

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-02-03U

П. П. Костробій*, Б. М. Маркович*

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

*Національний університет "Львівська політехніка"
Вул. С. Бандери, 12, Львів 79013

УДК: 530.145

PACS: 71.45.Gm

Статистична теорія просторово-обмежених систем зарядже-
них фермі-частинок: II. Функції розподілу

П. П. Костробій, Б. М. Маркович

Анотація. Для просторово-обмежених систем отримано загальний вираз для s -частинкової функції розподілу електронів. Проведено аналіз унарної та бінарної функцій розподілу електронів напівобмеженого металу (іонна підсистема моделюється однорідним фоном) при моделюванні поверхневого потенціалу потенціальним бар'єром.

Statistical theory of the spacebounded systems of charged fermi-particles: II. Distribution functions

P. P. Kostrobii, B. M. Markovych

Abstract. A general expression for s -particle electron distribution function has been obtained for spacebound systems. Analysis has been made of 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.

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

Вступ

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

У представленій роботі, що є продовженням [6], на основі методу функціонального інтегрування розглядається задача розрахунку функцій розподілу електронів для системи, яка складається із електронів та однорідного додатнього 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 у випадку моделювання поверхневого потенціалу потенціальними бар'єрами; результати розрахунків порівняно із результатами, які були отримані за допомогою методів функціоналу густини (у наближенні локальної густини) [11, 13] та Монте-Карло [12]. Досліджено вплив потенціального бар'єру на форму бінарної функції розподілу електронів.

1. Загальний вираз для s -частинкової функції розподілу

Визначимо s -частинкову функцію розподілу $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ згідно означення по Боголюбову [7]:

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

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

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

наступне:

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

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

Статистичний оператор $\exp[-\beta(H - \mu N)]$ можна представити 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 використано позначення, які були введені в праці [6]:

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

— гамільтоніан незваємодіючої системи, $\hbar \mathbf{p}$ — імпульс частинки у паралельній до поверхні розділу площині, α — квантове число, яке відповідає за нормальний до площини розділу рух частинки;

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

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

змішане фур'є-представлення локальної густини електронів:

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

де

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

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

Тоді можна зробити наступний ланцюжок тотожних перетворень виразу (1.1)

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

$$= \frac{\text{Sp}_{1,\dots,s} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp}(\exp[-\beta H'_0] S(\beta))} \times \frac{\text{Sp}_{1,\dots,s}(\exp[-\beta H'_0] S(\beta))}{\text{Sp}_{1,\dots,s} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} \frac{\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)}}{\langle S(\beta) \rangle_0}, \quad (1.8)$$

де введено наступні позначення:

$$\frac{F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)}{V^s} = \frac{\text{Sp}_{1,\dots,s} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (1.9)$$

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

$$\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)} = \frac{\text{Sp}_{1,\dots,s}(\exp[-\beta H'_0] S(\beta))}{\text{Sp}_{1,\dots,s} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (1.10)$$

$$\langle S(\beta) \rangle_0 = \frac{\text{Sp}(\exp[-\beta H'_0] S(\beta))}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}. \quad (1.11)$$

Згідно праці [6] маємо:

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

де $\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}(x_1, \dots, x_n)$ — незвідне середнє, штрих біля суми означає відсутність доданків із $\mathbf{q} = 0$.

Аналогічно для $\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)}$ (1.10) знаходимо, що

$$\langle S(\beta) \rangle_0^{(s)} = \prod_{\mathbf{q}}' \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2}$$

$$\times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{x,k}' \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \times \exp \left[\sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{x_1, \dots, x_n}' \sum_{k_1, \dots, k_n} \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(s)}(x_1, \dots, x_n) \omega_{k_1}(x_1) \dots \omega_{k_n}(x_n) \right], \quad (1.13)$$

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 (1.10).

Для розрахунку інтегралів у виразах (1.12) та (1.13) обмежимося гаусівським наближенням, замінивши, як і у роботі [6], величину $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}(x, -x)$ на $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_c$, а величини $\mathfrak{M}_k^{(s)}(x)$ та $\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x)$ — на

$$\bar{\mathfrak{M}}_k^{(s)}(x) = i \langle T \rho_k(x) \rangle_c^{(s)} \quad (1.14)$$

та

$$\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_c^{(s)}, \quad (1.15)$$

відповідно. Відмінність між величинами \mathfrak{M} та $\bar{\mathfrak{M}}$ полягає у способі усереднення: усереднення в (1.14) та (1.15) відбувається по усій системі, а не по ідеальній як, наприклад, в (1.11).

Для подальшого розгляду зручно ввести таку величину:

$$\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_c^{(s)} - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle, \quad (1.16)$$

тоді (1.15) можна представити так:

$$\bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = \bar{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(x, -x) + \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) - \bar{\mathfrak{M}}_{k_1}^{(s)}(x) \bar{\mathfrak{M}}_{k_2}^{(s)}(-x), \quad (1.17)$$

тоді отримуємо для s -частинкової електронної функції розподілу наступний вираз:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = C F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{x, k_1, k_2}' \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1, k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right] + \frac{1}{2} \sum_{x, k_1, k_2}' \left(\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) - \bar{\mathfrak{M}}_{k_1}^{(s)}(x) \bar{\mathfrak{M}}_{k_2}^{(s)}(-x) \right) \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \quad (1.18)$$

$$+ \sum'_{x,k} \bar{\mathfrak{m}}_k^{(s)}(x) \omega_k(x) \Big] \Big/ \int (d\omega) \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} \sum'_{x,k_1,k_2} \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1,k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right],$$

де введено ефективний потенціал $g(x)$ згідно праці [6], C — константа, яку можна визначити з умови нормування

$$\frac{1}{V^s} \int_V d\mathbf{r}_1 \dots \int_V d\mathbf{r}_s F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = 1. \quad (1.19)$$

Згідно (1.18) представимо s -частинкову функцію розподілу так:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = C F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \\ \times \left\langle \exp \left[\frac{1}{2} \sum'_{x,k_1,k_2} (\Delta \mathfrak{m}_{k_1,k_2}^{(s)}(x, -x) - \bar{\mathfrak{m}}_{k_1}^{(s)}(x) \bar{\mathfrak{m}}_{k_2}^{(s)}(-x)) \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right. \right. \\ \left. \left. + \sum'_{x,k} \bar{\mathfrak{m}}_k^{(s)}(x) \omega_k(x) \right] \right\rangle_g, \quad (1.20)$$

де введено таке позначення:

$$\langle \dots \rangle_g = \frac{\int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum'_{x,k_1,k_2} \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1,k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right] \dots}{\int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum'_{x,k_1,k_2} \left(\frac{\beta}{S} g(x) \right)_{k_1,k_2}^{-1} \omega_{k_1}(x) \omega_{k_2}(-x) \right]}. \quad (1.21)$$

Для подальшого розгляду зручно ввести наступні скорочені позначення:

$$\begin{aligned} 1 &= k_1, 2 = k_2, \dots; \underline{1} = x_1, \underline{2} = x_2, \dots; \\ \bar{\mathfrak{m}}_{1,2}(\underline{1}, \underline{2}) &= \bar{\mathfrak{m}}_{k_1,k_2}(x_1, x_2), \dots; \\ \delta(\underline{1} + \underline{2}) &= \delta_{x_1+x_2,0}, \dots; \delta_{1+2} = \delta_{k_1+k_2,0}, \dots; \\ G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) &= \frac{\beta}{S} g_{k_1,k_2}(x). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Розкладаючи \exp в формулі (1.20) у ряд, отримуємо:

$$\begin{aligned} F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) &= C F_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \left[1 \right. \\ &+ \frac{1}{2} \sum'_{\underline{1}} \Delta \mathfrak{m}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \rangle_g \\ &- \frac{1}{2} \sum'_{\underline{1}} \sum'_{1,2} \bar{\mathfrak{m}}_1^{(s)}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_2^{(s)}(-\underline{1}) \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \rangle_g \\ &+ \frac{1}{2!} \sum'_{\underline{1}, \underline{2}} \sum'_{1,2} \bar{\mathfrak{m}}_1^{(s)}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_2^{(s)}(\underline{2}) \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(\underline{2}) \rangle_g \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{1}{4} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}} \sum'_{1,2,3,4} \Delta \mathfrak{m}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \Delta \mathfrak{m}_{3,4}^{(s)}(\underline{3}, -\underline{3}) \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(-\underline{3}) \rangle_g \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{1}{4} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}} \sum'_{1,2,3,4} \bar{\mathfrak{m}}_1^{(s)}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_2^{(s)}(-\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_3^{(s)}(\underline{3}) \bar{\mathfrak{m}}_4^{(s)}(-\underline{3}) \\ &\quad \times \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(-\underline{3}) \rangle_g \\ &- \frac{1}{2!} \frac{1}{2} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}} \sum'_{1,2,3,4} \Delta \mathfrak{m}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_3^{(s)}(\underline{3}) \bar{\mathfrak{m}}_4^{(s)}(-\underline{3}) \\ &\quad \times \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(-\underline{3}) \rangle_g \\ &+ \frac{1}{3!} \frac{3}{2} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}, \underline{4}} \sum'_{1,2,3,4} \Delta \mathfrak{m}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_3^{(s)}(\underline{3}) \bar{\mathfrak{m}}_4^{(s)}(\underline{4}) \\ &\quad \times \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(\underline{4}) \rangle_g \\ &- \frac{1}{3!} \frac{3}{2} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}, \underline{4}} \sum'_{1,2,3,4} \bar{\mathfrak{m}}_1^{(s)}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_2^{(s)}(-\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_3^{(s)}(\underline{3}) \bar{\mathfrak{m}}_4^{(s)}(\underline{4}) \\ &\quad \times \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(-\underline{1}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(\underline{4}) \rangle_g \\ &+ \frac{1}{4!} \sum'_{\underline{1}, \underline{2}, \underline{3}, \underline{4}} \sum'_{1,2,3,4} \bar{\mathfrak{m}}_1^{(s)}(\underline{1}) \bar{\mathfrak{m}}_2^{(s)}(\underline{2}) \bar{\mathfrak{m}}_3^{(s)}(\underline{3}) \bar{\mathfrak{m}}_4^{(s)}(\underline{4}) \\ &\quad \times \langle \omega_1(\underline{1}) \omega_2(\underline{2}) \omega_3(\underline{3}) \omega_4(\underline{4}) \rangle_g + \dots \left. \right], \quad (1.23) \end{aligned}$$

оскільки згідно (1.21)

$$\langle \omega_1(\underline{1})\omega_2(\underline{2}) \rangle_g = G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{2}), \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned} & \langle \omega_1(\underline{1})\omega_2(-\underline{1})\omega_3(\underline{3})\omega_4(-\underline{3}) \rangle_g = G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})G_{3,4}(\underline{3}, -\underline{3}) \\ & + G_{1,3}(\underline{1}, -\underline{1})G_{2,4}(-\underline{1}, \underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{3}) + G_{1,4}(\underline{1}, -\underline{1})G_{2,3}(-\underline{1}, \underline{1})\delta(\underline{1} - \underline{3}), \end{aligned} \quad (1.25)$$

то другий та третій доданки не будуть давати вкладу в $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$ (1.23), так як

$$\begin{aligned} & \sum'_{\underline{1}, \underline{3}} \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \Delta \mathfrak{M}_{3,4}^{(s)}(\underline{3}, -\underline{3}) \langle \omega_1(\underline{1})\omega_2(-\underline{1})\omega_3(\underline{3})\omega_4(-\underline{3}) \rangle_g \\ & \propto \int d\mathbf{q}_1 \int d\mathbf{q}_3 \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \Delta \mathfrak{M}_{3,4}^{(s)}(\underline{3}, -\underline{3}) g_{1,2}(\underline{1}) g_{3,4}(\underline{3}) \\ & + \frac{1}{S} \int d\mathbf{q}_1 \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \Delta \mathfrak{M}_{3,4}^{(s)}(-\underline{1}, \underline{1}) g_{1,3}(\underline{1}) g_{2,4}(\underline{1}) \\ & + \frac{1}{S} \int d\mathbf{q}_1 \Delta \mathfrak{M}_{1,4}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \Delta \mathfrak{M}_{2,3}^{(s)}(-\underline{1}, \underline{1}) g_{1,4}(\underline{1}) g_{2,3}(\underline{1}) \end{aligned} \quad (1.26)$$

і після термодинамічного переходу другий та третій доданки пропадають. Аналогічний розгляд для виразу

$$\begin{aligned} & \langle \omega_1(\underline{1})\omega_2(-\underline{1})\omega_3(\underline{3})\omega_4(\underline{4}) \rangle_g = G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})G_{3,4}(\underline{3}, -\underline{3})\delta(\underline{3} + \underline{4}) \\ & + G_{1,3}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{3})G_{2,4}(-\underline{1}, \underline{1})\delta(\underline{1} - \underline{4}) \\ & + G_{1,4}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{4})G_{2,3}(-\underline{1}, \underline{1})\delta(\underline{1} - \underline{3}), \end{aligned} \quad (1.27)$$

показує, що другий та третій доданки не дають вкладу в $F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s)$. Усі доданки, що походять із середнього від чотирьох незалежних польових змінних, дають вклад у s -частинкову функцію розподілу:

$$\begin{aligned} & \langle \omega_1(\underline{1})\omega_2(\underline{2})\omega_3(\underline{3})\omega_4(\underline{4}) \rangle_g = G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{2})G_{3,4}(\underline{3}, -\underline{3})\delta(\underline{3} + \underline{4}) \\ & + G_{1,3}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{3})G_{2,4}(\underline{2}, -\underline{2})\delta(\underline{2} + \underline{4}) \\ & + G_{1,4}(\underline{1}, -\underline{1})\delta(\underline{1} + \underline{4})G_{2,3}(\underline{2}, -\underline{2})\delta(\underline{2} + \underline{3}). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Підставляючи вирази (1.24)-(1.28) в (1.23), отримуємо:

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = CF_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \left[1 \right.$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{2} \sum'_{\underline{1}} \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) + \frac{1}{8} \sum'_{\underline{1}, \underline{3}} \sum_{1,2,3,4} \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) \\ & \times \Delta \mathfrak{M}_{3,4}^{(s)}(\underline{3}, -\underline{3}) G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) G_{3,4}(\underline{3}, -\underline{3}) + \dots \end{aligned} \quad (1.29)$$

тоді збираючи весь ряд (1.29), отримуємо загальний вираз для s -частинкової функції розподілу:

$$\begin{aligned} & F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = CF_s^0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \\ & \times \exp \left[\frac{1}{2} \sum'_{\underline{1}} \sum_{1,2} \Delta \mathfrak{M}_{1,2}^{(s)}(\underline{1}, -\underline{1}) G_{1,2}(\underline{1}, -\underline{1}) \right]. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Зауважимо, що цей вираз є точним, тобто весь нескінченний ряд (1.23) після термодинамічного переходу згортається у вираз для s -частинкової функції розподілу (1.30).

2. Розрахунок унарної функції розподілу

Для унарної функції розподілу ($s = 1$) із (1.30) отримуємо:

$$F_1(\mathbf{r}_1) = CF_1^0(\mathbf{r}_1) \exp \left[\frac{\beta}{2S} \sum'_x \sum_{k_1, k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(x) \right]. \quad (2.1)$$

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

2.1. Розрахунок унарної функції розподілу електронів без врахування кулонівської взаємодії

Згідно (1.9) у випадку $s = 1$ маємо:

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

$$= \frac{1}{N} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}'_1 \dots \int d\mathbf{r}'_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N) \exp[-\beta H'_0] \times \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N). \quad (2.2)$$

Перейшовши у представлення вторинного квантування, отримуємо:

$$\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) = \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1) a_{a_2}^\dagger a_{a_1}, \quad (2.3)$$

тоді

$$\frac{F_1^0(\mathbf{r}_1)}{V} = \frac{1}{N} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1) \frac{\text{Sp}(\exp[-\beta H'_0] a_{a_2}^\dagger a_{a_1})}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{1}{N} \sum_a |\Psi_a(\mathbf{r}_1)|^2 n_a, \quad (2.4)$$

де

$$n_a = \frac{1}{\exp[\beta(E_a - \mu)] + 1} \quad (2.5)$$

— функція розподілу Фермі-Дірака.

2.1.1. Модель нескінченно високого потенціального бар'єру

В якості поверхневого потенціалу розглядаємо нескінченно високу потенціальну стінку (непроникну), яка розташована в точці $z = 0$. Тобто вважаємо, що електрони знаходяться в області $z < 0$ і не можуть проникнути в область $z > 0$.

Хвильові функції для даної моделі є такими:

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(-z), \quad \alpha = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.6)$$

а відповідні енергетичні рівні:

$$\varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}. \quad (2.7)$$

У випадку низьких температур для унарної функції ідеальної системи отримуємо:

$$F_1^0(z) = \frac{V}{SN} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_\alpha(z)|^2 \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - p^2 - \alpha^2\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{8}{n} \int d\mathbf{p} \int d\alpha \sin^2(\alpha z) \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - p^2 - \alpha^2\right) \theta(-z), \quad (2.8)$$

де n — концентрація електронів, здійснено перехід від сумування до інтегрування та враховано дві можливі орієнтації спіну електрона.

Виконавши інтегрування у виразі (2.8), отримуємо (див., наприклад, [8]):

$$F_1^0(z) = \left[1 - \frac{3}{8} \left(\frac{z_0}{z}\right)^3 \sin \frac{2z}{z_0} + \frac{3}{4} \left(\frac{z_0}{z}\right)^2 \cos \frac{2z}{z_0}\right] \theta(-z), \quad (2.9)$$

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

2.1.2. Потенціальний бар'єр скінченної висоти

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

$$V(z) = W \theta(-z). \quad (2.10)$$

Власні функції цього потенціалу є такими:

$$\varphi_\alpha(z) = C_\alpha \left[-\sin(\alpha z - \gamma_\alpha) \theta(-z) + \frac{\alpha}{s} \exp(-\varkappa_\alpha z) \theta(z) \right], \quad (2.11)$$

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

$$\frac{\alpha L}{2} + \arcsin \frac{\alpha}{s} = n\pi, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.12)$$

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

$$\int_{-L/2}^{+\infty} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 = 1, \quad (2.13)$$

і вона є такою:

$$C_\alpha = \frac{2}{\sqrt{L + \frac{2}{\varkappa_\alpha}}}, \quad (2.14)$$

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

$$F_1^0(z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{8}{n} \int_0^{\sqrt{2m\mu}/\hbar} d\alpha \left[\sin^2(\alpha z - \gamma_\alpha) \theta(-z) + \frac{\alpha^2}{s^2} \exp(-2\mathcal{X}_\alpha z) \theta(z) \right] \times \left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2 \right), \quad (2.15)$$

де n — концентрація електронів. Подальший розрахунок необхідно виконувати чисельно.

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

Тут і надалі будемо розраховувати величину $\Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x)$ по такій формулі:

$$\Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(s)}(x, -x) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0^{(s)} - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0, \quad (2.16)$$

тобто на відміну від (1.16), розглядаємо усереднення по ідеальній системі.

Згідно означення усереднення (1.10) для довільного оператора A :

$$\langle A \rangle_0^{(1)} = \frac{\text{Sp}_1 \left(\exp[-\beta H'_0] A \right)}{\text{Sp}_1 \exp[-\beta H'_0]} = \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}{\text{Sp}_1 \exp[-\beta H'_0]} \frac{\text{Sp}_1 \left(\exp[-\beta H'_0] A \right)}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (2.17)$$

скориставшись означенням унарної функції розподілу ідеальної системи (2.2), отримуємо:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_0^{(1)} &= \frac{V}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_2 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &\quad \times \exp[-\beta H'_0] A \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \frac{V}{N F_1^0(z_1)} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \langle A a_{a_1}^\dagger a_{a_2} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

У випадку неоднорідності системи вздовж осі z , вираз (2.18) можна записати так:

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

$$\times \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \langle A a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) \rangle_0. \quad (2.19)$$

Якщо в якості оператора A взяти $T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x)$, то згідно (2.16) маємо:

$$\begin{aligned} \Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) &= i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0^{(1)} - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0 \\ &= \frac{i^2 V}{SN} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \exp[i\nu(\beta_1 - \beta_2)] \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||1}) \\ &\quad \times \varphi_{\alpha'}^*(z_1) \varphi_\alpha(z_1) \langle T \rho_{k_1}(\mathbf{q}|\beta_1) \rho_{k_2}(-\mathbf{q}|\beta_2) a_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{p}') a_\alpha(\mathbf{p}) \rangle_0 \\ &\quad - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x) \rho_{k_2}(-x) \rangle_0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

де в першому доданку здійснено перехід від частотного представлення для величин $\rho_k(x)$ до температурного. Використавши явний вираз для змішаного фур'є-представлення локальної густини, отримуємо:

$$\begin{aligned} \Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) &= \frac{i^2 V}{SN} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \exp[i\nu(\beta_1 - \beta_2)] \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||1}) \sum_{\mathbf{p}'_1, \alpha'_1, \alpha'_1} \sum_{\mathbf{p}'_2, \alpha'_2, \alpha'_2} \langle \alpha_1 | \exp(-k_1 z) | \alpha'_1 \rangle \langle \alpha_2 | \exp(-k_2 z) | \alpha'_2 \rangle \\ &\quad \times \varphi_{\alpha'}^*(z_1) \varphi_\alpha(z_1) \langle T a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1 | \beta_1) a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q} | \beta_1) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2 | \beta_2) \\ &\quad \times a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} | \beta_2) a_{\alpha'}(\mathbf{p} + \mathbf{p}') a_\alpha(\mathbf{p}') \rangle_0, \end{aligned} \quad (2.21)$$

де в середньому $\langle \dots \rangle_0$ можливі такі спарювання (враховуючи, що $\mathbf{q} \neq 0$):

- 1) 1-ий оператор та 4-ий, 2-ий та 5-ий, 3-ій та 6-ий;
- 2) 1-ий оператор та 6-ий, 2-ий та 3-ій, 4-ий та 5-ий.

Враховуючи, що $-\langle T a_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}|\beta_2) \rangle_0 = G_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1 - \beta_2)$ — одностинкова функція Гріна, отримуємо:

$$\begin{aligned} \Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) &= \frac{i^2 V}{SN F_1^0(z_1)} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha, \alpha', \alpha_1} \langle \alpha_1 | \exp(-k_1 z) | \alpha' \rangle \\ &\quad \times \langle \alpha | \exp(-k_2 z) | \alpha_1 \rangle \varphi_{\alpha'}^*(z_1) \varphi_\alpha(z_1) \\ &\quad \times \frac{2}{\beta^3} \sum_{\nu_1} G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu_1) G_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu_1 - \nu) G_\alpha(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu_1 - \nu). \end{aligned} \quad (2.22)$$

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

Вираз (2.22) необхідно підставити у формулу (2.1) та виконати сумування по бозівській частоті ν . Оскільки явний вираз для $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ є невідомим, то з метою отримання аналітичного виразу для $F_1(\mathbf{r}_1)$ візьмемо ефективний потенціал у випадку $\nu = 0$, аналітичні вирази для якого були знайдені у праці [6]. Тоді у формулі (2.1) сумування по бозівській частоті ν стосується лише величини $\Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x)$. При підстановці (2.22) у формулу (2.1) виникає вираз, який ми розглянемо окремо:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta^2} \sum_{\nu, \nu_1} G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu_1) G_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu_1 - \nu) G_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}|\nu_1 - \nu) \\ &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{\nu, \nu_1} \frac{1}{i\nu_1 + \mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} \\ & \times \frac{1}{i(\nu_1 - \nu) + \mu - E_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \frac{1}{i(\nu_1 - \nu) + \mu - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \\ &= \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - \mu)]} \frac{1}{E_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \\ & \times \left[\frac{1}{1 + \exp[\beta(\mu - E_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))]} - \frac{1}{1 + \exp[\beta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))]} \right], \quad (2.23) \end{aligned}$$

де було використано перехід від сумування по бозівській ν та фермієвській ν_1 частотах до контурного інтегралу згідно [9]; та враховано, що $G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu_1) = (i\nu_1 + \mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}))^{-1}$ — фур'є-образ одночастинкової функції Гріна. Вираз (2.23) буде мати різкий максимум у випадку $\alpha \approx \alpha'$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - \mu)]} \frac{\partial}{\partial E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \frac{1}{1 + \exp[\beta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))]} \\ &= \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - \mu)]} \frac{\beta \exp[\beta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))]}{(1 + \exp[\beta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))])^2}. \quad (2.24) \end{aligned}$$

з метою отримання простішого виразу для $\Delta\mathfrak{M}$ покладемо у формулі (2.24) α рівним α_1 та розглянемо малі значення вектора \mathbf{q} , тоді вираз (2.24) набуде такого вигляду (у випадку низьких температур):

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \mu)]}{(1 + \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \mu)])^3} = \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})). \quad (2.25)$$

Тоді показник \exp у виразі для унарної функції (2.1) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} & \frac{\beta}{2S} \sum'_{x, k_1, k_2} \Delta\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(1)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(x) \quad (2.26) \\ &= \frac{i^2 V}{S^2 N} \frac{1}{F_1^0(z_1)} \sum'_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \alpha} |\varphi_{\alpha}(z_1)|^2 \delta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p})) \\ & \times \sum_{k_1, k_2} \exp[-i(k_1 + k_2)z_1] g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}|\nu = 0), \end{aligned}$$

де було використано умову повноти для власних функцій $\varphi_{\alpha}(z)$, і, отже, унарна функція розподілу електронів має такий вигляд:

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{f_1^0(z_1)}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_1) \right], \quad (2.27)$$

де введено такі позначення:

$$f_1^0(z_1) = \frac{1}{S n} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_{\alpha}(z_1)|^2 \delta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p})) \equiv \frac{\partial}{\partial \mu} F_1^0(z_1), \quad (2.28)$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = \sum_{k_1, k_2} \exp[-i(k_1 + k_2)z_1] g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}|\nu = 0). \quad (2.29)$$

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

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{f_1^0(z_1)}{F_1^0(z_1)} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dq q g(q, \nu = 0|z_1, z_1) \right], \quad (2.30)$$

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

Аналогічно розраховуючи унарну функцію розподілу $F_1(z_1)$ у випадку високих температур ($\beta \rightarrow 0$), отримуємо:

$$F_1(z_1) = C F_1^0(z_1) \exp \left[-\frac{\beta}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_1) \right], \quad (2.31)$$

що співпадає з відомими виразами, див. наприклад [10].

2.3.1. Розрахунок $f_1^0(z)$ для нескінченно високого потенціального бар'єру

Розраховуючи $f_1^0(z)$ для моделі нескінченно високого потенціального бар'єру в якості поверхневого потенціалу, отримуємо:

$$\begin{aligned} f_1^0(z) &= \frac{1}{S n} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_\alpha(z)|^2 \delta\left(\mu - \frac{\hbar^2}{2m}(p^2 + \alpha^2)\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{8}{n} \int d\mathbf{p} \int d\alpha \sin^2(\alpha z) \delta\left(\mu - \frac{\hbar^2}{2m}(p^2 + \alpha^2)\right) \\ &= 3z_0^2 \frac{m}{\hbar^2} \left[1 - \frac{z_0}{2z} \sin\left(\frac{2z}{z_0}\right)\right] \theta(-z), \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.3.2. Розрахунок $f_1^0(z)$ для потенціального бар'єру скінченної висоти

Розраховуючи $f_1^0(z)$ для потенціального бар'єру скінченної висоти, отримуємо:

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

подальший розрахунок необхідно виконувати чисельно.

2.4. Дані чисельних розрахунків унарної функції розподілу електронів

Нами проведено чисельні розрахунки унарної функції розподілу при характерних для металів концентраціях ($r_s = 2 \div 6$) у випадку моделювання поверхневого потенціалу різними потенціальними бар'єрами. Так, на рис. 1 приведено результати наших розрахунків у порівнянні із результатами, які отримані за допомогою методу функціоналу густини у наближенні локальної густини [11] та методу Монте-Карло [12] для $r_s = 2.66$. Як бачимо із порівняння, наші розрахунки в області біля поверхні краще узгоджуються із розрахунками, які отримані методом Монте-Карло.

На рис. 2 наведено результати наших розрахунків для моделі нескінченно високого та скінченного потенціальних бар'єрів у порівнянні із результатами Ленга [13] для $r_s = 5$. У випадку нескінченно високого бар'єру електронна густина швидше загасає.

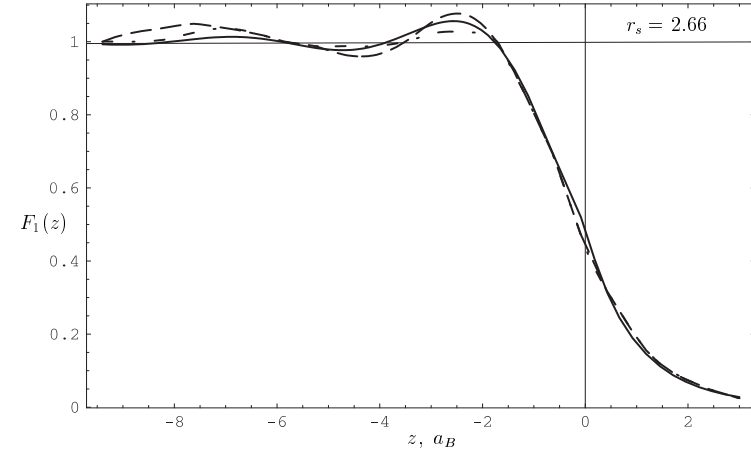


Рис. 1. Електронна унарна функція розподілу у випадку $r_s = 2.66$. Суцільна лінія — наші розрахунки, штрихова — Монте-Карло, штрихпунктирна — метод функціоналу густини.

3. Розрахунок бінарної функції розподілу

Для бінарної функції розподілу ($s = 2$) із (1.30) отримуємо:

$$F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left[\frac{\beta}{2S} \sum'_{x, k_1, k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(x) \right], \quad (3.1)$$

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

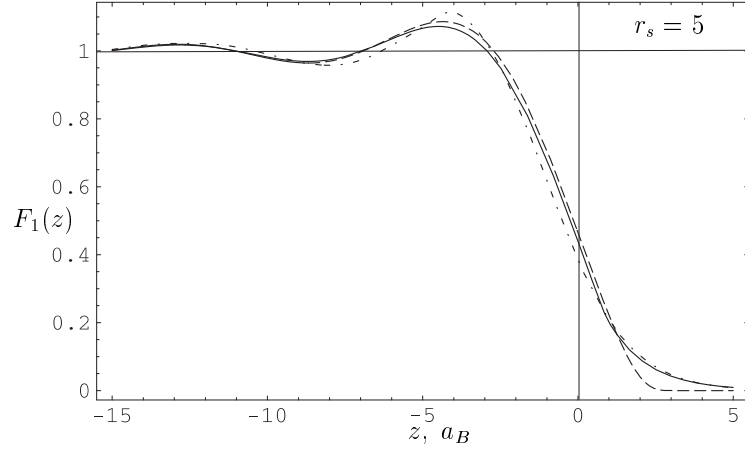


Рис. 2. Електронна унарна функція розподілу у випадку $r_s = 5$. Суцільна лінія — розрахунки для скінченного потенціального бар'єру, штрихова — для нескінченно високого потенціального бар'єру, штрихпунктирна — розрахунки Ленга.

3.1. Розрахунок бінарної функції розподілу ідеальної системи

Згідно (1.9) у випадку $s = 2$ отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} &= \frac{\text{Sp}_{1,2} \exp[-\beta H_0']}{\text{Sp} \exp[-\beta H_0']} = \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H_0']} \\ &\times \int d\mathbf{r}_3 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \exp[-\beta H_0'] \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H_0']} \int d\mathbf{r}'_1 \dots \int d\mathbf{r}'_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N) \exp[-\beta H_0'] \\ &\times \sum_{i \neq j=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_j) \phi_f(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N), \end{aligned} \quad (3.2)$$

перейшовши у представлення вторинного квантування, отримуємо:

$$\sum_{i \neq j=1}^N \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_i) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_j)$$

$$= \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3}, \quad (3.3)$$

тоді

$$\begin{aligned} \frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \\ &\times \frac{\text{Sp}(\exp[-\beta H_0'] a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3})}{\text{Sp} \exp[-\beta H_0']} \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \\ &\times (n_{a_1} n_{a_2} \delta_{a_1, a_3} \delta_{a_2, a_4} - n_{a_1} n_{a_3} \delta_{a_1, a_4} \delta_{a_2, a_3}) \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1} |\Psi_{a_1}(\mathbf{r}_1)|^2 n_{a_1} \sum_{a_2} |\Psi_{a_2}(\mathbf{r}_2)|^2 n_{a_2} \\ &- \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2) n_{a_1} n_{a_2}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

враховуючи, що для великих N : $N(N-1) \approx N^2$, та використавши вираз для унарної функції (2.4), отримуємо:

$$\begin{aligned} \frac{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{V^2} &= \frac{F_1^0(\mathbf{r}_1) F_1^0(\mathbf{r}_2)}{V^2} \\ &- \frac{1}{N^2} \sum_{a_1, a_2} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_1}(\mathbf{r}_2) n_{a_1} n_{a_2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Для розглядуваної нами задачі для бінарної функції $F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ отримуємо:

$$\begin{aligned} F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) &= F_1^0(z_1) F_1^0(z_2) - \left(\frac{V}{SN}\right)^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \\ &\times \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}) n_{\alpha_1}(\mathbf{p}') n_{\alpha_2}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \end{aligned} \quad (3.6)$$

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

У випадку низьких температур ($\beta \rightarrow \infty$) сумування по \mathbf{p}' у формулі (3.6) можна виконати аналітично:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}'} \theta(c_1^2 - p'^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2)$$

$$= \frac{S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p}' \theta(c_1^2 - p'^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}' - \mathbf{p})^2), \quad (3.7)$$

де введено такі позначення:

$$c_1^2 = \frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha_1^2, \quad (c_1^2 \geq 0); \quad (3.8)$$

$$c_2^2 = \frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha_2^2, \quad (c_2^2 \geq 0). \quad (3.9)$$

Із (3.7) легко бачити, що у випадку $p \leq |c_1 - c_2|$:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{S}{(2\pi)^2} [\pi c_1^2 \theta(c_2^2 - c_1^2) + \pi c_2^2 \theta(c_1^2 - c_2^2)], \quad (3.10)$$

а у випадку $p > c_1 + c_2$:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = 0. \quad (3.11)$$

Виконавши інтегрування у виразі (3.7) у випадку, коли $p < c_1 + c_2$ та $p > |c_1 - c_2|$, отримуємо:

$$I(p, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{S}{(2\pi)^2} [f(p, \alpha_1, \alpha_2) + f(p, \alpha_2, \alpha_1)], \quad (3.12)$$

де введено таке позначення:

$$f(p, \alpha_1, \alpha_2) = c_1^2 \left(\frac{\pi}{2} + \arcsin \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2}{2pc_1} \right) + \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2}{2p} \sqrt{c_1^2 - \frac{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - p^2)^2}{4p^2}}. \quad (3.13)$$

Тоді для бінарної функції $F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$ (3.6) отримуємо наступний вираз:

$$F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1)F_1^0(z_2) - \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{S}{(2\pi)^2} 2\pi \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \times \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \int_0^\infty dp p J_0(pr_{||}) I(p, \alpha_1, \alpha_2), \quad (3.14)$$

де $J_0(pr_{||})$ — функція Бесселя нульового порядку. Подальший розрахунок $F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$ для певних моделей поверхневого потенціалу необхідно проводити чисельно.

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

Згідно означення усереднення (1.10) для довільного оператора A маємо:

$$\langle A \rangle_0^{(2)} = \frac{\text{Sp}_{1,2}(\exp[-\beta H'_0] A)}{\text{Sp}_{1,2} \exp[-\beta H'_0]} = \frac{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0] \text{Sp}_{1,2}(\exp[-\beta H'_0] A)}{\text{Sp}_{1,2} \exp[-\beta H'_0] \text{Sp} \exp[-\beta H'_0]}, \quad (3.15)$$

скориставшись означенням бінарної функції розподілу ідеальної системи (3.2), отримуємо:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_0^{(2)} &= \frac{V^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{\text{Sp} \exp[-\beta H'_0]} \int d\mathbf{r}_3 \dots \int d\mathbf{r}_N \sum_f \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &\quad \times \exp[-\beta H'_0] A \phi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= \frac{V^2}{N(N-1)} \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{a_1, \dots, a_4} \Psi_{a_1}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_3}(\mathbf{r}_1) \Psi_{a_2}^*(\mathbf{r}_2) \Psi_{a_4}(\mathbf{r}_2) \\ &\quad \times \langle A a_{a_1}^\dagger a_{a_2}^\dagger a_{a_4} a_{a_3} \rangle_0 = \frac{V^2/S^2}{N(N-1)} \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \\ &\quad \times \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4} \exp(i\mathbf{p}_3 \mathbf{r}_{||1} + i\mathbf{p}_4 \mathbf{r}_{||2}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_3}(z_1) \\ &\quad \times \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_4}(z_2) \langle A a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha_4}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4) a_{\alpha_3}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Якщо в якості оператора A взяти $T\rho_{k_1}(x)\rho_{k_2}(-x)$, то згідно (2.16) отримуємо (врахувавши, що для великих N : $N(N-1) \approx N^2$):

$$\begin{aligned} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) &= i^2 \langle T\rho_{k_1}(x)\rho_{k_2}(-x) \rangle_0^{(2)} - i^2 \langle T\rho_{k_1}(x)\rho_{k_2}(-x) \rangle_0 \\ &= i^2 \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \exp[i\nu(\beta_1 - \beta_2)] \\ &\quad \times \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4} \exp(i\mathbf{p}_3 \mathbf{r}_{||1} + i\mathbf{p}_4 \mathbf{r}_{||2}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_3}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_4}(z_2) \\ &\quad \times \langle T\rho_{k_1}(\mathbf{q}|\beta_1) \rho_{k_2}(-\mathbf{q}|\beta_2) a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha_4}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4) a_{\alpha_3}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3) \rangle_0 \\ &\quad - i^2 \langle T\rho_{k_1}(x)\rho_{k_2}(-x) \rangle_0, \end{aligned} \quad (3.17)$$

де в першому доданку здійснено перехід від частотного представлення для величин $\rho_k(x)$ до температурного. Використавши явний вираз для змішаного фур'є-представлення локальної густини, отримуємо:

$$\begin{aligned} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) &= i^2 \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{1}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta d\beta_2 \exp[i\nu(\beta_1 - \beta_2)] \\ &\times \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_4} \sum_{\mathbf{p}'_1, \alpha'_1, \alpha''_1} \sum_{\mathbf{p}'_2, \alpha'_2, \alpha''_2} \exp(i\mathbf{p}_3 \mathbf{r}_{||1} + i\mathbf{p}_4 \mathbf{r}_{||2}) \langle \alpha'_1 | \exp(-ik_1 z) | \alpha_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha'_2 | \exp(-ik_2 z) | \alpha_2 \rangle \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_3}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_4}(z_2) \\ &\times \left\langle T a_{\alpha'_1}^\dagger(\mathbf{p}'_1 | \beta_1) a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{q} | \beta_1) a_{\alpha'_2}^\dagger(\mathbf{p}'_2 | \beta_2) a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}'_2 + \mathbf{q} | \beta_2) \right. \\ &\left. \times a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha_4}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4) a_{\alpha_3}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3) \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

де в середньому $\langle \dots \rangle_0$ можливі такі спарювання (враховуючи, що $\mathbf{q} \neq 0$):

- 1) 1-ий оператор та 4-ий, 2-ий та 5-ий, 3-ій та 7-ий, 6-ий та 8-ий;
- 2) 1-ий оператор та 4-ий, 2-ий та 5-ий, 3-ій та 8-ий, 6-ий та 7-ий;
- 3) 1-ий оператор та 4-ий, 2-ий та 6-ий, 3-ій та 7-ий, 5-ий та 8-ий;
- 4) 1-ий оператор та 4-ий, 2-ий та 6-ий, 3-ій та 8-ий, 5-ий та 7-ий;
- 5) 1-ий оператор та 7-ий, 2-ий та 5-ий, 3-ій та 8-ий, 4-ий та 6-ий;
- 6) 1-ий оператор та 7-ий, 2-ий та 6-ий, 3-ій та 8-ий, 4-ий та 5-ий;
- 7) 1-ий оператор та 7-ий, 2-ий та 3-ій, 4-ий та 5-ий, 6-ий та 8-ий;
- 8) 1-ий оператор та 7-ий, 2-ий та 3-ій, 4-ий та 6-ий, 5-ий та 8-ий;
- 9) 1-ий оператор та 8-ий, 2-ий та 3-ій, 4-ий та 5-ий, 6-ий та 7-ий;
- 10) 1-ий оператор та 8-ий, 2-ий та 3-ій, 4-ий та 6-ий, 5-ий та 7-ий;
- 11) 1-ий оператор та 8-ий, 2-ий та 5-ий, 3-ій та 7-ий, 4-ий та 6-ий;
- 12) 1-ий оператор та 8-ий, 2-ий та 6-ий, 3-ій та 7-ий, 4-ий та 5-ий.

Враховуючи, що $\langle a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) \rangle_0 = n_\alpha(\mathbf{p})$ та зібравши подібні доданки в (3.18), отримуємо:

$$\begin{aligned} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) &= \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{i^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1, \alpha'_2} \langle \alpha'_1 | \exp(-ik_1 z) | \alpha_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha'_2 | \exp(-ik_2 z) | \alpha_2 \rangle \frac{2}{\beta^3} \sum_{\nu_1} G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \nu_1) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) \\ &\times G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) n_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) \left[\varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha'_2}(z_1) | \varphi_{\alpha_2}(z_2) \right]^2 \\ &- \exp[i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha'_2}(z_2) \\ &+ \left(\frac{V}{SN} \right)^2 \frac{i^2}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1, \alpha'_2} \langle \alpha'_1 | \exp(-ik_1 z) | \alpha_1 \rangle \\ &\times \langle \alpha'_2 | \exp(-ik_2 z) | \alpha_2 \rangle \frac{1}{\beta^4} \sum_{\nu_1, \nu_3} \varphi_{\alpha'_2}(z_1) \varphi_{\alpha'_1}(z_2) \{ \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \\ &\times \varphi_{\alpha_2}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} | \nu_1) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_2 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q} | \nu_3) \\ &- \exp[i\mathbf{p}_2(\mathbf{r}_{||1} - \mathbf{r}_{||2})] \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \nu_1) \\ &\times G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 | \nu_3) \} G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_1 | \nu_3 + \nu) \\ &+ \text{такі ж доданки, в яких зроблено заміну: } z_1 \leftrightarrow z_2. \end{aligned} \quad (3.19)$$

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

Вираз (3.19) необхідно підставити у формулу (3.1) та виконати сумування по бозівській частоті ν . Оскільки явний вираз для $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ є невідомим, то з метою отримання аналітичного виразу для $F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ візьмемо ефективний потенціал у випадку $\nu = 0$, аналітичні вирази для якого були знайдені у праці [6]. Тоді у формулі (3.1) сумування по бозівській частоті ν стосується лише величини $\Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x)$. При підстановці (3.19) у формулі (3.1) виникають вирази, які ми розглянемо окремо:

$$\frac{1}{\beta^2} \sum_{\nu, \nu_1} G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} | \nu_1) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 | \nu_1 - \nu)$$

$$\cong \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)), \quad (3.20)$$

де для сумування по бозівській ν та фермієвській ν_1 частотах було виконано аналогічно як у формулі (2.23) та зроблено такі ж припущення як і при отриманні виразу (2.25); аналогічно розглядаємо такий вираз:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta^3} \sum_{\nu, \nu_1, \nu_3} G_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}|\nu_1) G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2|\nu_1 - \nu) G_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}|\nu_3) G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\nu_3 + \nu) \\ &= \frac{1}{\beta^3} \sum_{\nu, \nu_1, \nu_3} \frac{1}{i\nu_1 + \mu - E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q})} \frac{1}{i(\nu_1 - \nu) + \mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)} \\ & \quad \times \frac{1}{i\nu_3 + \mu - E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q})} \frac{1}{i(\nu_3 + \nu) + \mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)} \\ &= \frac{1}{E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1) + E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)} \\ & \quad \times \left[\frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}) - \mu)]} - \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) - \mu)]} \right] \\ & \quad \times \left[\frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) - \mu)]} - \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1) - \mu)]} \right]. \quad (3.21) \end{aligned}$$

У випадку низьких температур мають місце співвідношення:

$$E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) \approx E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), \quad E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}) \approx E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2) \quad (3.22)$$

і тоді вираз (3.21) набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2)} \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2) - \mu)]} \\ & \quad \times \frac{\partial}{\partial E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1)} \frac{1}{1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1) - \mu)]} \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{\beta \exp[\beta(E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2) - \mu)]}{(1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2) - \mu)])^2} \frac{\beta \exp[\beta(E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1) - \mu)]}{(1 + \exp[\beta(E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1) - \mu)])^2}, \quad (3.23) \end{aligned}$$

у границі низьких температур цей вираз оцінимо так:

$$-\theta(\mu - E_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_2)) \delta(\mu - E_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_1)). \quad (3.24)$$

Тоді показник ехр у виразі для бінарної функції розподілу (3.1) набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} & \frac{\beta}{2S} \sum'_{x, k_1, k_2} \Delta \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^{(2)}(x, -x) g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}|\nu = 0) \\ &= -\frac{F_1^0(z_1) f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1) F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \\ & \times \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) \\ & \quad - \frac{f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_1) \\ & \quad - \frac{f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)} \frac{1}{S} \sum'_{\mathbf{q}} g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_2, z_2), \quad (3.25) \end{aligned}$$

де використано умову повноти для власних функцій та введено наступні позначення:

$$\begin{aligned} f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= f_1^0(z_1) F_1^0(z_2) - \frac{1}{n^2 S^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp[i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \\ & \quad \times \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)) \theta(\mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)), \quad (3.26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= F_1^0(z_1) f_1^0(z_2) - \frac{1}{n^2 S^2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \exp[i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)(\mathbf{r}_{||2} - \mathbf{r}_{||1})] \\ & \quad \times \varphi_{\alpha_1}^*(z_2) \varphi_{\alpha_2}(z_2) \varphi_{\alpha_2}^*(z_1) \varphi_{\alpha_1}(z_1) \delta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)) \theta(\mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)), \quad (3.27) \end{aligned}$$

Вираз (3.25) 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 $|\mathbf{r}_{||1} - \mathbf{r}_{||2}| \rightarrow \infty$:

$$f_{2,1}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_1^0(z_1) F_1^0(z_2), \quad f_{2,2}^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_1^0(z_1) f_1^0(z_2), \quad (3.28)$$

$$F_2^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_1^0(z_1) F_1^0(z_2), \quad (3.29)$$

після цих наближень отримуємо вираз для бінарної функції розподілу електронів:

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = C F_1(z_1) F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)} \quad (3.30)$$

$$\times \exp \left[- \frac{F_1^0(z_1)f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \right] \\ \times \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}}' \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_2) \Big],$$

де було враховано вираз для унарної функції розподілу (2.27).

Оскільки екранований потенціал для моделі потенціального бар'єру в якості поверхневого потенціалу залежить від модуля вектора \mathbf{q} , то (3.30) набуває такого вигляду:

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = C F_1(z_1) F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)} \quad (3.31) \\ \times \exp \left[- \frac{F_1^0(z_1)f_1^0(z_2) + f_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{2F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \right] \\ \times \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q J_0(qr_{||}) g(q, \nu = 0 | z_1, z_2) \Big],$$

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

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

$$F_2(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = C F_1(z_1) F_1(z_2) \frac{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)}{F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)} \quad (3.32) \\ \times \exp \left[- \frac{F_1^0(z_1)F_1^0(z_2)}{F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)} \frac{\beta}{S} \sum_{\mathbf{q}}' \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_2) \right].$$

Із виразу (3.31) видно, що при зростанні віддалі між двома електронами у площині, яка паралельна до поверхні розділу, бінарна функція розподілу є добутком двох унарних функцій (оскільки $J_0(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$):

$$\lim_{r_{||} \rightarrow \infty} F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1) F_1^0(z_2), \quad (3.33)$$

$$\lim_{r_{||} \rightarrow \infty} g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = \lim_{r_{||} \rightarrow \infty} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}}' \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}) g(\mathbf{q}, \nu = 0 | z_1, z_2) = 0, \quad (3.34)$$

і, отже,

$$F_2(r_{||} \rightarrow \infty, z_1, z_2) = F_1(z_1) F_1(z_2), \quad (3.35)$$

тобто при достатньо великих $r_{||}$ кореляції між частинками зникають, що відповідає принципу ослаблення кореляцій [7].

3.4. Дані чисельних розрахунків бінарної функції розподілу електронів

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

На рис. 3 та рис. 5 подано бінарну функцію розподілу електронів у випадку коли один електрон знаходиться в точці ($r_{||} = 0, z_2 = -6 a_B$) та ($r_{||} = 0, z_2 = -4 a_B$) відповідно, а інший — в області ($|r_{||}| \geq 0, -\infty < z_1 \leq 0$); ці розрахунки проведені для нескінченно високого потенціального бар'єру в якості 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 області є більш різким, ніж у випадку врахування лише обмінних ефектів [14].

З рис. 4 та рис. 6 видно, що при наближенні одного із електронів до потенціального бар'єру (площина $z_1 = 0$) бінарна функція розподілу електронів в області ($r_{||} \rightarrow 0, z_1, z_2 \rightarrow 0$) деформується, в області ($r_{||} \rightarrow 0, z_1, z_2 \rightarrow -\infty$) вона є аксіально симетричною, оскільки це відповідає однорідній системі (два електрони знаходяться в глибині металу). Тобто, електрон при підході до поверхні розділу відчуває не лише ефективне відштовхування з боку інших електронів, а й починає відчувати потенціальний бар'єр. Фізично це означає, що електрону енергетично не вигідно покидати метал.

Аналогічні результати розрахунків приведено на рис. 7 – рис. 10 для потенціального бар'єру скінченної висоти в якості поверхневого потенціалу. Скінченість потенціального бар'єру призводить до більш плавного загасання електронної бінарної функції розподілу біля поверхні розділу.

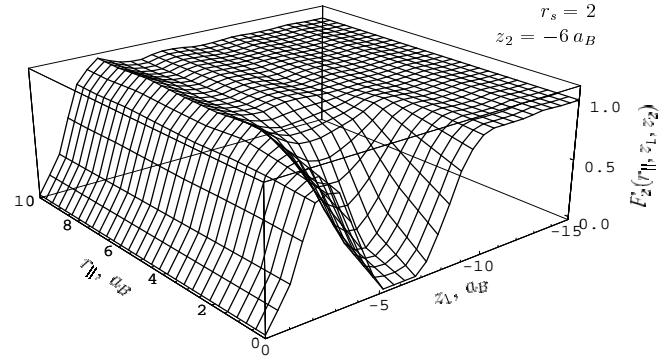


Рис. 3. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -6 a_B)$ при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

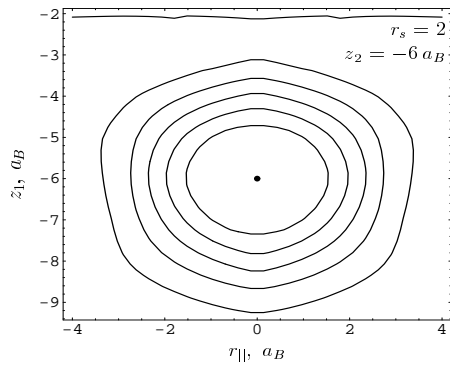


Рис. 4. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -6 a_B)$ на $(r_{||}, z_1)$ -площину при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

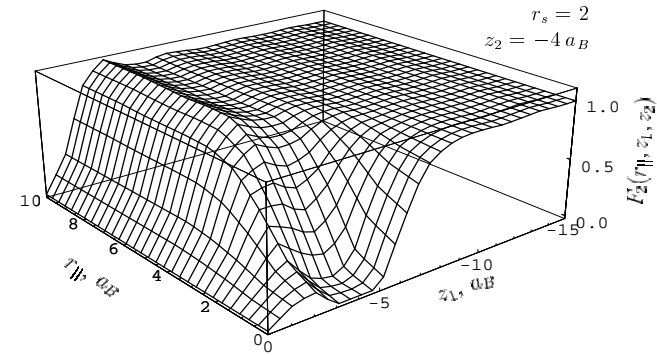


Рис. 5. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

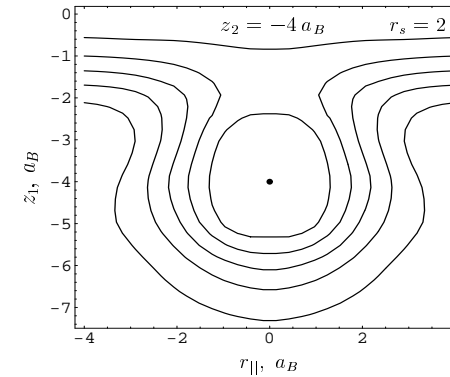


Рис. 6. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ на $(r_{||}, z_1)$ -площину при $r_s = 2$ (нескінченно високий потенціальний бар'єр).

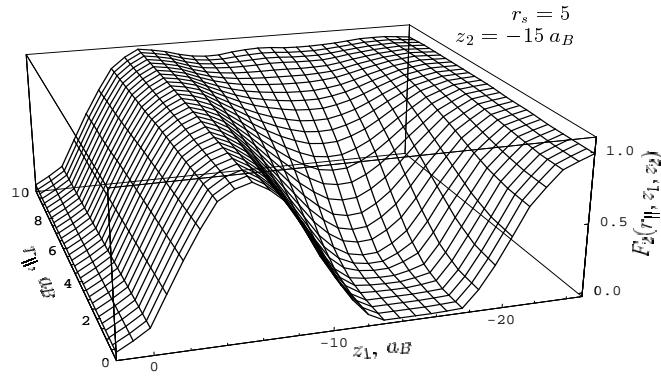


Рис. 7. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -15 a_B)$ при $r_s = 5$ (скінчений потенціальний бар'єр).

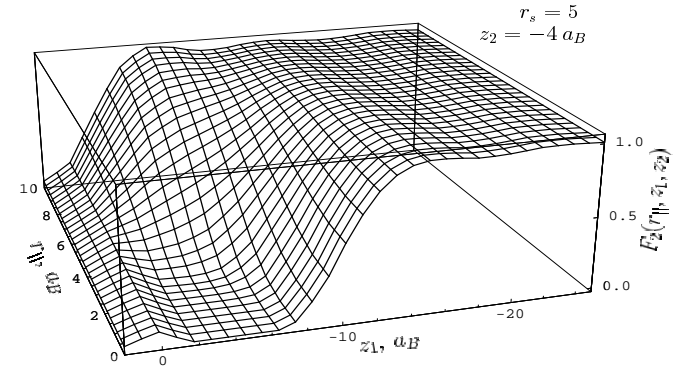


Рис. 9. Бінарна функція розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ при $r_s = 5$ (скінчений потенціальний бар'єр).

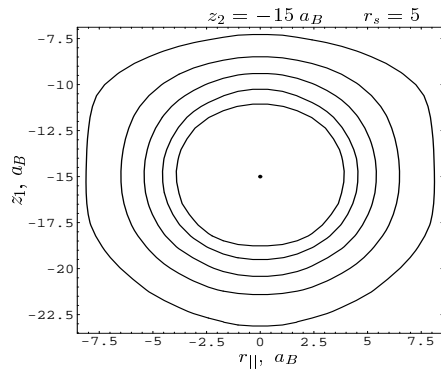


Рис. 8. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -15 a_B)$ на $(r_{||}, z_1)$ -площину при $r_s = 5$ (скінчений потенціальний бар'єр).

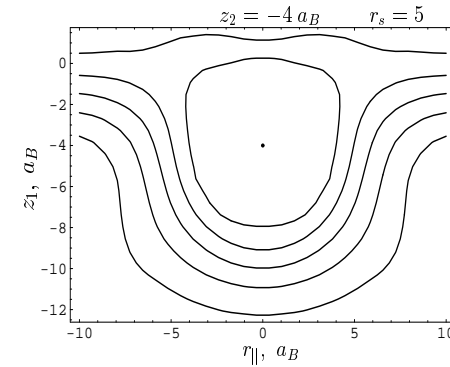


Рис. 10. Проекція бінарної функції розподілу електронів $F_2(r_{||}, z_1, z_2 = -4 a_B)$ на $(r_{||}, z_1)$ -площину при $r_s = 5$ (скінчений потенціальний бар'єр).

Література

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. Besenbacher F., 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. Костробій П. П., Маркович Б. М., у друці.
7. Боголюбов Н. Н., *Избранные труды, т. 2* (Наукова думка, Киев, 1970).
8. Nekovee M., Pitarke J. M., preprint cond-mat/0012116 (2000).
9. Каданов Л., Бейм Г., *Квантовая статистическая механика* (Мир, Москва, 1964).
10. Юхновский И. Р., Курьяк И. И., *Электролиты* (Наукова думка, Киев, 1988).
11. Zhang Z. Y., Langreth D. C., Perdew J. P., Phys. Rev. B **41**, 5674 (1990).
12. Acioli P. H., Ceperley D. M., Phys. Rev. B **54**, 17199 (1996).
13. Lang N. D., Kohn W., Phys. Rev. B **1**, 4555 (1970).
14. Moore I. D., March N. H., Ann. Phys. (N. Y.) **97**, 136 (1976).

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Петро Петрович Костробій
Богдан Михайлович Маркович

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

Роботу отримано 28 травня 2002 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені