

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
Ольга Зіновіївна Казановська

Двочастинкова кореляційна функція "ГУСТИНА-ГУСТИНА"
НАПШОВОБМЕЖЕНОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ІЗ ВРАХУВАННЯМ
ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

Роботу отримано 29 вересня 2006 р.

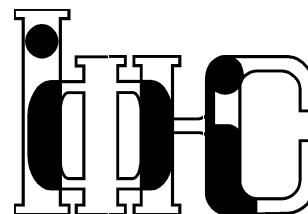
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-06-15U

П. П. Костробій*, Б. М. Маркович*, О. З. Казановська*

ДВОЧАСТИНКОВА КОРЕЛЯЦІЙНА ФУНКЦІЯ
"ГУСТИНА-ГУСТИНА" НАПШОВОБМЕЖЕНОГО
ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ ІЗ ВРАХУВАННЯМ ПОПРАВКИ НА
ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

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

ЛЬВІВ

УДК: 530.145

PACS: 71.45.Gm

Двочастинкова кореляційна функція “густина–густина” напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле

П. П. Костробій, Б. М. Маркович, О. З. Казановська

Анотація. Запропоновано підхід для врахування поправки на локальне поле у випадку неоднорідної електронної системи. Проведено розрахунок двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” напівобмеженого електронного газу з використанням різних виразів для поправки на локальне поле та досліджено вплив площини поділу на кореляційну функцію.

Density-response function of semi-infinite electron gas with account local-field correction function

P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. Z. Kazanovska

Abstract. An approach for the calculation of the local-field correction function in a non-uniform electron system is presented. Using different expressions for local-field correction function, calculation density-response function of semi-infinite electron gas is made. Influence of a plane interface on density-response function is investigated.

Подається в Condens. Matter Phys.

Submitted to Condens. Matter Phys.

1. Вступ

Дослідження властивостей фермі-систем посідає одне з центральних місць у статистичній фізиці та фізиці твердого тіла [1, 2]. Для періодичних металічних систем концепція локального поля є загальноприйнятим способом врахування кореляційних ефектів, а поправка на локальне поле — одна з універсальних характеристик систем взаємодіючих частинок, що визначає функцію діелектричної проникності та кореляційні ефекти. Ця характеристика є найповніше вивчена для моделі електронної рідини. Загальні властивості поправки на локальне поле є добре відомими, проте її мікроскопічна теорія ще далека від свого завершення. Цьому присвячені праці [3–6], в яких у межах базисного підходу отримано інтегральні рівняння для поправки на локальне поле в наближенні три- та чотиричастинкових кореляційних функцій базисної системи (в ролі базисної системи використовуються ідеальні системи ферміонів).

У випадку просторово неоднорідних фермі-систем така теорія є практично нерозвинутою. Усі розрахунки для неоднорідних фермі-систем виконуються, як правило, з використанням наближення локальної густини в методі функціоналу густини [7, 8] або у наближенні хаотичних фаз [9–15]. Метод функціоналу густини по своїй суті є одночастинковим підходом і не дає змоги коректно врахувати колективні явища (сили зображення, слабкий зв'язок і т.д.) [16, 17]. Причиною використання наближення хаотичних фаз у базисному підході є надзвичайні ускладнення, які виникають внаслідок відсутності періодичності в просторово обмежених системах. Для ілюстрації цього можна згадати, що тоді як у цьому підході для двочастинкової кореляційної функції в просторово однорідній системі отримуємо просте алгебраїчне рівняння [3–6] (у наближенні хаотичних фаз), то у випадку неоднорідної системи — матричне рівняння (3.3), розв'язати яке аналітично вдається лише з використанням грубих наближень. У праці [18] побудована загальна схема для врахування три- та чотиричастинкових кореляційних функцій базової неоднорідної фермі-системи, проте практична її реалізація є надзвичайно складною. Для того, щоб обійти ці труднощі в даній роботі запропоновано простий підхід для врахування поправки на локальне поле. Цей підхід використовує відомі для неї результати з теорії однорідних фермі-систем, проте він враховує ефекти зображення, які є принциповими для просторово обмежених фермі-систем.

2. Модель

Розглядаємо напівобмежений простий метал в рамках моделі “желе”, тобто іонна підсистема металу моделюється рівномірно розподіленим додатним зарядом, який обмежений площиною поділу $z = -d$, з густиною:

$$\varrho_{\text{jell}}(x, y, z) \equiv \varrho_{\text{jell}}(z) = n_{\text{bulk}} \theta(-d - z), \quad (2.1)$$

де $\theta(x)$ — функція Хевісайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

n_{bulk} — концентрація електронів, $d > 0$ — параметр, який визначається самоузгоджено з умови електронейтральності

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz (\varrho(z) - \varrho_{\text{jell}}(z)) = 0, \quad (2.2)$$

де $\varrho(z)$ — густина електронів.

Будемо вважати, що іонна підсистема формує поверхневий потенціал для електронів $V(\mathbf{r}) \equiv V(z)$, який не дозволяє їм покинути метал. Враховуючи, що поверхневий потенціал є функцією лише нормальної до поверхні поділу координати електрона, хвильова функція електрона та його енергія є такі:

$$\Psi_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \varphi_{\alpha}(z), \quad E_{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_{\alpha}, \quad (2.3)$$

де $\hbar\mathbf{p}$ — двовимірний імпульс електрона в площині поділу,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \varphi_{\alpha}(z) = \varepsilon_{\alpha} \varphi_{\alpha}(z).$$

У представленні вторинного квантування, яке побудоване на хвильових функціях (2.3), гамільтоніан системи є таким:

$$H = H_0 - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) + \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}), \quad (2.4)$$

де

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_{\alpha}(\mathbf{p}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p}) \quad (2.5)$$

— гамільтоніан системи без врахування кулонівської взаємодії між електронами, $\nu(\mathbf{q}|z - z') = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z - z'|}$ — двовимірний фур'є-образ кулонівської взаємодії, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$, S — площа поверхні поділу ($S \rightarrow \infty$), $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$,

$$\nu_k(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2 + k^2}$$

— фур'є-образ кулонівської взаємодії, $k = \frac{2\pi}{L} n$, L визначає область зміни нормальної координати: $z \in (-L/2, +L/2)$, $L \rightarrow \infty$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\rho_k(\mathbf{q})$ — змішане фур'є-представлення локальної густини електронів:

$$\rho_k(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}, \alpha, \alpha'} \langle \alpha | e^{-ikz} | \alpha' \rangle a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (2.6)$$

$$\langle \alpha | \dots | \alpha' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \varphi_{\alpha}^*(z) \dots \varphi_{\alpha'}(z),$$

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

$$\{a_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), a_{\alpha_2}^{\dagger}(\mathbf{p}_2)\} = \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \delta_{\alpha_1, \alpha_2}; \quad (2.7)$$

$N = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p})$ — оператор кількості частинок; штрих біля суми у формулі (2.4) означає відсутність доданків при $\mathbf{q} = 0$, що зумовлено умовою електронейтральності (2.2).

3. Двочастинкова електронна кореляційна функція “густина–густина”

Розглянемо двочастинкову незвідну електронну кореляційну функцію “густина–густина”

$$\overline{\mathfrak{M}}_{k, k'}(\mathbf{x}, -\mathbf{x}) = i^2 \langle T \rho_k(\mathbf{x}) \rho_{k'}(-\mathbf{x}) \rangle_c, \quad \mathbf{x} = (\mathbf{q}, \nu), \quad (3.1)$$

де

$$\rho_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\beta' e^{i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}|\beta'), \quad \rho_k(\mathbf{q}|\beta') = e^{\beta' H_0} \rho_k(\mathbf{q}) e^{-\beta' H_0},$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Sp } e^{-\beta(H-\mu N)} \dots}{\text{Sp } e^{-\beta(H-\mu N)}},$$

β — обернена термодинамічна температура, μ — хімічний потенціал електронного газу, ν — бозівська частота.

У праці [18] запропоновано загальну схему для розрахунку дво-частинкової кореляційної функції $\overline{\mathfrak{M}}$ з врахуванням три- та чотири-частинкових кореляцій. Згідно з цією схемою дво-частинкову кореляційну функцію $\overline{\mathfrak{M}}$ в імпульсному представленні можна записати так:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \overline{\mathfrak{M}}_2^0 + F(\overline{\mathfrak{M}}_2^0, \mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0), \quad (3.2)$$

де F — деяка функція, розрахунок якої є складною задачею, $\overline{\mathfrak{M}}_2^0 = \|\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\|$, $\overline{\mathfrak{M}}_2^0 = \|\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\|$; $\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0$ та \mathfrak{M}_4^0 — дво-, три- та чотиричастинкові незвідні кореляційні функції напівобмеженого електронного газу в наближенні ідеального обміну

$$\mathfrak{M}_l^0 \equiv \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_l}^0(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l) = i^l \langle T \rho_{k_1}(\mathbf{x}_1) \dots \rho_{k_l}(\mathbf{x}_l) \rangle_{0,c}, \quad l = 2, 3, 4,$$

тобто усереднення виконано згідно з правилом

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{\text{Sp } e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \dots}{\text{Sp } e^{-\beta(H_0 - \mu N)}},$$

$\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ — перенормована дво-частинкова кореляційна функція в наближенні хаотичних фаз, для якої в [18] отримано таке матричне рівняння:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2^0 = \mathfrak{M}_2^0 + \mathfrak{M}_2^0 V \overline{\mathfrak{M}}_2^0, \quad (3.3)$$

де $V = \frac{\beta}{SL} \|\nu_{k_1}(\mathbf{q}_1) \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0} \delta_{k_1 + k_2, 0}\|$.

Розв'язок матричного рівняння (3.3) можна представити у вигляді такого ряду:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2^0 = \mathfrak{M}_2^0 + \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 + \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 + \dots, \quad (3.4)$$

підставивши який в (3.2), отримуємо співвідношення для $\overline{\mathfrak{M}}_2$

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \mathfrak{M}_2^0 + \overline{F}(\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0), \quad (3.5)$$

де

$$\begin{aligned} \overline{F}(\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0) &= F(\overline{\mathfrak{M}}_2^0, \mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0) + \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 \\ &+ \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 + \dots \end{aligned}$$

Оскільки $\overline{\mathfrak{M}}_2$ є функцією від $\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0$ та \mathfrak{M}_4^0 , то (3.5) можна представити так:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \mathfrak{M}_2^0 + \tilde{F}(\overline{\mathfrak{M}}_2), \quad (3.6)$$

де

$$\tilde{F}(\overline{\mathfrak{M}}_2(\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0)) = \overline{F}(\mathfrak{M}_2^0, \mathfrak{M}_3^0, \mathfrak{M}_4^0).$$

Оскільки розрахунок функції \tilde{F} є надзвичайно складним, спробуємо побудувати апроксимаційний вираз для \tilde{F} . Якщо знехтувати три- та чотиричастинковими кореляціями, то повинна виконуватися така рівність:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \overline{\mathfrak{M}}_2^0, \quad \text{при } \mathfrak{M}_3^0 = \mathfrak{M}_4^0 = 0,$$

тоді з порівняння (3.4) та (3.6) випливає, що

$$\tilde{F}(\overline{\mathfrak{M}}_2^0) = \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 + \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 V \mathfrak{M}_2^0 + \dots = \mathfrak{M}_2^0 V \overline{\mathfrak{M}}_2^0. \quad (3.7)$$

Для врахування три- та чотиричастинкових кореляцій введемо матрицю \mathbf{G} , яка в теорії однорідного електронного газу є скалярною функцією і називається поправкою на локальне поле:

$$\tilde{F}(\overline{\mathfrak{M}}_2) = \mathfrak{M}_2^0 V (1 - \mathbf{G}) \overline{\mathfrak{M}}_2, \quad (3.8)$$

причому

$$\mathbf{G} = 0 \quad \text{при } \mathfrak{M}_3^0 = \mathfrak{M}_4^0 = 0.$$

Отже, для дво-частинкової кореляційної функції $\overline{\mathfrak{M}}_2$ отримали таке матричне рівняння:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \mathfrak{M}_2^0 + \mathfrak{M}_2^0 V (1 - \mathbf{G}) \overline{\mathfrak{M}}_2. \quad (3.9)$$

У випадку однорідного електронного газу це матричне рівняння перетворюється в скалярне, розв'язок якого є відомим з теорії однорідного електронного газу [1-6]:

$$\overline{\mathfrak{M}}_2 = \frac{\mathfrak{M}_2^0}{1 - \mathfrak{M}_2^0 V (1 - G)}. \quad (3.10)$$

Вважаючи, що матриця \mathbf{G} є діагональною, запишемо матричне рівняння (3.9) в (\mathbf{q}, z) -представленні

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{x}|z_1, z_2) &= \mathfrak{M}^0(\mathbf{x}|z_1, z_2) \\ &+ \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int dz' \mathfrak{M}^0(\mathbf{x}|z_1, z) [\nu(\mathbf{q}|z - z') - \bar{\nu}(\mathbf{q}|z - z')] \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{x}|z', z_2), \end{aligned} \quad (3.11)$$

де $\bar{\nu}_k(\mathbf{q}) = G_k(\mathbf{q})\nu_k(\mathbf{q})$, $\bar{\nu}(\mathbf{q}|z-z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')} \bar{\nu}_k(\mathbf{q})$. Зауважимо,

що хоча і матрицю поправки на локальне поле \mathbf{G} взято у діагональній формі, за рахунок того, що $\bar{\nu}(\mathbf{q}|z-z')$ знаходиться в інтегральному рівнянні, в $\bar{\mathfrak{M}}(\mathbf{x}|z_1, z_2)$ будуть враховані ефекти зображення, які пов'язані з поправкою на локальне поле.

Для двочастинкової кореляційної функції електронного газу в наближенні ідеального обміну в праці [15] отримано такий вираз:

$$\mathfrak{M}^0(\mathbf{x}|z_1, z_2) = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{x}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2), \quad (3.12)$$

де

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{p}} \Pi_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{p}, \mathbf{x}), \quad (3.13)$$

$$\Pi_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \quad (3.14)$$

— поляризаційний оператор, $n_{\alpha}(\mathbf{p})$ — функція розподілу Фермі-Дірака:

$$n_{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{\beta(E_{\alpha}(\mathbf{p}) - \mu)} + 1}.$$

У випадку низьких температур ($\nu = 0$) сумування по \mathbf{p} у формулі (3.13) можна виконати аналітично, у результаті отримуємо:

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \left[1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \right] \times \theta \left(1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \theta(p_F - \alpha_1), \quad (3.15)$$

де $p_F = (9\pi/4)^{1/3}/r_S$ — імпульс Фермі, r_S — параметр Бракнера в одиницях радіуса Бора a_B .

У праці [15] показано, що в певних наближеннях сумування по

α_1 та α_2 у формулі (3.12) можна виконати аналітично

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(q|z, z') &= -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{q} \left(e^{-q|z-z'|} - e^{-q|z+z'|} \right) \\ &\times \left[\frac{p_F \cos(p_F(z+z'))}{(z+z')^2} - \frac{p_F \cos(p_F(z-z'))}{(z-z')^2} \right] \\ &+ \left[\frac{\sin(p_F(z-z'))}{(z-z')^3} - \frac{\sin(p_F(z+z'))}{(z+z')^3} \right] \theta(-z)\theta(-z'). \end{aligned} \quad (3.16)$$

4. Результати чисельних розрахунків двочастинкової електронної кореляційної функції “густина–густина”

Чисельні розрахунки проведено у випадку низьких температур з використанням для $G_k(\mathbf{q})$ такої апроксимації [1, 2]:

$$G_k(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \frac{q^2 + k^2}{q^2 + k^2 + \xi p_F^2}, \quad (4.1)$$

тоді

$$\bar{\nu}(\mathbf{q}|z-z') = \frac{\pi e^2}{\sqrt{q^2 + \xi p_F^2}} \exp \left(-\sqrt{q^2 + \xi p_F^2} |z-z'| \right).$$

В якості поверхневого потенціалу будемо розглядати нескінченно високу потенціальну стінку. У цьому випадку власні функції та власні значення є такими:

$$\varphi_{\alpha}(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(-z), \quad \varepsilon_{\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \alpha = \frac{2\pi k}{L}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.2)$$

На рис.1–рис.5 подано результати чисельних розрахунків двочастинкової кореляційної функції в безрозмірній формі:

$$\widetilde{\mathfrak{M}}(q|z_1, z_2) = \mathfrak{M}(q|z_1, z_2) \left/ \left(-\frac{SL^2}{\beta} \frac{m}{\hbar^2} \frac{p_F}{\pi a_B} \right) \right.$$

для калію ($r_S = 4.86 a_B$). Розглянуто такі випадки:

1. Наближення ідеального обміну, тобто двочастинкова кореляційна функція розрахована за формулою (3.12).

2. Наближення ідеального обміну з використанням запропонованих у [15] наближень, тобто двочастинкова кореляційна функція розрахована за формулою (3.16).
3. Наближення хаотичних фаз ($G_k(\mathbf{q}) = 0$).
4. $\xi = 1$ — аналог апроксимації Хаббарда для однорідного електронного газу.
5. $\xi = 2$ — аналог апроксимації Гелдарта та Воско для однорідного електронного газу.
6. $\xi = 1 + \frac{2}{\pi p_F a_B}$ — аналог апроксимації Анімалу для однорідного електронного газу.
7. $\xi = 1 + \frac{4}{\pi p_F a_B}$ — аналог апроксимації Шема для однорідного електронного газу.

На рис.1 подано залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від q в цих випадках при різних фіксованих нормальних до площини поділу координатах електронів ($z_1 = z_2$). При наближенні електронів до площини поділу кореляційна функція зменшується, що фізично зрозуміло: біля площини поділу електронів є менше, ніж при $z_1, z_2 \rightarrow -\infty$ і тому міжелектронні кореляції є також меншими. В області $q > 2p_F$ ($p_F = 0.395a_B^{-1}$) відмінності між розглянутими семи випадками зникають. Поправка на локальне поле є суттєвою в області $q < 2p_F$, це відповідає великим віддалям між електронами в площині поділу і внаслідок цього є важливими багаточастинкові кореляційні ефекти. Область $q > 2p_F$ відповідає малим віддалям між електронами, багаточастинкові ефекти не є суттєвими, визначальною є пряма двочастинкова кореляція між електронами. В цій області добре працює навіть апроксимаційна формула (3.16), яка в області малих q є неприйнятною.

На рис.2–рис.5 подано залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від нормальної до площини поділу координати одного з електронів (z_1) при фіксованій координаті другого електрона (z_2). У випадку знаходження одного з електронів далеко від площини поділу ($z_2 = -18.42 a_B$, рис.5) двочастинкової кореляційної функції є симетричною з різким максимумом в точці z_2 . При наближенні одного з електронів до площини поділу (рис.2,3) симетричність втрачається, різкий максимум розмивається. Причиною цього є ефективне відштовхування зі сторони поверхні.

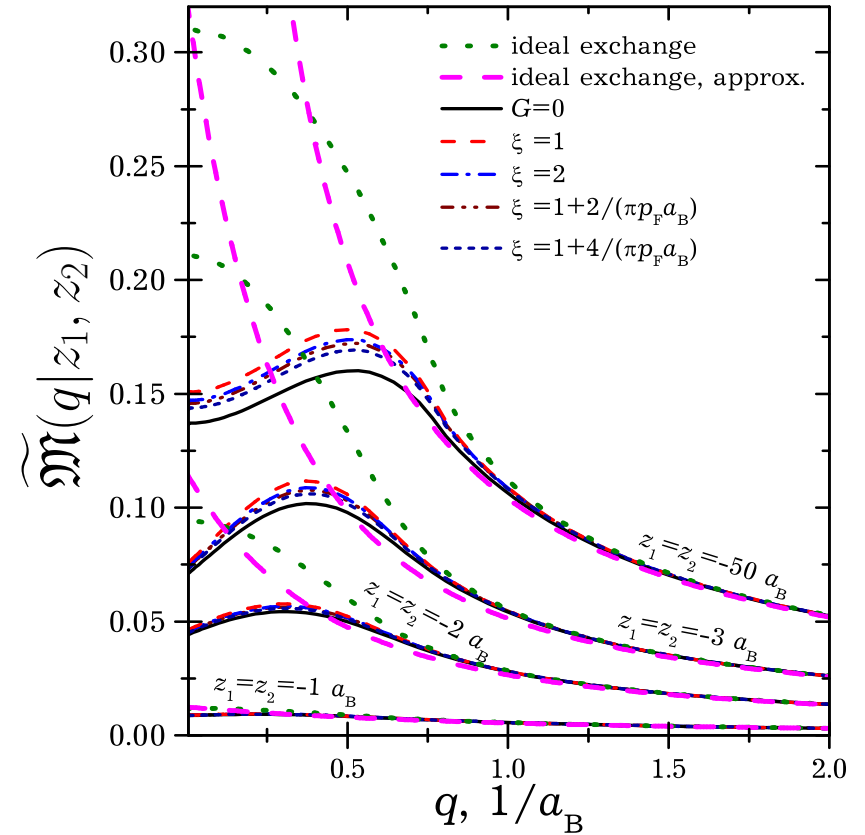


Рис. 1. Залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від q при різних фіксованих нормальних до площини поділу координатах електронів ($z_1 = z_2$).

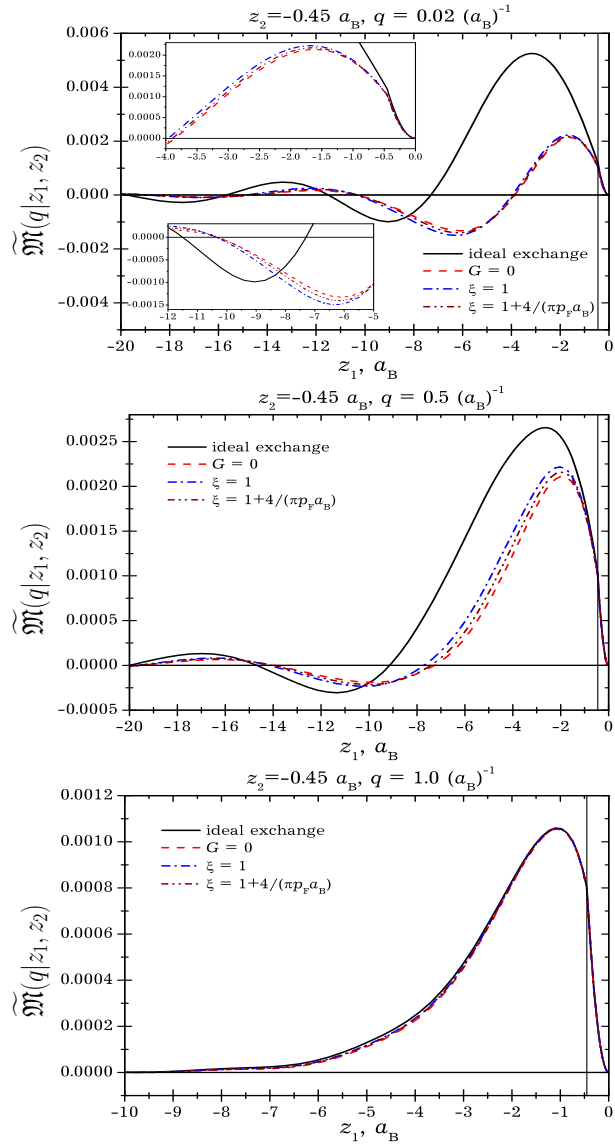


Рис. 2. Залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від нормальної до площини поділу координати одного з електронів (z_1), інша координата зафіксована ($z_2 = -0.45a_B$).

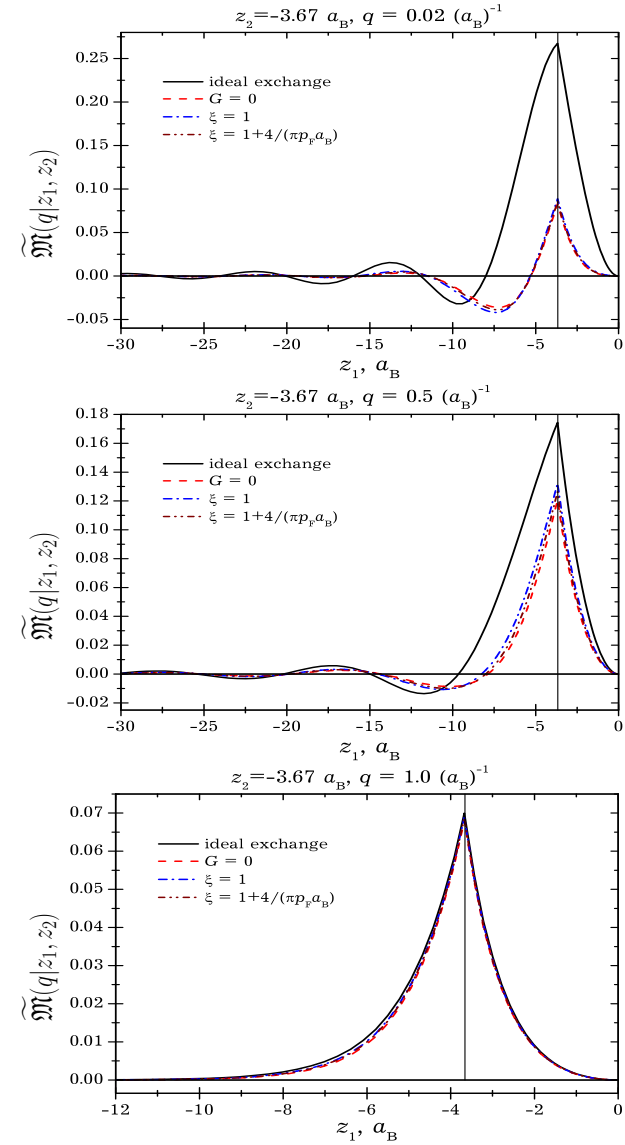


Рис. 3. Залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від нормальної до площини поділу координати одного з електронів (z_1), інша координата зафіксована ($z_2 = -3.67a_B$).

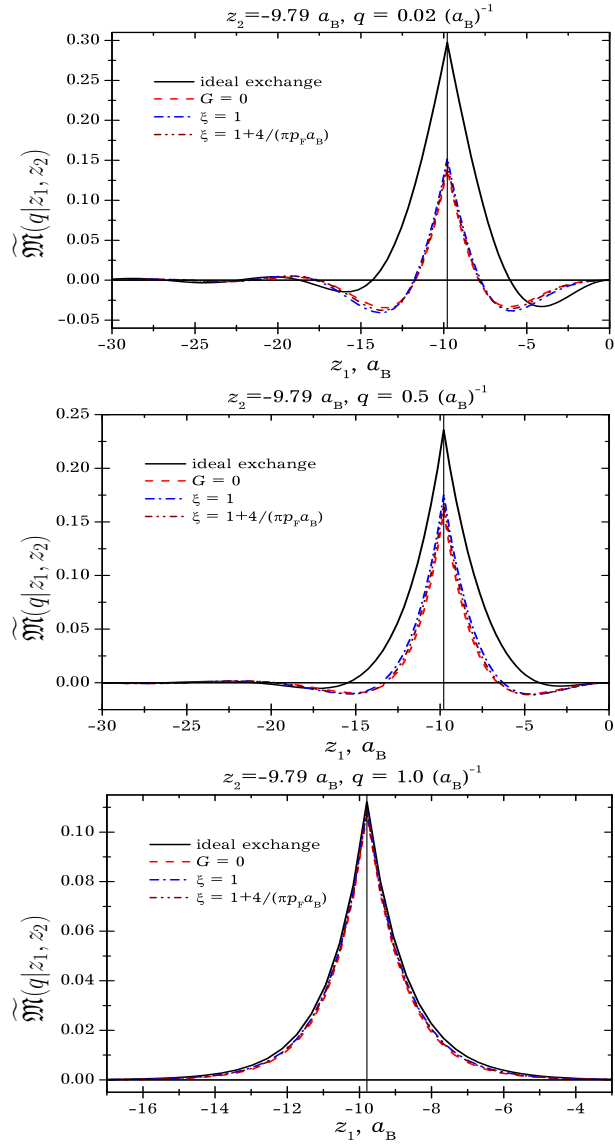


Рис. 4. Залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від нормальної до площини поділу координати одного з електронів (z_1), інша координата зафіксована ($z_2 = -9.79a_B$).

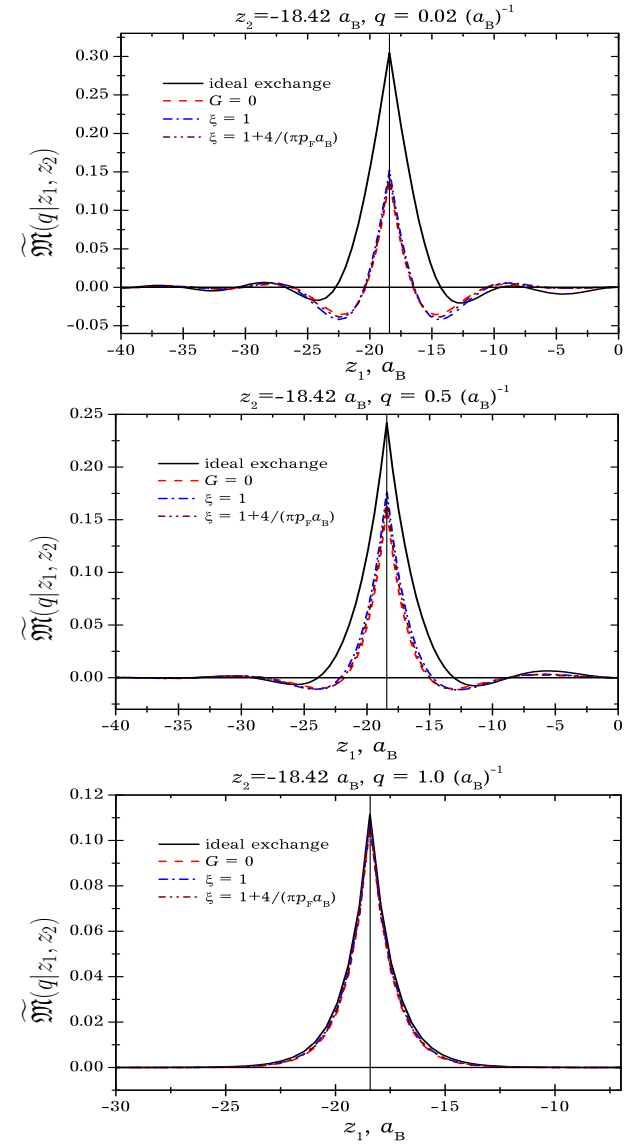


Рис. 5. Залежність двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ від нормальної до площини поділу координати одного з електронів (z_1), інша координата зафіксована ($z_2 = -18.42a_B$).

5. Висновки

Запропоновано підхід для врахування поправки на локальне поле у випадку неоднорідних систем. Цей підхід використовує відомі з теорії однорідної електронної рідини апроксимаційні вирази для поправки на локальне поле. Проте, за рахунок того, що вираз для поправки на локальне поле знаходиться в інтегральному рівнянні для двочастинкової кореляційної функції $\overline{\mathcal{M}}$ (3.11), то ефекти, які пов'язані з просторовою обмеженістю електронного газу, є враховані. Ці ефекти призводять до того, що біля площини поділу різкий максимум двочастинкової кореляційної функції розмивається та відсувається від площини поділу.

Поправка на локальне поле для $\overline{\mathcal{M}}$ є суттєвою в області $q < 2p_F$, тоді як в області $q > 2p_F$ двочастинкова кореляційна функція добре описується формулою (3.16), в якій не враховані багаточастинкові ефекти.

Література

- Mahan Gerald. D. Many-particle physics, 1990 Plenum Press, New York, p. 1032.
- Горобченко В. Д., Максимов Е. Г. Диэлектрическая проницаемость электронного газа // УФН. 1980. Т.130, вып.1. С.65–111.
- Vavruk M., Krokhmalkii T. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory: II. Ground State Characteristics in the Medium Density // Phys. Status Solidi B. 1992. Vol.169, n.2. P.451–462.
- Vavruk M., Paslavskii V. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory // Phys. Status Solidi B. 1998. Vol.208, n.1. P.91–104.
- Vavruk M., Blazhievskii O. Reference System Approach in the Electron Liquid Theory: V. Application to the Two-Component Fermi Systems // Phys. Status Solidi B. 1994. Vol.186, n.2. P.449–460.
- Ваврук М. В, Паславський В. Н, Гишко Н. Л. Температурна залежність поправки на локальне поле // Журн. фіз. досл. 2000. Т.4, №1. С.6–15.
- Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. 1964. Vol.136, n.3B. P.B864–B871.
- Jones R. O., Gunnarsson O. The density functional formalism, its applications and prospects // Rev. Mod. Phys. 1989. Vol.61, n.3. P.689–746.
- Hedin L. New method for calculating the one-particle Green's function with application to the electron-gas problem // Phys. Rev. 1965. Vol.139, n.3A. P.A796–A823.
- Fratesi G., Brivio G. P., Molinari L. G. Many-body approach to infinite non-periodic systems: application to the surface of semi-infinite jellium // 2003. cond-mat/0305344.
- Костробій П. П., Маркович Б. М. Розрахунок електронної густини та дипольного бар'єра для металів з плоскою поверхнею поділу // Укр. фсз. журн. 2002. Т.47, №9. С.884–889.
- Костробій П. П., Маркович Б. М. Поверхнева енергія напівобмеженого металу у моделі “желе” // Укр. фсз. журн. 2002. Т.47, №12. С.1180–1184.
- Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали // Журн. фіз. досл. 2003. Т.7, №2. С.195–206.
- Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: II. Функції розподілу // Журн. фіз. досл. 2003. Т.7, №3. С.298–312.
- Костробій П. П., Маркович Б. М. Ефективний потенціал між-електронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція напівобмеженого електронного газу. –Львів: 2006. –18с., (Препр./ НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ICMP-06-05U). To be appear in Condens. Matter Phys.
- A. E. Mattsson, W. Kohn An energy functional for surfaces // J. Chem. Phys. 2001. Vol.115, n.8. p.3441–3443.
- A. G. Eguluz, M. Heinrichsmeier, A. Fleszar, W. Hanke Nanostructured materials // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol.68, n.9. p.1359–1362.
- Kostrobij P. P., Markovych B. M. A new approach to calculate the thermodynamic potential of an inhomogeneous electron gas // Condens. Matter Phys. 2003. Vol.6, No.2(34). p.347–362.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; Yu. Rudavskii, *Lviv*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*.

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>