Національна академія наук України

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP–02–02U

П. П. Костробій[*], Б. М. Маркович[*]

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

---

[*] Національний університет “Львівська політехніка”
Вул. С. Бандери, 12, Львів 79013

ЛЬВІВ

УДК: 530.145
PACS: 71.45.Gm

Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: І. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали

П. П. Костробій, Б. М. Маркович

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

Statistical theory of the spacebounded systems of charged fermi-particles: I. The functional integration method and effective potentials

P. P. Kostrobii, B. M. Markovych

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

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

Вступ

Просторово-неоднорідні системи заряджених частинок як базові моделі активно застосовуються для опису тонкоплівкових структур, острівцевих ланцюжкових структур, надграток, самоорганізуючих адсорбатів [1–3]. У зв'язку із розвитком експериментальних методів дослідження таких систем (скануючі тунельна спектроскопія та мікроскопія, польова іонна мікроскопія та їх модифікації), які дають усе більш детальну інформацію про електронну будову, структурні перетворення, дифузійні, адсорбційні, десорбційні процеси на поверхні металів, діелектриків, напівпровідників [4], значну увагу приділяють теоретичним дослідженням термодинамічних та структурних властивостей цих систем.

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

У випадку класичних просторово-неоднорідних систем заряджених частинок з однією поверхнею розділу такі рівняння для екранованого потенціалу розглядалися у працях [8–11]. Для цього випадку в [8–10] розроблено різні методи, які дозволяють отримати аналітичний розв'язок рівняння для $g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$ (z_1, z_2 — нормальні до поверхні розділу координати заряджених частинок, $r_{||} = |\mathbf{r}_{||}|$ — відстань між частинками в площині паралельній до поверхні розділу).

У працях [12–14, 16] досліджувалась задача визначення екранованих потенціалів взаємодії для систем заряджених частинок типу тонких плівок. Авторам праць [12,13,16] вдалося розв'язати цю задачу у випадку, коли нехтують частотною [12,16] або просторовою [13] дисперсією екранованого потенціалу. У [14] знайдено аналітичний вираз для екранованого потенціалу класичних систем типу тонких плівок у наближенні "постійної густини".

У представленій роботі розглядається задача статистичного опису системи заряджених фермі-частинок із поверхнею розділу методом функціонального інтегрування. Отримано вираз для термодинамічного потенціалу такої системи, в основу якого покладено ефективний потенціал взаємодії фермі-частинок між собою та поверхнею розділу. Нами запропоновано підхід, який дозволяє коректно враховати обмінно-кореляційні ефекти в рамках наближень, які запропоновано в праці [15]. Знайдено аналітичні вирази для екранованого потенціалу взаємодіючих між собою та поверхнею електронів для різних моделей поверхневого потенціалу.

1. Постановка задачі

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

$$\int\limits_S d\mathbf{R}_{||} \int\limits_{-L/2}^{+L/2} dZ\, \varrho(\mathbf{R}_{||}, Z) = eN, \; e > 0. \tag{1.1}$$

Гамільтоніан такої системи має вигляд:

$$H = T + V_{ee} + V_{ei} + V_{ii}, \tag{1.2}$$

де

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i \tag{1.3}$$

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

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j = 1}^{N} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \tag{1.4}$$

— потенціальна енергія взаємодії між електронами,

$$V_{ii} = \frac{1}{2} \int\limits_V d\mathbf{R}_1 \int\limits_V d\mathbf{R}_2 \, \frac{\varrho(\mathbf{R}_1)\varrho(\mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \tag{1.5}$$

— потенціальна енергія додатнього заряду,

$$V_{ei} = -e \sum_{j=1}^{N} \varphi(\mathbf{r}_j) \tag{1.6}$$

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

$$\varrho(\mathbf{R}) = \varrho_0 \theta(-Z) + \Delta\varrho(\mathbf{R}), \tag{1.7}$$

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

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int\limits_V d\mathbf{R}\,\frac{\varrho(\mathbf{R})}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} = \frac{1}{e}V(\mathbf{r}) + \varrho_0\int\limits_V d\mathbf{R}\,\frac{\theta(-Z)}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}, \tag{1.8}$$

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

Для розрахунку великої статистичної суми розглядуваної системи гамільтоніан (1.2) зручно подати у представленні вторинного квантування.

2. Представлення вторинного квантування

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V(\mathbf{r}_i)\right]\Psi_a(\mathbf{r}_i) = E_a\Psi_a(\mathbf{r}_i), \tag{2.1}$$

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

$$E_a = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha,\ a = (\mathbf{p}, \alpha), \tag{2.2}$$

де $\hbar\mathbf{p}$ — імпульс електрона в паралельній до XOY площині, α — деяке квантове число, яке залежить від конкретного вибору потенціального бар'єру для поверхневого потенціалу. Хвильові функції мають вигляд:

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}}\varphi_\alpha(z). \tag{2.3}$$

Розкладаючи потенціальну енергію взаємодії між двома зарядженими частинками у ряд Фур'є

$$\frac{e^2}{\sqrt{(\mathbf{r}_{||}-\mathbf{r}'_{||})^2 + (z-z')^2}} = \frac{1}{S}\sum_{\mathbf{q}}\nu\left(\mathbf{q}|z-z'\right)\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\left(\mathbf{r}_{||}-\mathbf{r}'_{||}\right)}, \tag{2.4}$$

де $\nu\left(\mathbf{q}|z-z'\right) = \frac{2\pi e^2}{q}\mathrm{e}^{-q|z-z'|}$ — двовимірний фур'є-образ кулонівської взаємодії, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}}m_{x,y}$, $m_{x,y} = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, гамільтоніан системи (1.2) можна представити так:

$$H = \sum_{\mathbf{p},\alpha}E_\alpha(\mathbf{p})a^\dagger_\alpha(\mathbf{p})a_\alpha(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S}N{\sum_{\mathbf{q}}}'\nu(\mathbf{q}|0)$$
$$+\frac{1}{2S}{\sum_{\mathbf{q}}}'\sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1,\alpha'_1}\sum_{\mathbf{p}_2,\alpha_2,\alpha'_2}\int dz\int dz'\,\nu(\mathbf{q}|z-z')\varphi^*_{\alpha_1}(z)\varphi_{\alpha'_1}(z)$$
$$\times\varphi^*_{\alpha_2}(z')\varphi_{\alpha'_2}(z')a^\dagger_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1)a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1-\mathbf{q})a^\dagger_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_2+\mathbf{q}), \tag{2.5}$$

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

$$\left\{a_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), a^\dagger_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2)\right\} = \delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2}\delta_{\alpha_1,\alpha_2}; \tag{2.6}$$

$N = \sum\limits_{\mathbf{p},\alpha}a^\dagger_\alpha(\mathbf{p})a_\alpha(\mathbf{p})$ — оператор кількості частинок; штрих біля суми у формулі (2.5) означає відсутність доданків при $\mathbf{q} = 0$, що зумовлено умовою електронейтральності (1.1).

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

$$\nu(\mathbf{q}|z-z') = \frac{1}{L}\sum_k \nu_k(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-ik(z-z')}, \tag{2.7}$$

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

$$\rho_k(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p},\alpha,\alpha'}\langle\alpha|\mathrm{e}^{-ikz}|\alpha'\rangle a^\dagger_\alpha(\mathbf{p})a_{\alpha'}(\mathbf{p}-\mathbf{q}), \tag{2.8}$$

де

$$\langle\alpha|\cdots|\alpha'\rangle = \int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz\,\varphi^*_\alpha(z)\cdots\varphi_{\alpha'}(z), \tag{2.9}$$

для гамільтоніану (2.5) отримуємо:

$$H = \sum_{\mathbf{p},\alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a^\dagger_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}{}' \nu(\mathbf{q}|0)$$

$$+\frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_{k} \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}). \tag{2.10}$$

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

3. Функціональне представлення великої статистичної суми

Велика статистична сума

$$\Xi = \mathrm{Sp} \exp\left[-\beta(H - \mu N)\right], \tag{3.1}$$

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

$$\Xi = \Xi_0 \exp\left(\frac{\beta}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}{}' \nu(\mathbf{q}|0)\right) \Xi_{int}, \tag{3.2}$$

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

$$\Xi_{int} = \langle S(\beta)\rangle_0, \; \langle\ldots\rangle_0 = \frac{1}{\Xi_0} \mathrm{Sp}\Big(\exp(-\beta H_0')\ldots\Big), \tag{3.3}$$

$$S(\beta) = T\exp\left[-\frac{1}{2SL} \int\limits_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\beta')\right], \tag{3.4}$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = \mathrm{e}^{\beta' H_0'} \rho_k(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{-\beta' H_0'}, \tag{3.5}$$

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

Для подальших викладок зручно перейти до частотного представлення:

$$\rho_k(\mathbf{q}|\nu) = \frac{1}{\beta} \int\limits_0^\beta d\beta' \mathrm{e}^{i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\beta'), \tag{3.6}$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = \sum_\nu \mathrm{e}^{-i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\nu), \tag{3.7}$$

де $\nu = \frac{2\pi}{\beta} n$ $(n = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$ — бозівські частоти. Тоді (3.4) набуде вигляду:

$$S(\beta) = T\exp\left[-\frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_k \sum_\nu \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\nu) \rho_{-k}(-\mathbf{q}|-\nu)\right]. \tag{3.8}$$

З метою спрощення усереднення $S(\beta)$ згідно (3.3) перейдемо до функціонального представлення для $S(\beta)$ [6, 7], скориставшись тотожністю Стратановича-Хаббарда [21]

$$\exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N} A_{n,m} y_n y_m\right]$$

$$= \det(\mathbb{A})^{-1/2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^{N} \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N} x_n (\mathbb{A}^{-1})_{n,m} x_m + i \sum_{n=1}^{N} x_n y_n\right], \tag{3.9}$$

де i — уявна одиниця, $\mathbb{A} = ||A_{n,m}||$ — симетрична матриця, тоді для (3.8) отримуємо:

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

$$\times \int (d\omega) \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_\nu \sum_k \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}|\nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}|-\nu)\right]$$

$$\times T\exp\left[i \sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_k \sum_\nu \omega_k(\mathbf{q}|\nu) \rho_k(\mathbf{q}|\nu)\right], \tag{3.10}$$

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

$$(d\omega) = \prod_{\mathbf{q}>0} \prod_{k\geqslant 0} \prod_{\nu \geqslant 0} \frac{d\omega^c_k(\mathbf{q}|\nu)}{\sqrt{\pi}} \frac{d\omega^s_k(\mathbf{q}|\nu)}{\sqrt{\pi}}, \tag{3.11}$$

$$\omega_k(\mathbf{q}|\nu) = \omega^c_k(\mathbf{q}|\nu) + i\omega^s_k(\mathbf{q}|\nu), \tag{3.12}$$

$$\omega^c_k(\mathbf{q}|\nu) = \omega^c_{-k}(-\mathbf{q}|-\nu), \tag{3.13}$$

$$\omega^s_k(\mathbf{q}|\nu) = -\omega^s_{-k}(-\mathbf{q}|-\nu). \tag{3.14}$$

Зауважимо, що у зв'язку з тим, що операторні змінні $\rho_k(\mathbf{q}|\nu)$ знаходяться в (3.10) під знаком T-впорядкування, інтегрувати по β' в (3.6) не можна.

Введемо для зручності наступне позначення: $x = (\mathbf{q}, \nu)$, тоді усереднюючи $S(\beta)$ згідно (3.3), отримуємо:

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

$$\times \int (d\omega) \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}{}' \sum_k \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}|\nu)\omega_{-k}(-\mathbf{q}|-\nu)\right]$$

$$\times \exp\left[\sum_{n\geqslant 1} \frac{1}{n!} \sum_{x_1,\ldots,x_n}{}' \sum_{k_1,\ldots,k_n} \mathfrak{M}_{k_1,\ldots,k_n}(x_1,\ldots,x_n)\omega_{k_1}(x_1)\ldots\omega_{k_n}(x_n)\right], \tag{3.15}$$

де $\mathfrak{M}_{k_1,\ldots,k_n}(x_1,\ldots,x_n) = i^n\langle T\rho_{k_1}(x_1)\ldots\rho_{k_n}(x_n)\rangle_{0,c}$ — так звані незвідні середні (кумулянти); штрих біля суми і надалі означає, що $\mathbf{q} \neq 0$. Розрахунок та явні вирази для $\mathfrak{M}_{k_1,\ldots,k_n}(x_1,\ldots,x_n)$ подано в додатку А.

Розрахунок інтегралу (3.15) є складною проблемою [5]. У праці [22] було показано, що для дуже точного опису електронного газу достатньо розглядати незвідні середні до четвертого порядку включно, а рештою — знехтувати, тобто будемо вважати, що

$$\mathfrak{M}_{k_1,\ldots,k_n}(x_1,\ldots,x_n) = 0,\ n \geqslant 5. \tag{3.16}$$

Для того, щоб обійти загальновідомі труднощі розрахунку інтегралу (3.15) і врахувати якомога краще обмінно-кореляційні ефекти вищих порядків зробимо наступне: замінимо $\mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x_1,x_2)$ на $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x_1,x_2) = i^2\langle T\rho_{k_1}(x_1)\rho_{k_2}(x_2)\rangle_c$, де усереднення відбувається по всій системі, та обмежимось гаусівським наближенням у виразі (3.15). Тобто представимо (3.15) у такому вигляді:

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

$$\times \int (d\omega) \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{x,k_1,k_2}{}' \left(\frac{\beta}{S}\bar{g}(x)\right)^{-1}_{k_1,k_2} \omega_{k_1}(x)\omega_{k_2}(-x)\right], \tag{3.17}$$

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

$$\left(\frac{\beta}{S}\bar{g}(x)\right)^{-1}_{k_1,k_2} = \left(\frac{\beta}{SL}\nu_{k_1}(\mathbf{q})\right)^{-1}\delta_{k_1+k_2,0} - \bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x). \tag{3.18}$$

Це рівняння у матричному вигляді можна записати так:

$$\left(\frac{\beta}{S}\hat{\bar{g}}(x)\right)^{-1} = \left(\frac{\beta}{SL}\hat{\nu}(\mathbf{q})\right)^{-1} - \hat{\bar{\mathfrak{M}}}(x,-x). \tag{3.19}$$

Домножуючи це рівняння справа на матрицю $\frac{\beta}{S}\hat{\bar{g}}(x)$, а потім — зліва на матрицю $\frac{\beta}{SL}\hat{\nu}(\mathbf{q})$, отримуємо рівняння:

$$\frac{\beta}{S}\hat{\bar{g}}(x) = \frac{\beta}{SL}\hat{\nu}(\mathbf{q}) + \frac{\beta}{SL}\hat{\nu}(\mathbf{q})\hat{\bar{\mathfrak{M}}}(x,-x)\frac{\beta}{S}\hat{\bar{g}}(x),$$

або

$$\hat{\bar{g}}(x) = \frac{1}{L}\hat{\nu}(\mathbf{q}) + \frac{\beta}{SL}\hat{\nu}(\mathbf{q})\hat{\bar{\mathfrak{M}}}(x,-x)\hat{\bar{g}}(x). \tag{3.20}$$

Покомпонентно це рівняння має наступний вигляд:

$$\bar{g}_{k_1,k_2}(x) = \frac{1}{L}\nu_{k_1}(\mathbf{q})\delta_{k_1+k_2,0} + \frac{\beta}{SL}\sum_k \nu_{k_1}(\mathbf{q})\bar{\mathfrak{M}}_{-k_1,k}(x,-x)\bar{g}_{k,k_2}(x). \tag{3.21}$$

У праці [23] подібним чином досліджувався ефективний потенціал, але при цьому в кумулянті другого порядку розглядалися лише діагональні члени. Це призводило до відсутності сил зображення; у нашому підході сили зображення, як буде показано нижче, враховано.

Виконавши інтегрування у виразі (3.17), отримуємо наступний вираз для термодинамічного потенціалу Ω:

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{N}{2S}\sum_{\mathbf{q}}{}' \nu(\mathbf{q}|0) - \frac{1}{\beta}\ln\frac{\prod_x{}' \det\left(\frac{\beta}{S}\hat{\bar{g}}(x)\right)^{1/2}}{\prod_{\mathbf{q}}{}' \prod_k \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{1/2}}, \tag{3.22}$$

де $\Omega_0 = -\ln\Xi_0/\beta$ — термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи.

4. Дослідження рівняння для ефективного потенціалу

Для подальшого викладу зручно перейти в $(\mathbf{q},z)$-представлення, ввівши для ефективного потенціалу $\bar{g}_{k_1,k_2}(x)$ його фур'є-образ $\bar{g}(x|z_1,z_2)$ наступним чином:

$$\bar{g}(x|z_1,z_2)=\sum_{k_1,k_2}\mathrm{e}^{-ik_1z_1-ik_2z_2}\bar{g}_{k_1,k_2}(x),\tag{4.1}$$

$$\bar{g}_{k_1,k_2}(x)=\frac{1}{L^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_1\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_2\,\mathrm{e}^{ik_1z_1+ik_2z_2}\bar{g}(x|z_1,z_2),\tag{4.2}$$

тоді рівняння (3.21) набуде вигляду:

$$\begin{aligned}&\bar{g}(x|z_1,z_2)=\nu(\mathbf{q}|z_1-z_2)\\&+\frac{\beta}{SL^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz'\,\nu(\mathbf{q}|z_1-z')\bar{\mathfrak{M}}(x|z',z)\bar{g}(x|z,z_2),\end{aligned}\tag{4.3}$$

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

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z',z)=\sum_{k',k}\mathrm{e}^{ik'z'+ikz}\bar{\mathfrak{M}}_{k',k}(x,-x).\tag{4.4}$$

У деяких випадках зручніше працювати не з інтегральним рівнянням другого порядку (4.3), а з інтегро-диференціальним, яке можна отримати з (4.3) шляхом двократного диференціювання по z_1:

$$\begin{aligned}&\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right)\bar{g}(x|z_1,z_2)\\&+\frac{4\pi\beta}{SL^2}e^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dz\,\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z)\bar{g}(x|z,z_2)=-4\pi e^2\delta(z_1-z_2),\end{aligned}\tag{4.5}$$

де в межах інтегралу зроблено граничний перехід $L\to\infty$. Для знаходження його розв'язків розглянемо певні наближення для $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x)$.

4.1. Наближення ідеального обміну

Покладемо в (4.5) $\mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x,-x)$ замість $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x)$:

$$\begin{aligned}&\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right)g(x|z_1,z_2)\\&+\frac{4\pi\beta}{SL^2}e^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dz\,\mathfrak{M}(x|z_1,z)g(x|z,z_2)=-4\pi e^2\delta(z_1-z_2),\end{aligned}\tag{4.6}$$

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

Рівняння такого типу розглядалися в [12, 18–20] для шаруватих систем. Там величину $\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2)$ представляли у вигляді суми двох кумулянтів однорідної системи, один з них відповідав проходженню частинки крізь потенціальний бар'єр, а інший — відбиванню від нього.

У наступних двох підрозділах розглянемо різні моделі поверхневого потенціалу, які допускають аналітичні розв'язки рівняння (4.6).

4.1.1. Модель нескінченно високої потенціальної стінки

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

Хвильові функції для даної моделі є наступними:

$$\varphi_\alpha(z)=\frac{2}{\sqrt{L}}\sin(\alpha z)\theta(-z),\ \alpha=\frac{2\pi n}{L},\ n=1,2,\ldots,\tag{4.7}$$

відповідні енергетичні рівні:

$$\varepsilon_\alpha=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}.\tag{4.8}$$

Розрахуємо фур'є-образ незвідного середнього другого порядку у цьому випадку:

$$\mathfrak{M}(x|z_1,z)=\sum_{k_1,k}\mathrm{e}^{ik_1z_1+ikz}\mathfrak{M}_{k_1,k}(x)$$

$$=-i^2\sum_{k_1,k}\sum_{\mathbf{p},\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\nu'}\mathrm{e}^{ik_1z_1+ikz}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1z}|\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ikz}|\alpha_1\rangle$$

$$\times\frac{1}{\beta^2}G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}|\nu'-\nu)$$

$$=\frac{L^2}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p},\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\nu'}\varphi^*_{\alpha_1}(z_1)\varphi_{\alpha_2}(z_1)\varphi^*_{\alpha_2}(z)\varphi_{\alpha_1}(z)G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}|\nu'-\nu), \tag{4.9}$$

де $G_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1-\beta_2)=-\langle T a_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1)a^\dagger_\alpha(\mathbf{p}|\beta_2)\rangle_0$ — одночастинкова функція Гріна та враховано, що $\sum\limits_k \mathrm{e}^{ik(z_1-z)}=L\delta(z_1-z)$.

Враховуючи, що

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\nu'}G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}|\nu'-\nu)$$

$$=\frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p})-n_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q})}{-i\nu+E_{\alpha_1}(\mathbf{p})-E_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q})}=\Pi_{\alpha_1,\alpha_2}(x,\mathbf{p}) \tag{4.10}$$

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

У випадку низьких температур ($\beta\to\infty$) $\nu\to 0$, та припускаючи, що два електрони перебувають на одному рівні $\alpha_1=\alpha_2$, отримуємо для поляризаційного оператора наступний вираз:

$$\Pi_{\alpha_1,\alpha_1}(\mathbf{q},0,\mathbf{p})=\frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p})-n_{\alpha_1}(\mathbf{p}-\mathbf{q})}{E_{\alpha_1}(\mathbf{p})-E_{\alpha_1}(\mathbf{p}-\mathbf{q})}. \tag{4.11}$$

У випадку малих значень імпульсу передачі $\mathbf{q}$, які будуть давати основний вклад при сумуванні в (4.9), отримуємо:

$$\Pi_{\alpha_1,\alpha_1}(\mathbf{q},0,\mathbf{p})\cong\frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial E_{\alpha_1}(\mathbf{p})}\cong\frac{\partial\theta(\mu-E_{\alpha_1}(\mathbf{p}))}{\partial E_{\alpha_1}(\mathbf{p})}=-\delta(\mu-E_{\alpha_1}(\mathbf{p})). \tag{4.12}$$

Скориставшись далі умовою повноти для власних функцій (4.7)

$$\sum_\alpha\varphi^*_\alpha(z)\varphi_\alpha(z')=\delta(z-z'), \tag{4.13}$$

для $\mathfrak{M}(x|z_1,z)$ отримуємо:

$$\mathfrak{M}(x|z_1,z)\cong-\frac{L^2}{\beta}\sum_{\mathbf{p},\alpha_1}\delta(\mu-E_{\alpha_1}(\mathbf{p}))|\varphi_{\alpha_1}(z)|^2\delta(z_1-z), \tag{4.14}$$

останній вираз можна ще більш спростити, якщо припустити, що

$$|\varphi_\alpha(z)|^2\cong\frac{2}{L}\theta(-z), \tag{4.15}$$

це відповідає наближенню “постійної густини” [14]. У цьому випадку незвідне середнє $\mathfrak{M}(x|z_1,z)$ має вигляд:

$$\mathfrak{M}(x|z_1,z)\cong-\frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\theta(-z_1)\delta(z_1-z), \tag{4.16}$$

де $\rho(\mu)=2/(SL)\sum\limits_{\mathbf{p},\alpha}\delta(\mu-E_\alpha(\mathbf{p}))$ —густина станів невзаємодіючого електронного газу на рівні Фермі.

Підставляючи останній вираз для $\mathfrak{M}(x|z_1,z)$ в інтегро-диференціальне рівняння (4.5), отримуємо наступне вже звичайне диференціальне рівняння:

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2-\varkappa^2_{TF}\theta(-z_1)\right]g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=-4\pi e^2\delta(z_1-z_2), \tag{4.17}$$

де $\varkappa^2_{TF}=4\pi e^2\rho(\mu)$, $\varkappa_{TF}$ — обернений радіус екранування Томаса-Фермі.

У випадку високих температур ($\theta\to\infty$), зробивши аналогічні наближення, отримуємо рівняння (4.17), в якому замість оберненого радіусу екранування Томаса-Фермі $\varkappa_{TF}$ стоїть обернений радіус екранування Дебая $\varkappa_D$, $\varkappa^2_D=4\pi\beta e^2n$, $n=2N/(SL)$ — концентрація електронів ($N,S,L\to\infty$, так що $n=const$).

В області $z_1<0$ (там де є електрони):

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2-\varkappa^2_{TF}\right]g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=-4\pi e^2\delta(z_1-z_2),\ z_2<0, \tag{4.18}$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2-\varkappa^2_{TF}\right]g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=0,\ z_2>0; \tag{4.19}$$

в області $z_1>0$:

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right]g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=-4\pi e^2\delta(z_1-z_2),\ z_2>0, \tag{4.20}$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right]g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=0,\ z_2<0. \tag{4.21}$$

Фізично коректний розв’язок рівняння (4.18) має наступний вигляд:

$$g_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=\frac{2\pi e^2}{Q}\left[\mathrm{e}^{Q(z_1+z_2)}+A_1\mathrm{e}^{-Q|z_1+z_2|}\right],\ z_1,z_2<0, \tag{4.22}$$

де $A_1 = const$, $Q = \sqrt{q^2 + \varkappa_{TF}^2}$; аналогічно розв'язок рівняння (4.20):

$$g_3(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2}{q}\left[\mathrm{e}^{-q|z_1+z_2|} + A_3\mathrm{e}^{-q(z_1+z_2)}\right],\ z_1, z_2 > 0, \tag{4.23}$$

де $A_3 = const$.

Розв'язки рівнянь (4.19) та (4.21) із врахуванням симетрії відносно перестановок двох частинок мають вигляд:

$$g_2(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = A_2\mathrm{e}^{Qz_1 - qz_2},\ z_1 < 0,\ z_2 > 0, \tag{4.24}$$

$$g_4(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = A_2\mathrm{e}^{Qz_2 - qz_1},\ z_1 > 0,\ z_2 < 0. \tag{4.25}$$

Константи A_1 та A_3 можна отримати з умови неперервності екранованих потенціалів та їх перших похідних:

$$g_1(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 = 0, z_2 = 0) = g_3(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 = 0, z_2 = 0), \tag{4.26}$$

$$\left.\frac{dg_1(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)}{dz_1}\right|_{z_1 = z_2 = 0} = \left.\frac{dg_3(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)}{dz_1}\right|_{z_1 = z_2 = 0}. \tag{4.27}$$

Константу A_2 можна визначити із однієї з двох наступних умов:

$$g_2(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 < 0, z_2 = 0) = g_1(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 < 0, z_2 = 0), \tag{4.28}$$

$$g_4(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 > 0, z_2 = 0) = g_3(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 > 0, z_2 = 0). \tag{4.29}$$

Отже, враховуючи (4.26)-(4.29), отримуємо екранований потенціал для нескінченно високого потенціального бар'єру:

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \leqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{2\pi e^2}{Q}\left[\mathrm{e}^{-Q|z_1 - z_2|} + \frac{Q - q}{Q + q}\mathrm{e}^{Q(z_1 + z_2)}\right], \tag{4.30}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \geqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{2\pi e^2}{q}\left[\mathrm{e}^{-q|z_1 - z_2|} - \frac{Q - q}{Q + q}\mathrm{e}^{-q(z_1 + z_2)}\right], \tag{4.31}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \leqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q + q}\mathrm{e}^{Qz_1 - qz_2}, \tag{4.32}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \geqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q + q}\mathrm{e}^{Qz_2 - qz_1}. \tag{4.33}$$

Вирази (4.30) та (4.31) співпадають із отриманими в роботі [16,18] екранованими потенціалами для плівок, якщо розглядати достатньо товсті плівки ($\varkappa L \gg 1$, $\varkappa$ — обернений радіус екранування Томаса-Фермі або Дебая, L — товщина плівки).

4.1.2. Потенціальний бар'єр скінченої висоти

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

$$V(z) = W\theta(-z). \tag{4.34}$$

Власні функції та власні значення цього потенціалу є наступними:

$$\varphi_\alpha(z) = C_\alpha\left[-\sin(\alpha z - \gamma_\alpha)\theta(-z) + \frac{\alpha}{s}\exp(-\varkappa_\alpha z)\theta(z)\right],\ \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}, \tag{4.35}$$

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:

$$\frac{\alpha L}{2} + \arcsin\frac{\alpha}{s} = n\pi,\ n = 1, 2, \ldots, \tag{4.36}$$

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

$$\int\limits_{-L/2}^{+\infty} dz\,|\varphi_\alpha(z)|^2 = 1, \tag{4.37}$$

і вона є такою:

$$C_\alpha = \frac{2}{\sqrt{L + \frac{2}{\varkappa_\alpha}}}, \tag{4.38}$$

У всіх реальних задачах висота потенціального бар'єру є більшою за рівень Фермі, тобто $W > \mu$.

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

$$\begin{aligned} |\varphi_\alpha(z)|^2 &= C_\alpha^2\left[\sin^2(\alpha z - \gamma_\alpha)\theta(-z) + \frac{\alpha^2}{s^2}\exp(-2\varkappa_\alpha z)\theta(z)\right] \\ &\cong C_\alpha^2\left[\left(\frac{1}{2} - \sin\gamma_\alpha\cos\gamma_\alpha\right)\theta(-z) + \sin\gamma_\alpha\cos_\alpha\theta(z)\right], \end{aligned} \tag{4.39}$$

де вже враховано, що $L \to \infty$.

Від сумування по α зручно перейти до інтегрування за наступною формулою [24]:

$$\sum_{n=1}^{n_{max}} f(\alpha_n) \cong \frac{1}{2}[f(s) - f(0)] + \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^s d\alpha\, \frac{4}{C_\alpha^2} f(\alpha). \tag{4.40}$$

Тоді незвідне середнє другого порядку при використанні наближень, які застосовувалися при розгляді нескінченно високого потенціального бар'єру, набуде вигляду:

$$\mathfrak{M}(x|z_1, z) \cong -\frac{L^2}{\beta}\sum_{\mathbf{p},\alpha} \delta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p}))|\varphi_\alpha(z)|^2 \delta(z_1 - z)$$

$$\cong \frac{4}{\pi}\frac{S}{(2\pi)^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \int\limits_0^s d\alpha\, [f_1(\alpha)\theta(-z) + f_2(\alpha)\theta(z)]\, \delta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p}))\delta(z_1 - z), \tag{4.41}$$

де

$$f_1(\alpha) = \frac{1}{2} - \sin\gamma_\alpha \cos\gamma_\alpha, \tag{4.42}$$

$$f_2(\alpha) = \sin\gamma_\alpha \cos\gamma_\alpha \tag{4.43}$$

і при переході до інтегрування враховано дві можливі орієнтації спіну електрона.

Рівняння для екранованого потенціалу у цьому випадку є наступними:

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 + k_1^2\right)\right] g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2),\ z_1 < 0, z_2 < 0; \tag{4.44}$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 + k_2^2\right)\right] g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = -4\pi e^2 \delta(z_1 - z_2),\ z_1 > 0, z_2 > 0; \tag{4.45}$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 + k_1^2\right)\right] g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = 0,\ z_1 < 0, z_2 > 0; \tag{4.46}$$

$$\left[\frac{d^2}{dz_1^2} - \left(q^2 + k_2^2\right)\right] g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2) = 0,\ z_1 > 0, z_2 < 0, \tag{4.47}$$

де введено наступні позначення:

$$k_1^2 = \frac{4}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \int\limits_0^s d\alpha\, f_1(\alpha)\frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})}, \tag{4.48}$$

$$k_2^2 = \frac{4}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} \int\limits_0^s d\alpha\, f_2(\alpha)\frac{\partial n_\alpha(\mathbf{p})}{\partial E_\alpha(\mathbf{p})}. \tag{4.49}$$

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

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \leqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{2\pi e^2}{Q_1}\left[\mathrm{e}^{-Q_1|z_1 - z_2|} + \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1(z_1 + z_2)}\right], \tag{4.50}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \geqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{2\pi e^2}{Q_2}\left[\mathrm{e}^{-Q_2|z_1 - z_2|} - \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{-Q_2(z_1 + z_2)}\right], \tag{4.51}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \leqslant 0, z_2 \geqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1 z_1 - Q_2 z_2}, \tag{4.52}$$

$$g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1 \geqslant 0, z_2 \leqslant 0) = \frac{4\pi e^2}{Q_1 + Q_2}\mathrm{e}^{Q_1 z_2 - Q_2 z_1}, \tag{4.53}$$

де $Q_1 = \sqrt{q^2 + k_1^2}$, $Q_2 = \sqrt{q^2 + k_2^2}$. При збільшенні висоти потенціального бар'єру ($s \to \infty$) вирази (4.50)–(4.53) переходять у (4.30)–(4.33).

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

Для розрахунку $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x, -x)$ скористаємось методом, який був запропонований у [17]. Згідно означення $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x, -x)$ маємо:

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

$$= \prod_{\mathbf{q}}{}' \prod_k \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{-1/2} \int (d\omega) \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{x,k}{}' \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{-1}\right.$$

$$\left.\times \omega_k(x)\omega_{-k}(-x)\right] \frac{d}{d\omega_{k_1}(x)}\frac{d}{d\omega_{k_2}(-x)} \left\langle T \exp\left[i\sum_{x,k}{}' \omega_k(x)\rho_k(x)\right]\right\rangle \tag{4.54}$$

$$= \left(\frac{\beta}{SL}\nu_{k_1}(\mathbf{q})\right)^{-1}\left[\left(\frac{\beta}{SL}\nu_{k_2}(\mathbf{q})\right)^{-1}\overline{\omega_{-k_1}(-x)\omega_{-k_2}(x)} - \delta_{k_1+k_2,0}\right],$$

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

$$\overline{\ldots} = \prod_{\mathbf{q}}{}' \prod_k \left(\frac{\beta}{SL}\nu_k(\mathbf{q})\right)^{-1/2}$$

$$\times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{x,k}{}' \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(x) \omega_{-k}(-x) \right] \ldots$$

$$\times \left\langle T \exp \left[i \sum_{x,k}{}' \omega_k(x) \rho_k(x) \right] \right\rangle . \qquad (4.55)$$

Для спрощення записів введемо наступні позначення:

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

$$V_1^{-1} = \left(\frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}_1) \right)^{-1}, \ldots . \qquad (4.56)$$

тоді функціональний інтеграл (3.15), обмежившись кумулянтами до четвертого порядку включно, можна представити так:

$$I = \int (d\omega) \exp[F(\omega)], \qquad (4.57)$$

де

$$F(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{1,2}{}' \left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1} \delta_{1+2,0} \right) \omega_1 \omega_2 + \sum_{n=3}^{4} \frac{1}{n!} \sum_{1,\ldots,n}{}' \mathfrak{M}_{1,\ldots,n} \omega_1 \ldots \omega_n . \qquad (4.58)$$

Для величин $\overline{\omega_{k_1}(x_1) \cdots \omega_{k_n}(x_n)}$, $n = 2, 3, 4$ у праці [17] було запропоновано ланцюжок рівнянь, причому у виборі конкретного вигляду цих рівнянь є деяка довільність. Виберемо наступні рівняння:

$$\overline{\prod_{j=1}^{l} \left(\frac{d}{d\omega_j} + \frac{dF(\omega)}{d\omega_j} \right)} = 0,\ l = 1, 2, 3, 4. \qquad (4.59)$$

У випадку $l = 1$ маємо таке рівняння:

$$\frac{1}{2} \sum_{2,3} \mathfrak{M}_{1,2,3} \overline{\omega_2 \omega_3} + \frac{1}{3!} \sum_{2,3,4} \mathfrak{M}_{1,2,3,4} \overline{\omega_2 \omega_3 \omega_4} = 0, \qquad (4.60)$$

для $l = 2$:

$$\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1} \delta_{1+2,0}$$

$$+ \sum_{1',2'} \left[\frac{1}{2} \mathfrak{M}_{1,2,1',2'} + \left(\mathfrak{M}_{1,2'} - V_1^{-1} \delta_{1+2',0} \right) \left(\mathfrak{M}_{1',2} - V_2^{-1} \delta_{1'+2,0} \right) \right] \overline{\omega_{1'} \omega_{2'}}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{1',2',3'} \left[\mathfrak{M}_{1',2,3'} \left(\mathfrak{M}_{1,2'} - V_1^{-1} \delta_{1+2',0} \right) + \mathfrak{M}_{1,2',3'} \left(\mathfrak{M}_{1',2} - V_2^{-1} \delta_{1'+2,0} \right) \right]$$

$$\times \overline{\omega_{1'} \omega_{2'} \omega_{3'}} + \sum_{1',2',3',4'} \left[\frac{1}{3!} \mathfrak{M}_{1',2,3',4'} \left(\mathfrak{M}_{1,2'} - V_1^{-1} \delta_{1+2',0} \right) + \frac{1}{3!} \mathfrak{M}_{1,2',3',4'} \right.$$

$$\left. \times \left(\mathfrak{M}_{1',2} - V_2^{-1} \delta_{1'+2,0} \right) + \frac{1}{4} \mathfrak{M}_{1,2',3'} \mathfrak{M}_{1',2,3'} \right] \overline{\omega_{1'} \omega_{2'} \omega_{3'} \omega_{4'}} = 0, \qquad (4.61)$$

для $l = 3$:

$$\mathfrak{M}_{1,2,3} + \frac{1}{2} \sum_{1',2'} \left[\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1} \delta_{1+2,0} \right) \mathfrak{M}_{1',2',3} \right.$$

$$\left. + \left(\mathfrak{M}_{2,3} - V_2^{-1} \delta_{2+3,0} \right) \mathfrak{M}_{1',2',1} + \left(\mathfrak{M}_{3,1} - V_1^{-1} \delta_{1+3,0} \right) \mathfrak{M}_{1',2',2} \right] \overline{\omega_{1'} \omega_{2'}}$$

$$+ \sum_{2',3'} \left[\left(\mathfrak{M}_{3,2'} - V_3^{-1} \delta_{3+2',0} \right) \mathfrak{M}_{1,2,3'} \right.$$

$$\left. + \left(\mathfrak{M}_{1,2'} - V_1^{-1} \delta_{1+2',0} \right) \mathfrak{M}_{2,3,3'} + \left(\mathfrak{M}_{2,2'} - V_2^{-1} \delta_{2+2',0} \right) \mathfrak{M}_{3,1,3'} \right] \overline{\omega_{2'} \omega_{3'}}$$

$$+ \sum_{1',2',3'} \left(\mathfrak{M}_{1,1'} - V_1^{-1} \delta_{1+1',0} \right) \left(\mathfrak{M}_{2,2'} - V_2^{-1} \delta_{2+2',0} \right)$$

$$\times \left(\mathfrak{M}_{3,3'} - V_3^{-1} \delta_{3+3',0} \right) \overline{\omega_{1'} \omega_{2'} \omega_{3'}}$$

$$+ P(1,2|3) \sum_{1',2',3'} \left[\frac{1}{3!} \left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1} \delta_{1+2,0} \right) \mathfrak{M}_{1',2',3,3'} + \frac{1}{2} \mathfrak{M}_{1,2,3'} \mathfrak{M}_{1',2',3} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \mathfrak{M}_{1,2,3',1'} \left(\mathfrak{M}_{3,2'} - V_3^{-1} \delta_{3+2',0} \right) \right] \overline{\omega_{1'} \omega_{2'} \omega_{3'}}$$

$$+ P(1,2|3) \sum_{1',2',3',4'} \left[\frac{1}{3!} \mathfrak{M}_{1,2,3'} \mathfrak{M}_{1',2',3,4'} + \frac{1}{4} \mathfrak{M}_{1,2,3',4'} \mathfrak{M}_{1',2',3} \right.$$

$$\left. + \left(\mathfrak{M}_{1,3'} - V_1^{-1} \delta_{1+3',0} \right) \left(\mathfrak{M}_{2,4'} - V_2^{-1} \delta_{2+4',0} \right) \mathfrak{M}_{1',2',3} \right] \overline{\omega_{1'} \omega_{2'} \omega_{3'} \omega_{4'}} = 0, \qquad (4.62)$$

де $P(1,2|3)$ — оператор, який переставляє індекси: $P(1,2|3)\mathfrak{M}_{1,2,3} = \mathfrak{M}_{1,2,3} + \mathfrak{M}_{1,3,2} + \mathfrak{M}_{3,2,1}$; для $l = 4$ маємо:

$$\mathfrak{M}_{1,2,3,4} + P(1,2|3,4)\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\left(\mathfrak{M}_{3,4} - V_3^{-1}\delta_{3+4,0}\right)$$

$$+P(1,2,3|4)\sum_{1',2'}\left[\frac{1}{2}\mathfrak{M}_{1,2,3}\mathfrak{M}_{1',2',4} + \mathfrak{M}_{1,2,3,1'}\left(\mathfrak{M}_{4,2'} - V_4^{-1}\delta_{4+2',0}\right)\right]$$

$$\times\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}} + P(1,2|3,4)\sum_{1',2'}\Bigg[\frac{1}{2}\Big(\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\mathfrak{M}_{1',2',3,4}$$

$$+\left(\mathfrak{M}_{3,4} - V_3^{-1}\delta_{3+4,0}\right)\mathfrak{M}_{1,2,1',2'}\Big) + \mathfrak{M}_{1,2,2'}\mathfrak{M}_{1',3,4}\Bigg]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}}$$

$$+P(1,2|3|4)\sum_{1',2'}\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\left(\mathfrak{M}_{3,1'} - V_3^{-1}\delta_{3+1',0}\right)$$

$$\times\left(\mathfrak{M}_{4,2'} - V_4^{-1}\delta_{4+2',0}\right)\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}}$$

$$+P(1,2,3|4)\sum_{1',2',3'}\left[\frac{1}{3!}\mathfrak{M}_{1,2,3}\mathfrak{M}_{1',2',3',4} + \frac{1}{2}\mathfrak{M}_{1,2,3,3'}\mathfrak{M}_{1',2',4}\right]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}}$$

$$+\frac{1}{2}P(1,2|3,4)\sum_{1',2',3'}\Bigg[\mathfrak{M}_{1,2,3'}\mathfrak{M}_{1',2',3,4} + \mathfrak{M}_{1,2,2',3'}\mathfrak{M}_{1',3,4}\Bigg]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}}$$

$$+P(1,2|3|4)\sum_{1',2',3'}\Bigg[\frac{1}{2}\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\left(\mathfrak{M}_{3,3'} - V_3^{-1}\delta_{3+3',0}\right)$$

$$\times\mathfrak{M}_{1',2',4} + \frac{1}{2}\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\left(\mathfrak{M}_{4,3'} - V_4^{-1}\delta_{4+3',0}\right)$$

$$\times\mathfrak{M}_{1',2',3}+\left(\mathfrak{M}_{3,2'} - V_3^{-1}\delta_{3+2',0}\right)\left(\mathfrak{M}_{4,3'} - V_4^{-1}\delta_{4+3',0}\right)\mathfrak{M}_{1,2,1'}\Bigg]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}}$$

$$+\sum_{1',2',3',4'}\left(\mathfrak{M}_{1,1'} - V_1^{-1}\delta_{1+1',0}\right)\left(\mathfrak{M}_{2,2'} - V_2^{-1}\delta_{2+2',0}\right)$$

$$\times\left(\mathfrak{M}_{3,3'} - V_3^{-1}\delta_{3+3',0}\right)\left(\mathfrak{M}_{4,4'} - V_4^{-1}\delta_{4+4',0}\right)\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}\omega_{4'}}$$

$$+\sum_{1',2',3',4'}\Bigg[\frac{1}{3!}P(1,2,3|4)\mathfrak{M}_{1,2,3,4'}\mathfrak{M}_{1',2',3',4}$$

$$+\frac{1}{4}P(1,2|3,4)\mathfrak{M}_{1,2,3',4'}\mathfrak{M}_{1',2',3,4}\Bigg]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}\omega_{4'}}$$

$$+P(1,2|3|4)\sum_{1',2',3',4'}\Bigg[\frac{1}{3!}\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)$$

$$\times\Big(\left(\mathfrak{M}_{3,4'} - V_3^{-1}\delta_{3+4',0}\right)\mathfrak{M}_{1',2',3',4} + \left(\mathfrak{M}_{4,4'} - V_4^{-1}\delta_{4+4',0}\right)\mathfrak{M}_{1',2',3,3'}\Big)$$

$$+\frac{1}{2}\Bigg(\frac{1}{2}\left(\mathfrak{M}_{1,2} - V_1^{-1}\delta_{1+2,0}\right)\mathfrak{M}_{1',2',3}\mathfrak{M}_{3',4',4}$$

$$+\left(\mathfrak{M}_{3,1'} - V_3^{-1}\delta_{3+1',0}\right)\mathfrak{M}_{1,2,3'}\mathfrak{M}_{2',4',4}\Bigg) + \mathfrak{M}_{1,2,3',4'}$$

$$\times\left(\mathfrak{M}_{3,1'} - V_3^{-1}\delta_{3+1',0}\right)\left(\mathfrak{M}_{4,2'} - V_4^{-1}\delta_{4+2',0}\right)\Bigg]\overline{\omega_{1'}\omega_{2'}\omega_{3'}\omega_{4'}} = 0, \tag{4.63}$$

де оператор $P(1,2|3|4)$ діє так:

$$P(1,2|3|4)\mathfrak{M}_{1,2,3,4} = \mathfrak{M}_{1,2,3,4} + \mathfrak{M}_{1,3,2,4}$$

$$+\mathfrak{M}_{2,3,1,4} + \mathfrak{M}_{1,2,4,3} + \mathfrak{M}_{1,4,2,3} + \mathfrak{M}_{2,4,1,3}, \tag{4.64}$$

а оператор $P(1,2|3,4)$ — так:

$$P(1,2|3,4)\mathfrak{M}_{1,2,3,4} = \mathfrak{M}_{1,2,3,4} + \mathfrak{M}_{1,3,2,4} + \mathfrak{M}_{2,3,1,4}. \tag{4.65}$$

Систему рівнянь (4.60)-(4.65) будемо розв'язувати, шукаючи розв'язки $\overline{\omega_1\omega_2}$, $\overline{\omega_1\omega_2\omega_3}$ та $\overline{\omega_1\omega_2\omega_3\omega_4}$ у вигляді:

$$\overline{\omega_1\omega_2} = \overline{\omega_1\omega_2}^0 + \overline{\omega_1\omega_2}^1 + \ldots, \tag{4.66}$$

$$\overline{\omega_1\omega_2\omega_3} = \overline{\omega_1\omega_2\omega_3}^0 + \overline{\omega_1\omega_2\omega_3}^1 + \ldots, \tag{4.67}$$

$$\overline{\omega_1\omega_2\omega_3\omega_4} = \overline{\omega_1\omega_2\omega_3\omega_4}^0 + \overline{\omega_1\omega_2\omega_3\omega_4}^1 + \ldots, \tag{4.68}$$

де позначення $\overline{\ldots}^0$ означає розв'язок у наближенні нуль сум по $x = (\mathbf{q}, \nu)$, причому в ньому враховано усі суми по k (обмежуватися якоюсь скінченою кількістю сум по k неможна, оскільки індекс k відповідає за неоднорідність системи і в області швидкої зміни електронної густини ряди не будуть збігатися). На відміну від цього, вектор $\mathbf{q}$ відповідає за однорідність системи ($\mathbf{q}$ — вектор, який паралельний до площини розділу) і розклади будуть проводитися по плазмовому параметру $\lambda = \langle\tau\rangle/\tau_{TF}$, який рівний відношенню середньої віддалі між частинками до радіусу екранування Томаса-Фермі (середня віддаль $\langle\tau\rangle = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}$, радіус екранування Томаса-Фермі $\tau_{TF} = 1/\varkappa_{TF}$, n — концентрація електронів).

Для подальшого розгляду зручно ввести наступні позначення:

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

$$\mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1},\underline{2}) = \mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x_1,x_2), \ldots ;$$
$$\delta(\underline{1}+\underline{2}) = \delta_{x_1+x_2,0}, \ldots ; \delta_{1+2} = \delta_{k_1+k_2,0}, \ldots . \tag{4.69}$$

У наближенні нуль сум по x рівняння (4.61) вже в нових позначеннях має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}
&\mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1})\delta(\underline{1}+\underline{2}) - V_1^{-1}(\underline{1})\delta(\underline{1}+\underline{2})\delta_{1+2} \\
&+V_1^{-1}(\underline{1})V_2^{-1}(\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{0} \\
&-V_1^{-1}(\underline{1})\sum_{1'}\mathfrak{M}_{1',2}(-\underline{2},\underline{2})\overline{\omega_{1'}(-\underline{2})\omega_{-1}(-\underline{1})}^{0} \\
&-V_2^{-1}(\underline{2})\sum_{2'}\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{2'}(-\underline{1})}^{0} \\
&+\sum_{1',2'}\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1})\mathfrak{M}_{1',2}(-\underline{2},\underline{2})\overline{\omega_{1'}(-\underline{2})\omega_{2'}(-\underline{1})}^{0} = 0,
\end{aligned} \tag{4.70}$$

це рівняння розв'язуємо ітераціями, вважаючи що

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{0} = \overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{0,1} + \overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{0,2} + \ldots , \tag{4.71}$$

де позначення $\overline{\ldots}^{0,1}$ означає наступне: наближення нуль сум по x та одна сума по k. Підставивши (4.71) в (4.70) та зібравши увесь нескінченний ряд, отримуємо:

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{0} = V_1(\underline{1})V_2(\underline{1})\delta(\underline{1}+\underline{2})R_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}), \tag{4.72}$$

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

$$R_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) = V_1^{-1}(\underline{1})\delta_{1+2} + \sum_{1'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})V_{1'}(\underline{1})R_{-1',2}(\underline{1},-\underline{1}), \tag{4.73}$$

тоді незвідне середнє $\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1})$ у наближенні нуль сум по x згідно (3.18) має вигляд:

$$\begin{aligned}
\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) &= R_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) - V_1^{-1}(\underline{1})\delta_{1+2} \\
&= \sum_{1'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})V_{1'}(\underline{1})R_{-1',2}(\underline{1},-\underline{1}),
\end{aligned} \tag{4.74}$$

врахувавши, що $R_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) = \bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) + V_1^{-1}(\underline{1})\delta_{1+2}$, отримуємо для $\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1})$ у наближенні нуль сум по x наступне інтегральне рівняння:

$$\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) = \mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) + \sum_{1'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})V_{1'}(\underline{1})\bar{\mathfrak{M}}_{-1',2}(\underline{1},-\underline{1}). \tag{4.75}$$

Зауважимо, що у випадку однорідної системи (тобто коли $\bar{\mathfrak{M}}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1})$, $\mathfrak{M}_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) \propto \delta_{1+2}$) інтегральне рівняння (4.75) перетворюється у звичайне алгебраїчне, розв'язок якого має наступний вигляд:

$$\bar{\mathfrak{M}}_{1,-1}(\underline{1},-\underline{1}) = \frac{\mathfrak{M}_{1,-1}(\underline{1},-\underline{1})}{1 - V_1(\underline{1})\mathfrak{M}_{1,-1}(\underline{1},-\underline{1})}, \tag{4.76}$$

що співпадає з виразом для кумулянтної кореляційної функції взаємодіючої системи [15].

Для того, щоб знайти наступний член розкладу $\overline{\omega_1\omega_2}$ (4.66) розглядаємо рівняння (4.61), залишаючи в ньому доданки, які пропорційні одній сумі по x:

$$\begin{aligned}
&C_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) + V_1^{-1}(\underline{1})V_2^{-1}(\underline{1})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(\underline{1})}^{1} \\
&-V_1^{-1}(\underline{1})\sum_{1'}\mathfrak{M}_{1',2}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{1'}(\underline{1})\omega_{-1}(-\underline{1})}^{1} \\
&-V_2^{-1}(\underline{1})\sum_{2'}\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{-2}(\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{1})}^{1} \\
&+\sum_{1',2'}\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1})\mathfrak{M}_{1',2}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{1'}(\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{1})}^{1} = 0,
\end{aligned} \tag{4.77}$$

де введено наступне позначення:

$$\begin{aligned}
C_{1,2}(\underline{1},-\underline{1}) &= \frac{1}{2}\sum_{\underline{1}',1',2'}\mathfrak{M}_{1,2,1',2'}(\underline{1},-\underline{1},\underline{1}',-\underline{1}')\overline{\omega_{1'}(\underline{1}')\omega_{2'}(-\underline{1}')}^{0} \\
&+\frac{1}{2}\sum_{1',2',3'}\Bigg[\sum_{\underline{1}'}\mathfrak{M}_{1',2,3'}(\underline{1}',-\underline{1},\underline{1}-\underline{1}')\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1}) \\
&\times\overline{\omega_{1'}(\underline{1}')\omega_{2'}(-\underline{1})\omega_{3'}(\underline{1}-\underline{1}')}^{0} \\
&+\sum_{\underline{2}'}\mathfrak{M}_{1,2',3'}(\underline{1},\underline{2}',-\underline{1}-\underline{2}')\mathfrak{M}_{1',2}(\underline{1},-\underline{1})\ \overline{\omega_{1'}(\underline{1})\omega_{2'}(\underline{2}')\omega_{3'}(-\underline{1}-\underline{2}')}^{0}\Bigg]
\end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2}\left[\sum_{\underline{1}',1',3'}\mathfrak{M}_{1',2,3'}(\underline{1}',-\underline{1},\underline{1}-\underline{1}')\;V_1^{-1}(\underline{1})\overline{\omega_{1'}(\underline{1}')\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{3'}(\underline{1}-\underline{1}')}^{0}\right.$$

$$\left.+\sum_{\underline{2}',2',3'}\mathfrak{M}_{1,2',3'}(\underline{1},\underline{2}',-\underline{1}-\underline{2}')V_2^{-1}(\underline{1})\;\overline{\omega_{-2}(\underline{1})\omega_{2'}(\underline{2}')\omega_{3'}(-\underline{1}-\underline{2}')}^{0}\right]. \tag{4.78}$$

Розв'язуючи рівняння (4.77) ітераціями (аналогічно як було знайдено $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(\underline{1})}^{0}$), отримуємо наступний розв'язок:

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{1}=-V_1(\underline{1})V_2(\underline{1})\delta(1+2)$$

$$\times\sum_{1',2'}R_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})V_{1'}(\underline{1})C_{-1',-2'}(\underline{1},-\underline{1})V_{2'}(\underline{1})R_{2',2}(\underline{1},-\underline{1}). \tag{4.79}$$

У вираз для $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{1}$ (4.79) входить середнє від трьох польових змінних ω у наближенні нуль сум по x. Для того щоб знайти це середнє розглянемо рівняння (4.62) у цьому наближенні:

$$\tilde{C}_{1,2,3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})$$

$$-V_1^{-1}(\underline{1})V_2^{-1}(\underline{2})V_3^{-1}(-\underline{1}-\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$+V_2^{-1}(\underline{2})V_3^{-1}(-\underline{1}-\underline{2})\sum_{1'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{1'}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$+V_1^{-1}(\underline{1})V_3^{-1}(-\underline{1}-\underline{2})\sum_{2'}\mathfrak{M}_{2,2'}(\underline{2},-\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{2})\omega_{-3}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$+V_1^{-1}(\underline{1})V_2^{-1}(\underline{2})\sum_{3'}\mathfrak{M}_{3,3'}(-\underline{1}-\underline{2},\underline{1}+\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{3'}(\underline{1}+\underline{2})}^{0} \tag{4.80}$$

$$-V_3^{-1}(\underline{1}+\underline{2})\sum_{1',2'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})\mathfrak{M}_{2,2'}(\underline{2},-\underline{2})\overline{\omega_{1'}(-\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{2})\omega_{-3}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$-V_1^{-1}(\underline{1})\sum_{2',3'}\mathfrak{M}_{2,2'}(\underline{2},-\underline{2})\mathfrak{M}_{3,3'}(-\underline{1}-\underline{2},\underline{1}+\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{2})\omega_{3'}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$-V_2^{-1}(\underline{1})\sum_{1',3'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})\mathfrak{M}_{3,3'}(-\underline{1}-\underline{2},\underline{1}+\underline{2})\overline{\omega_{1'}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{3'}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}$$

$$+\sum_{1',2',3'}\mathfrak{M}_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})\mathfrak{M}_{2,2'}(\underline{2},-\underline{2})\mathfrak{M}_{3,3'}(-\underline{1}-\underline{2},\underline{1}+\underline{2})$$

$$\times\overline{\omega_{1'}(-\underline{1})\omega_{2'}(-\underline{2})\omega_{3'}(\underline{1}+\underline{2})}^{0}=0,$$

де введено наступне позначення:

$$\tilde{C}_{1,2,3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})=\mathfrak{M}_{1,2,3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})$$

$$-V_1^{-1}(\underline{1})\sum_{1'}\mathfrak{M}_{1',2,3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{1'}(\underline{1})}^{0}$$

$$-V_2^{-1}(\underline{2})\sum_{2'}\mathfrak{M}_{1,2',3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\overline{\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{2'}(\underline{2})}^{0}$$

$$-V_3^{-1}(\underline{1}+\underline{2})\sum_{3'}\mathfrak{M}_{1,2,3'}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\overline{\omega_{-3}(\underline{1}+\underline{2})\omega_{3'}(-\underline{1}-\underline{2})}^{0} \tag{4.81}$$

$$+\sum_{1',2'}\mathfrak{M}_{1',2,3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\mathfrak{M}_{1,2'}(\underline{1},-\underline{1})\overline{\omega_{2'}(-\underline{1})\omega_{1'}(\underline{1})}^{0}$$

$$+\sum_{1',3'}\mathfrak{M}_{1,2,3'}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\mathfrak{M}_{3,1'}(-\underline{1}-\underline{2},\underline{1}+\underline{2})\overline{\omega_{1'}(\underline{1}+\underline{2})\omega_{3'}(-\underline{1}-\underline{2})}^{0}$$

$$+\sum_{2',3'}\mathfrak{M}_{1,2',3}(\underline{1},\underline{2},-\underline{1}-\underline{2})\mathfrak{M}_{2,3'}(\underline{2},-\underline{2})\overline{\omega_{2'}(-\underline{2})\omega_{3'}(\underline{2})}^{0}.$$

Розв'язуючи рівняння (4.80) ітераціями, знаходимо вираз для $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(-\underline{3})}$ у наближенні нуль сум по x:

$$\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(-\underline{3})}^{0}=V_1(\underline{1})V_2(\underline{2})V_3(\underline{3})\delta(\underline{1}+\underline{2}+\underline{3})$$

$$\times\sum_{1',2',3'}R_{1,1'}(\underline{1},-\underline{1})V_{1'}(\underline{1})R_{2,2'}(\underline{2},-\underline{2})V_{2'}(\underline{2})$$

$$\times R_{3,3'}(\underline{3},-\underline{3})V_{3'}(\underline{3})\tilde{C}_{-1',-2',-3'}(\underline{1},\underline{2},\underline{3}). \tag{4.82}$$

Аналогічно можна знайти $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})}^{2}$, для цього треба розглядати рівняння (4.61) у наближенні двох сум по x, знайти $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(-\underline{3})}^{1}$ із рівняння (4.62) та $\overline{\omega_{-1}(-\underline{1})\omega_{-2}(-\underline{2})\omega_{-3}(-\underline{3})\omega_{-4}(-\underline{4})}^{0}$ — з рівняння (4.63), і так далі.

4.2.1. Розрахунок перенормованого кумулянта другого порядку у наближенні нуль сум по x

Як було вище показано (див.(4.75)) перенормований кумулянт другого порядку $\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x)$ у наближенні нуль сум по x задовольняє наступне інтегральне рівняння:

$$\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x) = \mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x,-x)$$

$$+\frac{\beta}{SL}\sum_{k}\mathfrak{M}_{k_1,k}(x,-x)\nu_k(\mathbf{q})\bar{\mathfrak{M}}_{-k,k_2}(x,-x). \qquad (4.83)$$

Перейшовши до $(\mathbf{q},z)$-представлення згідно (4.4), отримуємо:

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2) = \mathfrak{M}(x|z_1,z_2)$$

$$+\frac{\beta}{SL^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz'\,\mathfrak{M}(x|z_1,z)\nu(\mathbf{q}|z-z')\bar{\mathfrak{M}}(x|z',z_2), \qquad (4.84)$$

де введено наступні позначення:

$$\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2) = \sum_{k_1,k_2}\exp\left(ik_1z_1+ik_2z_2\right)\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x), \qquad (4.85)$$

$$\bar{\mathfrak{M}}_{k_1,k_2}(x,-x) = \frac{1}{L^2}\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_1\int\limits_{-L/2}^{+L/2}dz_2\exp\left(-ik_1z_1-ik_2z_2\right)\bar{\mathfrak{M}}(x|z_1,z_2). \qquad (4.86)$$

У випадку моделювання поверхневого потенціалу нескінченно високою потенціальною стінкою та при $\beta\to\infty$ інтегральне рівняння другого порядку (4.84) перетворюється в наступне інтегральне рівняння вже першого порядку (в межах інтегралу зроблено граничний перехід $L\to\infty$):

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = -\frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\theta(-z_1)\delta(z_1-z_2)$$

$$-\frac{\varkappa_{TF}^2}{2q}\theta(-z_1)\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dz\,\exp(-q|z_1-z|)\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q},\nu=0|z,z_2), \qquad (4.87)$$

де використано співвідношення (4.16) та наближення, які до нього призвели.

Для того, щоб розв'язати рівняння (4.87) зручно ввести у розгляд нову невідому функцію $\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)$ таку, що

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = -\frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\theta(-z_1)\delta(z_1-z_2)$$

$$+\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)\theta(-z_1)\theta(-z_2), \qquad (4.88)$$

тоді рівняння (4.87) набуде вигляду (при $z_1,z_2<0$):

$$\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = \frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\frac{\varkappa_{TF}^2}{2q}\exp(-q|z_1-z_2|)$$

$$-\frac{\varkappa_{TF}^2}{2q}\int\limits_{-\infty}^{0}dz\exp(-q|z_1-z|)\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z,z_2). \qquad (4.89)$$

Продиференціювавши це рівняння два рази по z_1, отримуємо наступне диференціальне рівняння:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-Q^2\right)\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = -\frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\varkappa_{TF}^2\delta(z_1-z_2), \qquad (4.90)$$

розв'язок якого шукаємо у такому вигляді:

$$\bar{\mathfrak{M}}_1(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = \frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)\frac{\varkappa_{TF}^2}{2Q}$$

$$\times\Big(\exp\left(-Q|z_1-z_2|\right)+C\exp\left(Q(z_1+z_2)\right)\Big), \qquad (4.91)$$

де C — невідома константа, яку можна визначити шляхом підстановки (4.91) у рівняння (4.89):

$$C = \frac{Q-q}{Q+q}. \qquad (4.92)$$

Тоді врахувавши (4.92), (4.91), (4.88) та (4.87), отримуємо наступний вираз для перенормованого кумулянта другого порядку у наближенні нуль сум по x:

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2) = \mathfrak{M}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)$$

$$+\frac{\varkappa_{TF}^2}{4\pi}\frac{L^2S}{\beta}\rho(\mu)g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)\theta(-z_1)\theta(-z_2), \qquad (4.93)$$

де $g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)$ — екранований потенціал у випадку низьких температур.

Провівши аналогічні розрахунки у випадку $\beta \to 0$, отримуємо

$$\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = \mathfrak{M}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)$$

$$+\frac{\varkappa_D^2}{2\pi} LN g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)\theta(-z_1)\theta(-z_2), \qquad (4.94)$$

де $g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)$ — екранований потенціал у випадку високих температур.

4.2.2. Розрахунок екранованого потенціалу, побудованого на перенормованому кумулянті другого порядку

У випадку нескінченно високої потенціальної стінки для поверхневого потенціалу та при низьких температурах рівняння (4.5) можна, використовуючи (4.93) та (4.16), записати так:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 - \varkappa_{TF}^2\theta(-z_1)\right)\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) + \frac{\varkappa_{TF}^4}{4\pi}e^2\theta(-z_1)$$

$$\times \int\limits_{-\infty}^{0} dz\, g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z)\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z,z_2) = -4\pi e^2\delta(z_1 - z_2). \qquad (4.95)$$

Якщо $z_1, z_2 > 0$, то розв'язок рівняння (4.95) є наступним:

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = \frac{2\pi e^2}{q}\left[\mathrm{e}^{-q|z_1-z_2|} + C_1\mathrm{e}^{-q(z_1+z_2)}\right], \qquad (4.96)$$

де C_1 — константа, яку треба визначити з умови неперервності екранованого потенціалу.

У випадку $z_1 > 0$, $z_2 < 0$ маємо такий розв'язок:

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = f_1(z_2)\mathrm{e}^{-qz_1}, \qquad (4.97)$$

де $f_1(z_2)$ — невідома функція, яку визначимо пізніше.

У випадку $z_1, z_2 < 0$ рівняння (4.95) набуває вигляду:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)$$

$$+\frac{\varkappa_{TF}^4}{4\pi}e^2\int\limits_{-\infty}^{0} dz\, g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z)\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z,z_2) = -4\pi e^2\delta(z_1 - z_2), \qquad (4.98)$$

подіявши на це інтегро-диференціальне рівняння зліва оператором $\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)$, отримуємо наступне диференціальне рівняння:

$$\left[\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)^2 - \varkappa_{TF}^4\right]\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)$$

$$= -4\pi e^2\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)\delta(z_1 - z_2), \qquad (4.99)$$

де було використано рівняння (4.17). Враховуючи, що згідно (4.17) має місце наступне співвідношення

$$-4\pi e^2\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)\delta(z_1 - z_2) = \left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)^2 g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2), \qquad (4.100)$$

то рівняння (4.99) набуде вигляду:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - Q^2\right)^2\left[\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) - g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2)\right]$$

$$= \varkappa_{TF}^4\bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2). \qquad (4.101)$$

Для подальшого розгляду зручно ввести таке позначення:

$$\Delta g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = \bar{g}(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) - g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2), \qquad (4.102)$$

тоді рівняння (4.101) можна записати так:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 - 2\varkappa_{TF}^2\right)$$

$$\times\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - q^2\right)\Delta g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = \varkappa_{TF}^4 g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2). \qquad (4.103)$$

Розв'язок цього рівняння можна представити у вигляді двократної згортки:

$$\Delta g(\mathbf{q},\nu = 0|z_1,z_2) = \varkappa_{TF}^4\int\limits_{-\infty}^{0}dz\int\limits_{-\infty}^{0}dz' K_2(z_1,z)K_1(z,z')g(\mathbf{q},\nu = 0|z',z_2), \qquad (4.104)$$

де $K_1(z,z')$ та $K_2(z_1,z)$ — функції Гріна, які задовольняють наступну пару рівнянь:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2} - q^2 - 2\varkappa_{TF}^2\right)K_1(z_1,z_2) = \delta(z_1 - z_2), \qquad (4.105)$$

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right)K_2(z_1,z_2)=\delta(z_1-z_2). \tag{4.106}$$

Щоб отримати явний вираз для $\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)$ необхідно знайти функції Гріна K_1 та K_2 з рівнянь (4.105) та (4.106), після того підставити їх в (4.104). Проте із структури рівнянь (4.105), (4.106) та (4.104) зрозуміло, що розв'язок має наступну структуру:

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=B_1\mathrm{e}^{-q|z_1-z_2|}+B_2\mathrm{e}^{q(z_1+z_2)}$$

$$+B_3\mathrm{e}^{-\bar{Q}|z_1-z_2|}+B_4\mathrm{e}^{\bar{Q}(z_1+z_2)}, \tag{4.107}$$

де $\bar{Q}=\sqrt{q^2+2\varkappa_{TF}^2}$. І тому простіше підставити (4.107) в (4.99) і звідти визначити константи B_1 та B_3, вони є такими:

$$B_1=\frac{\pi e^2}{q},\ B_3=\frac{\pi e^2}{\bar{Q}}. \tag{4.108}$$

З умови неперервності екранованого потенціалу

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1>0,z_2<0)\Big|_{z_2=0}=\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1>0,z_2>0)\Big|_{z_2=0} \tag{4.109}$$

випливає, що

$$C_1=-\frac{\bar{Q}-q}{\bar{Q}+q}. \tag{4.110}$$

Аналогічно з умови неперервності екранованого потенціалу та його першої похідної

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1>0,z_2<0)\Big|_{z_1=0}=\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1<0,z_2<0)\Big|_{z_1=0}, \tag{4.111}$$

$$\frac{d\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1>0,z_2<0)}{dz_1}\bigg|_{z_1=0}=\frac{d\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1<0,z_2<0)}{dz_1}\bigg|_{z_1=0}, \tag{4.112}$$

отримуємо константи B_2 та B_4:

$$B_2=-\frac{\pi e^2}{q},\ B_4=\frac{\pi e^2}{\bar{Q}}\left(1+2\frac{\bar{Q}-q}{\bar{Q}+q}\right). \tag{4.113}$$

У випадку $z_1<0$, $z_2>0$ згідно (4.95) маємо таке рівняння:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-Q^2\right)\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)$$

$$+\frac{\varkappa_{TF}^4}{4\pi}e^2\int\limits_{-\infty}^{0}dz\,g(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z)\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z,z_2)=0, \tag{4.114}$$

яке, подіявши зліва оператором $\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-Q^2\right)$, зводимо до наступного вигляду:

$$\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2-2\varkappa_{TF}^2\right)\left(\frac{d^2}{dz_1^2}-q^2\right)\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=0, \tag{4.115}$$

розв'язок якого:

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=f_2(z_2)\left(C_2\mathrm{e}^{qz_1}+\mathrm{e}^{\sqrt{q^2+2\varkappa_{TF}^2}z_1}\right), \tag{4.116}$$

де C_2 — константа, $f_2(z_2)$ — невідома функція, яку визначено нижче. Враховуючи, що вирази (4.97) та (4.116) повинні бути симетричними відносно перестановки частинок, приходимо до висновку, що: $C_2=0$, $f_1(z_2)=C\mathrm{e}^{\bar{Q}z_2}$, $f_2(z_2)=C\mathrm{e}^{-qz_2}$, і, отже,

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=C\mathrm{e}^{-qz_1+\bar{Q}z_2},\ z_1>0,\ z_2<0, \tag{4.117}$$

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1,z_2)=C\mathrm{e}^{-qz_2+\bar{Q}z_1},\ z_1<0,\ z_2>0, \tag{4.118}$$

константу C визначаємо з умови, що

$$\left[\frac{d\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1>0,z_2<0)}{dz_1}-\frac{d\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1<0,z_2>0)}{dz_2}\right]\Bigg|_{z_1=z_2=0}$$

$$=-4\pi e^2 \tag{4.119}$$

і вона є такою:

$$C=\frac{4\pi e^2}{\bar{Q}+q}. \tag{4.120}$$

Отже, для нескінченно високого потенціального бар'єру в якості поверхневого потенціалу при низьких температурах екранований потенціал має наступний вигляд:

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1\geqslant 0,z_2\geqslant 0)=\frac{2\pi e^2}{q}\left[\mathrm{e}^{-q|z_1-z_2|}-\frac{\bar{Q}-q}{\bar{Q}+q}\mathrm{e}^{-q(z_1+z_2)}\right], \tag{4.121}$$

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1\geqslant 0,z_2\leqslant 0)=\frac{4\pi e^2}{\bar{Q}+q}\mathrm{e}^{-qz_1+\bar{Q}z_2}, \tag{4.122}$$

$$\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z_1\leqslant 0,z_2\geqslant 0)=\frac{4\pi e^2}{\bar{Q}+q}\mathrm{e}^{-qz_2+\bar{Q}z_1}, \tag{4.123}$$

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

$$+\frac{\pi e^2}{\bar{Q}}\left[\mathrm{e}^{-\bar{Q}|z_1-z_2|}+\mathrm{e}^{\bar{Q}(z_1+z_2)}\right]+\frac{2\pi e^2}{\bar{Q}}\frac{\bar{Q}-q}{\bar{Q}+q}\mathrm{e}^{\bar{Q}(z_1+z_2)}. \qquad (4.124)$$

З порівняння (4.121), (4.122) та (4.123) із (4.31), (4.33) та (4.32) видно, що врахування кулонівської взаємодії в кумулянті другого порядку (4.93) не змінює структури екранованого потенціалу в областях ($z_1\geqslant 0$, $z_2\geqslant 0$), ($z_1\geqslant 0$, $z_2\leqslant 0$) та ($z_1\leqslant 0$, $z_2\geqslant 0$), а призводить до заміни $Q=\sqrt{q^2+\varkappa_{TF}^2}$ на $\bar{Q}=\sqrt{q^2+2\varkappa_{TF}^2}$, тобто до більш швидкого загасання екранованого потенціалу на великих віддалях вглиб металу (вирази (4.122) та (4.123)).

Зауважимо, що у випадку високих температур у виразах (4.121)–(4.124) слід замінити обернений радіус екранування Томаса-Фермі $\varkappa_{TF}$ на $\varkappa_D$ ($\varkappa_D$ — обернений радіус екранування Дебая).

5. Взаємодія двох заряджених частинок біля поверхні металу

Для того, щоб порівняти результати наших розрахунків із результатами, які були отримані в праці [18], розглянемо потенціальну енергію взаємодії двох зарядів e_1 та e_2, які знаходяться у вакуумі на однаковій віддалі $z_1=z_2=z$ від поверхні металу згідно (4.121) є такою:

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||},z)=\frac{e_1e_2}{(2\pi)^2}\int d\mathbf{q}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}}\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z,z)/e^2, \qquad (5.1)$$

де $r_{||}=|\mathbf{r}_{||}|$ — відстань між зарядами у паралельній до поверхні площині. У випадку малих імпульсів передачі ($q^2\ll\varkappa_{TF}^2$) екранований потенціал взаємодії $\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z,z)$ (4.121) набуває наступного вигляду:

$$\frac{1}{e^2}\bar{g}(\mathbf{q},\nu=0|z,z)\cong\frac{2\pi}{q}\left(1-\mathrm{e}^{-2qz}+\frac{2q}{\sqrt{2}\varkappa_{TF}}\mathrm{e}^{-2qz}\right), \qquad (5.2)$$

тоді потенціальна енергія взаємодії $\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||},z)$ (5.1)

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||},z)=e_1e_2\int\limits_0^{+\infty}dq\left(1-\mathrm{e}^{-2qz}+\frac{2q}{\sqrt{2}\varkappa_{TF}}\mathrm{e}^{-2qz}\right)J_0(qr_{||}), \qquad (5.3)$$

де $J_0(qr_{||})$ — функція Бесселя нульового порядку. Оскільки згідно [25] має місце співвідношення:

$$\int\limits_0^{+\infty}dq\,\mathrm{e}^{-2qz}J_0(qr_{||})=\frac{1}{\sqrt{r_{||}^2+4z^2}}, \qquad (5.4)$$

то

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||},z)=e_1e_2\left(\frac{1}{r_{||}}-\frac{1}{\sqrt{r_{||}^2+4z^2}}+\frac{4}{\sqrt{2}\varkappa_{TF}}\frac{z}{(r_{||}^2+4z^2)^{3/2}}\right), \qquad (5.5)$$

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

У випадку $r_{||}\gg z$ знаходимо асимптотику:

$$\bar{W}_{12}(\mathbf{r}_{||},z)\cong\frac{2e_1e_2}{r_{||}^3}z^2, \qquad (5.6)$$

яка співпадає з результатом роботи Кона та Лау [26] та відрізняється у два рази від енергії взаємодії двох диполів.

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

$$\bar{W}_1(z)=\left.\left(\frac{1}{2}\bar{W}_{11}(\mathbf{r}_{||},z)-\frac{e^2}{2r_{||}}\right)\right|_{r_{||}\to 0}=-\frac{e^2}{2}\int\limits_0^{+\infty}dq\,\mathrm{e}^{-2qz}\frac{\sqrt{q^2+2\varkappa_{TF}^2}-q}{\sqrt{q^2+2\varkappa_{TF}^2}+q}$$

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

$$\left.+\frac{\pi}{\sqrt{2}\varkappa_{TF}z}\left(H_1(2\sqrt{2}\varkappa_{TF}z)-N_1(2\sqrt{2}\varkappa_{TF}z)\right)\right], \qquad (5.7)$$

де H_0 та H_1 — функції Струве, N_0 та N_1 — функції Неймана відповідно нульового та першого порядків [25].

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

$$\bar{W}_1(z)\cong-\frac{e^2}{4z}\left(1-\frac{1}{\sqrt{2}\varkappa_{TF}z}\right), \qquad (5.8)$$

де перший доданок відповідає класичним силам зображення.

З іншої сторони, при $\varkappa_{TF} z \ll 1$ отримуємо, що

$$\bar{W}_1(z) \cong -\frac{e^2}{2}\sqrt{2}\varkappa_{TF}\left[1-\sqrt{2}\varkappa_{TF} z\left(\frac{4}{3}-\frac{1}{2}\gamma-\frac{1}{2}\ln\left(\sqrt{2}\varkappa_{TF} z\right)\right)\right], \tag{5.9}$$

де $\gamma = 0.577215$ — постійна Ейлера.

Величина $\bar{W}_1(0) = \frac{e^2}{2}\sqrt{2}\varkappa_{TF}$ скінчена і відповідає обмінно-кореляційній частині енергії взаємодії заряду e із напівобмеженим металом [27]. Таким чином, вираз (5.7) містить інформацію як про сили зображення на великих віддалях від поверхні металу, так і про багаточастинкові обмінно-кореляційні ефекти всередині металу.

Аналогічно можна розрахувати величини $W_{12}(\mathbf{r}, z)$, $W_1(z)$ на основі екранованого потенціалу $g(\mathbf{q}, \nu = 0|z_1, z_2)$ (4.31) [18]. Відмінність полягає у заміні величини $\sqrt{2}\varkappa_{TF}$ та $\varkappa_{TF}$. Обмінно-кореляційна частина енергії взаємодії заряду e із напівобмеженим металом, яка була розрахована з врахуванням перенормування кумулянта другого порядку, виявляється у $\sqrt{2}$ рази більшою за аналогічну величину без врахування перенормування:

$$\frac{\bar{W}_1(0)}{W_1(0)} = \sqrt{2}. \tag{5.10}$$

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

Додаток A

Тут подано розрахунки незвідних середніх n-го порядку.

Розглянемо незвідне середнє першого порядку:

$$\mathfrak{M}_{k_1}(x_1) = i\langle T\rho_{k_1}(x_1)\rangle_{0,c}, \tag{A1}$$

для якого згідно означення усереднення (3.3) маємо

$$\mathfrak{M}_{k_1}(x_1) = i\frac{1}{\Xi_0}\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0'}T\rho_{k_1}(x_1)\right)$$

$$= i\frac{1}{\Xi_0}\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0'}T\frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta d\beta'\,\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'}\rho_{k_1}(\mathbf{q}_1|\beta')\right)$$

$$= i\frac{1}{\Xi_0}\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0'}T\frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta d\beta'\,\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'}\sum_{\mathbf{p},\alpha,\alpha'}\langle\alpha|\mathrm{e}^{-ik_1 z}|\alpha'\rangle\right.$$

$$\left.\times\, a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}|\beta')a_{\alpha'}(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1|\beta')\right)$$

$$= i\frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta d\beta'\sum_{\mathbf{p},\alpha,\alpha'}\langle\alpha|\mathrm{e}^{-ik_1 z}|\alpha'\rangle\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'}\lim_{\beta'\to+0}G_\alpha(\mathbf{p}|\beta')\delta_{\mathbf{q}_1,0}\delta_{\alpha,\alpha'}, \tag{A2}$$

де $G_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1-\beta_2) = -\langle Ta_\alpha(\mathbf{p}|\beta_1)a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}|\beta_2)\rangle_0$ — одночастинкова функція Гріна. Оскільки скрізь, де відбувається сумування по $\mathbf{q}$ має місце умова $\mathbf{q} \neq 0$, то кумулянт першого порядку тотожно рівний нулеві: $\mathfrak{M}_{k_1}(x_1) = 0$.

Розглянемо незвідне середнє другого порядку:

$$\mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x_1,x_2) = i^2\langle T\rho_{k_1}(x_1)\rho_{k_2}(x_2)\rangle_{0,c}$$

$$= i^2\langle T\rho_{k_1}(x_1)\rho_{k_2}(x_2)\rangle_0 - i^2\langle T\rho_{k_1}(x_1)\rangle_0\langle T\rho_{k_2}(x_2)\rangle_{0,c}$$

$$= i^2\frac{1}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1,\alpha_1'}\sum_{\mathbf{p}_2,\alpha_2,\alpha_2'}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1 z}|\alpha_1'\rangle\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ik_2 z}|\alpha_2'\rangle\left\langle T\int\limits_0^\beta d\beta'\int\limits_0^\beta d\beta''\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'}\right.$$

$$\left.\times\mathrm{e}^{i\nu_2\beta''}a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1|\beta')a_{\alpha_1'}(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1|\beta')a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2|\beta'')a_{\alpha_2'}(\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2|\beta'')\right\rangle_0$$

$$= i^2\frac{1}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1,\alpha_1'}\sum_{\mathbf{p}_2,\alpha_2,\alpha_2'}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1 z}|\alpha_1'\rangle\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ik_2 z}|\alpha_2'\rangle\delta_{\alpha_1,\alpha_2'}\delta_{\alpha_1',\alpha_2}$$

$$\times\int\limits_0^\beta d\beta'\int\limits_0^\beta d\beta''\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'+i\nu_2\beta''}G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\beta''-\beta')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2|\beta'-\beta'')\delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2}$$

$$\times\delta_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1,\mathbf{p}_2} = i^2\frac{1}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1,\alpha_2}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1 z}|\alpha_1'\rangle\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ik_2 z}|\alpha_2'\rangle\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,0}$$

$$\times\int\limits_0^\beta d\beta'\int\limits_0^\beta d\beta''\,\mathrm{e}^{i\nu_1\beta'+i\nu_2\beta''}G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\beta''-\beta')G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1|\beta'-\beta''), \tag{A3}$$

перейшовши до частотного представлення:

$$G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\beta''-\beta') = \frac{1}{\beta}\sum_{\nu} G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\nu)\mathrm{e}^{i\nu(\beta''-\beta')}, \tag{A4}$$

де $G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\nu) = (i\nu+\mu-E_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1))^{-1}$ — фур'є-образ одночастинкової функції Гріна, $\nu = \frac{\pi}{\beta}(2n+1)$, $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$,

$$\mathfrak{M}_{k_1,k_2}(x_1,x_2) = -i^2\frac{1}{\beta^2}\sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1,\alpha_2}\sum_{\nu}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1z}|\alpha_1'\rangle\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ik_2z}|\alpha_2'\rangle$$

$$\times G_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1|\nu)G_{\alpha_2}(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1|\nu-\nu_1)\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2,0}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}. \tag{A5}$$

Аналогічно можна розрахувати незвідне середнє n-го порядку ($n \geqslant 3$), для якого маємо наступний вираз:

$$\mathfrak{M}_{k_1,\ldots,k_n}(x_1,\ldots,x_n) = (-1)^{n-1}i^n\frac{1}{\beta}\sum_{\mathbf{p},\alpha_1,\ldots,\alpha_n}\sum_{\nu}\langle\alpha_1|\mathrm{e}^{-ik_1z}|\alpha_2\rangle$$

$$\times\langle\alpha_2|\mathrm{e}^{-ik_2z}|\alpha_3\rangle\cdots\langle\alpha_n|\mathrm{e}^{-ik_nz}|\alpha_1\rangle G_{\alpha_1}(\mathbf{p}|\nu)G_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1|\nu-\nu_1)\cdots$$

$$\times G_{\alpha_n}(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\ldots-\mathbf{q}_{n-1}|\nu-\nu_1-\nu_1-\nu_2-\ldots-\nu_{n-1})$$

$$\times\delta_{x_1+x_2+\cdots+x_n,0}, \tag{A6}$$

де $\nu_1,\ldots,\nu_2$ — бозівські частоти, ν — фермієвська.

Література

1. С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, Усп. физ. наук **168**, 1083 (1998).
2. П. Г. Борзяк, О. Е. Кияєв, А. Г. Наумовець, Р. Д. Федорович, Укр. фіз. журн. **43**, 1487 (1998).
3. В. Г. Литовченко, Д. В. Корбутяк, С. Г. Крилюк, Ю. В. Крюченко, Укр. фіз. журн. **43**, 1493 (1998).
4. F. Besenbacher, Rep. Prog. Phys. **59**, 1737 (1996).
5. И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, *Статистическая теория классических равновесных систем* (Наукова думка, Киев, 1980).
6. И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудавский, Теор. мат. физ. **49**, 234 (1981).
7. И. Р. Юхновский, П. П. Костробий, *Препринт АН УССР ИТФ-80-79Р* (Ин-т теор. физики, Киев, 1980).
8. И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, И. И. Курыляк, *Препринт АН УССР ИТФ-77-97Р* (Ин-т теор. физики, Киев, 1977).
9. И. Р. Юхновский, М. Ф. Головко, Е. Н. Совьяк, *Препринт АН УССР ИТФ-82-159Р* (Ин-т теор. физики, Киев, 1982).

10. А. Л. Ребенко, *Препринт АН УССР, ИТФ-81-118Р* (Ин-т теор. физики, Киев, 1981).
11. F. Bechstedt, R. Elderlein, D. Reichardt, Phys. Stat. Sol. (b) **117**, 261 (1983).
12. Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Ю. А. Романов, Физ. тв. тела **22**, 2700 (1980).
13. А. И. Войтенко, А. М. Габович, В. М. Розенбаум, *Препринт АН УССР № 17* (Ин-т физики, Киев, 1984).
14. А. С. Усенко, Укр. фіз. журн. **28**, 839 (1983).
15. M. Vavrukh, V. Solovyan, N. Vavrukh, Phys. stat. sol. (b) **117**, 361 (1993).
16. И. И. Курыляк, П. П. Костробий, А. А. Пизио, *Препринт АН УССР ИТФ-87-7Р* (Ин-т теор. физики, Киев, 1987).
17. И. А. Вакарчук, Ю. К. Рудавский, Г. В. Понедилок, *Препринт АН УССР ИТФ-81-34Р* (Ин-т теор. физики, Киев,1981).
18. А. М. Габович, Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Ю. А. Романов, Журн. эксп. теор. физ. **75**, 249 (1978).
19. А. В. Сидякин, Журн. эксп. теор. физ. **58**, 573 (1970).
20. А. М. Габович, Л. Г. Ильченко, Э. А. Пашицкий, Физ. тв. тела **21**, 1683 (1979).
21. Р. Беллман, *Введение в теорию матриц* (Наука, Москва, 1969).
22. Ваврух М. В. Автореферат дисертаційної роботи на здобуття наукового ступеня доктора фіз.-мат. наук, 1986.
23. Г. И. Бигун, Теор. мат. физ. **62**, 446 (1985).
24. Г. М. Фихтенгольц, *Курс диференциального и интегрального исчисления* (Наука, Москва, 1970).
25. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (Наука, Москва, 1971).
26. W. Kohn, K.-H. Lau, Sol. State Comm. **18**, 553 (1976).
27. J. Appelbaum, *Surface Physics of Materials* (Academic Press, New York — London, 1975).

Петро Петрович Костробій
Богдан Михайлович Маркович

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

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