

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

ЕФЕКТИВНИЙ ПОТЕНЦІАЛ МІЖЕЛЕКТРОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ ТА
ДВОЧАСТИНКОВА КОРЕЛЯЦІЙНА ФУНКЦІЯ ДЛЯ НАПІВОВМЕЖЕНОГО
ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ

Роботу отримано 23 березня 2006 р.

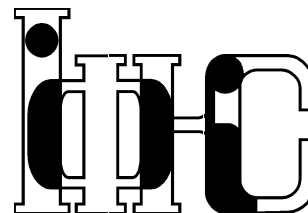
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділу теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-06-05U

П. П. Костробій*, Б. М. Маркович*

ЕФЕКТИВНИЙ ПОТЕНЦІАЛ МІЖЕЛЕКТРОННОЇ
ВЗАЄМОДІЇ ТА ДВОЧАСТИНКОВА КОРЕЛЯЦІЙНА
ФУНКЦІЯ НАПІВОВМЕЖЕНОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ

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

ЛЬВІВ

УДК: 530.145

PACS: 71.45.Gm

Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція напівобмеженого електронного газу

П. П. Костробій, Б. М. Маркович

Анотація. Розраховано ефективний потенціал міжелектронної взаємодії та двочастинкову електронну кореляційну функцію “густина–густина” для напівобмеженого металу в моделі “желе” та досліджено їх асимптотичні поведінки при великих віддальях між електронами в площині поверхні.

An effective potential of electron-electron interaction and a two-particle “density-density” correlator in semi-infinite jellium

P. P. Kostrobii, B. M. Markovych

Abstract. An effective potential of electron-electron interaction and a two-particle “density-density” correlator are calculated for semi-infinite jellium. Their asymptotics at large distances between electrons are studied in a plane parallel to a surface.

Подається в Condens. Matter Phys.

Submitted to Condens. Matter Phys.

1. Вступ

Одним із основних методів дослідження властивостей напівобмеженого систем на сьогоднішній день є метод функціоналу густини (DFT) [1, 2], який по своїй суті є одночастинковим підходом, незважаючи на його можливі модифікації (LDA, GGA та ін.). Тому в DFT неможливо коректно врахувати колективні явища (сили зображення, слабкий зв'язок і т.д.) [3, 4].

Першою спробою побудови багаточастинкової теорії неоднорідного електронного газу була праця [6], де сформульовано систему п'яти рівнянь (GWA-наближення). Поєднання GWA підходу з DFT з метою врахування багаточастинкових ефектів для виправлення недоліків DFT розглядалась в [5], однак цей підхід вимагає багато неконтрольованих спрощень при проведенні чисельних розрахунків, що проявилось у відсутності осциляцій ефективного парного міжелектронного потенціалу взаємодії.

Авторами у працях [7–9] із застосуванням методу функціонально-го інтегрування розвинуто підхід для розрахунку термодинамічних функцій та структурних функцій розподілу неоднорідного електронного газу. Ці характеристики представляються у вигляді розкладів за ефективним потенціалом міжелектронної взаємодії, який враховує як наявність сил зображення так і колективні ефекти (екранування). В даній роботі досліджується ефективний парний потенціал міжелектронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція “густина–густина”. У роботі запропоновано наближення, які дають змогу аналітично розрахувати двочастинкову кореляційну функцію та ефективний потенціал, а також знайти їх асимптотики. Коректність цих наближень досліджується шляхом порівняння з даними чисельних розрахунків.

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:

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

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

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

де $\varrho(z)$ — густина електронів.

Будемо вважати, що іонна підсистема формує поверхневий потенціал для електронів, який не дозволяє їм покинути метал. Цей поверхневий потенціал моделюємо нескінченно високою потенціальною стінкою:

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & z \geq 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

Така модель фізично правильно відображає реальну ситуацію та допускає аналітичні розв'язки відповідного рівняння Шредінгера.

Власні функції та власні значення цього потенціалу є такими:

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(z), \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \alpha = \frac{2\pi k}{L}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

де L визначає область зміни нормальної до площини поділу координати електрона: $z \in [-L/2, +\infty)$, причому L прямує до ∞ так, що має місце термодинамічна границя. Враховуючи, що поверхневий потенціал $V(z)$ є функцією лише нормальної до поверхні поділу координати електрона, хвильова функція електрона та його енергія є такі:

$$\Psi_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \varphi_\alpha(z), \quad E_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2(p^2 + \alpha^2)}{2m}, \quad (2.5)$$

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

У представленні вторинного квантування, яке побудоване на хвильових функціях (2.5), гамільтоніан системи є таким:

$$H = H_0 - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) + \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}), \quad (2.6)$$

де

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p},\alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) \quad (2.7)$$

— 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, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$, $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\nu_k(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / (\mathbf{q}^2 + k^2)$ — фур'є-образ кулонівської взаємодії, $k = \frac{2\pi}{L} n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\rho_k(\mathbf{q})$ — змішане фур'є-представлення локальної густини електронів:

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

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

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

$$\{a_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1), a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2)\} = \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \delta_{\alpha_1, \alpha_2}; \quad (2.9)$$

$N = \sum_{\mathbf{p},\alpha} a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$ — оператор кількості частинок; штрих біля суми у формулі (2.6) означає відсутність доданків при $\mathbf{q} = 0$, що зумовлено умовою електронейтральності (2.2).

3. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії

Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії є розв'язком інтегрального рівняння (див., наприклад, [5, 7]):

$$g(q|z_1, z_2) = \nu(q|z_1 - z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \nu(q|z_1 - z) \mathfrak{M}(q|z, z') g(q|z', z_2), \quad (3.10)$$

де

$$\mathfrak{M}(q|z, z') = \sum_{k',k} \mathfrak{M}_{k,k'}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) e^{ikz + ik'z'}, \quad (3.11)$$

$$\mathfrak{M}_{k,k'}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) = i^2 \langle \Gamma \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{k'}(-\mathbf{q}) \rangle_0 \quad (3.12)$$

— двочастинкова кореляційна функція “густина–густина” в наближенні ідеального обміну у випадку низьких температур ($\beta\mu \gg 1$, де

β — обернена термодинамічна температура, μ — хімічний потенціал електронного газу),

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

3.1. Розрахунок $\mathfrak{M}(q|z, z')$

Розглянемо координатне представлення кореляційної функції

$$\mathfrak{M}(r, z, z') = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathfrak{M}(q|z, z') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q J_0(qr) \mathfrak{M}(q|z, z'),$$

де $J_0(x)$ — циліндрична функція Бесселя, r — відстань між електронами в площині поділу, $\mathfrak{M}(q|z, z')$ — кореляційна функція в (\mathbf{q}, z) -представленні згідно з [8] має такий вигляд:

$$\mathfrak{M}(q|z, z') = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha_2}(z) \varphi_{\alpha_2}^*(z') \varphi_{\alpha_1}(z'), \quad (3.13)$$

де

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}} \Pi_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (3.14)$$

$$\Pi_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\theta(\mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})) - \theta(\mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \quad (3.15)$$

— поляризаційний оператор.

Сумування по вектору \mathbf{p} у формулі (3.14) можна виконати аналітично, перейшовши від суми до інтегралу згідно з правилом

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots = \frac{S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \dots,$$

причому, результат сумування по \mathbf{p} треба подвоювати за рахунок того, що електрон має дві можливі орієнтації спіну. У результаті інтегрування по \mathbf{p} , отримуємо такий вираз для $\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q})$:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \left[1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \right] \\ &\times \theta \left(1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \theta(p_F - \alpha_1), \end{aligned} \quad (3.16)$$

де p_F — імпульс Фермі, $p_F = \sqrt{2m\mu}/\hbar$.

Сумування по α_1 та α_2 у формулі (3.14) необхідно виконувати чисельно, перейшовши від суми до інтегралу, згідно з таким правилом:

$$\sum_{\alpha} \dots = \frac{L}{2\pi} \int_0^\infty d\alpha \dots$$

Розглянемо деякі наближення, які дозволяють отримати аналітичні вирази для двочастинкової кореляційної функції $\mathfrak{M}(q|z, z')$.

3.1.1. Врахування по нормалі до поверхні поділу лише дзеркального розсіяння електронів

Вважатимемо, що поляризаційний оператор є діагональним, тобто

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) \approx \Lambda_{\alpha_1, \alpha_1}(\mathbf{q}) \quad (3.17)$$

Фізично це означає, що ми враховуємо по нормалі до поверхні поділу лише дзеркальне розсіяння електронів. Тоді, використовуючи умову повноти для власних функцій $\varphi_\alpha(z)$

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

кореляційна функція (3.13) набуває такого вигляду:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(q|z, z') &= -\frac{L^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \sum_{\alpha} |\varphi_\alpha(z)|^2 \left[1 - \sqrt{1 - 4 \frac{p_F^2 - \alpha^2}{q^2}} \right] \\ &\times \theta \left(1 - 4 \frac{p_F^2 - \alpha^2}{q^2} \right) \theta(p_F - \alpha) \delta(z - z'). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Зробимо у виразі (3.18) наближення “постійної густини” [7, 8], тобто вважатимемо, що

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

Тоді сумування по α у виразі (3.18) можна виконати аналітично і у результаті для $\mathfrak{M}(q|z, z')$ отримуємо:

$$\mathfrak{M}(q|z, z') = -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{p_F}{2} L \left(\frac{q}{2p_F} \right) \theta(-z) \delta(z - z'), \quad (3.19)$$

де $L(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$ — функція Ліндхарда [10].

Зауважимо, що у випадку необмеженого електронного газу дво-частинкова кореляційна функція має такий вигляд [10]:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{\text{bulk}}(q) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\theta(\mu - E(\mathbf{p})) - \theta(\mu - E(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \\ &= -\frac{V}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{p_{\text{F}}}{2} \text{L} \left(\frac{q}{2p_{\text{F}}} \right), \end{aligned} \quad (3.20)$$

де V — об'єм системи ($V \rightarrow \infty$), тут $\hbar\mathbf{q}$ та $\hbar\mathbf{p}$ — тривимірні імпульси, $E(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$. Наближення діагонального поляризаційного оператора (3.17) можна трактувати як наближення Томаса-Фермі для нормального до поверхні поділу напрямку. Формула (3.19) фактично є кореляційною функцією однорідного електронного газу у наближенні Томаса-Фермі із врахуванням того, що електрони знаходяться при $z < 0$. Вираз (3.20) є дуже подібним до (3.19), але є суттєва відмінність: вектор \mathbf{q} у формулі (3.19) є двовимірним, а в (3.20) — тривимірним. Внаслідок цього асимптотична поведінка $\mathfrak{M}_{\text{bulk}}$ в координатному представленні при великих міжелектронних відстанях r є такою (фріделівські осциляції) [10]:

$$\mathfrak{M}_{\text{bulk}}(r) \sim \frac{\cos(2p_{\text{F}}r)}{r^3}, \quad (3.21)$$

а кореляційної функції неоднорідного електронного газу (3.19) — такою¹:

$$\mathfrak{M}(r, z, z') \sim \frac{\sin(2p_{\text{F}}r - \pi/4)}{r^{5/2}}, \quad (3.22)$$

де r у випадку (3.21) є тривимірним вектором, а у випадку (3.22) — двовимірним.

3.1.2. Врахування розсіювання електронів

Нехай виконується умова

$$4q^2 \frac{p_{\text{F}}^2 - \alpha_1^2}{(q^2 - \alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2} \ll 1, \quad (3.23)$$

¹При отриманні виразу (3.22) використано асимптотику для функції Бесселя [11]:

$$J_0(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right), \quad x \rightarrow \infty,$$

що має місце у випадку великих q (малі відстані між електронами в площині поділу) або у випадку малих q за умови, що $\alpha_1^2 - \alpha_2^2 \neq 0$. Тоді кореляційна функція набуде такого вигляду:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(q|z, z') &= -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha_2}(z) \varphi_{\alpha_2}^*(z') \varphi_{\alpha_1}(z') \\ &\quad \times \frac{p_{\text{F}}^2 - \alpha_1^2}{q^2 - \alpha_1^2 + \alpha_2^2} \theta(p_{\text{F}} - \alpha_1) \\ &\approx -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha_2} \frac{\varphi_{\alpha_2}(z) \varphi_{\alpha_2}^*(z')}{q^2 + \alpha_2^2} \\ &\quad \times \sum_{\alpha_1} \theta(p_{\text{F}} - \alpha_1) (p_{\text{F}}^2 - \alpha_1^2) \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha_1}(z'), \end{aligned} \quad (3.24)$$

де використовуючи той факт, що $\alpha_1 \in [0, p_{\text{F}}]$, а $\alpha_2 \in [0, \infty)$, зроблено наближення $q^2 - \alpha_1^2 + \alpha_2^2 \approx q^2 + \alpha_2^2$.

Сумування по α_1 у виразі (3.24) можна виконати аналітично, зробивши перехід від суми до інтегралу, у результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha_1} \theta(p_{\text{F}} - \alpha_1) (p_{\text{F}}^2 - \alpha_1^2) \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha_1}(z') \\ &= \frac{4}{L} \frac{L}{2\pi} \int_0^{p_{\text{F}}} d\alpha_1 (p_{\text{F}}^2 - \alpha_1^2) \sin(\alpha_1 z) \sin(\alpha_1 z') \theta(-z) \theta(-z') \\ &= \frac{2}{\pi} \left[\frac{p_{\text{F}} \cos(p_{\text{F}}(z + z'))}{(z + z')^2} - \frac{p_{\text{F}} \cos(p_{\text{F}}(z - z'))}{(z - z')^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin(p_{\text{F}}(z - z'))}{(z - z')^3} - \frac{\sin(p_{\text{F}}(z + z'))}{(z + z')^3} \right] \theta(-z) \theta(-z'). \end{aligned}$$

Сумування по α_2 у виразі (3.24) також можна виконати аналітично:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha_2} \frac{\varphi_{\alpha_2}(z) \varphi_{\alpha_2}^*(z')}{q^2 + \alpha_2^2} &= \frac{4}{L} \frac{L}{2\pi} \int_0^{\infty} d\alpha_2 \frac{\sin(\alpha_2 z) \sin(\alpha_2 z')}{q^2 + \alpha_2^2} \theta(-z) \theta(-z') \\ &= \frac{1}{2q} \left(e^{-q|z-z'|} - e^{-q|z+z'|} \right) \theta(-z) \theta(-z'). \end{aligned}$$

Виконавши сумування по α_1 та α_2 у виразі (3.24), отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(q|z, z') &= -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{q} \left(e^{-q|z-z'|} - e^{-q|z+z'|} \right) \\ &\times \left[\frac{p_F \cos(p_F(z+z'))}{(z+z')^2} - \frac{p_F \cos(p_F(z-z'))}{(z-z')^2} \right] \\ &+ \left[\frac{\sin(p_F(z-z'))}{(z-z')^3} - \frac{\sin(p_F(z+z'))}{(z+z')^3} \right] \theta(-z)\theta(-z'). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Зробивши обернене фур'є-перетворення та врахувавши, що згідно з [11], має місце таке співвідношення

$$\int_0^{\infty} dq e^{-q|z-z'|} J_0(qr) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-z')^2}},$$

отримаємо таку електронну кореляційну функцію в координатному представленні:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(r, z, z') &= -\frac{SL^2}{\beta} \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^3} \left(\frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-z')^2}} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z+z')^2}} \right) \\ &\times \left[p_F \frac{\cos(p_F(z+z'))}{(z+z')^2} - p_F \frac{\cos(p_F(z-z'))}{(z-z')^2} \right] \\ &+ \left[\frac{\sin(p_F(z-z'))}{(z-z')^3} - \frac{\sin(p_F(z+z'))}{(z+z')^3} \right] \theta(-z)\theta(-z'). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Отриманий вираз (3.26) показує, що наближення (3.23) приводить до фізично правильного результату, а саме враховано сили зображення та колективні ефекти (аналог фріделівських осциляцій для однорідного електронного газу).

На рис.1 та рис.2 представлено результати чисельного розрахунку кореляційної функції в безрозміреному вигляді:

$$\widetilde{\mathfrak{M}}(r, z, z') = \mathfrak{M}(r, z, z') / \left(-\frac{SL^2}{\beta} \frac{m}{\hbar^2 a_B^4} \right)$$

та згідно з (3.26). Як видно з рис.1 запропоноване в роботі наближення (3.23) приводить до якісно правильної залежності кореляційної функції від нормальних координат електронів, проте є розходження

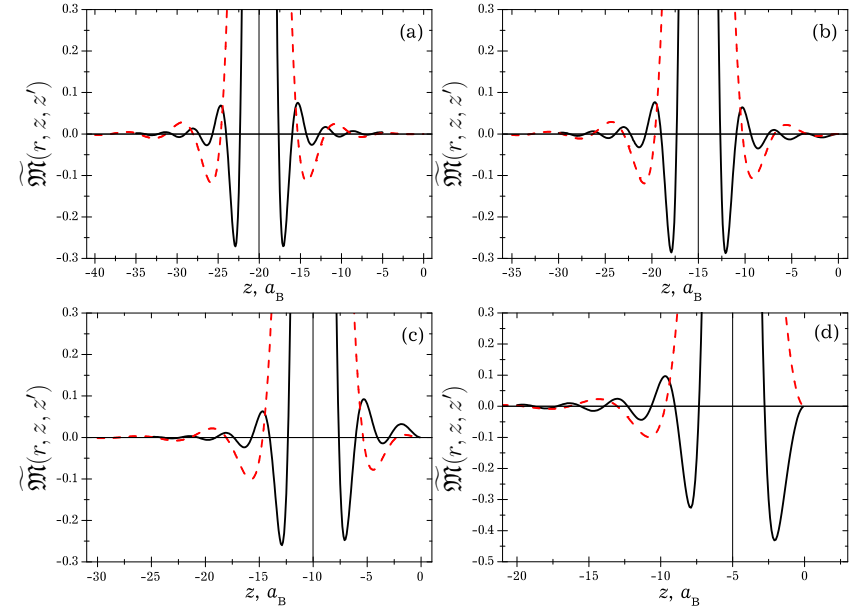


Рис. 1. Електронна кореляційна функція при $r = 0$ у таких випадках: а) $z' = -20a_B$, б) $z' = -15a_B$, в) $z' = -10a_B$, д) $z' = -5a_B$. Суцільна лінія — дані чисельного розрахунку формули (3.13), штрихова — протабульована функція (3.26).

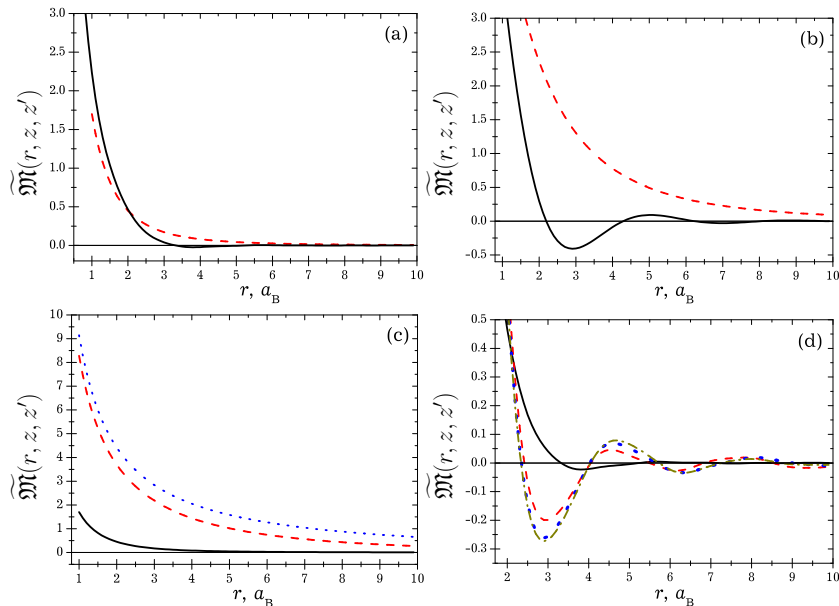


Рис. 2. Електронна кореляційна функція у таких випадках:
 а) $z = z' = -1a_B$, б) $z = -2a_B$, $z' = -3a_B$ (суцільна лінія — дані чисельного розрахунку формули (3.13), штрихова — протабульована функція (3.26));
 с) протабульована функція (3.26) при $z = z' = -1a_B$ (суцільна лінія), при $z = z' = -5a_B$ (штрихова лінія), при $z = z' = -15a_B$ (крапки);
 д) дані чисельного розрахунку формули (3.13) при $z = z' = -1a_B$ (суцільна лінія), при $z = z' = -5a_B$ (штрихова лінія), при $z = z' = -15a_B$ (крапки), при $z = z' = -20a_B$ (штрихпунктирна лінія).

з даними чисельного розрахунку, а саме: менші амплітуди осциляцій та більш сильне відштовхування електронів. З рис.2 видно, що наближення (3.23) не враховує осциляцій по координаті r (r — відстань між електронами в площині поділу). Поблизу площини поділу (див. рис.2а) видно добре узгодження даних чисельного розрахунку із аналітичним виразом (3.26), а при віддалені від площини поділу (див. рис.2б) спостерігається значне відхилення: вираз (3.26) дає занадто сильне відштовхування електронів.

Рис.2с та рис.2д представляють протабульовану кореляційну функцію (3.26) та дані її чисельного розрахунку без використання наближень при різних нормальних координатах електронів. Розрахунки показують, що чим ближче електрони знаходяться біля поверхні тим меншою є кореляція між ними, що фізично зрозуміло: біля площини поділу густина електронів в середньому є меншою, ніж в глибині металу.

3.2. Розрахунок ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії

Розглянемо випадок, що відповідає врахуванню по нормалі до поверхні поділу лише дзеркального розсіяння електронів в двочастинковій кореляційній функції “густина–густина” (3.19). Тоді рівняння (3.10) набуває такого вигляду:

$$g(q|z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z_1 - z_2|} - \frac{\kappa_{TF}^2}{2q} L\left(\frac{q}{2p_F}\right) \theta(-z_1) \int_{-\infty}^0 dz e^{-q|z_1 - z|} g(q|z, z_2), \quad (3.27)$$

де κ_{TF} — обернений радіус екранування Томаса-Фермі, $\kappa_{TF}^2 = 4p_F/(\pi a_B)$.

Рівняння такого типу розв’язується аналітично (див., наприклад,

[8]); його розв'язок є таким:

$$g(q|z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2}{Q} \left(e^{-Q|z_1-z_2|} + \frac{Q-q}{Q+q} e^{Q(z_1+z_2)} \right), \quad z_1 \leq 0, \quad z_2 \leq 0,$$

$$g(q|z_1, z_2) = \frac{2\pi e^2}{q} \left(e^{-q|z_1-z_2|} - \frac{Q-q}{Q+q} e^{-q(z_1+z_2)} \right), \quad z_1 \geq 0, \quad z_2 \geq 0,$$

$$g(q|z_1, z_2) = \frac{4\pi e^2}{Q+q} e^{Qz_1-qz_2}, \quad z_1 \leq 0, \quad z_2 \geq 0,$$

$$g(q|z_1, z_2) = \frac{4\pi e^2}{Q+q} e^{Qz_2-qz_1}, \quad z_1 \geq 0, \quad z_2 \leq 0,$$
(3.28)

де $Q = \sqrt{q^2 + \kappa_{\text{TF}}^2 L \left(\frac{q}{2p_{\text{F}}} \right)}$. Якщо зробити граничний перехід $q \rightarrow 0$ в функції Ліндхарда $L(q/(2p_{\text{F}}))$, то розв'язок (3.28) співпадає з ефективним потенціалом міжелектронної взаємодії $g_{\text{TF}}(q|z_1, z_2)$, який отриманий в працях [7, 8] в наближенні Томаса-Фермі.

Зробимо обернене фур'є-перетворення ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії

$$g(r, z, z') = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} g(q|z, z') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dq q J_0(qr) g(q|z, z'), \quad (3.29)$$

де r — відстань між електронами в площині поділу. Розглянемо асимптотичну поведінку ефективного потенціалу $g(r, z, z')$ при $r \rightarrow \infty$. У результаті, врахувавши асимптотичну поведінку функції Бесселя (див. стор.6), отримаємо

$$g(r, z_1, z_2) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{4} e^2 \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{\sqrt{p_{\text{F}}}} \phi(2p_{\text{F}}|z_1, z_2) \frac{\sin(2p_{\text{F}}r - \pi/4)}{r^{5/2}}, \quad (3.30)$$

де

$$\phi(q|z_1, z_2) = \frac{1}{Q} \left[-\frac{1+Q|z_1-z_2|}{Q^2} e^{-Q|z_1-z_2|} + \frac{1}{Q} \frac{1}{Q+q} \left(\frac{q}{Q} - \frac{Q-q}{Q+q} + (Q-q)(z_1+z_2) \right) e^{Q(z_1+z_2)} \right], \quad z_1 \leq 0, \quad z_2 \leq 0,$$
(3.31)

$$\phi(q|z_1, z_2) = -\frac{2}{Q(Q+q)^2} e^{-q(z_1+z_2)}, \quad z_1 \geq 0, \quad z_2 \geq 0, \quad (3.32)$$

$$\phi(q|z_1, z_2) = -\frac{2}{Q} \frac{1-(Q+q)z_1}{(Q+q)^2} e^{Qz_1-qz_2}, \quad z_1 \leq 0, \quad z_2 \geq 0, \quad (3.33)$$

$$\phi(q|z_1, z_2) = -\frac{2}{Q} \frac{1-(Q+q)z_2}{(Q+q)^2} e^{Qz_2-qz_1}, \quad z_1 \geq 0, \quad z_2 \leq 0. \quad (3.34)$$

Знайдений вираз (3.30) по формі співпадає із результатом праці [12], проте вираз для функції ϕ отриманий вперше.

У випадку однорідного електронного газу ефективний потенціал міжелектронної взаємодії має такий вигляд:

$$g(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_{\text{TF}}^2 L \left(\frac{q}{2p_{\text{F}}} \right)}, \quad (3.35)$$

а в координатному представленні:

$$g(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} g(q) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{\infty} dq \frac{\sin(qr)}{q \varepsilon(q)}, \quad (3.36)$$

де

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{q^2} L \left(\frac{q}{2p_{\text{F}}} \right)$$

— статична діелектрична проникність Хартрі. Асимптотична поведінка ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії в однорідному випадку при великих віддальх r має такий вигляд [10]:

$$g(r) \approx \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{a_{\text{B}}} \frac{1}{\varepsilon(2p_{\text{F}})^2} \frac{\cos(2p_{\text{F}}r)}{(2p_{\text{F}}r)^3}, \quad (3.37)$$

де ε — статична діелектрична проникність Хартрі.

На рис. 3 представлено асимптотику ефективного потенціалу (3.30), результати чисельного розрахунку формули (3.29), де в якості ефективного потенціалу $g(q|z, z')$ взято вираз (3.28) та вираз (3.28) в наближенні Томаса-Фермі. З рис.3 видно, що наближення Томаса-Фермі приводить до зникнення осциляцій, але дає якісно правильну поведінку ефективного потенціалу. Із заглибленням в метал (див. рис.3b) асимптотика добре відображає поведінку потенціалу вже при $r > 5a_{\text{B}}$. Ефективний потенціал для електронів, які знаходяться зовні біля поверхні поділу, має сильно відштовхувальний характер (див. рис.3c,d), причому осциляції зникають (див. рис.3d), що фізично зрозуміло: зовні біля поверхні поділу є мало електронів, тому колективні ефекти є слабкими і електрони взаємодіють між собою по закону, який близький до кулонівського. Це відображено і на рис.4, де

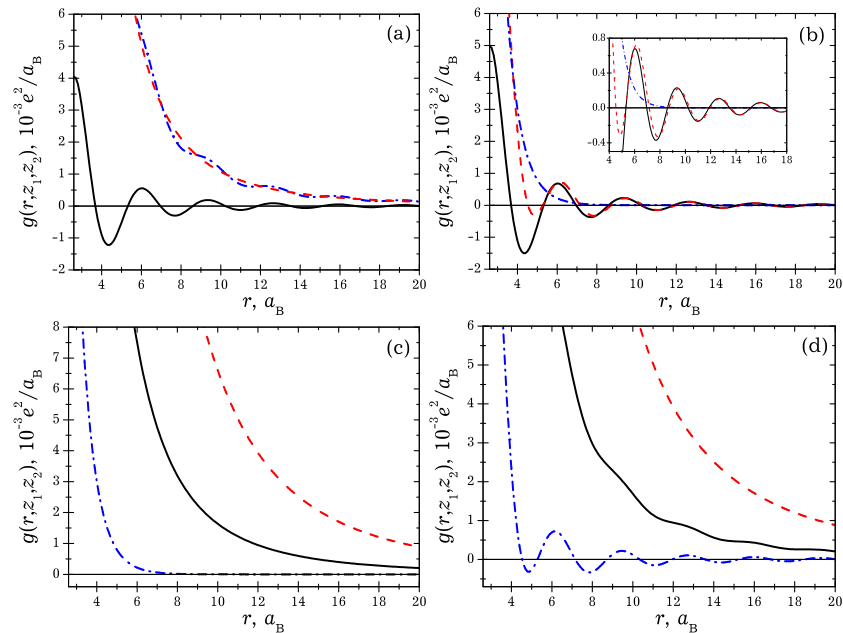


Рис. 3. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $g(r, z_1, z_2)$ у таких випадках:

- a) $z_1 = z_2 = -0.2a_B$, b) $z_1 = z_2 = -5a_B$ (суцільна лінія — асимптотика $g(r, z_1, z_2)$ (3.30), штрихова — фур'є-образ функції (3.28), штрихпунктирна — фур'є-образ ефективного потенціалу (3.28) у наближенні Томаса-Фермі);
 c) фур'є-образ ефективного потенціалу (3.28) у наближенні Томаса-Фермі при $z_1 = z_2 = 0$ (суцільна лінія), при $z_1 = z_2 = 1a_B$ (штрихова лінія), при $z_1 = z_2 = -10a_B$ (штрихпунктирна лінія);
 d) фур'є-образ ефективного потенціалу (3.28) при $z_1 = z_2 = 0$ (суцільна лінія), при $z_1 = z_2 = 1a_B$ (штрихова лінія), при $z_1 = z_2 = -10a_B$ (штрихпунктирна лінія).

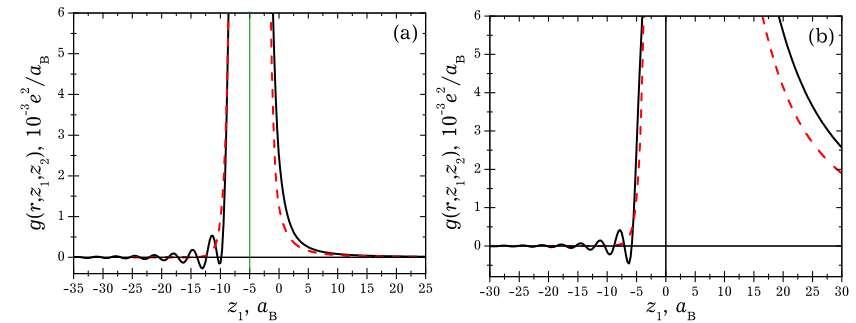


Рис. 4. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $g(r, z_1, z_2)$ при $r = 0$ у таких випадках: а) $z_2 = -5a_B$, б) $z_2 = 0$ (суцільна лінія — чисельний розв'язок інтегрального рівняння (3.10), штрихова лінія — фур'є-образ ефективного потенціалу (3.28)).

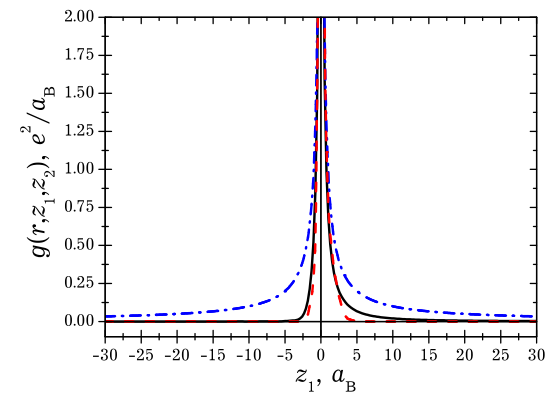


Рис. 5. Суцільна лінія — ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $g(r = 0, z_1, z_2 = 0)$ як чисельний розв'язок інтегрального рівняння (3.10), штрихова лінія — ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $g(r = 0, z_1, z_2 = 0)$ згідно з даними праці [5], штрихпунктирна лінія — кулонівський потенціал.

показано фур'є-образ ефективного потенціалу (3.28) та його томас-фермієвське наближення при $r = 0$.

На рис.4а та рис.4б показано ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функцію нормальної координати одного з електронів, а інший — знаходиться при $z_2 = -5a_B$ (рис.4а) та $z_2 = 0$ (рис.4б). З цих рисунків видно, що ефективний потенціал, який знайдений шляхом чисельного розв'язування інтегрального рівняння (3.10), є осцилюючим (суцільна лінія), а нехтування розсіянням електронів по нормалі до поверхні поділу призводить до відсутності осциляцій ефективного потенціалу по нормалі, тоді як є осциляції в площині поділу (див. рис.3а,b,d).

На рис.5 представлено порівняння чисельного розв'язку інтегрального рівняння (3.10), результатів праці [5] та кулонівського потенціалу. З цього рисунка випливає, що спостерігається якісне узгодження результатів наших розрахунків та даних праці [5]. Проте ефективний потенціал з праці [5] швидше спадає до нуля та немає осциляцій. Причиною цього, на нашу думку, є недостатньо коректне врахування колективних ефектів.

Усі розрахунки в статті проведено для $r_S = 2a_B$, де $r_S = (3n_{\text{bulk}}/(4\pi))^{1/3}$.

Висновки

У роботі проведено чисельні розрахунки двочастинкової електронної кореляційної функції “густина–густина” \mathfrak{M} напівобмеженого електронного газу та запропоновано ряд аналітичних апроксимаційних виразів для \mathfrak{M} , які добре узгоджуються з результатами числових розрахунків.

Отримані аналітичні вирази дозволили дослідити асимптотичну поведінку як для \mathfrak{M} при великих віддальх між електронами в площині поділу ($r \rightarrow \infty$):

$$\mathfrak{M}(r, z, z') \sim \frac{\sin(2p_F r - \pi/4)}{r^{5/2}},$$

так і для ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії g :

$$g(r, z_1, z_2) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{4} e^2 \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{\sqrt{p_F}} \phi(2p_F |z_1, z_2) \frac{\sin(2p_F r - \pi/4)}{r^{5/2}}, \quad r \rightarrow \infty.$$

Отриманий аналітичний вираз для \mathfrak{M} у випадку врахування по нормалі до поверхні поділу лише дзеркального розсіяння електронів дав змогу аналітично розв'язати інтегральне рівняння для ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії g із врахуванням як ефектів сил зображення, так і ефектів екранування.

Вперше показано, що коректне врахування колективних ефектів при чисельному розв'язуванні інтегрального рівняння для ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії приводить до появи осциляцій ефективного потенціалу. У випадку врахування по нормалі до поверхні поділу лише дзеркального розсіяння електронів результати наших розрахунків ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії g (3.28) узгоджуються з результатами чисельних розрахунків g , які проведені в праці [5].

Література

1. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. 1964. Vol.136, n.3B. p.B864–B871.
 2. Jones R. O., Gunnarsson O. The density functional formalism, its applications and prospects // Rev. Mod. Phys. 1989. Vol.61, n.3. p.689–746.
 3. A. E. Mattsson, W. Kohn An energy functional for surfaces // J. Chem. Phys. 2001. Vol.115, n.8. p.3441–3443.
 4. A. G. Eguiluz, M. Heinrichsmeier, A. Fleszar, W. Hanke Nanostructured materials // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol.68, n.9. p.1359–1362.
 5. 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.
 6. 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.
 7. 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.
 8. Kostrobij P. P., Markovych B. M. Statistical theory of the space-bounded systems of charged fermi-particles: I. The functional integration method and effective potentials // Journ. Phys. Stud. 2003. Vol.7, No.2. p.195-206.
 9. Kostrobij P. P., Markovych B. M. Statistical theory of the space-bounded systems of charged fermi-particles: II. Distribution functions // Journ. Phys. Stud. 2003. Vol.7, No.3. p.298-312.
 10. Harrison W. A. Solid state theory. New York – London – Toronto, 1970.
 11. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. -М.: Наука, 1971. – 1108 с.
 12. Габович А. М., Папицкий Э. А. Непрямое взаимодействие адсорбированных атомов на поверхности металла через электронный газ подложки // Физ. тв. тела 1976. Vol.18, N.2. с.377–381.
-

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>