

СТАТИСТИЧНА ТЕОРІЯ ПРОСТОРОВО-ОБМЕЖЕНИХ СИСТЕМ ЗАРЯДЖЕНИХ ФЕРМІ-ЧАСТИНОК: II. ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ

П. П. Костробій, Б. М. Маркович

Національний університет "Львівська політехніка", кафедра прикладної математики
вул. С. Бандери, 12, Львів 79013

(Отримано 7 червня 2002 р.; в остаточному вигляді — 20 листопада 2002 р.)

Для просторово-обмежених систем отримано загальний вираз для s -частинкової функції розподілу електронів. Проаналізовано унарну та бінарну функції розподілу електронів напівобмеженого металу (йонна підсистема моделюється однорідним фоном) при моделюванні поверхневого потенціалу потенціальним бар'єром.

Ключові слова: функція розподілу, поверхня розділу.

PACS number(s): 71.45.Gm

ВСТУП

Термодинамічні та структурні функції розподілу частинок є ключовими в дослідженні просторово-обмежених систем, до яких належить поверхня металу при взаємодії з газами, електролітами. У поверхневих явищах адсорбції, десорбції, дифузії таких систем одну з головних ролей відіграє електронна структура поверхні металу, яку можна вивчати як експериментальними методами (скануючі тунельна спектроскопія та мікроскопія, польова йонна мікроскопія та їхні модифікації [1–4]), так і методами комп'ютерного моделювання Монте-Карло [5]. Для вивчення механізмів адсорбції, десорбції, дифузії атомів, молекул та інших поверхневих явищ важливі теоретичні дослідження термодинамічних функцій, структурних функцій розподілу частинок з урахуванням специфіки взаємодії між частинками системи.

У цій статті, що є продовженням [6], на основі методу функціонального інтегрування розглянуто задачу розрахунку функцій розподілу електронів для моделі просторово-обмеженої системи, яка складається з електронів та однорідного додатного фону з плоскою поверхнею розділу. Для просторово-обмежених систем отримано загальний вираз для s -частинкової функції розподілу. Проведено чисельні розрахунки унарної та бінарної функцій розподілу

для моделювання поверхневого потенціалу потенціальними бар'єрами; результати розрахунків порівняно з результатами, отриманими за допомогою методів функціонала густини (у наближенні локальної густини) [7,8] та Монте-Карло [9]. Досліджено вплив потенціального бар'єра на форму бінарної функції розподілу електронів.

У цій праці використано позначення, які були введені в нашій попередній праці [6].

I. ЗАГАЛЬНИЙ ВИРАЗ ДЛЯ s -ЧАСТИНКОВОЇ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ

Визначимо s -частинкову функцію розподілу $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ згідно з означенням за Боголюбовим [10]:

$$\frac{F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} = \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \exp[-\beta(H - \mu N)]}{\text{Sp} \exp[-\beta(H - \mu N)]} \quad (1.1)$$

де V — об'єм розгляданої системи, \mathbf{r}_i — радіус-вектор i -ої частинки, H — гамільтоніан системи, N — оператор кількості частинок, μ — хемічний потенціал.

Операція $\text{Sp}_{1, \dots, s}$ для довільного оператора $A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ означає таке:

$$\text{Sp}_{1, \dots, s}\{A\} = \int d\mathbf{r}_{s+1} \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1.2)$$

де $\{\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)\}$ — функції довільного повного набору.

Статистичний оператор $\exp[-\beta(H - \mu N)]$ можна записати так:

$$\exp[-\beta(H - \mu N)] = \exp[-\beta H'_0] S(\beta) \exp\left(\frac{\beta}{2S} N \sum_{\mathbf{q}} \nu(\mathbf{q}|0)\right), \quad (1.3)$$

де S — площа поверхні розділу,

$$H'_0 = H_0 - \mu N, \quad H_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$$

— гамільтоніян незваємодіючої системи, $\hbar \mathbf{p}$ — імпульс частинки в паралельній до поверхні розділу площині, α — квантове число, яке відповідає за нормальний до площини розділу рух частинки (по осі Z);

$$S(\beta) = T \exp \left[-\frac{1}{2SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\beta') \right], \quad (1.4)$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = e^{\beta' H'_0} \rho_k(\mathbf{q}) e^{-\beta' H'_0}, \quad (1.5)$$

змішане фур'є-зображення локальної густини електронів [6]:

$$\rho_k(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \alpha'} \langle \alpha | e^{-i\mathbf{k}z} | \alpha' \rangle a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (1.6)$$

де

$$\langle \alpha | \cdots | \alpha' \rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} dz \varphi_\alpha^*(z) \cdots \varphi_{\alpha'}(z), \quad (1.7)$$

$\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$, $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $k = \frac{2\pi}{L} p$, $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Зробимо наступний ланцюжок тотожних перетворень виразу (1.1)

$$\begin{aligned} \frac{F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} &= \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)}{\text{Sp} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)} \\ &= \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)} \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)}{\text{Sp}_{1, \dots, s} \exp[-\beta H'_0]} \\ &= \frac{F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} \frac{\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)}}{\langle S(\beta) \rangle_0}, \end{aligned}$$

де введено таке позначення:

$$\frac{F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} = \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (1.8)$$

$F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ — s -частинкова електронна функція розподілу ідеальної системи (тобто без урахування кулонівської взаємодії між електронами),

$$\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)} = \frac{\text{Sp}_{1, \dots, s} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)}{\text{Sp}_{1, \dots, s} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (1.9)$$

$$\langle S(\beta) \rangle_0 = \frac{\text{Sp} \left(\exp[-\beta H'_0] S(\beta) \right)}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}. \quad (1.10)$$

Згідно з працею [6] маємо:

$$\begin{aligned} \langle S(\beta) \rangle_0 &= \prod'_{\mathbf{q}} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \\ &\times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum'_{x,k} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \\ &\times \exp \left[\sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum'_{x_1, \dots, x_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n) \omega_{k_1}(x_1) \dots \omega_{k_n}(x_n) \right], \end{aligned} \quad (1.11)$$

де $\nu_k(\mathbf{q})$ — фур'є-образ кулонівського потенціалу, $\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n)$ — незвідне середнє, $x = (\mathbf{q}, \nu)$, ν — бозівська частота, штрих біля суми означає відсутність доданків із $\mathbf{q} = 0$.

Аналогічно для $\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)}$ (1.9) знаходимо, що

$$\begin{aligned} \langle S(\beta) \rangle_0^{(s)} &= \prod'_{\mathbf{q}} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \\ &\times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum'_{x,k} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \\ &\times \exp \left[\sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum'_{x_1, \dots, x_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(s)}(x_1, \dots, x_n) \omega_{k_1}(x_1) \dots \omega_{k_n}(x_n) \right], \end{aligned} \quad (1.12)$$

де $\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(s)}(x_1, \dots, x_n) = i^n \langle T \rho_{k_1}(x_1) \dots \rho_{k_n}(x_n) \rangle_{0,c}^{(s)}$ — незвідне середнє в сенсі усереднення згідно з (1.9).

Для розрахунку інтегралів у виразах (1.11) та (1.12) обмежимося гауссівським наближенням, замінивши, як і в роботі [6], величину $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}(x, -x)$ на $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_c$. Відмінність між величинами \mathfrak{M} та $\bar{\mathfrak{M}}$ полягає у способі усереднення: усереднення в \mathfrak{M} відбувається по всій системі, а не по ідеальній, як у $\bar{\mathfrak{M}}$.

Для подальшого розгляду зручно ввести таку величину:

$$\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0^{(s)} - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle, \quad (1.13)$$

тоді $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x)$ можна записати так:

$$\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) + \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) - \mathfrak{M}_{k_1}^{(s)}(x) \mathfrak{M}_{k_2}^{(s)}(-x). \quad (1.14)$$

Ураховуючи це, отримуємо для s -частинкової електронної функції розподілу такий вираз:

$$\begin{aligned} F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) &= C F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \\ &\times \left\langle \exp \left[\frac{1}{2} \sum'_{x, k_1, k_2} \left(\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) - \mathfrak{M}_{k_1}^{(s)}(x) \mathfrak{M}_{k_2}^{(s)}(-x) \right) \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right] \right\rangle \end{aligned}$$

$$+ \left. \sum_{x,k} ' \mathfrak{M}_k^{(s)}(x) \omega_k(x) \right\rangle_g, \quad (1.15)$$

де введено таке позначення:

$$\langle \dots \rangle_g = \frac{\int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{x,k_1,k_2} ' \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1,k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right] \dots}{\int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{x,k_1,k_2} ' \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1,k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right]}, \quad (1.16)$$

$g(x)$ — ефективний потенціал, введений згідно з працею [6], C — константа, яка визначається з умови нормування

$$\frac{1}{V^s} \int_V d\mathbf{r}_1 \dots \int_V d\mathbf{r}_s F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = 1. \quad (1.17)$$

Розклавши \exp у виразі (1.15) у ряд та виконавши почленно усереднення згідно з (1.16), після термодинамічного переходу отримаємо ряд, який збирається в \exp [12]:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = C F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \exp \left[\frac{\beta}{2S} \sum_x ' \sum_{k_1,k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1,k_2}^{(s)}(x, -x) g_{k_1,k_2}(x, -x) \right]. \quad (1.18)$$

II. РОЗРАХУНОК УНАРНОЇ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ

Для унарної функції розподілу ($s = 1$) із (1.18) одержуємо:

$$F_1(\mathbf{r}_1) = C F_1^0(\mathbf{r}_1) \exp \left[\frac{\beta}{2S} \sum_x ' \sum_{k_1,k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1,k_2}^{(1)}(x, -x) g_{k_1,k_2}(x) \right]. \quad (2.19)$$

Для подальшого аналізу потрібно розрахувати унарну функцію розподілу ідеальної системи $F_1^0(\mathbf{r}_1)$ та величину $\Delta \mathfrak{M}_{k_1,k_2}^{(1)}(x, -x)$; розглядів ефективних потенціалів була присвячена праця [6].

A. Розрахунок унарної функції розподілу ідеальної системи електронів

Згідно з (1.8), коли $s = 1$, маємо:

$$\begin{aligned} \frac{F_1^0(\mathbf{r}_1)}{V} &= \frac{\text{Sp}_1 \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \\ &= \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \exp[-\beta H'_0] \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \frac{1}{N} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}'_1 \dots \int d\mathbf{r}'_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N) \exp[-\beta H'_0] \end{aligned}$$

$$\times \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N). \quad (2.20)$$

Перейшовши у представлення вторинного квантування, отримуємо:

$$\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) = \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1) a_{a_2}^\dagger a_{a_1}, \quad (2.21)$$

тоді

$$\frac{F_1^0(\mathbf{r}_1)}{V} = \frac{1}{N} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1) \frac{\text{Sp}(\exp[-\beta H'_0] a_{a_2}^\dagger a_{a_1})}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{1}{N} \sum_a |\Psi_a(\mathbf{r}_1)|^2 n_a, \quad (2.22)$$

де $\Psi_a(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{S} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_{\parallel}) \varphi_\alpha(z)$ — хвильова функція електрона при наявності поверхні розділу, \mathbf{r}_{\parallel} — радіус-вектор електрона у площині, яка паралельна до поверхні розділу, z — нормальна координата електрона, $a = (\mathbf{p}, \alpha)$,

$$n_a = \frac{1}{\exp[\beta(E_a - \mu)] + 1} \quad (2.23)$$

— функція розподілу Фермі-Дірака.

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

$$V(z) = W\theta(z). \quad (2.24)$$

Власні функції та власні значення рівняння Шредингера з цим потенціалом є такими:

$$\varphi_\alpha(z) = C_\alpha \left[-\sin(\alpha z - \gamma_\alpha) \theta(-z) + \frac{\alpha}{\tilde{s}} \exp(-\varkappa_\alpha z) \theta(z) \right], \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad (2.25)$$

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:

$$\frac{\alpha L}{2} + \arcsin \frac{\alpha}{\tilde{s}} = l\pi, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (2.26)$$

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

$$\int_{-L/2}^{+\infty} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 = 1, \quad (2.27)$$

і вона є такою:

$$C_\alpha = \frac{2}{\sqrt{L + \frac{2}{\varkappa_\alpha}}}, \quad (2.28)$$

У всіх реальних задачах висота потенціального бар'єра є більшою за рівень Фермі, тобто $W > \mu$. Тоді для уварної функції ідеальної системи одержуємо:

$$F_1^0(z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{8}{n} \int_0^{\sqrt{2m\mu}/\hbar} d\alpha \left[\sin^2(\alpha z - \gamma_\alpha) \theta(-z) + \frac{\alpha^2}{s^2} \exp(-2\kappa_\alpha z) \theta(z) \right] \left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2 \right), \quad (2.29)$$

де $n = N/V$ — концентрація електронів.

Коли потенціальний бар'єр нескінченно високий ($W \rightarrow \infty$), то отримуємо такий вираз для унарної функції розподілу ідеальної системи (див., наприклад, [11]):

$$F_1^0(z) = \left[1 - \frac{3}{8} \left(\frac{z_0}{z} \right)^3 \sin \frac{2z}{z_0} + \frac{3}{4} \left(\frac{z_0}{z} \right)^2 \cos \frac{2z}{z_0} \right] \theta(-z), \quad (2.30)$$

де $z_0 = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} a_B r_s$, a_B — радіус Бора, r_s — параметр Бракнера.

В. Розрахунок $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x)$

Тут і надалі будемо розраховувати величину $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x)$ за такою формулою:

$$\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0^{(s)} - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0, \quad (2.31)$$

тобто, на відміну від (1.13), в останньому доданку розглядаємо усереднення за ідеальною системою.

Згідно з означенням, усереднення (1.9) для довільного оператора A :

$$\langle A \rangle_0^{(1)} = \frac{\text{Sp}_1 \left(\exp[-\beta H'_0] A \right)}{\text{Sp}_1 \exp[-\beta H'_0]} = \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0] \text{Sp}_1 \left(\exp[-\beta H'_0] A \right)}{\text{Sp}_1 \exp[-\beta H'_0]}, \quad (2.32)$$

скориставшись означенням унарної функції розподілу ідеальної системи (2.20), отримуємо:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_0^{(1)} &= \frac{V}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &\times \exp[-\beta H'_0] A \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{V}{N} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \langle A a_{a_1}^\dagger a_{a_2} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Для неоднорідності системи вздовж осі z вираз (2.33) можна записати так:

$$\langle A \rangle_0^{(1)} = \frac{V}{SN} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \exp[i(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) r_{||1}] \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \langle A a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) \rangle_0. \quad (2.34)$$

Якщо за оператор A взяти $T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x)$, то, згідно з (2.31), одержуємо:

$$\begin{aligned} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) &= \frac{i^2 V}{SN} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \alpha_1 | \exp(-k_1 z) | \alpha' \rangle \langle \alpha | \exp(-k_2 z) | \alpha_1 \rangle \\ &\times \varphi_{\alpha'}^*(z_1) \varphi_\alpha(z_1) \frac{2}{\beta^3} \sum_{\nu_1} G_{\alpha_1}(\mathbf{p} | \nu_1) G_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q} | \nu_1 - \nu) G_\alpha(\mathbf{p} - \mathbf{q} | \nu_1 - \nu), \end{aligned} \quad (2.35)$$

де $G_\alpha(\mathbf{p} | \nu_1) = (i\nu_1 + \mu - E_\alpha(\mathbf{p}))^{-1}$ — фур'є-образ одночастинкової функції Гріна, ν_1 — фермівська частота, ν — бозівська.

С. Розрахунок унарної функції розподілу електронів у граничних випадках низьких ($\beta \rightarrow \infty$) та високих ($\beta \rightarrow 0$) температур

Вираз (2.35) необхідно підставити у формулу (2.19) та виконати сумування за бозівською частотою ν . Оскільки явний вираз для $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ є невідомим, то з метою отримання аналітичного виразу для $F_1(\mathbf{r}_1)$ знехтуємо частотною дисперсією ефективного потенціалу [6]. Тоді у формулі (2.19) сумування за бозівською частотою ν стосується лише величини $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x)$ і виконується аналітично. При низьких температурах показник \exp у виразі для унарної функції (2.19) набирає вигляду [12]:

$$\frac{\beta}{2S} \sum'_{x, k_1, k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(x) = \frac{i^2 V}{S^2 N} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \sum'_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \alpha} \sum_{k_1, k_2} |\varphi_\alpha(z_1)|^2 \times \delta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p})) \exp[-i(k_1 + k_2)z_1] g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu = 0), \quad (2.36)$$

Отже, унарна функція розподілу електронів є такою:

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{f_1^0(z_1)}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_1) \right], \quad (2.37)$$

де введено такі позначення:

$$f_1^0(z_1) = \frac{1}{S n} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_\alpha(z_1)|^2 \delta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p})) \equiv \frac{\partial}{\partial \mu} F_1^0(z_1), \quad (2.38)$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_1) = \sum_{k_1, k_2} \exp[-i(k_1 + k_2)z_1] g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu = 0). \quad (2.39)$$

Оскільки екранований потенціал для моделі потенціального бар'єра в ролі поверхневого потенціалу залежить від модуля вектора \mathbf{q} , то

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{f_1^0(z_1)}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q g(q, \nu = 0 | z_1, z_1) \right], \quad (2.40)$$

де виконано перехід від сумування за \mathbf{q} до інтегрування в полярній системі координат.

Аналогічно проводячи розрахунки унарної функції розподілу $F_1(z_1)$ для високих температур ($\beta \rightarrow 0$), отримуємо [12]:

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{\beta}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_1) \right], \quad (2.41)$$

що збігається з відомими виразами, див., наприклад [13].

Розраховуючи $f_1^0(z)$ для потенціального бар'єра скінченної висоти в ролі поверхневого потенціалу, маємо:

$$f_1^0(z) = \frac{1}{S n} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_\alpha(z)|^2 \delta \left(\mu - \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 + \alpha^2) \right) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{8}{n} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\sqrt{2m\mu}/\hbar} d\alpha \left[\sin^2(\alpha z - \gamma_\alpha) \theta(-z) + \left(\frac{\alpha}{s} \right)^2 \exp(-2\kappa_\alpha z) \theta(z) \right].$$

А для нескінченно високого бар'єра одержуємо:

$$f_1^0(z) = 3z_0^2 \frac{m}{\hbar^2} \left[1 - \frac{z_0}{2z} \sin\left(\frac{2z}{z_0}\right) \right] \theta(-z). \quad (2.42)$$

Д. Дані чисельних розрахунків унарної функції розподілу електронів

Ми провели чисельні розрахунки унарної функції розподілу при характерних для металів концентраціях ($r_s = 2 \div 6$), моделюючи поверхневий потенціал різними потенціальними бар'єрами. Так, на рис. 1 наведено результати наших розрахунків у порівнянні із результатами, які отримані за допомогою методу функціонала густини в наближенні локальної густини [7] та методу Монте-Карло [9] для $r_s = 2.66$. Як бачимо з порівняння, наші розрахунки в ділянці біля поверхні ліпше узгоджуються з розрахунками, які одержані методом Монте-Карло.

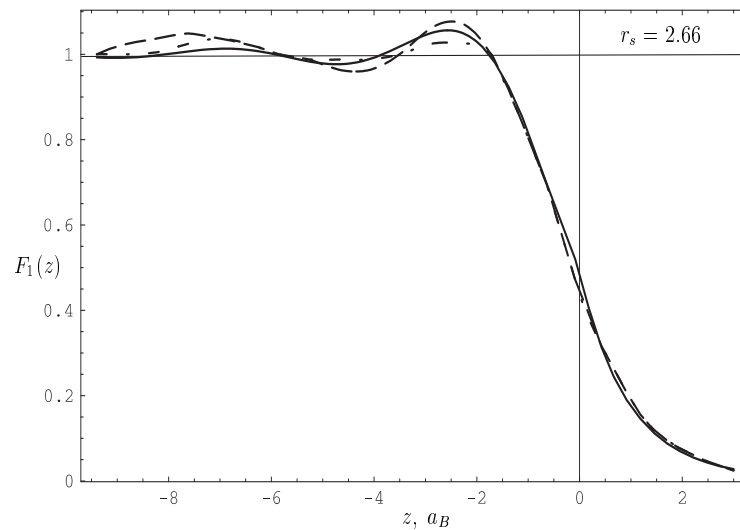


Рис. 1. Електронна унарна функція розподілу для $r_s = 2.66$. Суцільна лінія — наші розрахунки, штрихова — Монте-Карло, штрихпунктирна — метод функціонала густини.

На рис. 2 наведено результати наших розрахунків для моделі нескінченно високого та скінченного ($W = 4.01$ eV) потенціальних бар'єрів у порівнянні з результатами Ленґа [8] для $r_s = 5$. У випадку нескінченно високого бар'єра електронна густина швидше загасає.

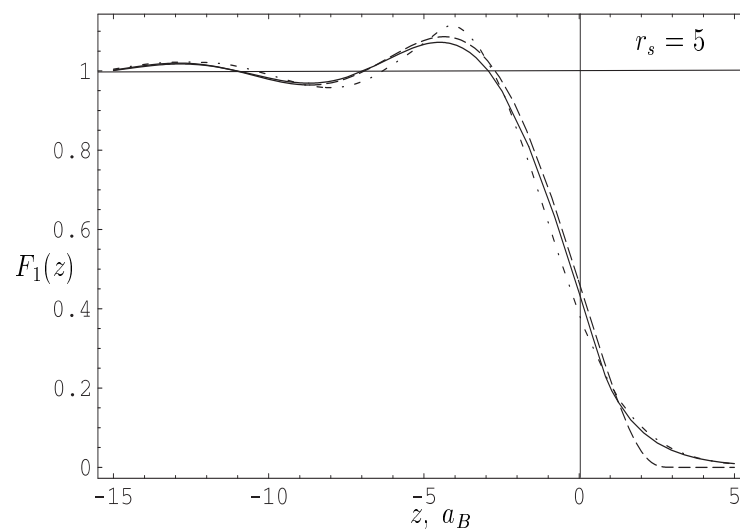


Рис. 2. Електронна унарна функція розподілу для $r_s = 5$. Суцільна лінія — розрахунки для скінченного потенціального бар'єра, штрихова — для нескінченно високого потенціального бар'єра, штрихпунктирна — розрахунки Ленґа.

III. РОЗРАХУНОК БІНАРНОЇ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ

Для бінарної функції розподілу ($s = 2$) із (1.18) отримуємо:

$$F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = CF_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left[\frac{\beta}{2S} \sum_{x, k_1, k_2} ' \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(x) \right], \quad (3.43)$$

для подальшого розгляду необхідно розрахувати бінарну функцію розподілу ідеальної системи електронів $F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ та величину $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x)$.

А. Розрахунок бінарної функції розподілу ідеальної системи електронів

Згідно з (1.8), коли $s = 2$, маємо:

$$\begin{aligned} \frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} &= \frac{\text{Sp}_{1,2} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \\ &= \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_3 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \exp[-\beta H'_0] \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}'_1 \dots \int d\mathbf{r}'_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \exp[-\beta H'_0] \\ &\quad \times \sum_{i \neq j=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_j) \phi_f(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N), \end{aligned} \quad (3.44)$$

перейшовши у зображення вторинного квантування, отримуємо:

$$\sum_{i \neq j=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_j) = \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3}, \quad (3.45)$$

тоді

$$\begin{aligned} \frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \\ &\quad \times \frac{\text{Sp} (\exp[-\beta H'_0] a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3})}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \\ &\quad \times (n_{a_1} n_{a_2} \delta_{a_1, a_3} \delta_{a_2, a_4} - n_{a_1} n_{a_3} \delta_{a_1, a_4} \delta_{a_2, a_3}) \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1} |\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1)|^2 n_{a_1} \sum_{a_2} |\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2)|^2 n_{a_2} \\ &\quad - \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2) n_{a_1} n_{a_2}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

враховуючи, що для великих N : $N(N-1) \approx N^2$, та використавши вираз для унарної функції (2.22), маємо:

$$\frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} = \frac{F_1^0(\mathbf{r}_1) F_1^0(\mathbf{r}_2)}{V^2} - \frac{1}{N^2} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2) n_{a_1} n_{a_2}. \quad (3.47)$$

Для розгляданої задачі бінарна функція розподілу $F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ набирає такого вигляду:

$$F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1)F_1^0(z_2) - \left(\frac{V}{SN}\right)^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1)\varphi_{\alpha_2}(z_1)\varphi_{\alpha_2}^*(z_2)\varphi_{\alpha_1}(z_2) \times \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}) n_{\alpha_1}(\mathbf{p}') n_{\alpha_2}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \quad (3.48)$$

де $\mathbf{r}_{||} = \mathbf{r}_{||1} - \mathbf{r}_{||2}$.

Для низьких температур ($\beta \rightarrow \infty$) сумування за \mathbf{p}' у формулі (3.48) можна виконати аналітично:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}'} \theta(c_1^2 - p'^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2) = \frac{S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p}' \theta(c_1^2 - p'^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2), \quad (3.49)$$

де введено такі позначення:

$$c_1^2 = \frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha_1^2, \quad (c_1^2 \geq 0); \quad (3.50)$$

$$c_2^2 = \frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha_2^2, \quad (c_2^2 \geq 0). \quad (3.51)$$

Із (3.49) легко бачити, що для $p \leq |c_1 - c_2|$:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{S}{(2\pi)^2} [\pi c_1^2 \theta(c_2^2 - c_1^2) + \pi c_2^2 \theta(c_1^2 - c_2^2)], \quad (3.52)$$

а для $p > c_1 + c_2$:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = 0. \quad (3.53)$$

Виконавши інтегрування у виразі (3.49), у випадку, коли $p < c_1 + c_2$ та $p > |c_1 - c_2|$, отримуємо:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{S}{(2\pi)^2} [f(p, \alpha_1, \alpha_2) + f(p, \alpha_2, \alpha_1)], \quad (3.54)$$

де введено таке позначення:

$$f(p, \alpha_1, \alpha_2) = c_1^2 \left(\frac{\pi}{2} + \arcsin \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2}{2pc_1} \right) + \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2}{2p} \sqrt{c_1^2 - \frac{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2)^2}{4p^2}}. \quad (3.55)$$

Тоді для бінарної функції $F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$ (3.48) одержуємо такий вираз:

$$F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1)F_1^0(z_2) - \left(\frac{V}{SN}\right)^2 \frac{S}{(2\pi)^2} 2\pi \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1)\varphi_{\alpha_2}(z_1) \times \varphi_{\alpha_2}^*(z_2)\varphi_{\alpha_1}(z_2) \int_0^\infty dp p J_0(pr_{||}) I(p, \alpha_1, \alpha_2), \quad (3.56)$$

де $J_0(pr_{||})$ — функція Бесселя нульового порядку.

В. Розрахунок $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x)$

Згідно з означенням усереднення (1.9), для довільного оператора A маємо:

$$\langle A \rangle_0^{(2)} = \frac{\text{Sp}_{\mathbf{p}_{1,2}}(\exp[-\beta H'_0] A)}{\text{Sp}_{\mathbf{p}_{1,2}} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp}_{\mathbf{p}_{1,2}} \exp[-\beta H'_0]} \frac{\text{Sp}_{\mathbf{p}_{1,2}}(\exp[-\beta H'_0] A)}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (3.57)$$

скориставшись означенням бінарної функції розподілу ідеальної системи (3.44), отримуємо:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_0^{(2)} &= \frac{V^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_3 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &\times \exp[-\beta H'_0] A \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{V^2}{N(N-1)} \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \\ &\times \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \langle A a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3} \rangle_0 \\ &= \frac{V^2/S^2}{N(N-1)} \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4} \exp(i\mathbf{p}_3 \mathbf{r}_{||1} + i\mathbf{p}_4 \mathbf{r}_{||2}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_3}(z_1) \\ &\times \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_4}(z_2) \langle A a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha_4}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4) a_{\alpha_3}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Якщо в ролі оператора A взяти $T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x)$, то, згідно з (2.31), маємо (врахувавши, що для великих N : $N(N-1) \approx N^2$):

$$\begin{aligned} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) &= \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{i^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1, \alpha'_2} \langle \alpha'_1 | \exp(-ik_1 z) | \alpha_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha'_2 | \exp(-ik_2 z) | \alpha'_1 \rangle \frac{2}{\beta^3} \sum_{\nu_1} G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \nu_1) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) n_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) \\ &\times \left[\varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha'_2}(z_1) |\varphi_{\alpha_2}(z_2)|^2 \right. \\ &\left. - \exp[i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha'_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha'_1}(z_2) \right] \\ &+ \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{i^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1, \alpha'_2} \langle \alpha'_1 | \exp(-ik_1 z) | \alpha_1 \rangle \langle \alpha'_2 | \exp(-ik_2 z) | \alpha_2 \rangle \\ &\times \frac{1}{\beta^4} \sum_{\nu_1, \nu_3} \varphi_{\alpha'_2}(z_1) \varphi_{\alpha'_1}(z_2) \{ \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \varphi_{\alpha_2}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} | \nu_1) \\ &\times G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_2 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q} | \nu_3) - \exp[i\mathbf{p}_2(\mathbf{r}_{||1} - \mathbf{r}_{||2})] \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \nu_1) \\ &\times G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 | \nu_3) \} G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_1 | \nu_3 + \nu) \\ &+ \text{такі ж доданки, в яких зроблено заміну: } z_1 \leftrightarrow z_2, \end{aligned} \quad (3.59)$$

де $\langle a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) \rangle_0 = n_\alpha(\mathbf{p})$ — кількість частинок у стані (\mathbf{p}, α) .

С. Розрахунок бінарної функції розподілу електронів у граничних випадках низьких ($\beta \rightarrow \infty$) та високих ($\beta \rightarrow 0$) температур

Вираз (3.59) потрібно підставити у формулу (3.43) та виконати сумування за бозівською частотою ν . Оскільки явний вираз для $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ є невідомим, то з метою отримання аналітичного виразу для $F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ знехтуємо частотною дисперсією ефективного потенціалу [6]. Тоді у формулі (3.43) сумування за бозівською частотою ν стосується лише величини $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x)$ та виконується аналітично.

Показник \exp у виразі для бінарної функції розподілу (3.43) для низьких температур набирає такого вигляду [12]:

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{2S} \sum'_{x, k_1, k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu = 0) &= -\frac{F_1^0(z_1) f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1) F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{S} \\ &\times \sum'_{\mathbf{q}} \exp [i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_2) \\ &- \frac{f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_1) \\ &- \frac{f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_2, z_2), \end{aligned} \quad (3.60)$$

де введено наступні позначення:

$$\begin{aligned} f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= f_1^0(z_1) F_1^0(z_2) - \frac{1}{n^2 S^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp [i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \\ &\times \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)) \theta(\mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)), \end{aligned} \quad (3.61)$$

$$\begin{aligned} f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= F_1^0(z_1) f_1^0(z_2) - \frac{1}{n^2 S^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp [i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \\ &\times \varphi_{\alpha_1}^*(z_2) \varphi_{\alpha_2}(z_2) \varphi_{\alpha_2}^*(z_1) \varphi_{\alpha_1}(z_1) \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)) \theta(\mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Вираз (3.60) можна ще більш спростити, замінивши в третьому та четвертому доданках функції $F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, $f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ та $f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ їхніми граничними значеннями при $|\mathbf{r}_{||1} - \mathbf{r}_{||2}| \rightarrow \infty$:

$$f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_1^0(z_1) F_1^0(z_2), \quad f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_1^0(z_1) f_1^0(z_2), \quad (3.63)$$

$$F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_1^0(z_1) F_1^0(z_2), \quad (3.64)$$

після цих наближень отримуємо вираз для бінарної функції розподілу електронів ($\beta \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) &= C F_1(z_1) F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)} \\ &\times \exp \left[-\frac{F_1^0(z_1) f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1) F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} \exp (i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_2) \right], \end{aligned} \quad (3.65)$$

де було враховано вираз для унарної функції розподілу (2.37).

Аналогічно провівши розрахунки у випадку високих температур ($\beta \rightarrow 0$), маємо:

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = C F_1(z_1) F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)}$$

$$\times \exp \left[-\frac{F_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \frac{\beta}{S} \sum_{\mathbf{q}}' \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) \right]. \quad (3.66)$$

Оскільки екранований потенціал для моделі потенціального бар'єра як поверхневого потенціалу залежить від модуля вектора \mathbf{q} , то (3.65) та (3.66) відповідно стають такими:

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = CF_1(z_1)F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1)F_1^0(z_2)} \times \exp \left[-\frac{F_1^0(z_1)f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q J_0(qr_{||}) g(q, \nu = 0|z_1, z_2) \right], \quad (3.67)$$

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = CF_1(z_1)F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1)F_1^0(z_2)} \times \exp \left[-\frac{F_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \frac{\beta}{2\pi} \int_0^\infty dq q J_0(qr_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) \right]. \quad (3.68)$$

Із виразу (3.48) видно, що зі зростанням віддалі між двома електронами у площині, яка паралельна до поверхні розділу, бінарна функція розподілу ідеальної системи електронів стає добутком двох унарних функцій ідеальної системи

$$\lim_{r_{||} \rightarrow \infty} F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1)F_1^0(z_2), \quad (3.69)$$

оскільки $J_0(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$; крім того, з аналогічної причини:

$$\lim_{r_{||} \rightarrow \infty} g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = \lim_{r_{||} \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}}' \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) \times g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = 0, \quad (3.70)$$

і отже, бінарна функція розподілу електронів (із урахуванням взаємодії між ними) є добутком унарних:

$$F_2(r_{||} \rightarrow \infty, z_1, z_2) = F_1(z_1)F_1(z_2), \quad (3.71)$$

тобто при достатньо великих $r_{||}$ кореляції між частинками зникають, що відповідає принципові ослаблення кореляцій [10].

Д. Дані чисельних розрахунків бінарної функції розподілу електронів

Тут подано результати наших розрахунків бінарної функції розподілу для моделей скінченного та нескінченно високого потенціального бар'єрів.

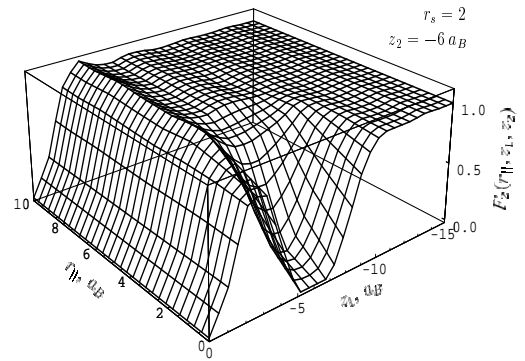


Рис. 3. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -6 a_B)$ при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

На рис. 3 та рис. 5 подано бінарну функцію розподілу електронів у випадку, коли один електрон перебуває в точці ($r_{||} = 0, z_2 = -6 a_B$) та ($r_{||} = 0, z_2 = -4 a_B$) відповідно, а інший — в ділянці ($|r_{||}| \geq 0, -\infty < z_1 < +\infty$); ці розрахунки проведені для нескінченно високого потенціального бар'єра як поверхневого потенціалу при $r_s = 2$.

З рис. 3 та рис. 5 видно, що бінарна функція розподілу електронів має мінімум при $r_{||} \rightarrow 0, z_1 \rightarrow z_2$, що є наслідком кулонівського відштовхування між електронами та неможливості перебування двох електронів в одній точці. Спадання функції $F_2(r_{||}, z_1, z_2)$ у цій ділянці є різкішим, ніж при врахуванні лише обмінних ефектів [14].

З рис. 4 та рис. 6 видно, що при наближенні одного з електронів до потенціального бар'єра (площина $z_1 = 0$) бінарна функція розподілу електронів в ділянці ($r_{||} \rightarrow 0, z_1, z_2 \rightarrow 0$) деформується, в ділянці ($r_{||} \rightarrow 0, z_1, z_2 \rightarrow -\infty$) вона є аксіально симетричною,

оскільки це відповідає однорідній системі (два електрони знаходяться в глибині металу). Тобто електрон, підходячи до поверхні розділу, відчуває не лише ефективне відштовхування з боку інших електронів, а й починає відчувати потенціальний бар'єр. Фізично це означає, що електронів енергетично не вигідно покидати метал.

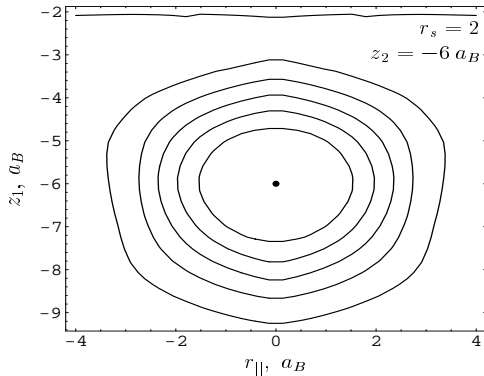


Рис. 4. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -6 a_B)$ на (r_{\parallel}, z_1) -площину при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

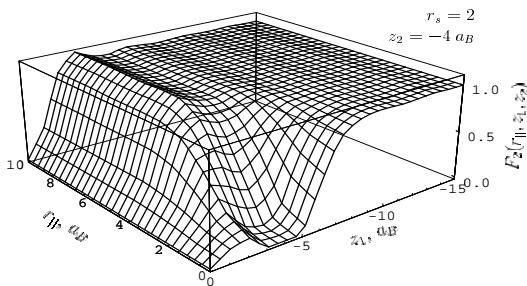


Рис. 5. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

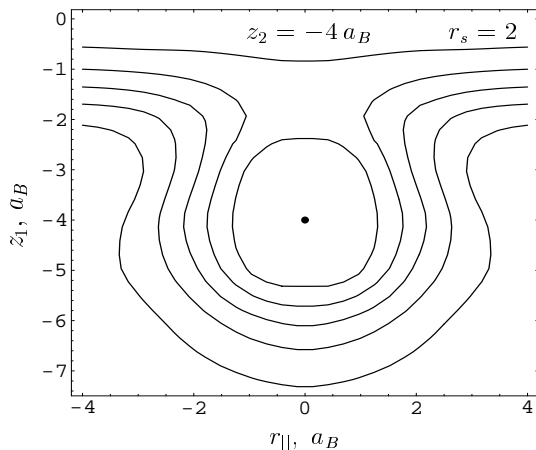


Рис. 6. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ на (r_{\parallel}, z_1) -площину при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

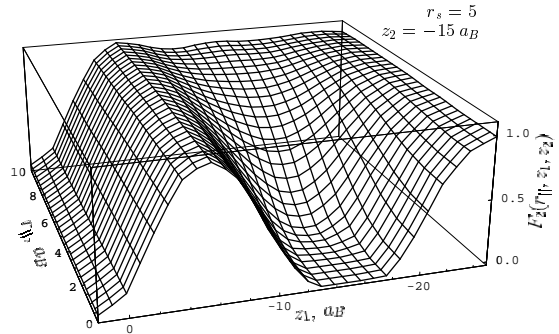


Рис. 7. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -15 a_B)$ при $r_s = 5$ (скінченний потенціальний бар'єр).

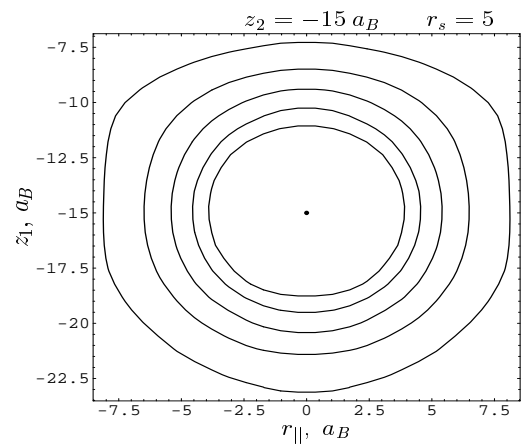


Рис. 8. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -15 a_B)$ на (r_{\parallel}, z_1) -площину при $r_s = 5$ (скінченний потенціальний бар'єр).

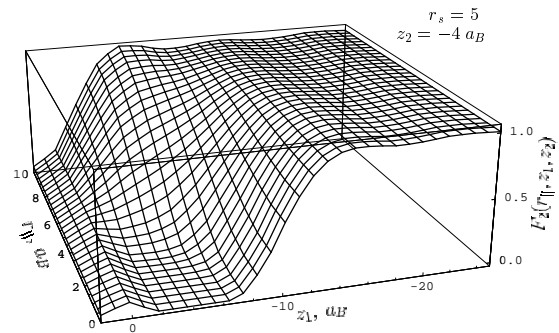


Рис. 9. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{\parallel}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ при $r_s = 5$ (скінченний потенціальний бар'єр).

Аналогічні результати розрахунків наведено на рис. 7-10 для потенціального бар'єра скінченної висоти ($W = 4.01 \text{ eV}$) як поверхневого потенціалу. Скінченність потенціального бар'єра приводить до плавнішого загасання електронної бінарної функції розподілу біля поверхні розділу.

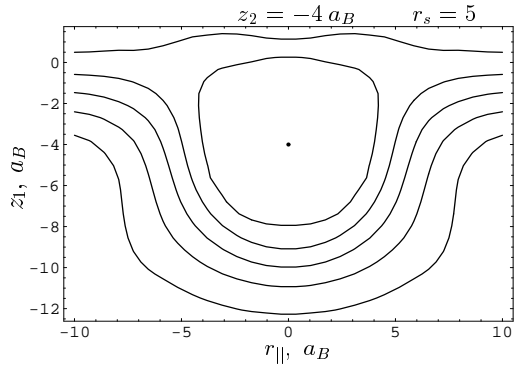


Рис. 10. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -4a_B)$ на $(r_{||}, z_1)$ -площину при $r_s = 5$ (скінченний потенціальний бар'єр).

IV. ВИСНОВКИ

Методом функціонального інтегрування отримано вираз для s -частинкової функції розподілу $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ системи взаємодіючих електронів з плоскою поверхнею розділу. Для розрахунку $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ достатньо знати s -частинкову функцію розподілу $F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ ідеальної системи та ефективний потенціал парної взаємодії при наявності плоскої поверхні розділу.

Досліджено аналітичні вирази для унарної та бінарної функцій розподілу в граничних випадках високих та низьких температур, а також вплив потенціального бар'єра на форму функцій розподілу.

-
- [1] J. C. Dunphy, P. Santet, Phys. Rev. B **47**, 2320 (1993).
 - [2] M. Bode, R. Pascal, M. Getzlaff, R. Wiesendanger, Acta Phys. Polon. A **93**, 273 (1998).
 - [3] A. L. de Lozanne, H. L. Edwards, C. Yuan, J. T. Markert, Acta Phys. Polon. A **33**, 333 (1998).
 - [4] F. Besenbacher, Rep. Prog. Phys. **59**, 1737 (1996).
 - [5] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, G. Rajagopal, Rev. Mod. Phys. **73**, 33 (2001).
 - [6] П. П. Костробій, Б. М. Маркович, Журн. фіз. досл. **7**, 195 (2003).
 - [7] Z. Y. Zhang, D. C. Langreth, J. P. Perdew, Phys. Rev. B **41**, 5674 (1990).
 - [8] N. D. Lang, W. Kohn, Phys. Rev. B **1**, 4555 (1970).
 - [9] P. H. Acioli, D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **54**, 17199 (1996).
 - [10] Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды, т. 2* (Наукова думка, Киев, 1970).
 - [11] M. Nekovee, J. M. Pitarke, preprint cond-mat/0012116 (2000).
 - [12] П. П. Костробій, Б. М. Маркович, препринт НАН України ICMP-02-03U, ІФКС, Львів, (2002).
 - [13] И. Р. Юхновский, И. И. Курыляк, *Электролиты* (Наукова думка, Киев, 1988).
 - [14] I. D. Moore, N. H. March, Ann. Phys. (N. Y.) **97**, 136 (1976).

A STATISTICAL THEORY OF THE SPACEBOUNDED SYSTEMS OF CHARGED FERMION-PARTICLES: II. DISTRIBUTION FUNCTIONS

P. P. Kostrobii, B. M. Markovych

*Department for Applied Mathematics, National University "Lvivska Politekhnikha"
12 Bandera Str., Lviv, UA-79013, Ukraine*

A general expression for the s -particle electron distribution function has been obtained for spacebound systems. The analysis has been made for the one-particle and the two-particle electron distribution functions of a semi-bounded metal (the ion subsystem is modelled by a uniform background) when modelling the surface potential by a potential barrier.