation functions // *Phys. Rev.* 1961. V. 124. № 2. P. 287–299.
 15. *Kotliar G., Savrasov S.Y., Haule K., Oudovenko V.S., Parcollet O., Marianetti C.A.* Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory // *Rev. Mod. Phys.* 2006. V. 78. № 3. P. 865–951.
 16. *Blöchl P.E., Pruschke T., Potthoff M.* Density-matrix functionals from Green's functions // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 88. № 20. P. 205139 (1–14).
 17. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 416 с.
 18. *Bobrov V.B., Trigger S.A., Zagorodny A.* Virial theorem, one-particle density matrix, and equilibrium condition in an external field // *Phys. Rev. A.* 2010. V. 82. № 4. P. 044105 (1–4).
 19. *Зубарев Д.Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // УФН. 1960. Т. 71. № 1. С. 71–116.
 20. *Озрин В.Д.* Цепочка уравнений для двухвременных температурных функций Грина // ТМФ. 1970. Т. 4. № 1. С. 66–75.
 21. *Бобров В.Б.* Термодинамика квантового газа и двухчастичная функция Грина // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. № 6. С. 365–367.
 22. *Balescu R.* Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. New York-London: Wiley, 1975. 756 p.
 23. *Potthoff M., Aichhorn M., Dahnen C.* Variational cluster approach to correlated electron systems in low dimensions // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. № 20. P. 206402 (1–4).
 24. *Potthoff M., Balzer M.* Self-energy-functional theory for systems of interacting electrons with disorder // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. № 12. P. 125112 (1–22).
 25. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика, часть I. М.: Наука, 1976. 584 с.
 26. *Силин В.П.* К теории вырожденной электронной жидкости // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. № 2. С. 495–500.
 27. *Ландау Л.Д.* Теория ферми-жидкости // ЖЭТФ. 1956. Т. 30. № 6. С. 1058–1064.
 28. *Baym G., Pethick C.* Landau Fermi-liquid theory: concepts and applications. Weinheim: Wiley-VCH, 1991. 216 p.
 29. *Кондратьев А.С., Кучма А.Е.* Электронная жидкость нормальных металлов. Ленинград: Изд-во Ленинградского ун-та, 1980. 200 с.
 30. *Vogt M., Zimmermann R., Needs R.J.* Spectral moments in the homogeneous electron gas // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. № 4. P. 045113 (1–10).