ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 7, № 2 (2003) с. 195–206
JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 7, No. 2 (2003) p. 195–206

СТАТИСТИЧНА ТЕОРІЯ ПРОСТОРОВО-ОБМЕЖЕНИХ СИСТЕМ ЗАРЯДЖЕНИХ ФЕРМІ-ЧАСТИНОК: І. МЕТОД ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ІНТЕҐРУВАННЯ ТА ЕФЕКТИВНІ ПОТЕНЦІЯЛИ

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 інтеґрування. Отримано вираз для термодинамічного потенціялу такої системи, який базується на ефективному потенціялі взаємодії між електронами та поверхнею розділу. Знайдено аналітичні вирази ефективних потенціялів взаємодії для різних моделей поверхневого потенціялу.

Ключові слова: екранований потенціял, 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, надґраток, 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 інтеґрування [6, 7] дозволяє отримати для цих величин групові розклади [5], основою для побудови яких є екранований потенціял взаємодії $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Рівняння для $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ є інтеґральним рівнянням типу згортки, аналітичний розв'язок якого — нетривіяльна задача.

У поданій статті розглянуто задачу статистичного опису системи заряджених фермі-частинок із поверхнею розділу методом функціонального інтеґрування. Отримано вираз для термодинамічного потенціялу такої системи, в основу якого покладено ефективний потенціял 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 потенціялу взаємодіючих між собою та поверхнею електронів для різних моделей поверхневого потенціялу.

І. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

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

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

Гамільтоніян такої системи має вигляд:

$$H = T + V_{ee} + V_{ei} + V_{ii}, \tag{2}$$

де

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

— оператор кінетичної енерґії електронів (m — маса електрона),

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

— потенціяльна енерґія взаємодії між електронами,

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

— потенціяльна енерґія додатного заряду,

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

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

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

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 потенціял для електронів, який будемо називати поверхневим і моделювати його потенціяльним 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 потенціял.

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 енерґії E_a електрона в полі поверхневого потенціялу $V(\mathbf{r})$:

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

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 енерґію електрона можна записати так:

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

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

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

Розкладаючи потенціяльну енерґію взаємодії між двома зарядженими частинками в ряд Фур'є

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

де $\nu\left(\mathbf{q}|z-z'\right) = \frac{2\pi e^2}{q}\mathrm{e}^{-q|z-z'|}$ — двовимірний фур'є-образ кулонівської взаємодії, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}}m_{x,y}$, $m_{x,y} = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, гамільтоніян системи (2) можна подати так:

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

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

$$\left\{a_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), a^\dagger_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)\right\} = \delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2}\delta_{\alpha_1,\alpha_2}; \qquad (14)$$

$N = \sum_{\mathbf{p},\alpha}a^\dagger_\alpha(\mathbf{p})a_\alpha(\mathbf{p})$ — оператор кількости частинок; штрих біля суми у формулі (13) означає відсутність доданків при $\mathbf{q} = 0$, що зумовлено умовою електронейтральности (1).

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

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

де $\nu_k(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/(\mathbf{q}^2+k^2)$ — фур'є-образ кулонівської взаємодії, $k = \frac{2\pi}{L}n$, $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, та ввівши змішане фур'є-представлення локальної густини електронів

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

де

$$\langle\alpha|\cdots|\alpha'\rangle = \int\limits_{-L/2}^{+L/2} dz\, \varphi^*_\alpha(z)\cdots\varphi_{\alpha'}(z), \tag{17}$$

для гамільтоніяна (13) отримуємо:

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

Таке представлення гамільтоніяна є зручним для розрахунку термодинамічного потенціялу методом функціонального інтеґрування.

III. ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ВЕЛИКОЇ СТАТИСТИЧНОЇ СУМИ

Велика статистична сума

$$\Xi = \mathrm{Sp}\exp\left[-\beta(H-\mu N)\right], \tag{19}$$

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

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

де $\Xi_0 = \mathrm{Sp}\exp(-\beta H'_0)$, $H'_0 = H_0 - \mu N$, $H_0 = \sum\limits_{\mathbf{p},\alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a^\dagger_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$ — гамільтоніян невзаємодіючої системи, μ — хемічний потенціял,

$$\Xi_{\mathrm{int}} = \langle S(\beta)\rangle_0,\ \langle\ldots\rangle_0 = \frac{1}{\Xi_0}\mathrm{Sp}\Big(\exp(-\beta H'_0)\ldots\Big), \tag{21}$$

$$S(\beta) = T\exp\Bigg[-\frac{1}{2SL}\int\limits_0^\beta d\beta'$$
$$\times {\sum_{\mathbf{q}}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\beta')\Bigg], \tag{22}$$

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

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

Для подальших викладок зручно перейти до частотного представлення:

$$\rho_k(\mathbf{q}|\nu) = \frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta d\beta'\, \mathrm{e}^{i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\beta'), \tag{24}$$

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

де $\nu = \frac{2\pi}{\beta} n$ $(n = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$ — бозівські частоти. Тоді (22) набуде вигляду:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 інтеґрала (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

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

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 обмежимось ґауссівським наближенням у виразі (33). Тобто запишемо (33) у такому вигляді:

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

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

$$\left(\frac{\beta}{S}\bar{g}(x)\right)^{-1}_{k_1,k_2}=\left(\frac{\beta}{SL}\nu_{k_1}(\mathbf{q})\right)^{-1}$$
$$\times\delta_{k_1+k_2,0}-\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x). \tag{36}$$

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

Виконавши інтеґрування у (35), отримуємо такий вираз для термодинамічного потенціялу Ω:

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

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

IV. ДОСЛІДЖЕННЯ РІВНЯННЯ ДЛЯ ЕФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦІЯЛУ

Як видно з (37), щоб знайти Ω, 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 ефективного потенціялу $\bar{g}_{k_1,k_2}(x)$ його фур'є-образ $\bar{g}(x|z_1,z_2)$ так:

$$\bar{g}(x|z_1,z_2)=\sum_{k_1,k_2}\mathrm{e}^{-ik_1z_1-ik_2z_2}\bar{g}_{k_1,k_2}(x), \tag{38}$$

$$\bar{g}_{k_1,k_2}(x)=\frac{1}{L^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_1\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_2\,\mathrm{e}^{ik_1z_1+ik_2z_2}\bar{g}(x|z_1,z_2), \tag{39}$$

тоді рівняння (36) набуде вигляду:

$$\bar{g}(x|z_1,z_2)=\nu(\mathbf{q}|z_1-z_2) \tag{40}$$
$$+\frac{\beta}{SL^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz'\nu(\mathbf{q}|z_1-z')\bar{\mathfrak{M}}(x|z',z)\bar{g}(x|z,z_2),$$

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

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

У деяких випадках зручніше працювати не з інтеґральним рівнянням другого порядку (41), а з інтеґро-диференціяльним, яке можна отримати з (41) двократним диференціюванням по z_1:

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

де в межах інтеґрала зроблено граничний перехід $L\to\infty$. Щоб знайти його розв'язки, розгляньмо певні наближення для $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x)$.

A. Наближення ідеального обміну

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

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

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

Для класичних просторово-неоднорідних систем заряджених частинок з однією поверхнею розділу такі рівняння для екранованого потенціялу 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 $\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2)$ представлено як суму двох кумулянтів однорідної системи, один з них відповідав проходженню частинки крізь потенціяльний бар'єр, а інший — відбиванню від нього. Статті [17, 21–23] присвячені визначенню екранованих потенціялів взаємодії для систем типу тонких плівок. Авторам вдалося розв'язати цю задачу для випадку, коли нехтують частотною [17, 23] або просторовою [21] дисперсією екранованого потенціялу. У статті [22] знайдено аналітичний вираз для екранованого потенціялу класичних систем типу тонких плівок у наближенні "постійної густини".

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

$$\mathfrak{M}(x|z_1,z)=\sum_{k_1,k}\mathrm{e}^{ik_1z_1+ikz}\mathfrak{M}_{k_1,k}(x)=\frac{L^2}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p},\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\nu'}\varphi^*_{\alpha_1}(z_1)\varphi_{\alpha_2}(z_1)\varphi^*_{\alpha_2}(z)\varphi_{\alpha_1}(z)G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}|\nu'-\nu), \tag{44}$$

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

Беручи до уваги, що

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

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

Коли $\nu \to 0$, 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 потенціял потенціяльною сходинкою висоти W, тобто вважаємо, що

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

Власні функції та власні значення цього потенціялу такі:

$$\varphi_\alpha(z) = C_\alpha\Big[-\sin(\alpha z-\gamma_\alpha)\theta(-z)+\frac{\alpha}{s}\exp(-\varkappa_\alpha z)\theta(z)\Big],$$

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}, \quad (48)$$

де ділянкою значень нормальної до площини XOY координати є напівінтервал $[-L/2,+\infty)$; α — квантове число, воно приймає значення, які можна визначити з такого рівняння:

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

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_α визначається з умови нормування

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

і вона є такою:

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

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

Для того, щоб отримати аналітичні вирази для екранованого потенціялу, розгляньмо 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 $L\to\infty$.

Від сумування за α зручно перейти до інтеґрування за такою формулою [24]:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} f(\alpha_n) \cong \frac{1}{2}[f(s)-f(0)]+\frac{1}{2\pi}\int\limits_0^s d\alpha\,\frac{4}{C_\alpha^2}f(\alpha). \quad (53)$$

Тоді незвідне середнє другого порядку набере вигляду:

$$\mathfrak{M}(\mathbf{q}|z_1,z) \cong -\frac{L^2}{\beta}\sum_{\mathbf{p},\alpha}\frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial E_{\alpha_1}(\mathbf{p})}|\varphi_\alpha(z)|^2\delta(z_1-z) \cong -\frac{SL^2}{4\beta\pi e^2}\Big[\left(\varkappa^2+\Delta\varkappa\right)\theta(-z_1)-\Delta\varkappa\,\theta(z_1)\Big]\delta(z_1-z), \quad (54)$$

де

$$\varkappa^2 = -\frac{2e^2}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\mathbf{p}\int\limits_0^s d\alpha\frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})}, \quad (55)$$

$$\Delta\varkappa = \frac{4e^2}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\mathbf{p}\int\limits_0^s d\alpha\frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})}\sin\gamma_\alpha\cos\gamma_\alpha \quad (56)$$

і при переході до інтеґрування 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 $\varkappa_{\mathrm{TF}}$, а при високих температурах: $n_\alpha(\mathbf{p}) = \exp(-\beta E_\alpha(\mathbf{p}))$ і $\varkappa$ — обернений радіус екранування Дебая $\varkappa_{\mathrm{D}}$.

Рівняння для екранованого потенціялу в наближенні "постійної густини" такі:

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-\left(q^2+\varkappa^2+\Delta\varkappa\right)\right]g(\mathbf{q}|z_1,z_2)$$

$$= -4\pi e^2\delta(z_1-z_2),\ z_1<0, z_2<0; \quad (57)$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 - \Delta\varkappa\right)\right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2)$$
$$= -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2),\ z_1 > 0, z_2 > 0; \tag{58}$$
$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 + \varkappa^2 + \Delta\varkappa\right)\right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) = 0,$$
$$z_1 < 0, z_2 > 0; \tag{59}$$
$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 - \Delta\varkappa\right)\right] g(\mathbf{q}|z_1, z_2) = 0,$$
$$z_1 > 0, z_2 < 0, \tag{60}$$

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 неперервности екранованого потенціялу та його першої похідної, отримуємо [10]:

$$g(\mathbf{q}|z_1 \leqslant 0, z_2 \leqslant 0)$$
$$= \frac{2\pi e^2}{Q_1}\left[\mathrm{e}^{-Q_1|z_1 - z_2|} + \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1(z_1 + z_2)}\right], \tag{61}$$
$$g(\mathbf{q}|z_1 \geqslant 0, z_2 \geqslant 0)$$
$$= \frac{2\pi e^2}{Q_2}\left[\mathrm{e}^{-Q_2|z_1 - z_2|} - \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{-Q_2(z_1 + z_2)}\right], \tag{62}$$
$$g(\mathbf{q}|z_1 \leqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1 z_1 - Q_2 z_2}, \tag{63}$$
$$g(\mathbf{q}|z_1 \geqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1 z_2 - Q_2 z_1}, \tag{64}$$

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

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

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

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

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

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

Для спрощення записів уведімо такі позначення:

$$1 = (x_1, k_1),\ 2 = (x_2, k_2), \ldots, \delta_{1+2,0} = \delta_{k_1+k_2,0}, \ldots,$$
$$V_1^{-1} = \left(\frac{\beta}{SL}\nu_{k_1}(\mathbf{q}_1)\right)^{-1}, \ldots . \tag{67}$$

Тоді функціональний інтеґрал (33), обмежившись кумулянтами до четвертого порядку включно, можна записати так:

$$I = \int (d\omega) \exp[F(\omega)], \tag{68}$$

де

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

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

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

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

$$\overline{\omega_1 \omega_2} = \overline{\omega_1 \omega_2}^{\,0} + \overline{\omega_1 \omega_2}^{\,1} + \ldots, \tag{71}$$

де позначення $\overline{(\ldots)}^{\,0}$ означає розв'язок у наближенні нуль сум за $x = (\mathbf{q}, \nu)$, причому в ньому враховано всі суми за k (обмежуватися якоюсь скінченою кількістю 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 параметром $\lambda = \langle \tau \rangle / \tau$, який дорівнює відношенню середньої віддалі між частинками до радіуса екранування Томаса–Фермі $\tau = \tau_{\mathrm{TF}}$ при низьких температурах або до радіуса екранування Дебая $\tau = \tau_{\mathrm{D}}$ у випадку високих температур (середня віддаль $\langle \tau \rangle = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$, $\tau_{\mathrm{TF}} = 1/\varkappa_{\mathrm{TF}}$, $\tau_{\mathrm{D}} = 1/\varkappa_{\mathrm{D}}$, n — концентрація електронів).

Для подальшого розгляду зручно ввести такі позначення:

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

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

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

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

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

Це рівняння розв'язуємо ітераціями, вважаючи, що

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{\,0,0} = \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{\,0,1} + \overline{\omega_{-1}(-\underline{1}) \omega_{-2}(-\underline{2})}^{\,0,1} + \ldots, \tag{74}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) = \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) + \sum_{1'} \mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1}, -\underline{1}) V_{1'}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{M}}_{-1',2}(\underline{1}, -\underline{1}). \tag{78}$$

Зауважимо, що для однорідної системи (тобто, коли $\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}), \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) \propto \delta_{1+2}$) інтеґральне рівняння (78) перетворюється у звичайне алґебраїчне, розв'язок якого:

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

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

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

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2) = \mathfrak{M}(x|z_1,z_2) + \frac{\beta}{SL^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2} dz$$
$$\times \int\limits_{-L/2}^{+L/2} dz'\,\mathfrak{M}(x|z_1,z)\nu(\mathbf{q}|z-z')\bar{\mathfrak{M}}(x|z',z_2), \tag{80}$$

де введено такі позначення:

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2) = \sum_{k_1,k_2} \exp\left(ik_1z_1+ik_2z_2\right)$$
$$\times\,\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x), \tag{81}$$

$$\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x) = \frac{1}{L^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2} dz_1$$
$$\times \int\limits_{-L/2}^{+L/2} dz_2 \exp\left(-ik_1z_1-ik_2z_2\right)\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2). \tag{82}$$

При моделюванні поверхневого потенціялу потенціяльним бар'єром та при $\nu\to 0$ інтеґральне рівняння другого порядку (80) перетворюється в інтеґральне рівняння вже першого порядку (в межах інтеґрала зроблено граничний перехід $L\to\infty$):

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

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:

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

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

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 - (\varkappa^2+\Delta\varkappa)\theta(-z_1) + \Delta\varkappa\,\theta(z_1)\right]\bar{g}(\mathbf{q}|z_1,z_2) + \frac{(\varkappa^2+\Delta\varkappa)^2}{4\pi e^2}\theta(-z_1)\int\limits_{-\infty}^{0} dz\,g(\mathbf{q}|z_1,z)\bar{g}(\mathbf{q}|z,z_2)$$
$$+\frac{\Delta\varkappa^2}{4\pi e^2}\theta(z_1)\int\limits_{0}^{\infty} dz\,g(\mathbf{q}|z_1,z)\bar{g}(\mathbf{q}|z,z_2) = -4\pi e^2\delta(z_1-z_2), \tag{85}$$

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

Це інтеґро-диференціяльне рівняння, згідно з [10], можна звести до диференціяльного, розв'язком якого є:

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

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1\geqslant 0, z_2\geqslant 0) = \frac{\pi e^2}{q}\left[\mathrm{e}^{-q|z_1-z_2|} - \mathrm{e}^{-q(z_1+z_2)}\right] + \frac{\pi e^2}{\bar{Q}_2}\left[\mathrm{e}^{-\bar{Q}_2|z_1-z_2|} + \mathrm{e}^{-\bar{Q}_2(z_1+z_2)}\right]$$
$$-\frac{2\pi e^2}{\bar{Q}_2}\frac{\bar{Q}_1-\bar{Q}_2}{\bar{Q}_1+\bar{Q}_2}\mathrm{e}^{-\bar{Q}_2(z_1+z_2)}, \tag{87}$$

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \geqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} \mathrm{e}^{\bar{Q}_1 z_2 - \bar{Q}_2 z_1}, \qquad (88)$$

$$\bar{g}(\mathbf{q}|z_1 \leqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{\bar{Q}_1 + \bar{Q}_2} \mathrm{e}^{\bar{Q}_1 z_1 - \bar{Q}_2 z_2}, \qquad (89)$$

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 $\mathfrak{M}(x|z_1, z_2)$ 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 потенціяльну енерґію взаємодії при низьких температурах двох зарядів e_1 та e_2, які знаходяться у вакуумі на однаковій віддалі $z_1 = z_2 = z$ від поверхні металу. Оскільки в праці [18] проаналізовано нескінченно високий потенціяльний бар'єр, то розберемо випадок $s \to \infty$. Потенціяльна енерґія взаємодії двох зарядів

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = \frac{e_1 e_2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}} \bar{g}(\mathbf{q}|z, z)/e^2, \qquad (90)$$

де

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

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

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

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

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = e_1 e_2 \int_0^{+\infty} dq \left(1 - \mathrm{e}^{-2qz} + \frac{2q}{\sqrt{2}\,\varkappa_{\mathrm{TF}}} \mathrm{e}^{-2qz}\right) J_0(q r_{||}), \qquad (93)$$

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

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

то

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) = e_1 e_2 \left(\frac{1}{r_{||}} - \frac{1}{\sqrt{r_{||}^2 + 4z^2}} + \frac{4}{\sqrt{2}\,\varkappa_{\mathrm{TF}}} \frac{z}{(r_{||}^2 + 4z^2)^{3/2}}\right), \qquad (95)$$

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:

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||}, z) \cong \frac{2 e_1 e_2}{r_{||}^3} z^2, \qquad (96)$$

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

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

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

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

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 $\varkappa_{\mathrm{TF}} z \gg 1$, отримуємо:

$$\bar{W}_1(z) \cong -\frac{e^2}{4z}\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}\,\varkappa_{\mathrm{TF}} z}\right), \qquad (98)$$

де перший доданок відповідає класичним силам зображення.

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

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

де $\gamma = 0.577215$ — постійна Ейлера.

Величина $\bar{W}_1(0) = \frac{e^2}{2}\sqrt{2}\,\varkappa_{\mathrm{TF}}$ скінченна і відповідає обмінно-кореляційній частині енерґії взаємодії заряду e із напівобмеженим металом [28]. Таким чином, вираз (97) містить інформацію як про сили зображення на великих віддалях 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 потенціялу $g(\mathbf{q}|z_1, z_2)$ (62) при $s \to \infty$ [18]. Відмінність полягає в заміні величини $\sqrt{2}\,\varkappa_{\mathrm{TF}}$ та $\varkappa_{\mathrm{TF}}$. Обмінно-кореляційна частина енерґії взаємодії заряду e з напівобмеженим металом, яка була розрахована з урахуванням перенормування кумулянта другого порядку, виявляється у $\sqrt{2}$ рази більшою за аналогічну величину без урахування перенормування:

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

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

ВИСНОВКИ

Методом функціонального інтеґрування отримано вираз для термодинамічного потенціялу Ω системи взаємодіючих електронів з плоскою поверхнею розділу. Показано, що для розрахунку Ω достатньо знати ефективний потенціял парної взаємодії при наявності поверхні розділу. Отримано інтеґральне рівняння для ефективного потенціялу 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 потенціялу та показано, що запропонований підхід коректного врахування кулонівських кореляцій приводить до зростання обмінно-кореляційної частини енерґії 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. Головко, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Киев, 1980).

[6] И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудавский, Теор. мат. физ. **49**, 234 (1981).

[7] И. Р. Юхновский, П. П. Кostробий, препринт ИТФ–80–79Р, Киев, 1980.

[8] M. Vavrukh, V. Solovyan, N. Vavrukh, Phys. Status Solidi B **171**, 361 (1993).

[9] Р. Беллман, *Введение в теорию матриц* (Наука, Москва, 1969).

[10] П. П. Костробій, Б. М. Маркович, препринт НАН України ICMP–02–02U, Львів, 2002.

[11] Ваврух 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. Головко, И. И. Курыляк, препринт АН УССР ИТФ–77–97Р, Киев, 1977.

[14] И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, 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. Пизио, препринт АН УССР ИТФ–87–7Р, Киев, 1987.
[24] Г. М. Фихтенгольц, *Курс диференциального 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.