

## СТАТИСТИЧНА ТЕОРІЯ ПРОСТОРОВО-ОБМЕЖЕНИХ СИСТЕМ ЗАРЯДЖЕНИХ ФЕРМІ-ЧАСТИНОК: І. МЕТОД ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ ТА ЕФЕКТИВНІ ПОТЕНЦІАЛИ

П. П. Костробій, Б. М. Маркович  
Національний університет “Львівська політехніка”,  
вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна

(Отримано 29 травня 2002р.; в остаточному вигляді — 5 листопада 2002 р.)

Представлено статистичну теорію системи заряджених фермі-частинок з плоскою поверхнею розділу. Теорія побудована на методі функціонального інтегрування. Отримано вираз для термодинамічного потенціалу такої системи, який базується на ефективному потенціалі взаємодії між електронами та поверхнею розділу. Знайдено аналітичні вирази ефективних потенціалів взаємодії для різних моделей поверхневого потенціалу.

**Ключові слова:** екранований потенціал, поверхня розділу.

PACS number(s): 71.45.Gm

### ВСТУП

Просторово-неоднорідні системи заряджених частинок як базові моделі активно застосовують для опису тонкоплівкових структур, острівцевих ланцюжкових структур, над'їраток, адсорбатів [1–3], які самоорганізуються. У зв'язку з розвитком експериментальних методів дослідження таких систем (скануючі тунельна спектроскопія та мікроскопія, польова йонна мікроскопія та їх модифікації), які дають усе детальнішу інформацію про електронну будову, структурні перетворення, дифузійні, адсорбційні, десорбційні процеси на поверхні металів, діелектриків, напівпровідників [4], значну увагу приділяють теоретичному вивченню термодинамічних та структурних властивостей цих систем.

Основною задачею рівноважної статистичної теорії таких систем є розрахунок термодинамічних функцій та статистичних функцій розподілу [5]. Використання для таких розрахунків методу функціонального інтегрування [6, 7] дозволяє отримати для цих величин групові розклади [5], основою для побудови яких є екранований потенціал взаємодії  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Рівняння для  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  є інтегральним рівнянням типу згортки, аналітичний розв'язок якого — нетривіальна задача.

У поданій статті розглянуто задачу статистичного опису системи заряджених фермі-частинок із поверхнею розділу методом функціонального інтегрування. Отримано вираз для термодинамічного потенціалу такої системи, в основу якого покладено ефективний потенціал взаємодії фермі-частинок між собою та поверхнею розділу. Ми запропонували підхід, що дозволяє коректно врахувати обмінно-кореляційні ефекти в межах наближень, які розглянуто в праці [8]. Знайдено аналітичні вирази для екранованого потенціалу взаємодіючих між собою та поверхнею електронів для різних моделей поверхневого потенціалу.

### І. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглядаємо систему  $N$  електронів в об'ємі  $V = SL$  у полі додатного неоднорідно розподіленого заряду  $\varrho(\mathbf{R}) = \varrho(\mathbf{R}_{\parallel}, Z)$ ,  $\mathbf{R}_{\parallel} = (X, Y)$ , де  $X, Y \in [-\sqrt{S}/2, +\sqrt{S}/2]$ ,  $Z \in [-L/2, +L/2]$ , причому існує умова електронейтральності

$$\int_S d\mathbf{R}_{\parallel} \int_{-L/2}^{+L/2} dZ \varrho(\mathbf{R}_{\parallel}, Z) = eN, \quad e > 0. \quad (1)$$

Гамільтоніян такої системи має вигляд:

$$H = T + V_{ee} + V_{ei} + V_{ii}, \quad (2)$$

де

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i \quad (3)$$

— оператор кінетичної енергії електронів ( $m$  — маса електрона),

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (4)$$

— потенціальна енергія взаємодії між електронами,

$$V_{ii} = \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{R}_1 \int_V d\mathbf{R}_2 \frac{\varrho(\mathbf{R}_1)\varrho(\mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \quad (5)$$

— потенціална енергія додатного заряду,

$$V_{ei} = -e \sum_{j=1}^N \varphi(\mathbf{r}_j) \quad (6)$$

— енергія взаємодії електронів із додатним зарядом,  $\varphi(\mathbf{r}_j)$  — потенціал, який створюється додатним зарядом. Припустимо, що цей заряд розподілений так:

$$\varrho(\mathbf{R}) = \varrho_0 \theta(-Z) + \Delta\varrho(\mathbf{R}), \quad (7)$$

де  $\varrho_0 = \frac{2N}{SL}e$ ,  $\theta(-Z)$  — функція Гевісайда,  $\Delta\varrho(\mathbf{R})$  — відхилення густини додатного заряду від однорідної. Зрозуміло, що таке відхилення зосереджене поблизу площини  $Z = 0$  і фактично формує одночастинковий потенціал для електронів, який будемо називати поверхневим і моделювати його потенціалним бар'єром. Ураховуючи це, отримуємо:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int_V d\mathbf{R} \frac{\varrho(\mathbf{R})}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} = \frac{1}{e} V(\mathbf{r}) + \varrho_0 \int_V d\mathbf{R} \frac{\theta(-Z)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|}, \quad (8)$$

де  $V(\mathbf{r}) = e \int_V d\mathbf{R} \frac{\Delta\varrho(\mathbf{R})}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|}$  — поверхневий потенціал.

Для розрахунку великої статистичної суми розглядуваної системи гамільтоніян (2) зручно подати у представленні вторинного квантування.

## II. ПРЕДСТАВЛЕННЯ ВТОРИННОГО КВАНТУВАННЯ

Уведемо в розгляд одночастинкові хвильові функції  $\Psi_a(\mathbf{r})$  та відповідні енергії  $E_a$  електрона в полі поверхневого потенціалу  $V(\mathbf{r})$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\mathbf{r}_i) \right] \Psi_a(\mathbf{r}_i) = E_a \Psi_a(\mathbf{r}_i), \quad (9)$$

які використаємо для побудови представлення вторинного квантування. На підставі симетрії нашої задачі можна вважати, що  $V(\mathbf{r}) = V(z)$ , де  $z$  — нормальна до площини  $XOY$  координата електрона,  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{||}, z)$ ,  $\mathbf{r}_{||}$  — двовимірний радіус-вектор електрона в паралельній до  $XOY$  площині. У цьому випадку енергію електрона можна записати так:

$$E_a = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha, \quad a = (\mathbf{p}, \alpha), \quad (10)$$

де  $\hbar\mathbf{p}$  — імпульс електрона в паралельній до  $XOY$  площині,  $\alpha$  — деяке квантове число, яке залежить від конкретного вигляду поверхневого потенціалу. Хвильові функції мають такий вигляд:

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}} \varphi_\alpha(z). \quad (11)$$

Розкладаючи потенціалну енергію взаємодії між двома зарядженими частинками в ряд Фур'є

$$\frac{e^2}{\sqrt{(\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})^2 + (z - z')^2}} = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} \nu(\mathbf{q}|z - z') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||} - \mathbf{r}'_{||})}, \quad (12)$$

де  $\nu(\mathbf{q}|z - z') = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z - z'|}$  — двовимірний фур'є-образ кулонівської взаємодії,  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ ,  $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$ ,  $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , гамільтоніян системи (2) можна подати так:

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q}} \nu(\mathbf{q}|0) + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p}_1, \alpha_1, \alpha'_1} \sum_{\mathbf{p}_2, \alpha_2, \alpha'_2} \int dz \int dz' \nu(\mathbf{q}|z - z') \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha'_1}(z) \times \varphi_{\alpha_2}^*(z') \varphi_{\alpha'_2}(z') a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}), \quad (13)$$

де  $a_\alpha^\dagger(\mathbf{p})$ ,  $a_\alpha(\mathbf{p})$  — відповідно оператори народження та знищення електрона в стані  $(\mathbf{p}, \alpha)$ , причому справджуються стандартні комутаційні співвідношення:

$$\{a_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2)\} = \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \delta_{\alpha_1, \alpha_2}; \quad (14)$$

$N = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$  — оператор кількості частинок; штрих біля суми у формулі (13) означає відсутність доданків при  $\mathbf{q} = 0$ , що зумовлено умовою електро-

нейтральності (1).

Розкладаючи  $\nu(\mathbf{q}|z - z')$  у ряд Фур'є

$$\nu(\mathbf{q}|z - z') = \frac{1}{L} \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) e^{-ik(z - z')}, \quad (15)$$

де  $\nu_k(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / (\mathbf{q}^2 + k^2)$  — фур'є-образ кулонівської взаємодії,  $k = \frac{2\pi}{L} n$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , та ввівши змішане фур'є-представлення локальної густини електронів

$$\rho_k(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \alpha'} \langle \alpha | e^{-ikz} | \alpha' \rangle a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (16)$$

де

$$\langle \alpha | \dots | \alpha' \rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} dz \varphi_{\alpha}^*(z) \dots \varphi_{\alpha'}(z), \quad (17)$$

для гамільтоніяна (13) отримуємо:

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_{\alpha}(\mathbf{p}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) + \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}). \quad (18)$$

Таке представлення гамільтоніяна є зручним для розрахунку термодинамічного потенціалу методом функціонального інтегрування.

### III. ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ВЕЛИКОЇ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ

Велика статистична сума

$$\Xi = \text{Sp} \exp[-\beta(H - \mu N)], \quad (19)$$

яка визначає термодинамічний потенціал системи:  $\Omega = -\ln \Xi / \beta$  та інші термодинамічні функції, у представленні взаємодії має вигляд:

$$\Xi = \Xi_0 \exp\left(\frac{\beta}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0)\right) \Xi_{\text{int}}, \quad (20)$$

де  $\Xi_0 = \text{Sp} \exp(-\beta H'_0)$ ,  $H'_0 = H_0 - \mu N$ ,  $H_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_{\alpha}(\mathbf{p}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p})$  — гамільтоніан невзаємодіючої системи,  $\mu$  — хемічний потенціал,

$$\Xi_{\text{int}} = \langle S(\beta) \rangle_0, \langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{\Xi_0} \text{Sp} \left( \exp(-\beta H'_0) \dots \right), \quad (21)$$

$$S(\beta) = T \exp \left[ -\frac{1}{2SL} \int_0^{\beta} d\beta' \times \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\beta') \right], \quad (22)$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = e^{\beta' H'_0} \rho_k(\mathbf{q}) e^{-\beta' H'_0}, \quad (23)$$

де  $T$  — символ хронологічного впорядкування “часів”  $\beta = 1/\theta$ ,  $\theta$  — термодинамічна температура.

Для подальших викладок зручно перейти до частотного представлення:

$$\rho_k(\mathbf{q}|\nu) = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\beta' e^{i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\beta'), \quad (24)$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = \sum_{\nu} e^{-i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\nu), \quad (25)$$

де  $\nu = \frac{2\pi}{\beta} n$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) — бозівські частоти. Тоді (22) набуде вигляду:

$$S(\beta) = T \exp \left[ -\frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \sum_{\nu} \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\nu) \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\nu) \right]. \quad (26)$$

Щоб спростити усереднення  $S(\beta)$  згідно з (21), перейдімо до функціонального представлення для  $S(\beta)$  [6, 7], скориставшись тотожністю Стратоновича-Габбарда [9]

$$\exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^N A_{n,m} y_n y_m \right] = \det(\mathbb{A})^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^N \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^N x_n (\mathbb{A}^{-1})_{n,m} x_m + i \sum_{n=1}^N x_n y_n \right], \quad (27)$$

де  $i$  — уявна одиниця,  $\mathbb{A} = \|A_{n,m}\|$  — симетрична матриця, тоді для (26) отримуємо:

$$S(\beta) = \prod_{\mathbf{q}}' \prod_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \int (d\omega) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_{\nu} \sum_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}|\nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}|\nu) \right] \times T \exp \left[ i \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \sum_{\nu} \omega_k(\mathbf{q}|\nu) \rho_k(\mathbf{q}|\nu) \right], \quad (28)$$

де  $(d\omega)$  — елемент фазового простору

$$\omega_k^c(\mathbf{q}|\nu) = \omega_{-k}^c(-\mathbf{q}|\nu), \quad (31)$$

$$(d\omega) = \prod_{\mathbf{q}>0} \prod_{k \geq 0} \prod_{\nu \geq 0} \frac{d\omega_k^c(\mathbf{q}|\nu)}{\sqrt{\pi}} \frac{d\omega_k^s(\mathbf{q}|\nu)}{\sqrt{\pi}}, \quad (29)$$

$$\omega_k^s(\mathbf{q}|\nu) = -\omega_{-k}^s(-\mathbf{q}|\nu). \quad (32)$$

$$\omega_k(\mathbf{q}|\nu) = \omega_k^c(\mathbf{q}|\nu) + i\omega_k^s(\mathbf{q}|\nu), \quad (30)$$

Зауважимо, що у зв'язку з тим, що операторні змінні  $\rho_k(\mathbf{q}|\nu)$  знаходяться в (28) під знаком  $T$ -впорядкування, інтегрувати за  $\beta'$  в (24) не можна.

Уведемо для зручності таке позначення:  $x = (\mathbf{q}, \nu)$ , тоді, усереднюючи  $S(\beta)$  згідно з (21), отримуємо:

$$\begin{aligned} \langle S(\beta) \rangle_0 &= \prod_{\mathbf{q}}' \prod_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \int (d\omega) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}|\nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}|\nu) \right] \\ &\times \exp \left[ \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{x_1, \dots, x_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n) \omega_{k_1}(x_1) \dots \omega_{k_n}(x_n) \right], \end{aligned} \quad (33)$$

де  $\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n) = i^n \langle T \rho_{k_1}(x_1) \dots \rho_{k_n}(x_n) \rangle_{0,c} \propto \delta_{x_1 + \dots + x_n, 0}$  — так звані незвідні середні (кумулянти); штрих біля суми й надалі означає, що  $\mathbf{q} \neq 0$ , і внаслідок цього  $\mathfrak{M}_{k_1}(x_1) = 0$ . Розрахунок  $\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n)$  проведено в праці [10].

Розрахунок інтеграла (33) є складною проблемою [5]. У праці [11] показано, що для коректного опису електронного газу достатньо розглядати незвідні середні до четвертого порядку включно, а рештою — знехтувати, тобто будемо вважати, що

$$\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad n \geq 5. \quad (34)$$

Тому, згідно з працею [11], для якомога ліпшого врахування обмінно-кореляційних ефектів вищих порядків у виразі (33) замінимо  $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}(x_1, x_2)$  на  $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x_1, x_2) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x_1) \rho_{k_2}(x_2) \rangle_c$ , де усереднення відбувається по всій системі, та обмежимося Гауссівським наближенням у виразі (33). Тобто запишемо (33) у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \langle S(\beta) \rangle_0 &= \prod_{\mathbf{q}}' \prod_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \\ &\times \int (d\omega) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{x, k_1, k_2} \left( \frac{\beta}{S} \bar{g}(x) \right)_{k_1, k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right], \end{aligned} \quad (35)$$

де введено ефективний потенціал  $\bar{g}(x)$  так:

$$\left( \frac{\beta}{S} \bar{g}(x) \right)_{k_1, k_2}^{-1} = \left( \frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \right)^{-1}$$

$$\times \delta_{k_1 + k_2, 0} - \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x). \quad (36)$$

У праці [12] подібно досліджували ефективний потенціал, але при цьому в кумулянті другого порядку розглядали лише діагональні члени. Це спричинило відсутність сил зображення; у нашому підході сили зображення, як буде показано нижче, враховано.

Виконавши інтегрування у (35), отримуємо такий вираз для термодинамічного потенціалу  $\Omega$ :

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_0 - \frac{N}{2S} \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) \\ &- \frac{1}{\beta} \ln \frac{\prod_x' \det \left( \frac{\beta}{S} \hat{g}(x) \right)^{1/2}}{\prod_{\mathbf{q}}' \prod_k \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (37)$$

де  $\hat{g}(x) = \|\bar{g}_{k_1, k_2}(x)\|$ ,  $\Omega_0 = -\ln \Xi_0/\beta$  — термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи.

#### IV. ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯННЯ ДЛЯ ЕФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦІАЛУ

Як видно з (37), щоб знайти  $\Omega$ , необхідно знати  $\bar{g}_{k_1, k_2}(x)$ , який визначається формулою (36).

Для подальшого розрахунку  $\bar{g}_{k_1, k_2}(x)$  зручно перейти в  $(\mathbf{q}, z)$ -представлення, увівши для ефектив-

ного потенціалу  $\bar{g}_{k_1, k_2}(x)$  його фур'є-образ  $\bar{g}(x|z_1, z_2)$  так:

$$\bar{g}(x|z_1, z_2) = \sum_{k_1, k_2} e^{-ik_1 z_1 - ik_2 z_2} \bar{g}_{k_1, k_2}(x), \quad (38)$$

$$\bar{g}_{k_1, k_2}(x) = \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{+L/2} dz_1 \int_{-L/2}^{+L/2} dz_2 e^{ik_1 z_1 + ik_2 z_2} \bar{g}(x|z_1, z_2), \quad (39)$$

тоді рівняння (36) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \bar{g}(x|z_1, z_2) &= \nu(\mathbf{q}|z_1 - z_2) \\ &+ \frac{\beta}{SL^2} \int_{-L/2}^{+L/2} dz \int_{-L/2}^{+L/2} dz' \nu(\mathbf{q}|z_1 - z') \bar{\mathfrak{M}}(x|z', z) \bar{g}(x|z, z_2), \end{aligned} \quad (40)$$

де  $\bar{\mathfrak{M}}(x|z', z)$  — фур'є-образ незвідного середнього другого порядку:

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z', z) = \sum_{k', k} e^{ik' z' + ikz} \bar{\mathfrak{M}}_{k', k}(x, -x). \quad (41)$$

У деяких випадках зручніше працювати не з інтегральним рівнянням другого порядку (41), а з інтегро-диференціальним, яке можна отримати з (41) двократним диференціюванням по  $z_1$ :

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 \right) \bar{g}(x|z_1, z_2) \\ + \frac{4\pi\beta}{SL^2} e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \bar{\mathfrak{M}}(x|z_1, z) \bar{g}(x|z, z_2) = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2), \end{aligned} \quad (42)$$

де в межах інтеграла зроблено граничний перехід

$L \rightarrow \infty$ . Щоб знайти його розв'язки, розглянемо певні наближення для  $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x)$ .

#### А. Наближення ідеального обміну

У (42) замість  $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x)$  покладімо  $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}(x, -x)$ :

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 \right) g(x|z_1, z_2) \\ + \frac{4\pi\beta}{SL^2} e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz \mathfrak{M}(x|z_1, z) g(x|z, z_2) = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2), \end{aligned} \quad (43)$$

де  $g(x|z_1, z_2)$  — ефективний потенціал у цьому наближенні.

Для класичних просторово-неоднорідних систем заряджених частинок з однією поверхнею розділу такі рівняння для екранованого потенціалу розглянуто в працях [13–16]. У них, зокрема, розроблено різні методи, які дозволяють отримати аналітичний розв'язок рівняння для  $g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$  ( $z_1, z_2$  — нормальні до поверхні розділу координати заряджених частинок,  $r_{||} = |\mathbf{r}_{||}|$  — відстань між частинками в площині, паралельній до поверхні розділу). У працях [17–20] досліджено це рівняння для шаруватих систем. Там величину  $\mathfrak{M}(x|z_1, z_2)$  представлено як суму двох кумулянтів однорідної системи, один з них відповідав проходженню частинки крізь потенціальний бар'єр, а інший — відбиванню від нього. Статті [17, 21–23] присвячені визначенню екранованих потенціалів взаємодії для систем типу тонких плівок. Авторам вдалося розв'язати цю задачу для випадку, коли нехтують частотною [17, 23] або просторовою [21] дисперсією екранованого потенціалу. У статті [22] знайдено аналітичний вираз для екранованого потенціалу класичних систем типу тонких плівок у наближенні “постійної густини”.

Фур'є-образ незвідного середнього другого порядку в наближенні ідеального обміну має такий вигляд [10]:

$$\mathfrak{M}(x|z_1, z) = \sum_{k_1, k} e^{ik_1 z_1 + ikz} \mathfrak{M}_{k_1, k}(x) = \frac{L^2}{\beta^2} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \sum_{\nu'} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z) \varphi_{\alpha_1}(z) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu') G_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu' - \nu), \quad (44)$$

де  $G_{\alpha}(\mathbf{p}|\nu) = (i\nu + \mu - E_{\alpha}(\mathbf{p}))^{-1}$  — фур'є-образ одночастинкової функції Гріна.

Беручи до уваги, що

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu'} G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu') G_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu' - \nu) = \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} = \Pi_{\alpha_1, \alpha_2}(x, \mathbf{p}) \quad (45)$$

— поляризаційний оператор системи невзаємодіючих електронів,  $n_\alpha(\mathbf{p}) = (\exp[\beta(E_\alpha(\mathbf{p}) - \mu)] + 1)^{-1}$  — функція розподілу Фермі-Дірака.

Коли  $\nu \rightarrow 0$ , для  $\mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1, z) \equiv \mathfrak{M}(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z)$  отримуємо [10]:

$$\mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1, z) \cong \frac{L^2}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} |\varphi_{\alpha_1}(z)|^2 \delta(z_1 - z). \quad (46)$$

Моделюємо поверхневий потенціал потенціальною сходиною висоти  $W$ , тобто вважаємо, що

$$V(z) = W\theta(z). \quad (47)$$

Власні функції та власні значення цього потенціалу такі:

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha(z) &= C_\alpha \left[ -\sin(\alpha z - \gamma_\alpha)\theta(-z) + \frac{\alpha}{s} \exp(-\varkappa_\alpha z)\theta(z) \right], \\ \varepsilon_\alpha &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \end{aligned} \quad (48)$$

де ділянкою значень нормальної до площини  $XOY$  координати є напівінтервал  $[-L/2, +\infty)$ ;  $\alpha$  — квантове число, воно приймає значення, які можна ви-

значити з такого рівняння:

$$\frac{\alpha L}{2} + \arcsin \frac{\alpha}{s} = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (49)$$

і є наслідком умови, що  $\varphi_\alpha(-L/2) = 0$ ; величина  $s$  пов'язана з висотою бар'єра  $W$ :  $W = \frac{\hbar^2 s^2}{2m}$ ;  $\gamma_\alpha = \arcsin \frac{\alpha}{s}$ ,  $\varkappa_\alpha = \sqrt{s^2 - \alpha^2}$ . Константа  $C_\alpha$  визначається з умови нормування

$$\int_{-L/2}^{+\infty} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 = 1, \quad (50)$$

і вона є такою:

$$C_\alpha = \frac{2}{\sqrt{L + \frac{2}{\varkappa_\alpha}}}. \quad (51)$$

У всіх реальних задачах висота потенціального бар'єра більша за рівень Фермі, тобто  $W > \mu$ .

Для того, щоб отримати аналітичні вирази для екранованого потенціалу, розглянемо наближення “постійної густини” для цієї моделі. Оскільки  $\sin^2 \alpha z \cong 1/2$ , то

$$|\varphi_\alpha(z)|^2 = C_\alpha^2 \left[ \sin^2(\alpha z - \gamma_\alpha)\theta(-z) + \frac{\alpha^2}{s^2} \exp(-2\varkappa_\alpha z)\theta(z) \right] \cong C_\alpha^2 \left[ \left( \frac{1}{2} - \sin \gamma_\alpha \cos \gamma_\alpha \right) \theta(-z) + \sin \gamma_\alpha \cos \gamma_\alpha \theta(z) \right], \quad (52)$$

де вже враховано, що  $L \rightarrow \infty$ .

Від сумування за  $\alpha$  зручно перейти до інтегрування за такою формулою [24]:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} f(\alpha_n) \cong \frac{1}{2} [f(s) - f(0)] + \frac{1}{2\pi} \int_0^s d\alpha \frac{4}{C_\alpha^2} f(\alpha). \quad (53)$$

Тоді незвідне середнє другого порядку набере вигляду:

$$\mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1, z) \cong -\frac{L^2}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})} |\varphi_\alpha(z)|^2 \delta(z_1 - z) \cong -\frac{SL^2}{4\beta\pi\epsilon^2} \left[ (\varkappa^2 + \Delta\varkappa) \theta(-z_1) - \Delta\varkappa \theta(z_1) \right] \delta(z_1 - z), \quad (54)$$

де

$$\varkappa^2 = -\frac{2e^2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \int_0^s d\alpha \frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})}, \quad (55)$$

$$\Delta\varkappa = \frac{4e^2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \int_0^s d\alpha \frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})} \sin \gamma_\alpha \cos \gamma_\alpha \quad (56)$$

і при переході до інтегрування враховано дві можливі

орієнтації спіну електрона. При низьких температурах:  $n_\alpha(\mathbf{p}) = \theta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p}))$ , і  $\varkappa$  є оберненим радіусом екранування Томаса-Фермі  $\varkappa_{\text{TF}}$ , а при високих температурах:  $n_\alpha(\mathbf{p}) = \exp(-\beta E_\alpha(\mathbf{p}))$  і  $\varkappa$  — обернений радіус екранування Дебая  $\varkappa_{\text{D}}$ .

Рівняння для екранованого потенціалу в наближенні “постійної густини” такі:

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{d^2}{dz_1^2} - (q^2 + \varkappa^2 + \Delta\varkappa) \right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) \\ & = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2), \quad z_1 < 0, z_2 < 0; \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{d^2}{dz_1^2} - (q^2 - \Delta\kappa) \right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) & g(\mathbf{q}|z_1 \leq 0, z_2 \leq 0) \\ = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2), \quad z_1 > 0, z_2 > 0; & \quad (58) & = \frac{2\pi e^2}{Q_1} \left[ e^{-Q_1|z_1-z_2|} + \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2} e^{Q_1(z_1+z_2)} \right], & (61) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{d^2}{dz_1^2} - (q^2 + \kappa^2 + \Delta\kappa) \right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) = 0, & g(\mathbf{q}|z_1 \geq 0, z_2 \geq 0) \\ z_1 < 0, z_2 > 0; & \quad (59) & = \frac{2\pi e^2}{Q_2} \left[ e^{-Q_2|z_1-z_2|} - \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2} e^{-Q_2(z_1+z_2)} \right], & (62) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{d^2}{dz_1^2} - (q^2 - \Delta\kappa) \right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) = 0, & g(\mathbf{q}|z_1 \leq 0, z_2 \geq 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2} e^{Q_1 z_1 - Q_2 z_2}, & (63) \\ z_1 > 0, z_2 < 0, & \quad (60) & g(\mathbf{q}|z_1 \geq 0, z_2 \leq 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2} e^{Q_1 z_2 - Q_2 z_1}, & (64) \end{aligned}$$

де  $g(\mathbf{q}|z_1, z_2) \equiv g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)$ .

Розв'язуючи ці рівняння з використанням умов неперервності екранованого потенціалу та його першої похідної, отримуємо [10]:

де  $Q_1 = \sqrt{q^2 + \kappa^2 + \Delta\kappa}$ ,  $Q_2 = \sqrt{q^2 - \Delta\kappa}$ . Зі збільшенням висоти потенціального бар'єра ( $s \rightarrow \infty$ ,  $\Delta\kappa \rightarrow 0$ ) вирази (61)–(64) збігаються з аналогічними виразами для товстих плівок [23].

### В. Урахування вищих поправок для $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x)$

Для розрахунку  $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x)$  скористайтесь методом, який запропонували у [25]. Згідно з означенням,  $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x)$  маємо:

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) &= i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_c = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle \\ &= \prod_x' \det \left( \frac{\beta}{S} \hat{g}(x) \right)^{-1/2} \int (d\omega) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{x,k}' \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. \times \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \frac{d}{d\omega_{k_1}(x)} \frac{d}{d\omega_{k_2}(-x)} \left\langle T \exp \left[ i \sum_{x,k}' \omega_k(x) \rho_k(x) \right] \right\rangle_0 \\ &= \left( \frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \right)^{-1} \left[ \left( \frac{\beta}{SL} \nu_{k_2}(\mathbf{q}) \right)^{-1} \overline{\omega_{-k_1}(-x) \omega_{-k_2}(x)} - \delta_{k_1+k_2, 0} \right], \end{aligned} \quad (65)$$

де під позначенням  $\overline{\dots}$  слід розуміти таке:

$$\begin{aligned} \overline{\dots} &= \prod_x' \det \left( \frac{\beta}{S} \hat{g}(x) \right)^{-1/2} \int (d\omega) \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{x,k}' \left( \frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \dots \\ &\quad \times \left\langle T \exp \left[ i \sum_{x,k}' \omega_k(x) \rho_k(x) \right] \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (66)$$

Для спрощення записів уведемо такі позначення:

$$1 = (x_1, k_1), 2 = (x_2, k_2), \dots, \delta_{1+2, 0} = \delta_{k_1+k_2, 0}, \dots,$$

$$V_1^{-1} = \left( \frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}_1) \right)^{-1}, \dots \quad (67)$$

Тоді функціональний інтеграл (33), обмежившись ку-  
мулянтами до четвертого порядку включно, можна  
записати так:

$$I = \int (d\omega) \exp[F(\omega)], \quad (68)$$

де

$$F(\omega) = \frac{1}{2} \sum'_{1,2} (\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1} \delta_{1+2,0}) \omega_1 \omega_2 + \sum_{n=3}^4 \frac{1}{n!} \sum'_{1,\dots,n} \mathfrak{M}_{1,\dots,n} \omega_1 \dots \omega_n. \quad (69)$$

Для величин  $\overline{\omega_{k_1}(x_1) \dots \omega_{k_n}(x_n)}$ ,  $n = 2, 3, 4$  у праці  
[25] запропоновано ланцюжок рівнянь:

$$\prod_{j=1}^l \left( \frac{d}{d\omega_j} + \frac{dF(\omega)}{d\omega_j} \right) = 0, \quad l = 1, 2, 3, 4. \quad (70)$$

Систему рівнянь (70) будемо розв'язувати, шука-  
ючи розв'язок  $\overline{\omega_1 \omega_2}$  у вигляді:

$$\overline{\omega_1 \omega_2} = \overline{\omega_1 \omega_2}^0 + \overline{\omega_1 \omega_2}^1 + \dots, \quad (71)$$

де позначення  $\overline{(\dots)}^0$  означає розв'язок у наближенні  
нуль сум за  $x = (\mathbf{q}, \nu)$ , причому в ньому враховано  
всі суми за  $k$  (обмежуватися якоюсь скінченною кіль-  
кістю сум за  $k$  не можна, оскільки індекс  $k$  відповідає  
за неоднорідність системи, і в ділянці швидкої зміни  
електронної густини ряди не будуть збігатися). На  
відміну від цього, вектор  $\mathbf{q}$  відповідає за однорідність  
системи ( $\mathbf{q}$  — вектор, який паралельний до площини  
розділу), і розклади будуть проводитися за парамет-  
ром  $\lambda = \langle \tau \rangle / \tau$ , який дорівнює відношенню серед-  
ньої віддалі між частинками до радіуса екранування  
Томаса–Фермі  $\tau = \tau_{TF}$  при низьких температурах або  
до радіуса екранування Дебая  $\tau = \tau_D$  у випадку ви-  
соких температур (середня віддаль  $\langle \tau \rangle = (\frac{3}{4\pi n})^{1/3}$ ,  
 $\tau_{TF} = 1/\varkappa_{TF}$ ,  $\tau_D = 1/\varkappa_D$ ,  $n$  — концентрація електро-  
нів).

Для подальшого розгляду зручно ввести такі по-  
значення:

$$1 = k_1, 2 = k_2, \dots; \underline{1} = x_1, \underline{2} = x_2, \dots;$$

$$\mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, \underline{2}) = \mathfrak{M}_{k_1, k_2}(x_1, x_2), \dots;$$

$$\delta(\underline{1} + \underline{2}) = \delta_{x_1+x_2,0}, \dots; \delta_{1+2} = \delta_{k_1+k_2,0}, \dots \quad (72)$$

У наближенні нуль сум за  $x$  рівняння (70) при  $l = 2$   
вже в нових позначеннях набирає вигляду:

$$\begin{aligned} & \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) \delta(\underline{1} + \underline{2}) \\ & - V_1^{-1}(\underline{1}) \delta(\underline{1} + \underline{2}) \delta_{1+2} \\ & + V_1^{-1}(\underline{1}) V_2^{-1}(\underline{2}) \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^0 \\ & - V_1^{-1}(\underline{1}) \sum_{1'} \mathfrak{M}_{1',2}(-\underline{2}, \underline{2}) \overline{\omega_{1'}(-\underline{2}) \omega_{-1}(-\underline{1})}^0 \\ & - V_2^{-1}(\underline{2}) \sum_{2'} \mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1}, -\underline{1}) \overline{\omega_{-2}(-\underline{2}) \omega_{2'}(-\underline{1})}^0 \\ & + \sum_{1',2'} \mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1}, -\underline{1}) \mathfrak{M}_{1',2}(-\underline{2}, \underline{2}) \overline{\omega_{1'}(-\underline{2}) \omega_{2'}(-\underline{1})}^0 = 0. \end{aligned} \quad (73)$$

Це рівняння розв'язуємо ітераціями, вважаючи, що

$$\begin{aligned} \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{0,0} &= \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{0,1} \\ &+ \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{0,1} + \dots, \end{aligned} \quad (74)$$

де позначення  $\overline{(\dots)}^{0,1}$  означає наближення нуль сум  
за  $x$  та одну суму за  $k$ . Підставивши (74) в (73) та  
зібравши весь нескінченний ряд, отримуємо:

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^0 = V_1(\underline{1}) V_2(\underline{1}) \delta(\underline{1} + \underline{2}) R_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}), \quad (75)$$

де величина  $R_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})$  задовольняє таке інтегральне  
рівняння:

$$\begin{aligned} R_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) &= V_1^{-1}(\underline{1}) \delta_{1+2} \\ &+ \sum_{1'} \mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1}, -\underline{1}) V_{1'}(\underline{1}) R_{-1',2}(\underline{1}, -\underline{1}). \end{aligned} \quad (76)$$

Тоді незвідне середнє  $\overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})$  у наближенні нуль  
сум за  $x$ , згідно з (65), має вигляд:

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) &= R_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) - V_1^{-1}(\underline{1}) \delta_{1+2} \\ &= \sum_{1'} \mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1}, -\underline{1}) V_{1'}(\underline{1}) R_{-1',2}(\underline{1}, -\underline{1}), \end{aligned} \quad (77)$$

Урахувавши, що  $R_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) = \overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) +$   
 $V_1^{-1}(\underline{1}) \delta_{1+2}$ , отримуємо для  $\overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})$  у цьому на-  
ближенні таке інтегральне рівняння:

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) &= \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) \\ &+ \sum_{1'} \mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1}, -\underline{1}) V_{1'}(\underline{1}) \overline{\mathfrak{M}}_{-1',2}(\underline{1}, -\underline{1}). \end{aligned} \quad (78)$$

Зауважимо, що для однорідної системи (тобто,  
коли  $\overline{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}), \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) \propto \delta_{1+2}$ ) інтегральне рів-



няння (78) перетворюється у звичайне алгебраїчне, де введено такі позначення:

$$\bar{\mathfrak{M}}_{1,-1}(\underline{1}, -\underline{1}) = \frac{\mathfrak{M}_{1,-1}(\underline{1}, -\underline{1})}{1 - V_1(\underline{1})\mathfrak{M}_{1,-1}(\underline{1}, -\underline{1})}, \quad (79)$$

що збігається з виразом для кумулянтної кореляційної функції взаємодіючої системи [8].

Перейшовши в рівнянні (78) до  $(\mathbf{q}, z)$ -представлення, згідно з (41), одержуємо:

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{M}}(x|z_1, z_2) &= \mathfrak{M}(x|z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int_{-L/2}^{+L/2} dz \\ &\times \int_{-L/2}^{+L/2} dz' \mathfrak{M}(x|z_1, z) \nu(\mathbf{q}|z - z') \bar{\mathfrak{M}}(x|z', z_2), \quad (80) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{M}}(x|z_1, z_2) &= \sum_{k_1, k_2} \exp(ik_1 z_1 + ik_2 z_2) \\ &\times \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x), \quad (81) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) &= \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{+L/2} dz_1 \\ &\times \int_{-L/2}^{+L/2} dz_2 \exp(-ik_1 z_1 - ik_2 z_2) \bar{\mathfrak{M}}(x|z_1, z_2). \quad (82) \end{aligned}$$

При моделюванні поверхневого потенціалу потенціальним бар'єром та при  $\nu \rightarrow 0$  інтегральне рівняння другого порядку (80) перетворюється в інтегральне рівняння вже першого порядку (в межах інтеграла зроблено граничний перехід  $L \rightarrow \infty$ ):

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z_1, z_2) = \mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1, z_2) - \frac{1}{2q} \left[ (\varkappa^2 + \Delta\varkappa)\theta(-z_1) - \Delta\varkappa\theta(z_1) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp(-q|z_1 - z|) \bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z, z_2), \quad (83)$$

де використано вираз (54),  $\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z_1, z_2) \equiv \bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)$ . Розв'язок цього рівняння такий:

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z_1, z_2) = \mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1, z_2) + \frac{SL^2}{16\beta\pi^2 e^4} \left[ (\varkappa^2 + \Delta\varkappa)^2 \theta(-z_1)\theta(-z_2) + \Delta\varkappa^2 \theta(z_1)\theta(z_2) \right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2). \quad (84)$$

Ураховуючи цей вираз для перенормованого кумулянта другого порядку, рівняння (42) записуємо так:

$$\begin{aligned} &\left[ \frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 - (\varkappa^2 + \Delta\varkappa)\theta(-z_1) + \Delta\varkappa\theta(z_1) \right] \bar{g}(\mathbf{q}|z_1, z_2) + \frac{(\varkappa^2 + \Delta\varkappa)^2}{4\pi e^2} \theta(-z_1) \int_{-\infty}^0 dz g(\mathbf{q}|z_1, z) \bar{g}(\mathbf{q}|z, z_2) \\ &+ \frac{\Delta\varkappa^2}{4\pi e^2} \theta(z_1) \int_0^{\infty} dz g(\mathbf{q}|z_1, z) \bar{g}(\mathbf{q}|z, z_2) = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2), \quad (85) \end{aligned}$$

де  $\bar{g}(\mathbf{q}|z_1, z_2) \equiv \bar{g}(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)$ .

Це інтегро-диференціальне рівняння, згідно з [10], можна звести до диференціального, розв'язком якого є:

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \leq 0, z_2 \leq 0) = \frac{\pi e^2}{q} \left[ e^{-q|z_1 - z_2|} - e^{q(z_1 + z_2)} \right] + \frac{\pi e^2}{Q_1} \left[ e^{-\bar{Q}_1|z_1 - z_2|} + e^{\bar{Q}_1(z_1 + z_2)} \right] + \frac{2\pi e^2}{Q_1} \frac{\bar{Q}_1 - \bar{Q}_2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} e^{\bar{Q}_1(z_1 + z_2)}, \quad (86)$$

$$\begin{aligned} \bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \geq 0, z_2 \geq 0) &= \frac{\pi e^2}{q} \left[ e^{-q|z_1 - z_2|} - e^{-q(z_1 + z_2)} \right] + \frac{\pi e^2}{Q_2} \left[ e^{-\bar{Q}_2|z_1 - z_2|} + e^{-\bar{Q}_2(z_1 + z_2)} \right] \\ &- \frac{2\pi e^2}{Q_2} \frac{\bar{Q}_1 - \bar{Q}_2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} e^{-\bar{Q}_2(z_1 + z_2)}, \quad (87) \end{aligned}$$

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \geq 0, z_2 \leq 0) = \frac{4\pi\epsilon^2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} e^{\bar{Q}_1 z_2 - \bar{Q}_2 z_1}, \quad (88)$$

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \leq 0, z_2 \geq 0) = \frac{4\pi\epsilon^2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} e^{\bar{Q}_1 z_1 - \bar{Q}_2 z_2}, \quad (89)$$

де  $\bar{Q}_1^2 = q^2 + 2(\varkappa^2 + \Delta\varkappa)$ ,  $\bar{Q}_2^2 = q^2 - 2\Delta\varkappa$ .

Вищі поправки в наближенні однієї суми за  $x$  для  $\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1, z_2)$  враховано у праці [10].

## V. ВЗАЄМОДІЯ ДВОХ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК БІЛЯ ПОВЕРХНІ МЕТАЛУ

Для того, щоб порівняти результати наших розрахунків із результатами, отриманими у статті [18], розгляньмо потенціальну енергію взаємодії при низьких температурах двох зарядів  $\epsilon_1$  та  $\epsilon_2$ , які знаходяться у вакуумі на однаковій віддалі  $z_1 = z_2 = z$  від поверхні металу. Оскільки в праці [18] проаналізовано нескінченно високий потенціальний бар'єр, то розби-

remo випадок  $s \rightarrow \infty$ . Потенціальна енергія взаємодії двох зарядів

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}} \bar{g}(\mathbf{q}|z, z) / \epsilon^2, \quad (90)$$

де

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z, z) = \frac{2\pi\epsilon^2}{q} \left[ 1 - \frac{\sqrt{q^2 + 2\varkappa_{\text{TF}}^2} - q}{\sqrt{q^2 + 2\varkappa_{\text{TF}}^2} + q} e^{-2qz} \right] \quad (91)$$

$r_{||} = |\mathbf{r}_{||}|$  — відстань між зарядами в паралельній до поверхні площині. Для малих імпульсів передачі ( $q^2 \ll \varkappa_{\text{TF}}^2$ ) екранований потенціал взаємодії  $\bar{g}(\mathbf{q}, \nu = 0|z, z)$  (91) набирає такого вигляду:

$$\frac{1}{\epsilon^2} \bar{g}(\mathbf{q}, \nu = 0|z, z) \cong \frac{2\pi}{q} \left( 1 - e^{-2qz} + \frac{2q}{\sqrt{2}\varkappa_{\text{TF}}} e^{-2qz} \right), \quad (92)$$

тоді потенціальна енергія взаємодії  $\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z)$  (90)

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = \epsilon_1 \epsilon_2 \int_0^{+\infty} dq \left( 1 - e^{-2qz} + \frac{2q}{\sqrt{2}\varkappa_{\text{TF}}} e^{-2qz} \right) J_0(qr_{||}), \quad (93)$$

де  $J_0(qr_{||})$  — функція Бесселя нульового порядку. Оскільки, згідно з [26], маємо співвідношення:

$$\int_0^{+\infty} dq e^{-2qz} J_0(qr_{||}) = \frac{1}{\sqrt{r_{||}^2 + 4z^2}}, \quad (94)$$

то

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = \epsilon_1 \epsilon_2 \left( \frac{1}{r_{||}} - \frac{1}{\sqrt{r_{||}^2 + 4z^2}} + \frac{4}{\sqrt{2}\varkappa_{\text{TF}}} \frac{z}{(r_{||}^2 + 4z^2)^{3/2}} \right), \quad (95)$$

де перші два доданки описують класичну взаємодію двох зарядів біля поверхні, враховуючи сили зображення; останній доданок — обмінно-кореляційні ефекти.

Для  $r_{||} \gg z$  знаходимо асимптотику:

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) \cong \frac{2\epsilon_1 \epsilon_2}{r_{||}^3} z^2, \quad (96)$$

яка збігається з результатом роботи Кона та Лау [27] та відрізняється у два рази від енергії взаємодії двох диполів.

Розгляньмо енергію притягання заряду до металу за рахунок сил зображення з розрахунку на один заряд:

$$\bar{W}_1(z) = \left( \frac{1}{2} \bar{W}_{11}(\mathbf{r}_{||}, z) - \frac{\epsilon^2}{2r_{||}} \right) \Big|_{r_{||} \rightarrow 0} = -\frac{\epsilon^2}{2} \int_0^{+\infty} dq e^{-2qz} \frac{\sqrt{q^2 + 2\varkappa_{\text{TF}}^2} - q}{\sqrt{q^2 + 2\varkappa_{\text{TF}}^2} + q} \quad (97)$$

$$= -\frac{\epsilon^2}{4z} \left[ 1 + \frac{1}{2\kappa_{TF}^2 z^2} - \pi \left( H_0(2\sqrt{2}\kappa_{TF}z) - N_0(2\sqrt{2}\kappa_{TF}z) \right) + \frac{\pi}{\sqrt{2}\kappa_{TF}z} \left( H_1(2\sqrt{2}\kappa_{TF}z) - N_1(2\sqrt{2}\kappa_{TF}z) \right) \right],$$

де  $H_0$  та  $H_1$  — функції Струве,  $N_0$  та  $N_1$  — функції Неймана відповідно нульового та першого порядків [26].

На достатньо великій віддалі від поверхні металу, коли  $\kappa_{TF}z \gg 1$ , отримуємо:

$$\bar{W}_1(z) \cong -\frac{\epsilon^2}{4z} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{2}\kappa_{TF}z} \right), \quad (98)$$

де перший доданок відповідає класичним силам зображення.

З іншого боку, при  $\kappa_{TF}z \ll 1$  одержуємо, що

$$\bar{W}_1(z) \cong -\frac{\epsilon^2}{2}\sqrt{2}\kappa_{TF} \times \left[ 1 - \sqrt{2}\kappa_{TF}z \left( \frac{4}{3} - \frac{1}{2}\gamma - \frac{1}{2}\ln(\sqrt{2}\kappa_{TF}z) \right) \right], \quad (99)$$

де  $\gamma = 0.577215$  — постійна Ейлера.

Величина  $\bar{W}_1(0) = \frac{\epsilon^2}{2}\sqrt{2}\kappa_{TF}$  скінченна і відповідає обмінно-кореляційній частині енергії взаємодії заряду  $\epsilon$  із напівобмеженим металом [28]. Таким чином, вираз (97) містить інформацію як про сили зображення на великих відстанях від поверхні металу, так і про багаточастинкові обмінно-кореляційні ефекти всередині металу.

Аналогічно можна розрахувати величини  $W_{12}(\mathbf{r}_{\parallel}, z)$ ,  $W_1(z)$  на основі екранованого потенціалу  $g(\mathbf{q}|z_1, z_2)$  (62) при  $s \rightarrow \infty$  [18]. Відмінність полягає в заміні величини  $\sqrt{2}\kappa_{TF}$  та  $\kappa_{TF}$ . Обмінно-кореляційна частина енергії взаємодії заряду  $\epsilon$  з напівобмеженим

металом, яка була розрахована з урахуванням перенормування кумулянта другого порядку, виявляється у  $\sqrt{2}$  рази більшою за аналогічну величину без урахування перенормування:

$$\frac{\bar{W}_1(0)}{W_1(0)} = \sqrt{2}. \quad (100)$$

Отже, врахування перенормування кумулянта другого порядку зберігає фізично правильну поведінку потенціальної енергії взаємодії зарядів біля поверхні та приводить до збільшення обмінно-кореляційної частини енергії взаємодії між зарядами.

## ВИСНОВКИ

Методом функціонального інтегрування отримано вираз для термодинамічного потенціалу  $\Omega$  системи взаємодіючих електронів з плоскою поверхнею розділу. Показано, що для розрахунку  $\Omega$  достатньо знати ефективний потенціал парної взаємодії при наявності поверхні розділу. Отримано інтегральне рівняння для ефективного потенціалу та знайдено його аналітичні розв'язки в ділянці низьких і високих температур у наближенні "постійної густини". Досліджено вплив обмінно-кореляційних взаємодій на розв'язки рівняння для екранованого потенціалу та показано, що запропонований підхід коректного врахування кулонівських кореляцій приводить до зростання обмінно-кореляційної частини енергії взаємодії.

- 
- [1] С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, Усп. физ. наук **168**, 1083 (1998).
  - [2] П. Г. Борзяк, О. Е. Кияєв, А. Г. Наумовець, Р. Д. Федорович, Укр. фіз. журн. **43**, 1487 (1998).
  - [3] В. Г. Литовченко, Д. В. Корбутяк, С. Г. Крилюк, Ю. В. Крюченко, Укр. фіз. журн. **43**, 1493 (1998).
  - [4] F. Besenbacher, Rep. Prog. Phys. **59**, 1737 (1996).
  - [5] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Киев, 1980).
  - [6] И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудаковский, Теор. мат. физ. **49**, 234 (1981).
  - [7] И. Р. Юхновский, П. П. Костробий, препринт ИТФ-80-79Р, Киев, 1980.
  - [8] M. Vavruk, V. Solovyan, N. Vavruk, Phys. Status Solidi B **171**, 361 (1993).
  - [9] Р. Беллман, *Введение в теорию матриц* (Наука, Москва, 1969).
  - [10] П. П. Костробий, Б. М. Маркович, препринт НАН України ІСМР-02-02U, Львів, 2002.
  - [11] Ваврук М. В., доктор. дисерт., Інститут теоретичної фізики АН України, Київ (1987).
  - [12] Г. И. Бигун, Теор. мат. физ. **62**, 446 (1985).
  - [13] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, И. И. Курьяк, препринт АН УССР ИТФ-77-97Р, Киев, 1977.
  - [14] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головкин, Е. Н. Совьяк, препринт АН УССР ИТФ-82-159Р, Киев, 1982.
  - [15] А. Л. Ребенко, препринт АН УССР, ИТФ-81-118Р, Киев, 1981.
  - [16] F. Bechstedt, R. Elderlein, D. Reichardt, Phys. Status Solidi B **117**, 261 (1983).
  - [17] Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Ю. А. Романов,

- Физ. тверд. тела **22**, 2700 (1980).
- [18] А. М. Габович, Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Ю. А. Романов, Журн. эксп. теор. физ. **75**, 249 (1978).
- [19] А. В. Сидякин, Журн. эксп. теор. физ. **58**, 573 (1970).
- [20] А. М. Габович, Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Физ. тверд. тела **21**, 1683 (1979).
- [21] А. И. Войтенко, А. М. Габович, В. М. Розенбаум, препринт АН УССР № 17, Киев, 1984.
- [22] А. С. Усенко, Укр. фіз. журн. **28**, 839 (1983).
- [23] И. И. Курыляк, П. П. Костробий, А. А. Пизин, препринт АН УССР ИТФ-87-7Р, Киев, 1987.
- [24] Г. М. Фихтенгольц, *Курс дифференциального и интегрального исчисления* (Наука, Москва, 1970).
- [25] И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудавский, Г. В. Понедилок, препринт АН УССР ИТФ-81-34Р, Киев, 1981.
- [26] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).
- [27] W. Kohn, K.-H. Lau, *Solid State Commun.* **18**, 553 (1976).
- [28] J. Appelbaum, *Surface Physics of Materials* (Academic Press, New York-London, 1975).

**STATISTICAL THEORY OF THE SPACEBOUNDED SYSTEMS  
OF CHARGED FERMI-PARTICLES: I. THE FUNCTIONAL INTEGRATION METHOD  
AND EFFECTIVE POTENTIALS**

P. P. Kostrobii, B. M. Markovych  
*National University "Lvivska Polytechnica"*  
*12 S. Bandery Str., Lviv, UA-79013, Ukraine*

A statistical theory of a system of charged Fermi-particles bounded with plane surface is presented. The theory is based on the functional integration method. The expressions for the system thermodynamic potential is based on the effective potential of interaction between electrons and the separable surface. Analytical expressions for the effective interaction potentials for different surface potentials are found.