

Пусть $V(r) = \sum_{i=1}^N v(r - \rho_i)$ с псупорядоченным образом распределенными местами атомов ρ_i . Тогда определяют функцию распределения $P(\rho_1, \dots, \rho_N)$ с $\int P d\tau_1 \dots d\tau_N = 1$, которая дает вероятность определенного распределения ρ_i . Все физические величины являются заданными как функции ρ_i . Усреднение происходит, следовательно, посредством умножения на P и интегрирования по всем координатам.

Ограничимся некоторыми замечаниями относительно усреднения самой функции Грина. Типичный член борновского ряда

$$(G_0 V G_0 V G_0 V G_0)_{kk'} = \sum_{k_1 k_2} G_0(k, E) V(k, k_1) G_0(k_1, E) \times \\ \times V(k_1, k_2) G_0(k_2, E) V(k_2, k') G_0(k', E) \quad (\text{П.66})$$

преобразуем, прежде всего, при помощи $V(r) = \sum_i v(r - \rho_i)$, причем пользуемся тем, что $V(k, k')$ связано с фурье-образом отдельного потенциала $v_i(r)$ посредством соотношения $V(k, k') = \sum_i \exp[-i(k - k') \cdot \rho_i] v_i(k, k')$:

$$\sum_{k_1 k_2} \sum_{i i' i''} G_0(k, E) \exp[-i(k - k_1) \cdot \rho_i] v_i(k, k_1) G_0(k_1, E) \times \\ \times \exp[-i(k_1 - k_2) \cdot \rho_{i'}] v_{i'}(k_1, k_2) G_0(k_2, E) \times \\ \times \exp[-i(k_2 - k') \cdot \rho_{i''}] v_{i''}(k_2, k') G_0(k', E). \quad (\text{П.67})$$

Это выражение усредняем с использованием функции распределения $P(\rho_1, \dots, \rho_N)$. Интегрирование по не входящим в показатели экспонент ρ_i и суммирование по i совместно с функцией P приводит к «корреляционной функции» $\mathcal{D}$, которая зависит от столько же радиус-векторов, сколько появляется факторов $v_i(k, k')$ в (П.67):

$$\sum_{k_1 k_2} \int \int \int d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 \mathcal{D}(\rho_1, \rho_2, \rho_3) G_0(k, E) \exp[-i(k - k_1) \cdot \rho'] \times \\ \times v_1(k, k_1) G_0(k_1, E) \exp[-i(k_1 - k_2) \cdot \rho_2] v_2(k_1, k_2) \times \\ \times G_0(k_2, E) \exp[-i(k_2 - k') \cdot \rho_3] v_3(k_2, k') G_0(k', E). \quad (\text{П.68})$$

Каждый член борновского ряда содержит, таким образом, корреляционную функцию $\mathcal{D}(\rho_1, \dots, \rho_N)$, которая зависит от усредненного пространственного распределения n атомов. Для периодической решетки с узлами R_i она принимает вид

$$\mathcal{D}(\rho_1, \dots, \rho_N) = \sum_{l_1, \dots, l_N} \delta(\rho_1 - \rho_2 - R_{l_1}) \delta(\rho_2 - \rho_3 - R_{l_2}) \dots \\ \dots \delta(\rho_{n-1} - \rho_n - R_{l_{n-1}}) \delta(\rho_n - R_{l_n}). \quad (\text{П.69})$$

В случае неупорядоченных потенциалов корреляционная функция также содержит компоненты δ -функционального типа. Три вектора в (П.69) возникают ведь из усреднения по всем тройкам векторов $\rho_i, \rho_{i'}, \rho_{i''}$ в (П.67). Однако при суммировании по i, i' и i'' там появляются также члены с $i = i' \neq i'', i = i' =$