

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

НАПВООБМЕЖЕНЕ «ЖЕЛЕ»: ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ,
ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ, ПОВЕРХНЕВА ЕНЕРГІЯ

Роботу отримано 3 червня 2014 р.

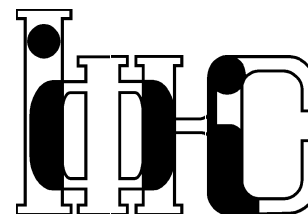
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії нерівноважних процесів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-14-02U

П. П. Костробій*, Б. М. Маркович*

НАПВООБМЕЖЕНЕ «ЖЕЛЕ»: ТЕРМОДИНАМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ,
ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ,
ПОВЕРХНЕВА ЕНЕРГІЯ

*Національний університет «Львівська політехніка»,
вул. С. Бандери, 12, Львів

ЛЬВІВ

УДК: 530.145

PACS: 73.20.-r; 71.10.-w; 71.45.-d

Напівобмежене «желе»: термодинамічний потенціал, хімічний потенціал, поверхнева енергія

П. П. Костробій, Б. М. Маркович

Анотація. Отримано загальний вираз для термодинамічного потенціалу моделі напівобмеженого «желе», на основі якого розраховано поверхневу енергію для моделі безмежно високого потенціального бар'єру. Досліджено поведінку поверхневої енергії та хімічного потенціалу як функції радіуса Вігнера-Зейтца та вплив на неї кулонівської взаємодії між електронами.

Semi-infinite jellium: thermodynamic potential, chemical potential, surface energy

P. P. Kostrobij, B. M. Markovych

Abstract. General expression for the thermodynamic potential model of semi-infinite jellium is obtained. By using this expression, surface energy for infinite barrier model is calculated. The behavior of surface energy and chemical potential as a function of the Wigner-Seitz radius and the influence of the Coulomb interaction between electrons on the calculated values are studied.

Подається в Condens. Matter Phys.

Submitted to Condens. Matter Phys.

Зміст

1. Вступ	2
2. Модель	5
3. Представлення вторинного квантування	7
4. Термодинамічний потенціал	9
4.1. Функціональне представлення термодинамічного потенціалу	9
4.2. Розрахунок термодинамічного потенціалу	15
5. Внутрішня енергія	22
5.1. Загальні співвідношення	22
5.2. Середнє від оператора кількості електронів та хімічний потенціал	24
5.3. Внутрішня енергія та поверхнева енергія	31
6. Висновки	34
A. Розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера з модельним поверхневим потенціалом	35
B. Густина станів електронної підсистеми	37
C. Унарна функція розподілу електронів	39
D. Термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи	40
E. Розрахунок $\langle N \rangle_0$ та $\partial \langle N \rangle_0 / \partial \mu$	42
F. Внутрішня енергія невзаємодіючої системи	44
G. Розрахунок $\mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$	45
H. Розрахунок $\sum_{\nu} \mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$ та $\sum_{\nu} \partial \mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) / \partial \mu$	47
I. Розрахунок сум від функцій розподілу Фермі-Дірака	48
I.1. $\sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha}(\mathbf{p}), \sum_{\mathbf{p}} \partial n_{\alpha}(\mathbf{p}) / \partial \mu$	48
I.2. $\sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})$	49
I.3. $\sum_{\mathbf{p}} \partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) / \partial \mu (n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p} + \mathbf{q}))$	54
J. Розрахунок інтегралів з ефективним потенціалом міжелектронної взаємодії	58

1. Вступ

На сьогоднішній день квантово-статистична теорія фермі-систем з наявністю поверхні поділу ще далека від завершення. Актуальність теоретичного опису таких систем важко переоцінити у зв'язку з важливістю процесів, які відбуваються за наявності поверхні поділу, та бурхливим розвитком експериментальних методів дослідження поверхні.

Найпопулярнішим теоретичним методом дослідження таких систем є метод функціоналу густини [1–3], що виник на основі добре відомого методу Томаса-Фермі, який був розроблений для атомів. За своєю природою метод функціоналу густини є одночастинковим підходом і не може коректно врахувати багаточастинкові кореляційні ефекти. Тому найчастіше для енергетичних функціоналів систем з поверхнею поділу використовують наближення локальної густини, тобто беруть для розрахунків відомі вирази з теорії однорідних систем та замість концентрації електронів n покладають розподіл електронної густини $n(\mathbf{r})$. Такий підхід є дискусійним [4], оскільки наявність поверхні поділу привносить не тільки кількісну, а й якісну зміну різних характеристик електронної системи (наприклад, виникають сили зображення і т.д.), що принципово не можна врахувати в теорії функціоналу густини.

Для методу функціонала густини є характерною проблема поверхневої енергії: розрахована за допомогою цього підходу поверхнева енергія напівобмеженого «желе» виявляється від'ємною для великих значень концентрації електронів ($r_s < 2.5 a_B$, де r_s — радіус Вігнера-Зейтца), що фізично неправильно, поверхнева енергія має бути додатною, інакше метал мав би спонтанно розколюватися. На даний час переважна більшість дослідників схилиються до думки, що причиною від'ємності поверхневої енергії є заміна дискретної іонної ґратки однорідним додатним фоном. Так, у роботі Ленга і Кона [5] дискретність ґратки враховувалась шляхом використання першого порядку теорії збурень за псевдопотенціалом. У результаті отримано додатну поверхневу енергію, яка задовільно узгоджувалась з експериментальними даними для ряду простих металів. У працях [6,7] Монієр і Педью розробили варіаційну процедуру, яка дозволила врахувати усереднений ефект дискретності введенням добавки до потенціалу всередині металу, яка залежить від структури ґратки та досліджуваної поверхні. Результати для поверхневої енергії виявилися досить близькими до результатів Ленга і Кона та краще узгоджуються з експериментальними даними. Після цього Аппель-

баум та Гаман [8], використовуючи наближення локальної густини, провели розрахунки для Cu(111), в яких дискретність іонної ґратки враховувалась без теорії збурень, та отримали добре узгодження з експериментальними даними. Автори всіх цих робіт припускали, що нелокальні обмінно-кореляційні ефекти є незначними і тому ними нехтували. У працях [9,10] проведено розрахунки поверхневої енергії з вар'юванням положенням останнього шару іонів та отримано добре узгодження з експериментальними даними для поверхневої енергії простих металів. У працях [11–13] запропоновано стабілізовану модель «желе», яка полягає у включенні в ефективний потенціал всередині металу усередненої по комірниці Вігнера-Зейтца псевдопотенціальної поправки. У цій моделі отримано додатні значення поверхневої енергії.

Отже, врахування дискретності іонної ґратки дозволило вирішити проблему з від'ємністю поверхневої енергії. Проте не очевидно, що нехтування дискретністю є головною та єдиною причиною розходження теорії з експериментом і що не можна покращити теорію, залишаючись у рамках моделі «желе». Були спроби вийти за рамки наближення локальної густини. Так, Шміт і Лукас [14], Крейг [15] та Пойкерг [16] розглядали деякі нелокальні вклади в обмінно-кореляційну частину поверхневої енергії, які зумовлені зміною нулевої енергії плазмонів внаслідок появи поверхневих мод під час розділення кристала на фрагменти. Виявивши добре узгодження цього вкладу з експериментальними даними для поверхневої енергії, автори цих робіт запропонували ототожнювати цю частину поверхневої енергії з повною поверхневою енергією, припускаючи, що інші, невраховані в їх розрахунках вклади взаємно компенсуються. У працях [17–24] такий підхід активно дискутувався. Для аналізу нелокальних ефектів Гаріс та Джонс [22,23], Вікборг та Інґлсфілд [25], а також Джонсон і Срінівасан [27] отримали вирази для обмінно-кореляційної енергії обмеженого електронного газу. Для електронів у потенціальному ящику з безмежно високими стінками була обчислена обмінна частина поверхневої енергії [22,23], а також у наближенні хаотичних фаз обмінно-кореляційна та обмінна частини [25]. Порівняння цих величин з розрахованими у наближенні локальної густини показало, що обмінно-кореляційні частини відрізняються приблизно на 10%, обмінні — на 50%, а кореляційні — у 6 разів. Тобто наближення локальної густини значно краще працює для суми обмінної та кореляційної частин енергії, ніж для кожної зокрема (див. також [26]). Подальші розрахунки з використанням більш реалістичних моделей поверхневого бар'єру [28–32], градієнтних розвинень [32–39], аналіз

Лангрета та Педью [38, 39] також виявили визначальний вклад наближення локальної густини в обмінно-кореляційну частину енергії. Так, розрахунки [35] показують, що нелокальні поправки не перевищують 16%, хоча відносний вклад нелокальності в повну поверхневу енергію може бути значно більшим (аж до 40%), оскільки для більшості металів обмінно-кореляційна частина поверхневої енергії є більша за повну поверхневу енергію [5].

Пізніші дослідження відновили дискусію щодо коректності використання наближення локальної густини при розрахунках поверхневої енергії. Використання Крочеком та Коном багаточастинкової схеми розрахунку, яка враховує кулонівські взаємодії через ферміївське гіперланцогове наближення [40, 41], дало значно вищі значення поверхневої енергії, ніж розраховані Ленгом та Коном в наближенні локальної густини [5]. На відміну від цього, значення поверхневої енергії, які отримані в розрахунках методом функціоналу густини [42] з використанням нелокального функціоналу Лангрета та Мела [43], є значно ближчими до результатів, які отримані в наближенні локальної густини. Розрахунки поверхневої енергії за допомогою квантового методу Монте-Карло [44, 45] показали, що отримані значення поверхневої енергії в області великих концентрацій ($r_s \leq 2.07 a_B$) добре узгоджуються з результатами, які отримані за допомогою нелокального функціоналу, а в області менших концентрацій ($r_s \geq 3.25 a_B$) добре узгоджуються з результатами, які отримані на основі багаточастинкової схеми Крочека та Кона [40, 41]. У праці [46] зроблено висновок, що наближення локальної густини вносить малі похибки в обмінно-кореляційну частину поверхневої енергії. У цій праці далекодіючі кореляції враховувалися самоузгоджено в наближенні хаотичних фаз, короткодійні кореляції були включені в часово-залежне наближення локальної густини [47, 48].

У праці [49], використовуючи отримані в [50] унарну та бінарну функції розподілу з врахуванням кулонівської взаємодії між електронами, проведено розрахунок поверхневої енергії та виявлено, що вона додатна в усій області електронної концентрації.

Згадаємо ще працю Такагаші та Онзави [51], в якій проведено розрахунки електронної густини та поверхневої енергії невзаємодіючого електронного газу у полі модельного потенціального бар'єру скінченної висоти. Цікаво, що розрахована без самоузгодження електронна густина є дуже близькою до самоузгоджених розрахунків Ленга та Кона [5], а поверхнева енергія є додатною для усіх концентрацій електронів і при малих концентраціях близька до знайденої Ленгом та Коном.

У представленій роботі зроблено спробу побудувати послідовну квантово-статистичну теорію простого металу з поверхнею поділу «метал-вакуум» у рамках моделі «желе». Отримано загальний вираз для термодинамічного потенціалу, для розрахунку якого визначальним є ефективний потенціал міжелектронної взаємодії, який раніше досліджувався нами у працях [52–56]. Показано, що у певних наближеннях термодинамічний потенціал можна подати у вигляді функціоналу від унарної та бінарної функцій розподілу електронів. У граничному випадку низьких температур на основі термодинамічного потенціалу отримано нелінійне алгебраїчне рівняння для хімічного потенціалу та загальний вираз для внутрішньої енергії. Показано, що отримане рівняння для хімічного потенціалу неоднорідної системи співпадає з рівнянням для однорідної системи. Проведено розрахунок хімічного потенціалу як функції радіуса Вігнера-Зейтца. Розраховано унарну функцію розподілу електронів для модельного поверхневого потенціалу у вигляді безмежно високого потенціального бар'єру. Отримано вирази для об'ємної та поверхневої частин внутрішньої енергії. Для цієї ж моделі поверхневого потенціалу проведено розрахунок поверхневої частини внутрішньої енергії, яка у випадку низьких частин є поверхневою енергією. Досліджено поведінку поверхневої енергії як функції радіуса Вігнера-Зейтца. Виявлено, що розрахована нами поверхнева енергія є додатною у всій області концентрацій, які характерні металам, та при малих концентраціях співпадає з розрахунками Ленга та Кона [5]. Досліджено вплив кулонівської взаємодії на розраховані характеристики.

2. Модель

Розглядаємо систему N електронів в об'ємі $V = SL$ у полі додатного заряду, який обмежений площиною поділу $Z = 0$, з таким розподілом:

$$\varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_{||}, Z) \equiv \varrho_{\text{jell}}(Z) = \varrho_0 \theta(-Z) = \begin{cases} \varrho_0, & Z \leq 0 \\ 0, & Z > 0 \end{cases},$$

де $\theta(x)$ — функція Хевісайда, $\mathbf{R}_{||} = (X, Y)$, $X, Y \in [-\sqrt{S}/2, +\sqrt{S}/2]$, $Z \in [-L/2, +L/2]$, причому має місце умова електронейтральності

$$\lim_{S, L \rightarrow \infty} \int_S d\mathbf{R}_{||} \int_{-L/2}^{+L/2} dZ \varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_{||}, Z) = eN, \quad e > 0 \quad (2.1)$$

та термодинамічна границя

$$\lim_{N,S,L \rightarrow \infty} \frac{eN}{SL} = \lim_{N,V \rightarrow \infty} \frac{eN}{V/2} = \varrho_0.$$

У літературі таку модельну систему називають “напівобмежене «желе»” і вона є однією з найпростіших моделей напівобмеженого металу, яка задовільно описує прості метали. Гамільтоніан такої системи має вигляд:

$$H_{\text{jell}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{j=1}^N \int_V d\mathbf{R} \frac{e \varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R})}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}|} + \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{R}_1 \int_V d\mathbf{R}_2 \frac{\varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_1) \varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_2)}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}, \quad (2.2)$$

де \mathbf{r}_j — радіус-вектор j -го електрона, перший доданок — це оператор кінетичної енергії електронів (m — маса електрона), другий — потенціальна енергія взаємодії між електронами, третій — енергія взаємодії електронів з додатним зарядом, четвертий — потенціальна енергія додатного заряду,

Виділимо із гамільтоніана (2.2) гамільтоніан однорідного «желе» $H_{\text{jell}}^{\text{unif}}$

$$H_{\text{jell}}^{\text{unif}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{j=1}^N \int_V d\mathbf{R} \frac{e^2 N/V}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}|} + \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{R}_1 \int_V d\mathbf{R}_2 \frac{(eN/V)^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}, \quad (2.3)$$

де фізичний зміст доданків є аналогічним до доданків гамільтоніана (2.2).

У результаті отримуємо

$$H_{\text{jell}} = H_{\text{jell}}^{\text{unif}} + \sum_{j=1}^N V_{\text{surf}}(\mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \int_V d\mathbf{R}_1 \int_V d\mathbf{R}_2 \frac{\varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_1) \varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}_2) - (eN/V)^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|}, \quad (2.4)$$

де

$$V_{\text{surf}}(\mathbf{r}_j) = \int_V d\mathbf{R} \frac{e(eN/V - \varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R}))}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{R}|}$$

— поверхневий потенціал, у полі якого знаходяться електрони. Цей потенціал формується відхиленням розподілу додатного заряду від однорідного. Так, якщо замість $\varrho_{\text{jell}}(\mathbf{R})$ покласти однорідний розподіл eN/V , то поверхневий потенціал, а також й останній доданок у гамільтоніані (2.3) перетвориться на нуль і у результаті отримаємо

$$\lim_{\varrho_{\text{jell}} \rightarrow \frac{eN}{V}} H_{\text{jell}} = H_{\text{jell}}^{\text{unif}}.$$

Зауважимо, що в силу симетрії розглядуваної задачі поверхневий потенціал $V_{\text{surf}}(\mathbf{r})$ буде функцією лише нормальної до площини поділу координати електрона, рух електронів у паралельній площині до поверхні поділу є вільним, тобто

$$V_{\text{surf}}(\mathbf{r}) \equiv V_{\text{surf}}(z).$$

Для розрахунку термодинамічного потенціалу розглядуваної системи гамільтоніан (2.4) зручно подати у представленні вторинного квантування.

3. Представлення вторинного квантування

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{surf}}(z) \right] \Psi_a(\mathbf{r}) = E_a \Psi_a(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

які використаємо для побудови представлення вторинного квантування.

Оскільки потенціал у стаціонарному рівнянні Шредінгера (3.1) залежить лише від нормальної координати електрона до площини поділу, то змінні можна розділити. У результаті отримуємо, що

$$E_a = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha, \quad a = (\mathbf{p}, \alpha), \quad (3.2)$$

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{\parallel}} \varphi_\alpha(z).$$

де \mathbf{r}_{\parallel} — двовимірний радіус-вектор електрона в паралельній до поверхні поділу площині, $\hbar\mathbf{p}$ — імпульс електрона у цій ж площині, причому

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y), \quad p_{x,y} = \frac{2\pi n_{x,y}}{\sqrt{S}}, \quad n_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.3)$$

α — деяке квантове число, яке залежить від конкретного вигляду поверхневого потенціалу, функції $\varphi_\alpha(z)$ задовольняють таке одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера

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

Розвиваючи потенціальну енергію взаємодії між двома електронами у ряд Фур'є

$$\frac{e^2}{\sqrt{(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})^2 + (z - z')^2}} = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} \nu(\mathbf{q}, z - z') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}'_{\parallel})},$$

де $\nu(\mathbf{q}, z - z') = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z - z'|}$ — двовимірний фур'є-образ кулонівської взаємодії, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$, $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$, $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, гамільтоніан системи (2.4) можна подати так:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) + \\ & + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}_1, \alpha_1, \alpha'_1} \sum_{\mathbf{p}_2, \alpha_2, \alpha'_2} \int dz \int dz' \nu(\mathbf{q}, z - z') \varphi_{\alpha_1}^*(z) \varphi_{\alpha'_1}(z) \times \\ & \times \varphi_{\alpha_2}^*(z') \varphi_{\alpha'_2}(z') a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1) a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2) a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}), \quad (3.4) \end{aligned}$$

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

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

$$N = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$$

— оператор кількості частинок; у формулі (3.4) відсутні доданки з $\mathbf{q} = 0$, що зумовлено умовою електронейтральності (2.1).

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

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

де $\nu_k(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / (\mathbf{q}^2 + k^2)$ — фур'є-образ кулонівської взаємодії, $k = \frac{2\pi}{L} n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, та введемо змішане фур'є-представлення

локальної густини електронів

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

де

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

Тоді для гамільтоніану (3.4) отримуємо:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}) - \frac{1}{2S} N \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) + \\ & + \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}). \quad (3.5) \end{aligned}$$

Представлення гамільтоніану (3.5) є зручним для розрахунку термодинамічного потенціалу методом функціонального інтегрування.

4. Термодинамічний потенціал

4.1. Функціональне представлення термодинамічного потенціалу

Велика статистична сума

$$\Xi = \text{Sp} \exp[-\beta(H - \mu N)],$$

яка визначає термодинамічний потенціал системи:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi$$

та інші термодинамічні функції, у представленні взаємодії має вигляд:

$$\Xi = \Xi_0 \exp\left(\frac{\beta}{2S} \langle N \rangle_0 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0)\right) \Xi_{\text{int}},$$

де $\Xi_0 = \text{Sp} \exp(-\beta H'_0)$, $H'_0 = H_0 - \mu N$, $H_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} E_\alpha(\mathbf{p}) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p})$ — гамільтоніан невзаємодіючої системи, μ — хімічний потенціал електронів,

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{\Xi_0} \text{Sp}(e^{-\beta H'_0} \dots), \quad (4.1)$$

$$\langle N \rangle_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \langle a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p}) \rangle_0 = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n_{\alpha}(\mathbf{p}),$$

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

— функція розподілу Фермі-Дірака,

$$\Xi_{\text{int}} = \langle \mathcal{S}(\beta) \rangle_0,$$

$$\mathcal{S}(\beta) = \text{T exp} \left[-\frac{1}{2SL} \int_0^{\beta} d\beta' \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}, \beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}, \beta') \right], \quad (4.2)$$

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

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

Тоді термодинамічний потенціал Ω набуває такого вигляду:

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{2S} \langle N \rangle_0 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) + \Omega_{\text{int}}, \quad (4.3)$$

де

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E_{\alpha}(\mathbf{p}))} \right] \quad (4.4)$$

— термодинамічний потенціал незваєодіючої системи¹ (його розрахунок проведено у додатку D),

$$\Omega_{\text{int}} = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi_{\text{int}}. \quad (4.5)$$

Для подальших викладок зручно перейти до частотного представлення:

$$\rho_k(\mathbf{q}, \nu) = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\beta' e^{i\nu\beta'} \rho_k(\mathbf{q}, \beta'), \quad (4.6)$$

¹Оскільки вигляд термодинамічного потенціалу Ω_0 як функції μ співпадає з термодинамічним потенціалом ідеального електронного газу, то тут і надалі термодинамічний потенціал Ω_0 (4.4) називаємо «термодинамічним потенціалом незваєодіючої системи», хоча в ньому опосередковано враховано кулонівську взаємодію між електронами через хімічний потенціал μ взаємодіючої системи електронів.

Це ж саме стосується і внутрішньої енергії незваєодіючої системи U_0 .

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

де $\nu = \frac{2\pi}{\beta} n$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) — бозівські частоти. Тоді (4.2) набуде вигляду:

$$\mathcal{S}(\beta) = \text{T exp} \left[-\frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \sum_{\nu} \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}, \nu) \rho_{-k}(-\mathbf{q}, -\nu) \right]. \quad (4.7)$$

З метою спрощення усереднення $\mathcal{S}(\beta)$ згідно з (4.1) представимо $\mathcal{S}(\beta)$ у вигляді функціонального інтегралу [57, 58], скориставшись тотожністю Стратоновича-Хаббарда [59]:

$$\exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbb{A} \mathbf{y} \right] = (\det \mathbb{A})^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} (d\mathbf{x}) \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbb{A}^{-1} \mathbf{x} + i \mathbf{x}^T \mathbf{y} \right],$$

де $(d\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^n \frac{dx_k}{\sqrt{2\pi}}$, $\mathbf{y}^T = (y_1, \dots, y_n)$, $\mathbf{x}^T = (x_1, \dots, x_n)$, i — уявна одиниця, \mathbb{A} — додатно визначена матриця. У результаті для (4.7) отримуємо:

$$\mathcal{S}(\beta) = \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_k \prod_{\nu} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \times$$

$$\times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \sum_{\nu} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}, \nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}, -\nu) \right] \times$$

$$\times \text{T exp} \left[i \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \sum_{\nu} \omega_k(\mathbf{q}, \nu) \rho_k(\mathbf{q}, \nu) \right], \quad (4.8)$$

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

$$(d\omega) = \prod_{\mathbf{q} > 0} \prod_{k \geq 0} \prod_{\nu \geq 0} \frac{d\omega_k^c(\mathbf{q}, \nu)}{\sqrt{\pi}} \frac{d\omega_k^s(\mathbf{q}, \nu)}{\sqrt{\pi}},$$

$$\omega_k(\mathbf{q}, \nu) = \omega_k^c(\mathbf{q}, \nu) + i\omega_k^s(\mathbf{q}, \nu),$$

$$\omega_k^c(\mathbf{q}, \nu) = \omega_{-k}^c(-\mathbf{q}, -\nu),$$

$$\omega_k^s(\mathbf{q}, \nu) = -\omega_{-k}^s(-\mathbf{q}, -\nu).$$

Зауважимо, що у зв'язку з тим, що операторні змінні $\rho_k(\mathbf{q}, \nu)$ знаходяться в (4.8) під знаком T-впорядкування, інтегрувати по β' в (4.6) не можна.

Усереднюючи $\mathcal{S}(\beta)$ згідно з (4.1), отримуємо:

$$\Xi_{\text{int}} = \langle \mathcal{S}(\beta) \rangle_0 = \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_k \prod_{\nu} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \int (d\omega) J(\omega), \quad (4.9)$$

де

$$J(\omega) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_k \sum_{\nu} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}, \nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}, -\nu) \right] \times \\ \times \exp \left[\sum_{n \geq 2} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \neq 0, k_1, \nu_1 \\ \dots \\ \mathbf{q}_n \neq 0, k_n, \nu_n}} \mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}^0(\mathbf{q}_1, \nu_1, \dots, \mathbf{q}_n, \nu_n) \times \right. \\ \left. \times \omega_{k_1}(\mathbf{q}_1, \nu_1) \dots \omega_{k_n}(\mathbf{q}_n, \nu_n) \right], \quad (4.10)$$

$$\mathfrak{M}_{k_1, \dots, k_n}^0(\mathbf{q}_1, \nu_1, \dots, \mathbf{q}_n, \nu_n) = i^n \langle T \rho_{k_1}(\mathbf{q}_1, \nu_1) \dots \rho_{k_n}(\mathbf{q}_n, \nu_n) \rangle_{0, c} \sim \\ \sim \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \delta_{\nu_1 + \nu_2 + \dots + \nu_n, 0}$$

— незвідні середні (кумулянти), δ — символ Кронекера, $\mathfrak{M}_k^0(\mathbf{q}, \nu) \equiv 0$, бо $\mathbf{q} \neq 0$.

Розрахунок інтегралу (4.9) є складною проблемою внаслідок наявності у показнику експоненти доданків із $n \geq 3$. Їх відкидання приводить до гаусівського наближення (наближення хаотичних фаз). Врахування цих доданків, як правило, проводять шляхом розвинення негаусівської частини підінтегральної функції (4.10) у ряд з наступним усередненням за гаусівським розподілом та частковим підсумовуванням доданків, які дають найбільший вклад. На відміну від цього, у роботі [52] показано, що підінтегральну функцію $J(\omega)$ можна апроксимувати гаусівською формою $J_G(\omega)$, ввівши невідому функцію $D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$:

$$J_G(\omega) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\nu} \left(\frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \right)^{-1} \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \right], \quad (4.11)$$

де $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ — фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії,

$$\left(\frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \right)^{-1} = \left(\frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \right)^{-1} \delta_{k_1 + k_2, 0} - D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu). \quad (4.12)$$

Невідому функцію $D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$ можна визначити з рівності середнього від $\omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu)$, яке обчислене з розподілом $J(\omega)$, середньому, яке обчислене з гаусівським розподілом $J_G(\omega)$, тобто з умови

$$\overline{\omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu)} = \langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G, \quad (4.13)$$

де введено такі позначення

$$\overline{\dots} = \frac{\int (d\omega) J(\omega) \dots}{\int (d\omega) J(\omega)}, \\ \langle \dots \rangle_G = \frac{\int (d\omega) J_G(\omega) \dots}{\int (d\omega) J_G(\omega)}. \quad (4.14)$$

У праці [52] показано, що розв'язок рівняння (4.13) у матричному вигляді є таким:

$$\mathbb{D} = \overline{\mathfrak{M}} (\mathbb{I} + \mathbb{V} \overline{\mathfrak{M}})^{-1},$$

де \mathbb{I} — одинична матриця,

$$\mathbb{V} = \left\| \frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \delta_{k_1 + k_2, 0} \right\|, \quad \overline{\mathfrak{M}} = \left\| \overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) \right\|,$$

$$\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) = i^2 \langle T \rho_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \rho_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle$$

— двочастинкова кореляційна функція, де усереднення відбувається із гамільтоніаном усієї системи, тобто

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Sp}(e^{-\beta(H - \mu N)} \dots).$$

Після цієї апроксимації функціональне представлення для Ω_{int} набуває такого вигляду:

$$\Omega_{\text{int}} = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi_{\text{int}} = \\ = -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \int (d\omega) J_G(\omega). \quad (4.15)$$

Цей гаусівський функціональний інтеграл легко обчислюється, у результаті отримуємо

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{int}} &= -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \left(\det \frac{\beta}{S} g(\mathbf{q}, \nu) \right)^{1/2} = \\ &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\nu} \ln \frac{\det g(\mathbf{q}, \nu)}{\prod_k \frac{1}{L} \nu_k(\mathbf{q})}.\end{aligned}$$

З цього виразу видно, що для подальшого розрахунку Ω_{int} необхідно знати ефективний потенціал міжелектронної взаємодії, фур'є-образ якого задовольняє матричне рівняння (4.12). Це рівняння можна переписати так:

$$\begin{aligned}g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) &= \frac{1}{L} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \delta_{k_1+k_2, 0} + \\ &+ \frac{\beta}{SL} \sum_k \nu_{k_1}(\mathbf{q}) D_{-k_1, k}(\mathbf{q}, \nu) g_{k, k_2}(\mathbf{q}, \nu).\end{aligned}\quad (4.16)$$

Оскільки

$$g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{1}{L^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_1 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_2 e^{ik_1 z_1 + ik_2 z_2} g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2),\quad (4.17)$$

$$g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) = \sum_{k_1, k_2} e^{-ik_1 z_1 - ik_2 z_2} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)$$

та

$$D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{1}{L^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_1 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_2 e^{-ik_1 z_1 - ik_2 z_2} D(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2),\quad (4.18)$$

$$D(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) = \sum_{k_1, k_2} e^{ik_1 z_1 + ik_2 z_2} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu),$$

то в (\mathbf{q}, z) -представленні рівняння (4.16) має такий вигляд:

$$\begin{aligned}g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) &= \nu(\mathbf{q}, z_1 - z_2) + \\ &+ \frac{\beta}{SL^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz' \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz'' \nu(\mathbf{q}, z_1 - z') D(\mathbf{q}, \nu, z', z'') g(\mathbf{q}, \nu, z, z_2),\end{aligned}$$

Це інтегральне рівняння у різних наближеннях розв'язувалося у працях [52–56], у додатку J наведено його наближений аналітичний розв'язок для безмежно високого потенціального бар'єру.

Отже, для розрахунку термодинамічного потенціалу в цьому підході достатньо знати ефективний потенціал парної взаємодії за наявності площини поділу.

4.2. Розрахунок термодинамічного потенціалу

Як видно з (4.5), для розрахунку термодинамічного потенціалу необхідно обчислити визначник матриці ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії. Це є доволі складною задачею, оскільки порядок цієї матриці є безмежним. Для цього можна скористатися відомою тотожністю (див., наприклад, [60])

$$\ln \det \mathbb{A} = \text{Sp} \ln \mathbb{A},$$

з наступним розвиненням у ряд $\ln \mathbb{A}$, обчисленням сліду матричних доданків в отриманому ряді та наступним підсумовуванням цього ряду.

Для уникнення такої процедури пропонуємо інший, еквівалентний до цього підхід, який полягає у побудові диференціального рівняння для шуканої величини Ω_{int} . Для цього замість $J_G(\omega)$ (4.11) введемо у розгляд функцію $J_G(\omega, \lambda)$, яка залежить від параметра λ :

$$\begin{aligned}J_G(\omega, \lambda) &= \\ &= \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\nu} \left(\frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, \lambda) \right)^{-1} \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \right],\end{aligned}$$

де $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, \lambda)$ – фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії, який залежить від параметра λ :

$$\left(\frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, \lambda) \right)^{-1} = \left(\frac{\beta}{SL} \nu_{k_1}(\mathbf{q}) \right)^{-1} \delta_{k_1+k_2, 0} - \lambda D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu),$$

причому $g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \equiv g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, 1)$, $J_G(\omega) \equiv J_G(\omega, 1)$.

Тоді від цього параметра залежатимуть Ω_{int} та Ξ_{int}

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{int}}(\lambda) &= -\frac{1}{\beta} \ln \Xi_{\text{int}}(\lambda) = \\ &= -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \int (d\omega) J_G(\omega, \lambda),\end{aligned}$$

причому

$$\Omega_{\text{int}} = \Omega_{\text{int}}(1).$$

Продиференціюємо $\Omega_{\text{int}}(\lambda)$ за параметром λ , у результаті отримуємо, що

$$\begin{aligned}\frac{d\Omega_{\text{int}}(\lambda)}{d\lambda} &= -\frac{1}{\beta} \frac{d}{d\lambda} \ln \Xi_{\text{int}}(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{\Xi_{\text{int}}(\lambda)} \frac{d\Xi_{\text{int}}(\lambda)}{d\lambda} = \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{1}{\Xi_{\text{int}}(\lambda)} \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \times \\ &\quad \times \frac{1}{2} \int (d\omega) J_G(\omega, \lambda) \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) = \\ &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G(\lambda),\end{aligned}$$

де введено середнє

$$\langle \dots \rangle_G(\lambda) = \frac{\int (d\omega) J_G(\omega, \lambda) \dots}{\int (d\omega) J_G(\omega, \lambda)}. \quad (4.19)$$

Усереднення (4.14) та (4.19) співпадають, якщо в останньому покласти $\lambda = 1$, тобто

$$\langle \dots \rangle_G = \langle \dots \rangle_G(1)$$

Отже, у результаті для $\Omega_{\text{int}}(\lambda)$ отримали таке диференціальне рівняння першого порядку:

$$\frac{d\Omega_{\text{int}}(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G(\lambda). \quad (4.20)$$

Для отримання однозначного розв'язку цього диференціального рівняння першого порядку його необхідно доповнити однією додатковою умовою. Легко зауважити, що

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{int}}(0) &= -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \times \\ &\quad \times \int (d\omega) \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \nu, k} \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \omega_k(\mathbf{q}, \nu) \omega_{-k}(-\mathbf{q}, -\nu) \right] = \\ &= \frac{1}{\beta} \ln 1 = 0.\end{aligned} \quad (4.21)$$

Розв'язок задачі Коші (4.20), (4.21) легко знаходимо:

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{int}} &\equiv \Omega_{\text{int}}(1) = \\ &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \int_0^1 \langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G(\lambda) d\lambda.\end{aligned}$$

Середнє від $\omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu)$ з гаусівським розподілом $J_G(\omega, \lambda)$ легко обчислюється і дорівнює:

$$\langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G(\lambda) = \frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, \lambda).$$

Отже, отримали вираз для розрахунку Ω_{int} :

$$\Omega_{\text{int}} = -\frac{1}{2S} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu) \int_0^1 g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu, \lambda) d\lambda.$$

Враховуючи співвідношення (4.17) (яке має місце і для залежного від λ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії) та (4.18), отримуємо

$$\Omega_{\text{int}} = -\frac{1}{2SL^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \nu} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_2 D(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) \int_0^1 g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2, \lambda) d\lambda.$$

Подальший розрахунок Ω_{int} за цією формулою необхідно проводити чисельно. З метою отримання аналітичних результатів, зробимо такі наближення:

- $D \approx \mathfrak{M}^0$, тобто розрахунок проводиметься у наближенні хаотичних фаз;
- $g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2, \lambda) \approx g(\mathbf{q}, 0, z_1, z_2, \lambda) \equiv g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda)$, тобто нехтуємо залежністю ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії від бозівської частоти ν .

Тоді вираз для Ω_{int} спрощується

$$\Omega_{\text{int}} \approx -\frac{1}{2SL^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_2 \sum_{\nu} \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) \int_0^1 g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda) d\lambda, \quad (4.22)$$

у цьому виразі підсумовування за частотою ν стосується лише функції $\mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$ (розрахунок цієї суми виконано у додатку H), а ефективний потенціал міжелектронної взаємодії $g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda)$ є розв'язком такого інтегрального рівняння:

$$g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda) = \nu(\mathbf{q}, z_1 - z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \lambda \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz' \nu(\mathbf{q}|z_1 - z') \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, 0, z', z) g(\mathbf{q}, z, z_2, \lambda). \quad (4.23)$$

Підставивши вираз (H.1) у (4.22), а (4.22) — у (4.3), знаходимо такий вираз для термодинамічного потенціалу:

$$\begin{aligned} \Omega = \Omega_0 - \frac{1}{2S} \langle N \rangle_0 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) + & \quad (4.24) \\ + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n_{\alpha}(\mathbf{p}) \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz |\varphi_{\alpha}(z)|^2 \int_0^1 d\lambda g(\mathbf{q}, z, z, \lambda) - & \\ - \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \times & \\ \times \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_2 \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \int_0^1 d\lambda g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda). & \end{aligned}$$

Враховуючи вирази для унарної та бінарної функції розподілу

електронів в моделі напівобмеженого «желе» [50]

$$F_1^0(z) = \frac{V}{S \langle N \rangle_0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_{\alpha}(z)|^2 n_{\alpha}(\mathbf{p}), \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) = F_1^0(z_1) F_1^0(z_2) - & \quad (4.26) \\ - \frac{V^2}{S^2 \langle N \rangle_0^2} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \alpha_1 \\ \mathbf{p}', \alpha_2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}') n_{\alpha_2}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2), & \end{aligned}$$

термодинамічний потенціал можна подати так

$$\begin{aligned} \Omega = \Omega_0 - \frac{1}{2S} \langle N \rangle_0 \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) + & \\ + \frac{1}{2} \frac{\langle N \rangle_0 S}{V} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz F_1^0(z) \int_0^1 d\lambda g(\mathbf{r}_{||}, z, z, \lambda) \Big|_{\mathbf{r}_{||}=0} + & \\ + \frac{1}{2} \frac{\langle N \rangle_0^2 S}{V^2} \int_S d\mathbf{r}_{||} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{+\frac{\lambda}{2}} dz_2 (F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) - F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)) \times & \\ \times \int_0^1 d\lambda g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2, \lambda), & \quad (4.27) \end{aligned}$$

де

$$g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2, \lambda) = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}} g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda) \quad (4.28)$$

— ефективний потенціал міжелектронної взаємодії у координатному представленні, який залежить від параметра λ .

Зауважимо, що вирази (4.25), (4.26) за формою співпадають з виразами для функцій розподілу електронів без кулонівської взаємодії, проте ці функції розподілу залежать від хімічного потенціалу μ взаємодіючої системи електронів.

Термодинамічний потенціал у випадку безмежно високого потенціального бар'єру

Для подальшого розрахунку термодинамічного потенціалу згідно з формулою (4.24) або (4.27) необхідно конкретизувати вигляд поверхневого потенціалу $V_{\text{surf}}(z)$. Змодельємо поверхневий потенціал безмежно високим потенціальним бар'єром, хвильові функції для якого

подано у додатку А (див. (А.3)). Суми за імпульсом \mathbf{p} від функцій розподілу Фермі-Дірака для низьких температур, величина $\langle N \rangle_0$ та інтеграли від хвильових функцій і ефективного потенціалу, які містяться в (4.24), розраховано в додатках І та J відповідно. Необхідно провести підсумовування за квантовим числом α , згідно з правилом (В.4). У результаті термодинамічний потенціал можна подати так:

$$\Omega = \Omega_{\text{bulk}} + \Omega_{\text{surf}}, \quad (4.29)$$

де перший доданок — об'ємна частина термодинамічного потенціалу (пропорційна до об'єму системи V), а другий — поверхнева (пропорційна до площі поверхні S). Об'ємна частина термодинамічного потенціалу має такий вигляд:

$$\Omega_{\text{bulk}} = \Omega_{0,\text{bulk}} + \Delta\Omega_{\text{bulk}}, \quad (4.30)$$

де

$$\frac{\Omega_{0,\text{bulk}}}{SL/2} = -\frac{\hbar^2}{15m\pi^2} p_{\text{F}}^5$$

— об'ємна частина термодинамічного потенціалу невзаємодіючої системи з розрахунку на одиницю об'єму (див. вираз (D.2)), яка залежить від імпульсу Фермі p_{F} взаємодіючої системи електронів,

$$\frac{\Delta\Omega_{\text{bulk}}}{SL/2} = \frac{e^2 p_{\text{F}}^3}{6\pi^2} \int_0^\infty dq \left[\int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q(\lambda)} - 1 \right] - \quad (4.31)$$

$$- \frac{e^2}{2\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 \tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2) \int_0^1 d\lambda g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda),$$

$$Q(\lambda) = \sqrt{q^2 + \lambda \varkappa_{\text{TF}}^2 L\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)},$$

$$L(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

— функція Ліндхарда, $\varkappa_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{4}{\pi} \frac{p_{\text{F}}}{a_{\text{B}}}}$ — обернений радіус екранування Томаса-Фермі, a_{B} — радіус Бора, функція $\tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2)$ розрахована в додатку І (див. вираз (I.2)), функція $g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda)$ — в додатку J (див. вираз (J.5)).

Зауважимо, що на вираз (4.30) наявність площини поділу ніяк не впливає і він є термодинамічним потенціалом з розрахунку на

одиницю об'єму однорідної системи. А термодинамічний потенціал однорідної системи можна аналогічно розрахувати, виходячи з гамільтоніану однорідного «желе» (2.3). Ці розрахунки є значно простішими і в аналогічних наближеннях отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_{\text{unif}}}{V} = & -\frac{\hbar^2}{15m\pi^2} p_{\text{F}}^5 + \frac{p_{\text{F}}^3}{12\pi^4} \int_0^\infty dq q^2 \left[\int_0^1 d\lambda g_{\text{unif}}(q, \lambda) - \nu(q) \right] - \\ & - \frac{p_{\text{F}}^3}{12\pi^4} \int_0^\infty dq q^2 \tilde{J}_{\text{unif}}(q) \int_0^1 d\lambda g_{\text{unif}}(q, \lambda), \end{aligned} \quad (4.32)$$

де функція $\tilde{J}_{\text{unif}}(q)$ обчислена в додатку І (див. (I.4)),

$$\nu(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

— тривимірний фур'є-образ кулонівського потенціалу,

$$g_{\text{unif}}(q, \lambda) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda \varkappa_{\text{TF}}^2 L\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)}$$

— тривимірний фур'є-образ ефективного потенціалу парної міжелектронної взаємодії в однорідній системі, який залежить від параметра λ .

Інтегрування за параметром λ у виразі (4.32) легко виконується і у результаті отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_{\text{unif}}}{V} = & -\frac{\hbar^2}{15m\pi^2} p_{\text{F}}^5 - \\ & - \frac{e^2 p_{\text{F}}^3}{3\pi^3} \int_0^\infty dq \left[1 - \frac{q^2(1 - \tilde{J}_{\text{unif}}(q))}{\varkappa_{\text{TF}}^2 L\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)} \ln \left(1 + \frac{\varkappa_{\text{TF}}^2}{q^2} L\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Вирази (4.30)–(4.31) та (4.33) хоч і відрізняються за формою проте дають той самий результат — термодинамічний потенціал однорідної системи у наближенні хаотичних фаз.

Поверхневий вклад у термодинамічний потенціал має такий вигляд

$$\Omega_{\text{surf}} = \Omega_{0,\text{surf}} + \Delta\Omega_{\text{surf}},$$

де

$$\frac{\Omega_{0,\text{surf}}}{S} = \frac{\hbar^2 p_{\text{F}}^4}{m\pi^2} \left(\frac{\pi}{32} - \frac{d p_{\text{F}}}{15} \right)$$

— поверхнева частина термодинамічного потенціалу невзаємодіючої системи з розрахунку на одиницю площі (див. вираз (D.4)), яка залежить від імпульсу Фермі p_F взаємодіючої системи електронів,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega_{\text{surf}}}{S} &= \frac{e^2 d p_F^3}{6\pi^2} \int_0^\infty dq \left[\int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q(\lambda)} - 1 \right] + \frac{e^2 p_F^2}{16\pi} \int_0^\infty dq + \\ &+ \frac{e^2 p_F^3}{12\pi^2} \int_0^\infty dq \int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q^2(\lambda)} \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \times \\ &\times \left[1 + \frac{3Q^2(\lambda)}{2p_F^2} - \frac{3Q(\lambda)(p_F^2 + Q^2(\lambda))}{2p_F^2} \arctg \frac{p_F}{Q(\lambda)} \right] - \\ &- \frac{e^2}{4\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 \tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2) \int_0^1 d\lambda g_2(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Параметр d розраховано в додатку С (див. вираз (C.2))

$$d = \frac{3\pi}{8p_F}, \quad (4.35)$$

а функцію $g_2(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda)$ розраховано в додатку J (див. вираз (J.6)).

Зауважимо, що у виразі (4.34) другий доданок, який є лінійним за хімічним потенціалом (квадратичним за імпульсом Фермі p_F), містить розбіжний інтеграл. Проте, як побачимо далі, при розрахунку внутрішньої енергії він зникає.

5. Внутрішня енергія

5.1. Загальні співвідношення

Знаючи термодинамічний потенціал Ω та використовуючи узагальнене рівняння Гіббса-Гельмгольца на випадок змінної кількості частинок, отримуємо внутрішню енергію системи U

$$U = \Omega - \theta \frac{\partial \Omega}{\partial \theta} - \mu \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}.$$

У випадку низьких температур $\theta \rightarrow 0$ другий доданок у цьому співвідношенні зникає і отримуємо

$$U = \Omega + \mu \langle N \rangle, \quad (5.1)$$

де враховано, що

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Sp} \left(e^{\beta(H - \mu N)} N \right) = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu}. \quad (5.2)$$

Оскільки згідно з (4.29) термодинамічний потенціал можна розділити на об'ємну та поверхневу частини, то

$$\langle N \rangle = - \frac{\partial(\Omega_{\text{bulk}} + \Omega_{\text{surf}})}{\partial \mu} = N_{\text{bulk}} + N_{\text{surf}}, \quad (5.3)$$

де

$$N_{\text{bulk}} = - \frac{\partial \Omega_{\text{bulk}}}{\partial \mu}, \quad (5.4)$$

$$N_{\text{surf}} = - \frac{\partial \Omega_{\text{surf}}}{\partial \mu}, \quad (5.5)$$

а також

$$U = U_{\text{bulk}} + U_{\text{surf}},$$

де

$$U_{\text{bulk}} = \Omega_{\text{bulk}} - \mu \frac{\partial \Omega_{\text{bulk}}}{\partial \mu} = \Omega_{\text{bulk}} + \mu N_{\text{bulk}}, \quad (5.6)$$

$$U_{\text{surf}} = \Omega_{\text{surf}} - \mu \frac{\partial \Omega_{\text{surf}}}{\partial \mu} = \Omega_{\text{surf}} + \mu N_{\text{surf}} \quad (5.7)$$

— відповідно об'ємна та поверхнева частини внутрішньої енергії.

Хімічний потенціал μ є розв'язком рівняння (5.2). Враховуючи (5.3), у термодинамічній границі отримуємо, що

$$\lim_{N, S, L \rightarrow \infty} \frac{\langle N \rangle}{SL/2} = \lim_{N, S, L \rightarrow \infty} \frac{N_{\text{bulk}}}{SL/2} = \frac{3}{4\pi} \frac{1}{r_s^3},$$

де r_s — радіус Вігнера-Зейтца в одиницях борівського радіуса a_B . Тобто у термодинамічній границі доданок N_{surf} не впливає на хімічний потенціал (але впливає на поверхневу частину внутрішньої енергії U_{surf}) і рівняння для нього можна подати так:

$$\langle N \rangle = - \frac{\partial \Omega_{\text{bulk}}}{\partial \mu}.$$

Згідно з (5.6) та (5.7) для розрахунку об'ємної U_{bulk} та поверхневої U_{surf} частин внутрішньої енергії необхідно ще розрахувати об'ємну N_{bulk} та поверхневу N_{surf} частини середнього від оператора кількості електронів $\langle N \rangle$.

5.2. Середнє від оператора кількості електронів та хімічний потенціал

Згідно з (5.4) та (5.5) величини N_{bulk} та N_{surf} можна розрахувати, узявши похідні за хімічним потенціалом μ від Ω_{bulk} та Ω_{surf} відповідно. Проте простіше скористатися функціональним представленням для термодинамічного потенціалу Ω (див. (4.15)) та обчислити цю похідну від виразу (4.3) за хімічним потенціалом μ . У результаті знаходимо, що

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \frac{1}{\beta \Xi_{\text{int}}} \frac{\partial \Xi_{\text{int}}}{\partial \mu} = \\
&= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \\
&\quad + \frac{1}{\beta \Xi_{\text{int}}} \prod_{\mathbf{q} \neq 0} \prod_{\nu} \prod_k \left(\frac{\beta}{SL} \nu_k(\mathbf{q}) \right)^{-1/2} \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \int (d\omega) J_G(\omega) \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} \frac{\partial D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)}{\partial \mu} \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) = \\
&= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \\
&\quad + \frac{1}{2\beta} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} \frac{\partial D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)}{\partial \mu} \langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G, \quad (5.8)
\end{aligned}$$

де усереднення $\langle \dots \rangle_G$ виконується згідно з (4.14).

Враховуючи, що

$$\langle \omega_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \omega_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_G = \frac{\beta}{S} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu),$$

вираз (5.8) можна переписати так:

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \\
&\quad + \frac{1}{2S} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0, \nu \\ k_1, k_2}} \frac{\partial D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu)}{\partial \mu} g_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \nu).
\end{aligned}$$

Враховуючи (4.17) та (4.18), отримуємо

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \\
&\quad + \frac{1}{2SL^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \nu} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_2 \frac{\partial D(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)}{\partial \mu} g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2), \quad (5.9)
\end{aligned}$$

З метою спрощення цього виразу зробимо такі ж наближення, як і при розрахунку термодинамічного потенціалу, а саме:

- $D \approx \mathfrak{M}^0$;
- $g(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) \approx g(\mathbf{q}, 0, z_1, z_2) \equiv g(\mathbf{q}, z_1, z_2)$.

Тоді вираз (5.9) значно спрощується і

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} + \\
&\quad + \frac{1}{2SL^2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_2 \sum_{\nu} \frac{\partial \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)}{\partial \mu} g(\mathbf{q}, z_1, z_2), \quad (5.10)
\end{aligned}$$

де підсумовування за частотою ν стосується лише похідної за хімічним потенціалом від двочастинкової кореляційної функції (розрахунок цієї суми виконано у додатку H, див. вираз (H.2)).

Підставивши вираз (H.2) у (5.10), знаходимо, що

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle &= \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} - \\
&\quad - \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{p})}{\partial \mu} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz |\varphi_{\alpha}(z)|^2 g(\mathbf{q}, z, z) + \\
&\quad + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \frac{\partial (n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{\partial \mu} \times \\
&\quad \times \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} dz_2 \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) g(\mathbf{q}, z_1, z_2). \quad (5.11)
\end{aligned}$$

Враховуючи вирази для унарної (4.25) та бінарної (4.26) функцій розподілу напівобмеженого «желе» [50], отримуємо

$$\begin{aligned} \langle N \rangle = & \langle N \rangle_0 + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}, 0) \frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} - \\ & - \frac{1}{2} \frac{S}{V} \int_{-\frac{\hbar}{2}}^{+\frac{\hbar}{2}} dz \frac{\partial (\langle N \rangle_0 F_1^0(z))}{\partial \mu} g(\mathbf{r}_{||}, z, z) \Big|_{\mathbf{r}_{||}=0^-} - \\ & - \frac{1}{2} \frac{S}{V^2} \int_S d\mathbf{r}_{||} \int_{-\frac{\hbar}{2}}^{+\frac{\hbar}{2}} dz_1 \int_{-\frac{\hbar}{2}}^{+\frac{\hbar}{2}} dz_2 \frac{\partial (\langle N \rangle_0^2 (F_2^0(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2) - F_1^0(z_1) F_1^0(z_2)))}{\partial \mu} \times \\ & \times g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2), \quad (5.12) \end{aligned}$$

де $g(\mathbf{r}_{||}, z_1, z_2)$ — ефективний потенціал міжелектронної взаємодії у координатному представленні (перехід до координатного представлення є аналогічним до (4.28)).

Середнє від оператора кількості електронів у випадку безмежно високого потенціального бар'єру

Для подальшого аналізу виразу (5.11) або (5.12), як і у попередньому розділі, розглядаємо в якості поверхневого потенціалу $V_{\text{surf}}(z)$ безмежно високий потенціальний бар'єр, хвильові функції для якого подано у додатку А (див. (А.3)). Величини $\langle N \rangle_0$ та $\partial \langle N \rangle_0 / \partial \mu$, суми за імпульсом \mathbf{p} від функцій розподілу Фермі-Дірака для низьких температур та інтеграли від хвильових функцій і ефективного потенціалу, які містяться в (4.24), розраховано в додатках Е, І та J відповідно. Необхідно провести підсумовування за квантовим числом α , згідно з правилом (В.4).

У результаті знаходимо, що об'ємна частина середньої кількості електронів $\langle N \rangle$ має такий вигляд

$$N_{\text{bulk}} = N_{0,\text{bulk}} + \Delta N_{\text{bulk}}, \quad (5.13)$$

де

$$\frac{N_{0,\text{bulk}}}{SL/2} = \frac{p_{\text{F}}^3}{3\pi^2}$$

— об'ємна частина середньої кількості електронів $\langle N \rangle$ невзаємодіючої системи з розрахунку на одиницю об'єму (див. вираз (Е.1)), яка

залежить від імпульсу Фермі p_{F} взаємодіючої системи електронів,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta N_{\text{bulk}}}{SL/2} = & \frac{p_{\text{F}}}{2\pi^2 a_{\text{B}}} \int_0^{\infty} dq \left(1 - \frac{q}{Q} \right) + \\ & + \frac{2}{\pi^4 a_{\text{B}}} \int_0^{\infty} dq q \int_0^{\infty} d\alpha_1 \int_0^{\infty} d\alpha_2 I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, 1), \quad (5.14) \end{aligned}$$

$Q \equiv Q(1)$, функція $I_-(q, \alpha_1, \alpha_2)$ розрахована в додатку І (див. вираз (І.7)), а функція $g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, 1)$ — в додатку J (див. вираз (J.5)).

Зауважимо, що на вирази (5.13)–(5.14) наявність площини поділу ніяк не впливає і це є кількість електронів з розрахунку на одиницю об'єму однорідної системи. Цю ж величину можна розрахувати, зробивши аналогічні наближення, виходячи з гамільтоніану однорідного «желе» (2.3). У результаті отримуємо, що

$$\begin{aligned} \frac{N_{\text{unif}}}{V} = & \frac{p_{\text{F}}^3}{3\pi^2} + \frac{p_{\text{F}}}{4\pi^4} \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dq q^2 (\nu(q) - g_{\text{unif}}(q)) + \\ & + \frac{p_{\text{F}}}{4\pi^4} \frac{m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} dq q^2 \tilde{I}_{\text{unif}}^-(q) g_{\text{unif}}(q), \quad (5.15) \end{aligned}$$

де функція $\tilde{I}_{\text{unif}}^-(q)$ розрахована у додатку І та визначається виразом (І.8),

$$g_{\text{unif}}(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \varkappa_{\text{TF}}^2 \text{L}\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)}$$

— тривимірний фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії в однорідній системі.

Підставивши у (5.15) вирази для тривимірних фур'є-образів кулонівського потенціалу $\nu(q)$ та ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії $g_{\text{unif}}(q)$, отримуємо, що

$$\frac{N_{\text{unif}}}{V} = \frac{p_{\text{F}}^3}{3\pi^2} + \frac{p_{\text{F}}}{\pi^3 a_{\text{B}}} \int_0^{\infty} dq \frac{(\varkappa_{\text{TF}}^2 \text{L}\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right) + q^2 \tilde{I}_{\text{unif}}^-(q))}{q^2 + \varkappa_{\text{TF}}^2 \text{L}\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)}. \quad (5.16)$$

Вирази (5.13)–(5.14) та (5.16) є нелінійними алгебраїчними рівняннями для хімічного потенціалу μ ($\mu = \frac{\hbar^2 p_{\text{F}}^2}{2m}$), хоча вони і відрізняються за формою, але дають однаковий результат, бо на значення хімічного потенціалу наявність площини поділу не впливає.

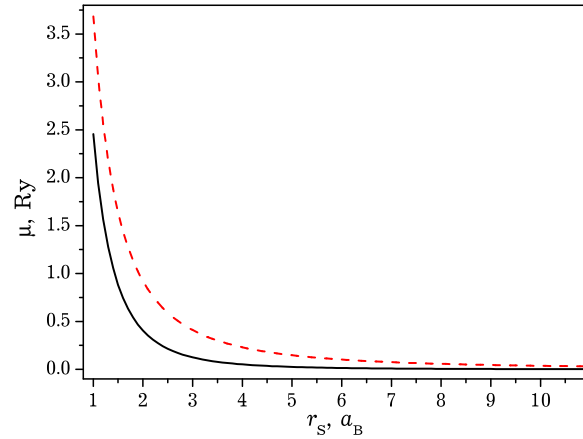


Рис. 1. Залежність хімічного потенціалу взаємодіючої системи електронів (суцільна лінія) та хімічного потенціалу невзаємодіючої системи електронів μ_0 (штрихова лінія) від радіуса Вігнера-Зейтца.

На рис. 1 подано залежність хімічного потенціалу електронів від радіуса Вігнера-Зейтца r_s , суцільна лінія — це хімічний потенціал, який є розв'язком нелінійного алгебраїчного рівняння (5.16), штрихова лінія — хімічний потенціал невзаємодіючої системи електронів

$$\mu_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{(r_s/a_B)^2}, \text{ Ry.} \quad (5.17)$$

З цього рисунка видно, що врахування кулонівської взаємодії призводить до зменшення хімічного потенціалу електронів.

На рис. 2 подано залежність параметра $d = 3\pi/(8p_F)$ від радіуса Вігнера-Зейтца r_s , суцільна лінія — для взаємодіючої системи, штрихова лінія — для невзаємодіючої системи. Параметр d є віддаллю від площини поділу ($z = 0$) до безмежно високого потенціального бар'єру. З цього рисунка видно, що врахування кулонівської взаємодії між електронами приводить до збільшення цієї віддалі та її нелінійної поведінки як функції r_s , тоді як в невзаємодіючій системі залежність d від r_s є лінійною.

На рис. 3 та рис. 4 подано залежність унарної функції розподілу електронів (С.1) від нормальної до площини поділу координати електрона для таких значень радіуса Вігнера-Зейтца: $r_s = 2a_B$ та $r_s = 6a_B$. Суцільна лінія на цих рисунках — це унарна функція, яка

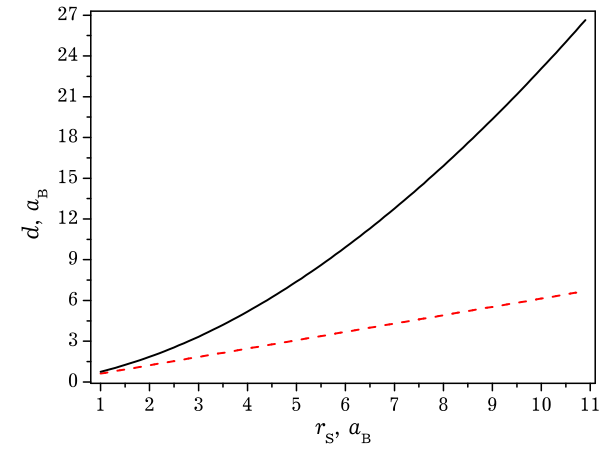


Рис. 2. Залежність параметра d від радіуса Вігнера-Зейтца (суцільна лінія — для взаємодіючої системи, штрихова — для невзаємодіючої).

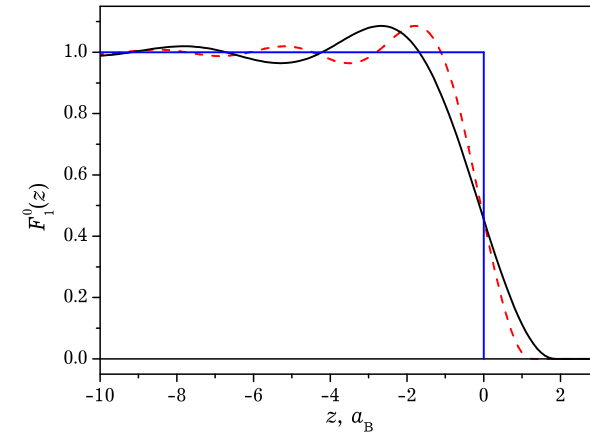


Рис. 3. Залежність унарної функції розподілу від нормальної до площини поділу координати електрона для $r_s = 2a_B$ (суцільна лінія — для взаємодіючої системи, штрихова — для невзаємодіючої).

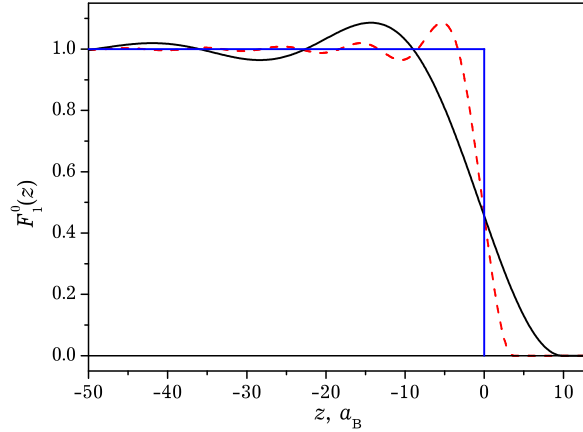


Рис. 4. Залежність унарної функції розподілу від нормальної до площини поділу координати електрона для $r_s = 6 a_B$ (суцільна лінія — для взаємодіючої системи, штрихова — для не взаємодіючої).

залежить від хімічного потенціалу, що є розв'язком нелінійного алгебраїчного рівняння (5.16), тобто тут враховано кулонівську взаємодію через залежність від хімічного потенціалу, штрихова лінія — унарна функція не взаємодіючої системи. Додатний заряд знаходиться в області $z \leq 0$. З цих рисунків видно, що врахування кулонівської взаємодії приводить до збільшення періоду загасаючих осциляцій унарної функції навколо свого значення в глибині металу, яке дорівнює одиниці.

Поверхнева частина середньої кількості електронів $\langle N \rangle$ має такий вигляд

$$N_{\text{surf}} = N_{0,\text{surf}} + \Delta N_{\text{surf}},$$

де

$$\frac{N_{0,\text{surf}}}{S} = \frac{p_F^2}{\pi^2} \left(\frac{d p_F}{3} - \frac{\pi}{8} \right) \quad (5.18)$$

— поверхнева частина середньої кількості електронів $\langle N \rangle$ не взаємодіючої системи з розрахунку на одиницю площі (див. вираз (E.5)), яка

залежить від імпульсу Фермі p_F взаємодіючої системи електронів,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta N_{\text{surf}}}{S} = & \frac{d p_F}{2\pi^2 a_B} \int_0^\infty dq \left(1 - \frac{q}{Q} \right) - \frac{1}{8\pi a_B} \int_0^\infty dq - \\ & - \frac{p_F}{4\pi^2 a_B} \int_0^\infty dq \frac{q}{Q^2} \frac{Q-q}{Q+q} \left(1 - \frac{Q}{p_F} \arctg \frac{p_F}{Q} \right) + \\ & + \frac{1}{\pi^4 a_B} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, 1). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Зауважимо, що у виразі (5.19) другий доданок, який є лінійним за хімічним потенціалом (квадратичним за імпульсом Фермі p_F), містить розбіжний інтеграл. Проте, як побачимо далі, при розрахунку внутрішньої енергії ця розбіжність зникає.

Також зауважимо, що якщо у вираз (5.18) підставити значення параметра d (4.35), то він перетвориться на нуль. Якщо ж врахувати кулонівську взаємодію між електронами, то $N_{0,\text{surf}} \neq 0$.

5.3. Внутрішня енергія та поверхнева енергія

Підставивши вирази (4.27) та (5.12), в які входять унарна та бінарна функції розподілу, а також ефективний потенціал міжелектронної взаємодії, для термодинамічного потенціалу та середнього від оператора кількості частинок відповідно у вираз (5.1), отримаємо загальний вираз для внутрішньої енергії. Цей вираз можна розглядати як один з можливих варіантів функціоналу енергії, який на відміну від функціоналів, що використовуються в теорії функціоналу густини, залежить не лише від унарної функції розподілу електронів, а й від бінарної та ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії.

Підставивши у (5.6) вирази для Ω_{bulk} та N_{bulk} (або Ω_{unif} та N_{unif}) отримуємо об'ємну частину внутрішньої енергії з розрахунку на одиницю об'єму (об'ємну частину внутрішньої енергії не взаємодіючої си-

стеми розраховано в додатку F)

$$\begin{aligned} \frac{U_{\text{bulk}}}{SL/2} &= \frac{\hbar^2}{10m\pi^2} p_F^5 - \frac{e^2 p_F^3}{6\pi^2} \int_0^\infty dq \left[1 - \int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q(\lambda)} \right] + \\ &+ \frac{e^2 p_F^3}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \left(1 - \frac{q}{Q} \right) + \\ &+ \frac{e^2 p_F^2}{\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, 1) - \\ &- \frac{e^2}{2\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 \tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2) \int_0^1 d\lambda g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) \end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned} \frac{U_{\text{unif}}}{V} &= \frac{\hbar^2}{10m\pi^2} p_F^5 + \\ &+ \frac{e^2 p_F^3}{\pi^3} \int_0^\infty dq \left[\frac{1}{2} \frac{(\varkappa_{\text{TF}}^2 L(\frac{q}{2p_F}) + q^2 \tilde{I}_{\text{unif}}^-(q))}{q^2 + \varkappa_{\text{TF}}^2 L(\frac{q}{2p_F})} - \frac{1}{3} + \right. \\ &\left. + \frac{q^2 (1 - \tilde{J}_{\text{unif}}(q))}{3\varkappa_{\text{TF}}^2 L(\frac{q}{2p_F})} \ln \left(1 + \frac{\varkappa_{\text{TF}}^2 L(\frac{q}{2p_F})}{q^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Підставивши у (5.7) вирази для Ω_{surf} та N_{surf} отримуємо поверхневу частину внутрішньої енергії з розрахунку на одиницю площі (поверхневу частину внутрішньої енергії невзаємодіючої системи розраховано в додатку F). Оскільки розглядаємо випадок низьких температур ($\theta \rightarrow 0$), то згідно з [66, 67], відношення U_{surf}/S є вільною поверхневою енергією σ , а величина $U_{\text{surf}} = \sigma S$ — роботою, яка необхідна для незворотного процесу створення нової вільної поверхні S . Величина σ описує надлишок енергії приповерхневих областей порівняно з енергією всередині тіла. Тоді поверхневу енергію σ можна подати так:

$$\sigma = \sigma_0 + \Delta\sigma, \quad (5.20)$$

де

$$\sigma_0 = \frac{\hbar^2 p_F^4}{2m\pi^2} \left(\frac{d p_F}{5} - \frac{\pi}{16} \right), \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} \Delta\sigma &= \frac{e^2 d p_F^3}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \left(1 - \frac{q}{Q} \right) - \frac{e^2 d p_F^3}{6\pi^2} \int_0^\infty dq \left[1 - \int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q(\lambda)} \right] + \\ &- \frac{e^2 p_F^3}{8\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{q}{Q^2} \frac{Q-q}{Q+q} \left(1 - \frac{Q}{p_F} \arctg \frac{p_F}{Q} \right) + \\ &+ \frac{e^2 p_F^3}{12\pi^2} \int_0^\infty dq \int_0^1 d\lambda \frac{q}{Q^2(\lambda)} \frac{Q(\lambda)-q}{Q(\lambda)+q} \times \\ &\times \left[1 + \frac{3Q^2(\lambda)}{2p_F^2} - \frac{3Q(\lambda)(p_F^2 + Q^2(\lambda))}{2p_F^2} \arctg \frac{p_F}{Q(\lambda)} \right] + \\ &+ \frac{e^2 p_F^2}{2\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, 1) - \\ &- \frac{e^2}{4\pi^4} \int_0^\infty dq q \int_0^\infty d\alpha_1 \int_0^\infty d\alpha_2 \tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2) \int_0^1 d\lambda g_2(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Підставивши у вираз (5.21) значення параметра d (4.35), отримуємо

$$\sigma_0 = \frac{\hbar^2 p_F^4}{160m\pi}, \quad (5.23)$$

що за формою співпадає з виразом для поверхневої енергії невзаємодіючої системи [61, 62, 68–70], проте у виразі (5.23) p_F є імпульсом Фермі з врахуванням кулонівської взаємодії між електронами, бо p_F є розв'язком алгебраїчного рівняння (5.16) або (5.13)–(5.14).

На рис. 5 подано залежність поверхневої енергії від радіуса Вігнера-Зейтца r_s , суцільна лінія — це поверхнева енергія, яка розрахована за формулами (5.20), (5.22), (5.23) з використанням значення хімічного потенціалу, який є розв'язком нелінійного алгебраїчного рівня (5.16), штрихова лінія — поверхнева енергія невзаємодіючої системи (5.23), штрих-пунктирна — результати розрахунків Ленга та Кона [5].

З цього рисунка видно, що врахування кулонівської взаємодії призводить до збільшення поверхневої енергії порівняно з поверхневою енергією невзаємодіючої системи. Крім того, розрахована нами поверхнева енергія є додатною у всій області r_s та в області $r_s = 5.5 - 6 a_B$ співпадає з розрахунками Ленга та Кона.

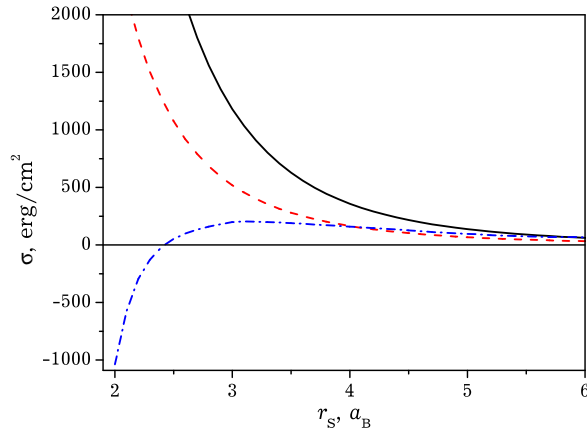


Рис. 5. Залежність поверхневої енергії від радіуса Вігнера-Зейтца (суцільна лінія — для взаємодіючої системи, штрихова — для невзаємодіючої, штрих-пунктирна — розрахунки Ленга та Кона [5]).

6. Висновки

За допомогою методу функціонального інтегрування отримано загальний вираз для термодинамічного потенціалу моделі напівобмеженого «желе». Для практичного застосування цього виразу необхідно розрахувати двочастинкову кореляційну функції електронів та ефективний потенціал міжелектронної взаємодії.

У граничному випадку низьких температур на основі термодинамічного потенціалу отримано та розв'язано нелінійне алгебраїчне рівняння для хімічного потенціалу, показано, що врахування кулонівської взаємодії приводить до пониження хімічного потенціалу. Також показано, що на значення хімічного потенціалу поверхнева частина термодинамічного потенціалу не впливає.

Використовуючи найпростішу модель поверхневого потенціалу — безмежно високий потенціальний бар'єр, у граничному випадку низьких температур отримано та досліджено об'ємні та поверхневі частини термодинамічного потенціалу, середнього значення оператора кількості електронів та внутрішньої енергії.

Досліджено вплив кулонівської взаємодії на поведінку унарної функції розподілу, виявлено, що врахування кулонівської взаємодії приводить до збільшення періоду загасаючих осциляцій навколо свого середнього значення в глибині металу.

Виявлено, що віддаль від площини поділу до безмежно високого потенціального бар'єру, як функція радіуса Вігнера-Зейтца, при врахуванні кулонівської взаємодії втрачає лінійну поведінку і зростає швидше.

На основі виразу для поверхневої частини внутрішньої енергії, моделюючи поверхневий потенціал безмежно високим потенціальним бар'єром, у граничному випадку низьких температур розраховано поверхневу енергію. Показано, що врахування кулонівської взаємодії приводить до її зростання. У всій області зміни радіуса Вігнера-Зейтца поверхнева енергія є додатною, в області $r_s > 5 a_B$ значення розрахованої нами поверхневої енергії добре узгоджуються з розрахунками Ленга та Кона [5].

Розрахунки хімічного потенціалу та поверхневої енергії виявили, що врахування кулонівської взаємодії є дуже важливим в області малих r_s , а по мірі зростання r_s вплив кулонівської взаємодії на ці величини зменшується.

А. Розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера з модельним поверхневим потенціалом

Розглянемо стани електронів у полі поверхневого потенціалу $V_{\text{surf}}(z)$, який змодельовано потенціальним бар'єром скінченної висоти W :

$$V_{\text{surf}}(z) = W \cdot \theta(z - d) = \begin{cases} W, & z > d, \\ 0, & z < d. \end{cases}$$

Розв'язком одновимірного стаціонарного рівняння Шредінгера з цим потенціалом

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

що задовольняє крайові умови

$$\varphi_\alpha(-L/2) = 0, \quad \varphi_\alpha(+\infty) = 0,$$

умови неперервності та гладкості

$$\begin{cases} \varphi_\alpha(z < d)|_{z=d} = \varphi_\alpha(z > d)|_{z=d}, \\ \varphi'_\alpha(z < d)|_{z=d} = \varphi'_\alpha(z > d)|_{z=d} \end{cases}$$

є таким:

$$\varphi_\alpha(z) = C_\alpha \begin{cases} \sin(\alpha(d - z) + \gamma(\alpha)), & z \leq d, \\ \frac{\alpha}{s} e^{-\kappa_\alpha(z-d)}, & z > d, \end{cases} \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad (\text{A.1})$$

де

$$\gamma(\alpha) = \arcsin \frac{\alpha}{s}, \quad \varkappa_\alpha = \sqrt{s^2 - \alpha^2}, \quad \alpha \leq s, \quad s = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar},$$

причому квантові числа α задовольняють алгебраїчне трансцендентне рівняння

$$\alpha \left(\frac{L}{2} + d \right) + \gamma(\alpha) = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.2})$$

З умови нормування хвильових функцій

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

впливає, що

$$C_\alpha = \frac{2}{\sqrt{L + 2d + 2/\varkappa_\alpha}}.$$

Зауважимо, що стани електронів з $\varepsilon_\alpha > W$ тут не виписуємо, бо нас цікавлять лише стани з $\varepsilon_\alpha \leq \mu$, а для фізично цікавих задач хімічний потенціал електронів є меншим за висоту потенціального бар'єра $\mu < W$.

Якщо висоту потенціального бар'єра спрямувати до безмежності, то

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \gamma(\alpha) = \lim_{s \rightarrow \infty} \arcsin \frac{\alpha}{s} = 0,$$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} C_\alpha = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{2}{\sqrt{L + 2d + 2/\varkappa_\alpha}} = \frac{2}{\sqrt{L + 2d}}$$

і в результаті отримуємо, що

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L + 2d}} \begin{cases} \sin(\alpha(d - z)), & z \leq d, \\ 0, & z > d, \end{cases} \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad (\text{A.3})$$

де

$$\alpha = \frac{\pi n}{\left(\frac{L}{2} + d\right)}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

V. Густина станів електронної підсистеми

Розрахуємо густину станів електронної підсистеми без врахування кулонівської взаємодії

$$\rho(E) = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \delta(E - E_\alpha(\mathbf{p})), \quad (\text{B.1})$$

де згідно з (3.2) та (A.1)

$$E_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2(p^2 + \alpha^2)}{2m}.$$

При термодинамічному граничному переході, коли $S \rightarrow \infty$ та $L \rightarrow \infty$, суми замінюємо інтегралами згідно з формулою Ейлера-Маклорена [28, 64]

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} f(n) &= \int_0^{\infty} f(x) dx - \frac{1}{2} [f(\infty) - f(0)] + \frac{B_1}{2!} [f'(\infty) - f'(0)] - \\ &\quad - \frac{B_2}{4!} [f'''(\infty) - f'''(0)] + \dots, \end{aligned}$$

де B_k — k -те число Бернуллі.

Для суми по двовимірному вектору \mathbf{p} , враховуючи (3.3), отримуємо

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dn_x \int_{-\infty}^{+\infty} dn_y f(\mathbf{p}) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \int_{-\infty}^{+\infty} dp_y f(\mathbf{p}) = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

де враховано дві можливі орієнтації спіна електрона та знехтувано доданками, які зникають при $S \rightarrow \infty$.

У випадку підсумовування за тривимірним вектором \mathbf{p} , отримуємо

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{p} f(\mathbf{p}). \quad (\text{B.3})$$

Розглянемо тепер підсумовування по α . З (A.2) впливає, що

$$\frac{dn}{d\alpha} = \frac{L}{2\pi} \left[1 + \frac{2}{L} \left(d + \frac{d\gamma(\alpha)}{d\alpha} \right) \right],$$

тоді

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} f(\alpha) &= \int_0^{+\infty} dn f(\alpha) - \frac{1}{2} f(0) = \int_0^{+\infty} \frac{dn}{d\alpha} d\alpha f(\alpha) - \frac{1}{2} f(0) = \\ &= \int_0^{+\infty} d\alpha \left[\frac{L}{2\pi} \left(1 + \frac{2}{L} \left(d + \frac{d\gamma(\alpha)}{d\alpha} \right) \right) - \frac{1}{2} \delta(\alpha) \right] f(\alpha), \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

доданки з похідними від підінтегральної функції відсутні, оскільки для розглядуваних функцій вони перетворюються на нуль.

Здійснюючи перехід від суми по \mathbf{p} до інтеграла згідно з (B.2), для густини станів (B.1) отримуємо

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{p} \delta \left(E - \frac{\hbar^2(p^2 + \alpha^2)}{2m} \right) = \\ &= \frac{S}{\pi} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} dp p \delta \left(E - \frac{\hbar^2(p^2 + \alpha^2)}{2m} \right) = \\ &= \frac{S}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha} \theta \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \alpha^2 \right). \end{aligned}$$

Здійснюючи перехід від суми по α до інтеграла згідно з (B.4), знаходимо густину станів

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{S}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} d\alpha \left[\frac{L}{2\pi} \left(1 + \frac{2}{L} \left(d + \frac{d\gamma(\alpha)}{d\alpha} \right) \right) - \frac{1}{2} \delta(\alpha) \right] \theta \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \alpha^2 \right) = \\ &= \frac{S}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\sqrt{2mE}/\hbar} d\alpha \left[\frac{L}{2\pi} \left(1 + \frac{2}{L} \left(d + \frac{d\gamma(\alpha)}{d\alpha} \right) \right) - \frac{1}{2} \delta(\alpha) \right] = \\ &= \frac{SL}{2} \frac{\sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} + \\ &+ S \left[\frac{\sqrt{2m}^{3/2} d}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} + \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} \gamma \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right) - \frac{m}{4\pi \hbar^2} \right], \quad (\text{B.5}) \end{aligned}$$

де перший доданок, який пропорційний до об'єму системи SL , є об'ємним вкладом, а решта — поверхневий вклад у густину станів. Знайдений вираз співпадає з виразом для густини станів, який отриманий у праці [28], якщо у формулі (B.5) покласти $d = 0$.

Якщо висоту потенціального бар'єру W спрямувати до безмежності, то γ перетвориться на нуль і вираз для густини станів спроститься

$$\rho(E) = \frac{SL}{2} \frac{\sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} + S \left(\frac{\sqrt{2m}^{3/2} d}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} - \frac{m}{4\pi \hbar^2} \right). \quad (\text{B.6})$$

Зауважимо, що густина станів незваємодіючої однорідної системи має такий вигляд:

$$\rho_{\text{unif}}(E) = V \frac{\sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E},$$

що співпадає з першим доданком виразу (B.5) або (B.6).

С. Унарна функція розподілу електронів

Розрахуємо унарну функцію розподілу електронів в моделі напівобмеженого «желе» [50] для безмежно високого потенціального бар'єру (A.3) у випадку низьких температур

$$\begin{aligned} F_1^0(z) &= \frac{V}{\langle N \rangle_0} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_{\alpha}(z)|^2 n_{\alpha}(\mathbf{p}) = \\ &= \frac{V}{\langle N \rangle_0} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} |\varphi_{\alpha}(z)|^2 \theta(p_{\text{F}}^2 - p^2 - \alpha^2). \end{aligned}$$

Здійснивши перехід від підсумовування до інтегрування згідно з правилами (B.2) та (B.4), отримуємо

$$F_1^0(z) = \left[1 + \frac{3 \cos(2p_{\text{F}}(d-z))}{(2p_{\text{F}}(d-z))^2} - \frac{3 \sin(2p_{\text{F}}(d-z))}{(2p_{\text{F}}(d-z))^3} \right] \theta(d-z), \quad (\text{C.1})$$

що при $d = 0$ за формою збігається з виразом [61–63] для функції розподілу електронів без врахування кулонівської взаємодії, проте у виразі (C.1) враховано кулонівську взаємодію через імпульс Фермі p_{F} електронної підсистеми.

У вираз (C.1) входить параметр d , визначимо його з умови електронейтральності

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} (F_1^0(z) - \theta(-z)) dz = 0.$$

Тоді

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^d dz \left[1 + \frac{3 \cos(2p_F(d-z))}{(2p_F(d-z))^2} - \frac{3 \sin(2p_F(d-z))}{(2p_F(d-z))^3} \right] - \int_{-\infty}^0 dz = \\ & = d + \int_{-\infty}^d dz \left[\frac{3 \cos(2p_F(d-z))}{(2p_F(d-z))^2} - \frac{3 \sin(2p_F(d-z))}{(2p_F(d-z))^3} \right] = \\ & = d + \frac{3}{2p_F} \int_0^{\infty} dz \left(\frac{\cos \zeta}{\zeta^2} - \frac{\sin \zeta}{\zeta^3} \right) = d - \frac{3}{2p_F} \frac{\pi}{4} = 0, \end{aligned}$$

тобто

$$d = \frac{3\pi}{8p_F}. \quad (\text{C.2})$$

D. Термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи

У цьому додатку розрахуємо термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E_\alpha(\mathbf{p}))} \right].$$

Оскільки тут μ — це хімічний потенціал взаємодіючої системи електронів, то у цьому виразі кулонівську взаємодію опосередковано враховано через хімічний потенціал.

Для того щоб виконати підсумовування за \mathbf{p} та α , скористаємося розрахованою у попередньому додатку густиною станів (B.5), тоді

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dE \rho(E) \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E)} \right] = \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{SL}{2} \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE \sqrt{E} \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E)} \right] - \\ &\quad - \frac{1}{\beta} S \frac{\sqrt{2}m^{3/2}d}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE \sqrt{E} \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E)} \right] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\beta} S \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{\infty} dE \gamma \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \right) \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E)} \right] + \\ & + \frac{1}{\beta} S \frac{m}{4\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} dE \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - E)} \right]. \end{aligned}$$

Скориставшись правилом інтегрування за частинами у кожному з доданків, отримуємо

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\frac{SL}{2} \frac{2\sqrt{2}m^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE E^{3/2} \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} - \\ &\quad - S \frac{2\sqrt{2}m^{3/2}d}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} dE E^{3/2} \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} - \\ &\quad - S \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{\infty} dE \int_0^E dE' \gamma \left(\frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar} \right) \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} + \\ &\quad + S \frac{m}{4\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} dE E \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}. \end{aligned}$$

Здійснивши граничний перехід до низьких температур ($\beta \rightarrow \infty$), остаточно отримуємо такий вираз для термодинамічного потенціалу невзаємодіючої системи:

$$\Omega_0 = \Omega_{0,\text{bulk}} + \Omega_{0,\text{surf}}, \quad (\text{D.1})$$

де

$$\begin{aligned} \Omega_{0,\text{bulk}} &= -\frac{SL}{2} \frac{4\sqrt{2}m^{3/2}}{15\pi^2 \hbar^3} \mu^{5/2} = \\ &= -\frac{SL}{2} \frac{\hbar^2}{15m\pi^2} p_F^5 \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

— об'ємний вклад у термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи (пропорційний до об'єму системи SL), який залежить від ім-

пульсу Фермі p_F взаємодіючої системи електронів,

$$\begin{aligned}\Omega_{0,\text{surf}} &= -S \left[\frac{4\sqrt{2}m^{3/2}d}{15\pi^2\hbar^3} \mu^{5/2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{m}{\pi^2\hbar^2} \int_0^\mu dE (\mu - E) \gamma\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right) - \frac{m}{8\pi\hbar^2} \mu^2 \right] = \\ &= S \frac{\hbar^2 p_F^4}{m\pi^2} \left[\frac{\pi}{32} - \frac{d p_F}{15} - \frac{1}{2p_F^4} \int_0^{p_F} dp (p_F^2 - p^2) \gamma(p) \right] \quad (\text{D.3})\end{aligned}$$

— поверхневий вклад (пропорційний до площі поділу S).

Якщо висоту потенціального бар'єру W спрямувати до безмежності, то γ перетвориться на нуль і вираз для $\Omega_{0,\text{surf}}$ спроститься

$$\begin{aligned}\Omega_{0,\text{surf}} &= -S \left(\frac{4\sqrt{2}m^{3/2}d}{15\pi^2\hbar^3} \mu^{5/2} - \frac{m}{8\pi\hbar^2} \mu^2 \right) = \\ &= S \frac{\hbar^2 p_F^4}{m\pi^2} \left(\frac{\pi}{32} - \frac{d p_F}{15} \right).\end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Зауважимо, що термодинамічний потенціал невзаємодіючої однорідної системи має такий вигляд:

$$\begin{aligned}\Omega_{0,\text{unif}} &= -V \frac{4\sqrt{2}m^{3/2}}{15\pi^2\hbar^3} \mu^{5/2} = \\ &= -V \frac{\hbar^2}{15m\pi^2} p_F^5,\end{aligned}$$

що співпадає з (D.2).

Е. Розрахунок $\langle N \rangle_0$ та $\partial \langle N \rangle_0 / \partial \mu$

Знаючи термодинамічний потенціал невзаємодіючої системи Ω_0 (вираз (D.1)), розрахуємо $\langle N \rangle_0$ для потенціального бар'єра у випадку низьких температур

$$\langle N \rangle_0 = -\frac{\partial \Omega_0}{\partial \mu} = -\frac{\partial (\Omega_{0,\text{bulk}} + \Omega_{0,\text{surf}})}{\partial \mu} = N_{0,\text{bulk}} + N_{0,\text{surf}},$$

де

$$\begin{aligned}N_{0,\text{bulk}} &= -\frac{\partial \Omega_{0,\text{bulk}}}{\partial \mu} = \\ &= \frac{SL}{2} \frac{2\sqrt{2}m^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} \mu^{3/2} = \frac{SL}{2} \frac{p_F^3}{3\pi^2}\end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

— об'ємна частина величини $\langle N \rangle_0$,

$$\begin{aligned}N_{0,\text{surf}} &= -\frac{\partial \Omega_{0,\text{surf}}}{\partial \mu} = \\ &= S \left[\frac{2\sqrt{2}m^{3/2}d}{3\pi^2\hbar^3} \mu^{3/2} + \frac{m}{\pi^2\hbar^2} \int_0^\mu dE \gamma\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right) - \frac{m}{4\pi\hbar^2} \mu \right] = \\ &= S \frac{p_F^2}{\pi^2} \left[\frac{d p_F}{3} - \frac{\pi}{8} + \frac{1}{p_F^2} \int_0^{p_F} dp \gamma(p) \right] \quad (\text{E.2})\end{aligned}$$

— поверхнева частина величини $\langle N \rangle_0$.

Знаючи $\langle N \rangle_0$, розрахуємо $\partial \langle N \rangle_0 / \partial \mu$

$$\frac{\partial \langle N \rangle_0}{\partial \mu} = \frac{\partial N_{0,\text{bulk}}}{\partial \mu} + \frac{\partial N_{0,\text{surf}}}{\partial \mu},$$

об'ємна частина:

$$\frac{\partial N_{0,\text{bulk}}}{\partial \mu} = \frac{SL}{2} \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \mu^{1/2} = \frac{SL}{2} \frac{m p_F}{\hbar^2 \pi^2}, \quad (\text{E.3})$$

поверхнева частина:

$$\begin{aligned}\frac{\partial N_{0,\text{surf}}}{\partial \mu} &= S \left(\frac{\sqrt{2}m^{3/2}d}{\pi^2\hbar^3} \mu^{1/2} + \frac{m}{\pi^2\hbar^2} \gamma(p_F) - \frac{m}{4\pi\hbar^2} \right) = \\ &= S \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \left(d p_F - \frac{\pi}{4} + \gamma(p_F) \right).\end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Якщо висоту потенціального бар'єру W спрямувати до безмежності, то γ перетвориться на нуль і вирази (E.2) та (E.4) спростуються

$$N_{0,\text{surf}} = S \frac{p_F^2}{\pi^2} \left(\frac{d p_F}{3} - \frac{\pi}{8} \right), \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{\partial N_{0,\text{surf}}}{\partial \mu} = S \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \left(d p_F - \frac{\pi}{4} \right). \quad (\text{E.6})$$

Вираз для поверхневої частини середнього від оператора кількості електронів (E.5) співпадає з виразом, який отриманий у працях [62, 70], якщо у формулі (E.5) покласти $d = 0$.

Зауважимо, що у випадку невзаємодіючої однорідної системи мають місце такі співвідношення

$$N_{0,\text{unif}} = V \frac{p_F^3}{3\pi^2},$$

$$\frac{\partial N_{0,\text{unif}}}{\partial \mu} = V \frac{m p_F}{\hbar^2 \pi^2},$$

що співпадають з об'ємними частинами (E.1) та (E.3) відповідно.

Ф. Внутрішня енергія невзаємодіючої системи

У цьому додатку проведено розрахунок внутрішньої енергії невзаємодіючої системи у випадку низьких температур.

Враховуючи вираз для об'ємної частини термодинамічного потенціалу невзаємодіючої системи $\Omega_{0,\text{bulk}}$ (D.2) та вираз для $N_{0,\text{bulk}}$ (E.1), для об'ємної частини внутрішньої енергії невзаємодіючої системи отримуємо, що

$$\begin{aligned} U_{0,\text{bulk}} &= \Omega_{0,\text{bulk}} + \mu N_{0,\text{bulk}} = \\ &= \frac{SL}{2} \frac{\hbar^2 p_F^5}{10m\pi^2}. \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

Враховуючи вираз для поверхневої частини термодинамічного потенціалу невзаємодіючої системи $\Omega_{0,\text{surf}}$ (D.3) та вираз для $N_{0,\text{surf}}$ (E.2), для поверхневої частини внутрішньої енергії невзаємодіючої системи отримуємо, що

$$\begin{aligned} U_{0,\text{surf}} &= \Omega_{0,\text{surf}} + \mu N_{0,\text{surf}} = \\ &= S \frac{\hbar^2 p_F^4}{m\pi^2} \left(\frac{d p_F}{10} - \frac{\pi}{32} \right) + \frac{\hbar^2}{2m\pi^2} \int_0^{p_F} dp p^2 \gamma(p). \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

Зауважимо, що вирази (F.1) та (F.2) залежать від імпульсу Фермі p_F взаємодіючої системи електронів.

Якщо висоту потенціального бар'єру W спрямувати до безмежності, то γ перетвориться на нуль і вираз для $U_{0,\text{surf}}$ спроститься

$$U_{0,\text{surf}} = S \frac{\hbar^2 p_F^4}{m\pi^2} \left(\frac{d p_F}{10} - \frac{\pi}{32} \right).$$

Зауважимо, що внутрішня енергія невзаємодіючої однорідної системи має такий вигляд:

$$U_{0,\text{unif}} = V \frac{\hbar^2 p_F^5}{10m\pi^2},$$

що співпадає з (F.1).

Г. Розрахунок $\mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$

Спершу проведемо розрахунок двочастинкової кореляційної функції електронів \mathfrak{M}^0 в імпульсному представленні

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) &= i^2 \langle T \rho_{k_1}(\mathbf{q}, \nu) \rho_{k_2}(-\mathbf{q}, -\nu) \rangle_{0,c} = \\ &= i^2 \langle T \rho_{k_1}(x_1) \rho_{k_2}(x_2) \rangle_0 - i^2 \langle T \rho_{k_1}(x_1) \rangle_0 \langle T \rho_{k_2}(x_2) \rangle_0 = \\ &= \frac{i^2}{\beta^2} \sum_{\substack{\mathbf{p}_1, \alpha_1, \alpha'_1 \\ \mathbf{p}_2, \alpha_2, \alpha'_2}} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha'_1 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha'_2 \rangle \left\langle T \int_0^\beta d\beta' \int_0^\beta d\beta'' e^{i\nu\beta'} \times \right. \\ &\quad \left. \times e^{-i\nu\beta''} a_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{p}_1 | \beta') a_{\alpha'_1}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q} | \beta') a_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{p}_2 | \beta'') a_{\alpha'_2}(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} | \beta'') \right\rangle_0 = \\ &= \frac{i^2}{\beta^2} \sum_{\substack{\mathbf{p}_1, \alpha_1, \alpha'_1 \\ \mathbf{p}_2, \alpha_2, \alpha'_2}} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha'_1 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha'_2 \rangle \delta_{\alpha_1, \alpha'_2} \delta_{\alpha'_1, \alpha_2} \delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 + \mathbf{q}} \times \\ &\quad \times \delta_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}, \mathbf{p}_2} \int_0^\beta d\beta' \int_0^\beta d\beta'' e^{i\nu(\beta' - \beta'')} \mathfrak{G}_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \beta'' - \beta') \mathfrak{G}_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2 | \beta' - \beta'') = \\ &= \frac{i^2}{\beta^2} \sum_{\mathbf{p}_1, \alpha_1, \alpha_2} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha_1 \rangle \times \\ &\quad \times \int_0^\beta d\beta' \int_0^\beta d\beta'' e^{i\nu(\beta' - \beta'')} \mathfrak{G}_{\alpha_1}(\mathbf{p}_1 | \beta'' - \beta') \mathfrak{G}_{\alpha_2}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q} | \beta' - \beta''). \end{aligned}$$

Перейшовши у цьому виразі до частотного представлення:

$$\mathfrak{G}_\alpha(\mathbf{p}, \beta'' - \beta') = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \mathfrak{G}_\alpha(\mathbf{p}, \nu) e^{i\nu(\beta'' - \beta')},$$

де $\mathfrak{G}_\alpha(\mathbf{p}, \nu) = (i\nu + \mu - E_\alpha(\mathbf{p}))^{-1}$ — фур'є-образ одночастинкової функції Гріна, $\nu = \pi(2n + 1)/\beta$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, отримуємо:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \sum_{\nu_1} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha_1 \rangle \times \\ &\quad \times \mathfrak{G}_{\alpha_1}(\mathbf{p}, \nu_1) \mathfrak{G}_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \nu_1 - \nu). \end{aligned}$$

Підсумовування у цьому виразі за фермієвською частотою ν_1 лег-

ко виконується (див., наприклад, [65]):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_1} \mathfrak{G}_{\alpha_1}(\mathbf{p}, \nu_1) \mathfrak{G}_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \nu_1 - \nu) = \\
& = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_1} \frac{1}{i\nu_1 + \mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} \cdot \frac{1}{i(\nu_1 - \nu) + \mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} = \\
& = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{1}{\zeta + \mu - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} \cdot \frac{1}{\zeta - i\nu + \mu - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \cdot \frac{d\zeta}{e^{\beta\zeta} + 1} = \\
& = \frac{1}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \cdot \frac{1}{e^{\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - \mu)} + 1} + \\
& \quad + \frac{1}{i\nu + E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} \cdot \frac{1}{e^{i\beta\nu} \cdot e^{\beta(E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \mu)} + 1} = \\
& = \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})},
\end{aligned}$$

де Γ — замкнений контур, який містить полюси функції $1/(e^{\beta\zeta} + 1)$,

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

— функція розподілу Фермі-Дірака.

Враховуючи результат підсумовування за частотою ν_1 , отримуємо

$$\begin{aligned}
\mathfrak{M}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha_1 \rangle \times \\
&\quad \times \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}. \quad (\text{G.1})
\end{aligned}$$

Тоді в (\mathbf{q}, z) -представленні отримуємо

$$\begin{aligned}
\mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) &= \sum_{k_1, k_2} e^{ik_1 z_1 + ik_2 z_2} \mathfrak{M}_{k_1, k_2}^0(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) = \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \sum_{k_1} e^{ik_1 z_1} \langle \alpha_1 | e^{-ik_1 z} | \alpha_2 \rangle \sum_{k_2} e^{ik_2 z_2} \langle \alpha_2 | e^{-ik_2 z} | \alpha_1 \rangle \times \\
&\quad \times \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} = \\
&= \frac{L^2}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2). \quad (\text{G.2})
\end{aligned}$$

Зауважимо, що у випадку однорідної системи двочастинкова кореляційна функція електронів (G.1) набуває простішого вигляду

$$\mathfrak{M}_{\text{unif}}^0(\mathbf{q}, \nu, -\mathbf{q}, -\nu) = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} \frac{n(\mathbf{p}) - n(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p} - \mathbf{q})},$$

де \mathbf{q} та \mathbf{p} — тривимірні вектори.

Н. Розрахунок $\sum_{\nu} \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$

та $\sum_{\nu} \partial \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) / \partial \mu$

Просумуємо отриманий вираз (G.2) у додатку G за бозівською частотою ν . Оскільки від ν залежить лише дріб у виразі для $\mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)$, то просумуємо його окремо

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\beta} \sum_{\nu} \frac{n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{-i\nu + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} = \\
& = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{1}{-\zeta + E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} \cdot \frac{d\zeta}{e^{\beta\zeta} - 1} = \\
& = \frac{1}{e^{\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))} - 1} = \frac{e^{\beta E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}}{e^{\beta E_{\alpha_1}(\mathbf{p})} - e^{\beta E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}} = \\
& = \frac{e^{\beta(E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \mu)}}{e^{\beta(E_{\alpha_1}(\mathbf{p}) - \mu)} - e^{\beta(E_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \mu)}} = \frac{\frac{1}{n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} - 1}{\frac{1}{n_{\alpha_1}(\mathbf{p})} - 1 - \frac{1}{n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})} + 1} = \\
& = \frac{(1 - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})) n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - n_{\alpha_1}(\mathbf{p})},
\end{aligned}$$

де Γ — замкнений контур, який охоплює полюси функції $1/(e^{\beta\zeta} - 1)$.

Тоді

$$\begin{aligned}
& \sum_{\nu} \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) = \\
& = -L^2 \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} (1 - n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})) n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2).
\end{aligned}$$

Скориставшись умовою повноти власних функцій

$$\sum_{\alpha_2} \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) = \delta(z_1 - z_2),$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} \mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) &= -L^2 \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) |\varphi_{\alpha_1}(z_1)|^2 \delta(z_1 - z_2) + \\ &+ L^2 \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2). \quad (\text{H.1}) \end{aligned}$$

Розглянемо тепер $\sum_{\nu} \partial \mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2) / \partial \mu$. Похідна за хімічним потенціалом μ стосується лише функцій розподілу Фермі-Дірака, тоді

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial (n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{\partial \mu} &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + \\ &+ \sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) \frac{\partial n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\partial \mu}. \end{aligned}$$

Зробивши у другій сумі заміну $\mathbf{p} - \mathbf{q}$ на \mathbf{p} , отримуємо

$$\sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial (n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{\partial \mu} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p} + \mathbf{q})).$$

Тоді

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} \frac{\partial \mathcal{M}^0(\mathbf{q}, \nu, z_1, z_2)}{\partial \mu} &= -L^2 \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} |\varphi_{\alpha_1}(z_1)|^2 \delta(z_1 - z_2) + \\ &+ L^2 \sum_{\mathbf{p}, \alpha_1, \alpha_2} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p} + \mathbf{q})) \times \\ &\times \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2). \quad (\text{H.2}) \end{aligned}$$

I. Розрахунок сум від функцій розподілу Фермі-Дірака

I.1. $\sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha}(\mathbf{p})$, $\sum_{\mathbf{p}} \partial n_{\alpha}(\mathbf{p}) / \partial \mu$

Розрахуємо суму за імпульсом \mathbf{p} від функції розподілу Фермі-Дірака у випадку низьких температур. Здійснивши перехід від підсумовування

до інтегрування згідно з (B.2), отримуємо

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha}(\mathbf{p}) &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2 - \mathbf{p}^2\right) = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} 2\pi \int_0^{\infty} dp p \theta(p_F^2 - \alpha^2 - \mathbf{p}^2) = \\ &= \frac{S}{2\pi} (p_F^2 - \alpha^2) \theta(p_F^2 - \alpha^2), \end{aligned}$$

де при обчисленні інтегралу було здійснено перехід до полярної системи координат.

Продиференціювавши отриманий вираз за хімічним потенціалом, отримуємо

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{p})}{\partial \mu} &= \frac{S}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2 \right) \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2\right) = \\ &= \frac{S}{2\pi} \left[\frac{2m}{\hbar^2} \theta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2\right) + \left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2\right) \delta\left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha^2\right) \right] = \\ &= \frac{S}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \theta(p_F^2 - \alpha^2). \end{aligned}$$

I.2. $\sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q})$

Розрахуємо суму за імпульсом \mathbf{p} від добутку двох функцій розподілу Фермі-Дірака у випадку низьких температур. Здійснивши перехід від підсумовування до інтегрування згідно з (B.2), отримуємо

$$\begin{aligned} J(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \theta(p_F^2 - \alpha_1^2 - \mathbf{p}^2) \theta(p_F^2 - \alpha_2^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2) = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \theta(c_1^2 - p^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2), \quad (\text{I.1}) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} c_1^2 &= p_F^2 - \alpha_1^2, & \alpha_1 &\leq p_F, \\ c_2^2 &= p_F^2 - \alpha_2^2, & \alpha_2 &\leq p_F. \end{aligned}$$

Якщо ж $\alpha_1 > p_F$ або $\alpha_2 > p_F$, то $J(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) = 0$.

У площині $p_x O p_y$ функція $\theta(c_1^2 - p^2)$ є рівнянням круга з центром у початку координат та радіуса c_1 , аналогічно функція $\theta(c_2^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2)$ є рівнянням круга з центром, який зміщений на вектор \mathbf{q} , та радіуса c_2 . Виберемо систему координат так, щоб вісь p_x була спрямована вздовж вектора \mathbf{q} , тоді функція J залежатиме від модуля вектора \mathbf{q} , тобто $J(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) = J(q, \alpha_1, \alpha_2)$.

Перший можливий випадок — ці два круги не мають спільних точок, тоді підінтегральна функція у виразі (I.1) перетворюється на нуль (див. рис. 6), тобто

$$J(q, \alpha_1, \alpha_2) = 0, \quad q \geq c_1 + c_2.$$

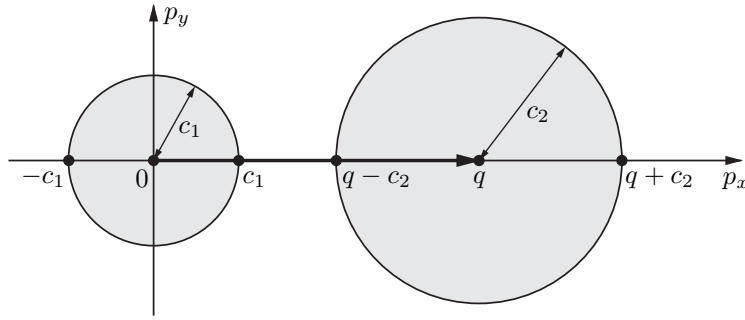


Рис. 6.

Другий можливий випадок — один круг повністю міститься в іншому (див. рис. 7), тоді інтеграл дорівнюватиме площі меншого круга

$$J(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \begin{cases} \pi c_1^2, & q < c_2 - c_1 \quad (c_2 > c_1), \\ \pi c_2^2, & q < c_1 - c_2 \quad (c_1 > c_2). \end{cases}$$

Третій можливий випадок — два круги перекриваються, це відбудеться за умови $q < c_1 + c_2$ (див. рис. 8). З рівняння кіл

$$\begin{cases} p_x^2 + p_y^2 = c_1^2, \\ (p_x - q)^2 + p_y^2 = c_2^2 \end{cases}$$

знаходимо абсцису точок перетину кіл

$$p_x = \frac{q^2 - c_2^2 + c_1^2}{2q},$$

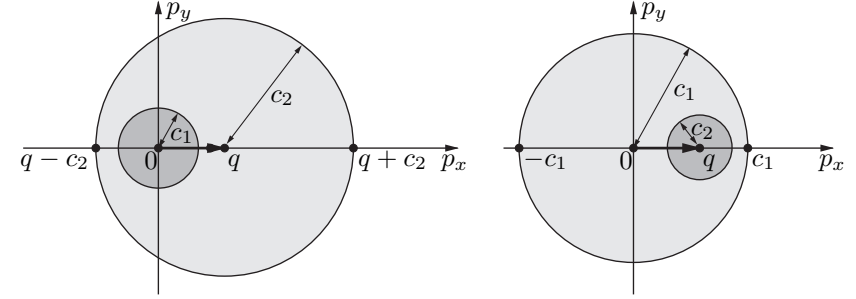


Рис. 7.

тоді

$$J(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \left[2 \int_{q-c_2}^{(q^2 - c_2^2 + c_1^2)/(2q)} dp_x \int_0^{\sqrt{c_2^2 - (p_x - q)^2}} dp_y + \right. \\ \left. + 2 \int_{(q^2 - c_2^2 + c_1^2)/(2q)}^{c_1} dp_x \int_0^{\sqrt{c_1^2 - p_x^2}} dp_y \right].$$

Ці інтеграли легко обчислюються, у результаті отримуємо

$$J(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{2S}{(2\pi)^2} [f(c_1, c_2, q) + f(c_2, c_1, q)],$$

де

$$f(c_1, c_2, q) = c_1^2 \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin \frac{c_1^2 - c_2^2 + q^2}{2qc_1} \right) - \\ - \frac{c_1^2 - c_2^2 + q^2}{2q} \sqrt{c_1^2 - \frac{(c_1^2 - c_2^2 + q^2)^2}{4q^2}}, \quad q < c_1 + c_2.$$

Отже, функцію $J(q, \alpha_1, \alpha_2)$ може подати так (для $\alpha_1 \leq p_F$ та $\alpha_2 \leq p_F$):

$$J(q, \alpha_1, \alpha_2) = \sum_{\mathbf{p}} n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2),$$

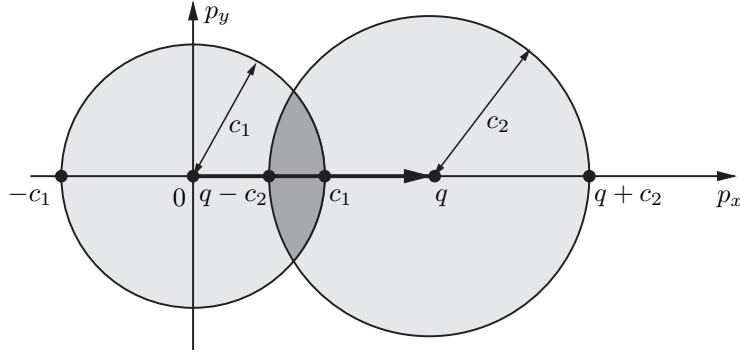


Рис. 8.

де

$$\tilde{J}(q, \alpha_1, \alpha_2) = \begin{cases} \begin{cases} \pi c_1^2, & c_2 > c_1, \\ \pi c_2^2, & c_1 > c_2, \end{cases} & 0 \leq q < |c_1 - c_2|, \\ f(c_1, c_2, q) + f(c_2, c_1, q), & |c_1 - c_2| \leq q < c_1 + c_2, \\ 0, & q \geq c_1 + c_2, \end{cases} \quad (\text{I.2})$$

де

$$c_1 = \sqrt{p_F^2 - \alpha_1^2}, \quad c_2 = \sqrt{p_F^2 - \alpha_2^2}.$$

Зауважимо, що отримана функція (I.2) є неперервною за усіма аргументами.

Розрахуємо суму за імпульсом \mathbf{p} від добутку двох функцій розподілу Фермі-Дірака для однорідної системи у випадку низьких температур. Такі розрахунки проводилися раніше (див., наприклад, [71]) для знаходження статичного форм-фактора невзаємодіючого електронного газу, але для повноти викладу приведемо їх і тут. У такому випадку вектори \mathbf{q} та \mathbf{p} є тривимірними. Здійснивши перехід від підсумовування до інтегрування згідно з правилом (B.3), отримуємо

$$\begin{aligned} J_{\text{unif}}(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{p}} n(\mathbf{p})n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \theta(p_F^2 - p^2) \theta(p_F^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2), \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

Функція $\theta(p_F^2 - p^2)$ є рівнянням кулі з центром у початку координат та радіуса p_F , аналогічно функція $\theta(p_F^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2)$ є рівнянням ку-

лі з центром, який зміщений на вектор \mathbf{q} , та радіуса p_F . Виберемо систему координат так, щоб вісь p_z була спрямована вздовж вектора \mathbf{q} , тоді функція J_{unif} залежатиме від модуля вектора \mathbf{q} , тобто $J_{\text{unif}}(\mathbf{q}) = J_{\text{unif}}(q)$.

Перший можливий випадок — ці дві кулі не мають спільних точок, тоді підінтегральна функція у виразі (I.3) перетворюється на нуль, тобто

$$J_{\text{unif}}(q) = 0, \quad q \geq 2p_F.$$

У випадку $q < 2p_F$ дві кулі перетинаються (див. рис.9), тоді функція $J_{\text{unif}}(q)$ дорівнюватиме об'єму фігури, яка виникла у результаті перетину куль. Цей об'єм зручно обчислити у циліндричній

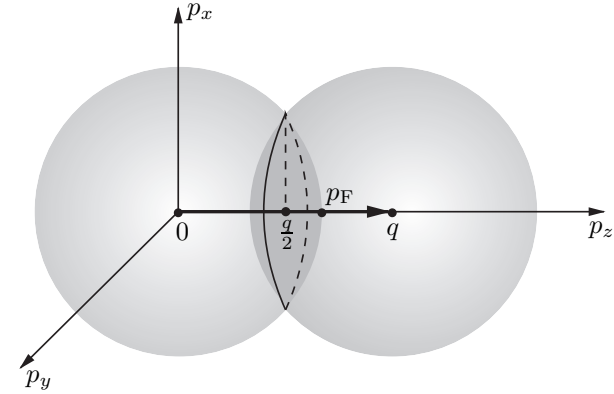


Рис. 9.

системі координат. У результаті отримуємо

$$\begin{aligned} J_{\text{unif}}(q) &= 2 \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{q/2}^{p_F} dp_z \int_0^{\sqrt{p_F^2 - p_z^2}} dp p = \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{4}{3} p_F^3 \left(1 - \frac{3}{4} \frac{q}{p_F} + \frac{1}{16} \frac{q^3}{p_F^3} \right), \quad q < 2p_F \end{aligned}$$

або

$$J_{\text{unif}}(q) = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{4}{3} p_F^3 \tilde{J}_{\text{unif}}(q),$$

де

$$\tilde{J}_{\text{unif}}(q) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{4} \frac{q}{p_F} + \frac{1}{16} \frac{q^3}{p_F^3}, & q < 2p_F, \\ 0, & q \geq 2p_F. \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

$$\mathbf{I.3.} \sum_{\mathbf{p}} \partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p}) / \partial \mu (n_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p}+\mathbf{q}))$$

Здійснивши перехід від підсумовування до інтегрування згідно з (B.2), у випадку низьких температур отримуємо

$$\begin{aligned} I(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n_{\alpha_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p}+\mathbf{q})) = \quad (\text{I.5}) \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{p} \frac{\partial \theta(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - \alpha_1^2 - p^2)}{\partial \mu} \times \\ &\quad \times [\theta(p_F^2 - \alpha_2^2 - (\mathbf{p}-\mathbf{q})^2) + \theta(p_F^2 - \alpha_2^2 - (\mathbf{p}+\mathbf{q})^2)] = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{p} \delta(p_F^2 - \alpha_1^2 - p^2) \times \\ &\quad \times [\theta(p_F^2 - \alpha_2^2 - (\mathbf{p}-\mathbf{q})^2) + \theta(p_F^2 - \alpha_2^2 - (\mathbf{p}+\mathbf{q})^2)] = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{p} \delta(c_1^2 - p^2) [\theta(c_2^2 - (\mathbf{p}-\mathbf{q})^2) + \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}+\mathbf{q})^2)], \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} c_1^2 &= p_F^2 - \alpha_1^2, \quad \alpha_1 \leq p_F, \\ c_2^2 &= p_F^2 - \alpha_2^2, \quad \alpha_2 \leq p_F. \end{aligned}$$

Якщо ж $\alpha_1 > p_F$ та $\alpha_2 > p_F$, то $I(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) = 0$.

Вираз (I.5) можна подати так:

$$I(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{2S}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} (I_-(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) + I_+(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)),$$

де

$$\begin{aligned} I_-(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \int d\mathbf{p} \delta(c_1^2 - p^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}-\mathbf{q})^2), \\ I_+(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \int d\mathbf{p} \delta(c_1^2 - p^2) \theta(c_2^2 - (\mathbf{p}+\mathbf{q})^2). \end{aligned}$$

Розрахунок функції $I_-(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2)$ проведемо у полярній системі координат та врахуємо, що дельта-функцію Дірака можна подати так

$$\delta(c_1^2 - p^2) = \frac{\delta(c_1 - p)}{2c_1} + \frac{\delta(c_1 + p)}{2c_1}, \quad (\text{I.6})$$

тоді

$$\begin{aligned} I_-(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp p \left(\frac{\delta(c_1 - p)}{2c_1} + \frac{\delta(c_1 + p)}{2c_1} \right) \times \\ &\quad \times \theta(c_2^2 - p^2 - q^2 + 2pq \cos \phi) = \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp p \frac{\delta(c_1 - p)}{2c_1} \theta(c_2^2 - p^2 - q^2 + 2pq \cos \phi) = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi \theta(c_2^2 - c_1^2 - q^2 + 2c_1 q \cos \phi) = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi \theta \left(\cos \phi - \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q} \right). \end{aligned}$$

Ця функція залежить лише від модуля вектора \mathbf{q} , тобто

$$I_-(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) = I_-(q, \alpha_1, \alpha_2).$$

Якщо

$$\frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q} > 1,$$

що еквівалентне до $q > c_1 + c_2$ та $q < c_1 - c_2$, то підінтегральна функція перетворюється на нуль і $I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) = 0$.

Якщо

$$-1 \leq \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q} \leq 1,$$

що еквівалентне до $c_1 - c_2 \leq q \leq c_1 + c_2$ та $q \geq c_2 - c_1$, то підінтегральна функція на відрізках $[0, \phi_0]$ та $[2\pi - \phi_0, 2\pi]$, де $\phi_0 = \arccos \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q}$ перетворюється на одиницю і

$$I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{2} \int_0^{\phi_0} d\phi + \frac{1}{2} \int_{2\pi - \phi_0}^{2\pi} d\phi = \phi_0 = \arccos \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q}.$$

Якщо

$$\frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1 q} < -1,$$

що еквівалентне до $0 \leq q < c_2 - c_1$, то підінтегральна функція перетворюється на одиницю і

$$I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\phi = \pi.$$

Отже, функцію $I_-(q, \alpha_1, \alpha_2)$ може подати так (для $\alpha_1 \leq \sqrt{2m\mu}/\hbar$ та $\alpha_2 \leq \sqrt{2m\mu}/\hbar$):

$$I_-(q, \alpha_1, \alpha_2) = \begin{cases} \left\{ \begin{array}{ll} 0, & 0 \leq q \leq c_1 - c_2, \\ \arccos \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1q}, & c_1 - c_2 < q \leq c_1 + c_2, \end{array} \right\}, & c_1 > c_2, \\ \left\{ \begin{array}{ll} 0, & c_1 + c_2 < q < \infty, \\ \pi, & 0 \leq q \leq c_2 - c_1, \\ \arccos \frac{q^2 + c_1^2 - c_2^2}{2c_1q}, & c_2 - c_1 < q \leq c_1 + c_2, \\ 0, & c_1 + c_2 < q < \infty, \end{array} \right\}, & c_2 \geq c_1, \end{cases} \quad (\text{I.7})$$

де

$$c_1 = \sqrt{p_F^2 - \alpha_1^2}, \quad c_2 = \sqrt{p_F^2 - \alpha_2^2}.$$

Зауважимо, що отримана функція (I.7) є неперервною за усіма аргументами.

Аналогічно можна розрахувати функцію $I_+(q, \alpha_1, \alpha_2)$, у результаті отримуємо, що

$$I_+(q, \alpha_1, \alpha_2) = I_-(q, \alpha_1, \alpha_2).$$

Отже,

$$\begin{aligned} I(\mathbf{q}, \alpha_1, \alpha_2) &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n_{\alpha_1}(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n_{\alpha_2}(\mathbf{p} + \mathbf{q})) = \\ &= \frac{2S}{(2\pi)^2} \frac{4m}{\hbar^2} I_-(q, \alpha_1, \alpha_2), \end{aligned}$$

де функція $I_-(q, \alpha_1, \alpha_2)$ задана виразом (I.7).

Розрахуємо таку ж функцію, але в однорідному випадку. Здійснивши перехід від підсумовування до інтегрування згідно з (B.3), у

випадку низьких температур отримуємо

$$\begin{aligned} I_{\text{unif}}(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n(\mathbf{p} + \mathbf{q})) = \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \frac{\partial \theta(\frac{2m\mu}{\hbar^2} - p^2)}{\partial \mu} \left[\theta(p_F^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2) + \theta(p_F^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q})^2) \right] = \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2m}{\hbar^2} \int d\mathbf{p} \delta(p_F^2 - p^2) \left[\theta(p_F^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2) + \theta(p_F^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q})^2) \right]. \end{aligned}$$

Цей вираз можна подати так:

$$I_{\text{unif}}(\mathbf{q}) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2m}{\hbar^2} (I_{\text{unif}}^-(\mathbf{q}) + I_{\text{unif}}^+(\mathbf{q})),$$

де

$$I_{\text{unif}}^-(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{p} \delta(p_F^2 - p^2) \theta(p_F^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{q})^2),$$

$$I_{\text{unif}}^+(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{p} \delta(p_F^2 - p^2) \theta(p_F^2 - (\mathbf{p} + \mathbf{q})^2).$$

Розрахунок функції $I_{\text{unif}}^-(\mathbf{q})$ проведемо у сферичній системі координат та врахуємо властивість (I.6) дельта-функції Дірака, тоді

$$\begin{aligned} I_{\text{unif}}^-(\mathbf{q}) &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty dp p^2 \left(\frac{\delta(p_F - p)}{2p_F} + \frac{\delta(p_F + p)}{2p_F} \right) \times \\ &\quad \times \theta(p_F^2 - p^2 - q^2 + 2pq \cos \vartheta) = \\ &= 2\pi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty dp p^2 \frac{\delta(p_F - p)}{2p_F} \theta(p_F^2 - p^2 - q^2 + 2pq \cos \vartheta) = \\ &= \pi p_F \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \theta \left(\cos \vartheta - \frac{q}{2p_F} \right) = \\ &= \pi p_F \int_{-1}^1 dx \theta \left(x - \frac{q}{2p_F} \right) = \pi p_F \tilde{I}_{\text{unif}}^-(q), \end{aligned}$$

де

$$\tilde{I}_{\text{unif}}^-(q) = \begin{cases} 2, & \frac{q}{2p_F} \leq -1, \\ 1 - \frac{q}{2p_F}, & -1 < \frac{q}{2p_F} \leq 1, \\ 0, & \frac{q}{2p_F} > 1. \end{cases} \quad (\text{I.8})$$

Ця функція залежить лише від модуля вектора \mathbf{q} , тобто

$$I_{\text{unif}}^-(\mathbf{q}) = I_{\text{unif}}^-(q).$$

Аналогічно можна розрахувати функцію $I_{\text{unif}}^+(q)$, у результаті отримуємо, що

$$I_{\text{unif}}^+(q) = I_{\text{unif}}^-(q).$$

Отже,

$$\begin{aligned} I_{\text{unif}}(\mathbf{q}) &= \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial n(\mathbf{p})}{\partial \mu} (n(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + n(\mathbf{p} + \mathbf{q})) = \\ &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4m}{\hbar^2} I_{\text{unif}}^-(q), \end{aligned}$$

де функція $I_{\text{unif}}^-(q)$ задана виразом (I.8).

Ж. Розрахунок інтегралів з ефективним потенціалом міжелектронної взаємодії

У цьому додатку проведено розрахунок інтегралів

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 g(\mathbf{q}, z, z, \lambda) \quad (\text{J.1})$$

та

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_1 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_2 \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda), \quad (\text{J.2})$$

де $\varphi_\alpha(z)$ — хвильові функції (A.3) електронів у полі безмежно високого потенціального бар'єру, який розташований в точці $z = d$, $g(\mathbf{q}, z_1, z_2, \lambda)$ — ефективний потенціал міжелектронної взаємодії, який є розв'язком інтегрального рівняння (4.23) та отриманий з використанням методики [53, 54]. Цей потенціал залежить від модуля вектора \mathbf{q} :

$$\begin{aligned} g(q, z_1 \leq d, z_2 \leq d, \lambda) &= \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} \left[e^{-Q(\lambda)|z_1 - z_2|} + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} e^{Q(\lambda)(z_1 + z_2 - 2d)} \right], \\ g(q, z_1 \geq d, z_2 \geq d, \lambda) &= \frac{2\pi e^2}{q} \left[e^{-q|z_1 - z_2|} - \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} e^{-q(z_1 + z_2 - 2d)} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g(q, z_1 \geq d, z_2 \leq d, \lambda) &= \frac{4\pi e^2}{Q(\lambda) + q} e^{Q(\lambda)(z_2 - d) - q(z_1 - d)}, \\ g(q, z_1 \leq d, z_2 \geq d, \lambda) &= \frac{4\pi e^2}{Q(\lambda) + q} e^{Q(\lambda)(z_1 - d) - q(z_2 - d)}, \end{aligned}$$

$$Q(\lambda) = \sqrt{q^2 + \lambda \mathcal{Z}_{\text{TF}}^2 \text{L}\left(\frac{q}{2p_{\text{F}}}\right)}.$$

Зауважимо, що інтеграли (J.1) та (J.2) для $\alpha = 0$ дорівнюють нулю, оскільки на нуль перетворюються хвильові функції (A.3).

Для $\alpha \neq 0$ інтеграл (J.1) набуває вигляду

$$\begin{aligned} &\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 g(q, z, z, \lambda) = \\ &= \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} |C_\alpha|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^d dz \left[1 + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} e^{2Q(\lambda)(z - d)} \right] \sin^2(\alpha(d - z)) = \\ &= \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} \frac{|C_\alpha|^2}{4} L + \\ &\quad + \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} \frac{|C_\alpha|^2}{2} d + \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} \frac{|C_\alpha|^2}{4} \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \frac{\alpha^2}{(Q^2(\lambda) + \alpha^2)Q(\lambda)}. \end{aligned}$$

Щоб розрахувати термодинамічний потенціал необхідно ще обчислити такий вираз у випадку низьких температур:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n_\alpha(\mathbf{p}) \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_\alpha(z)|^2 g(q, z, z, \lambda) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{\pi e^2}{2} \int_0^\infty dq \frac{q}{Q(\lambda)} \sum_{\alpha} |C_\alpha|^2 (p_{\text{F}}^2 - \alpha^2) \theta(p_{\text{F}} - \alpha) \times \\ &\quad \times \left[L + 2d + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \frac{\alpha^2}{(Q^2(\lambda) + \alpha^2)Q(\lambda)} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{\pi e^2}{2} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq \frac{q}{Q(\lambda)} \int_0^{p_{\text{F}}} d\alpha (p_{\text{F}}^2 - \alpha^2) \times \\ &\quad \times \left[L + 2d + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \frac{\alpha^2}{(Q^2(\lambda) + \alpha^2)Q(\lambda)} \right]. \quad (\text{J.3}) \end{aligned}$$

Оскільки

$$\int_0^{p_F} d\alpha \frac{\alpha^2(p_F^2 - \alpha^2)}{Q^2(\lambda) + \alpha^2} = \frac{2}{3}p_F^3 + Q^2(\lambda)p_F - Q(\lambda)(p_F^2 + Q^2(\lambda)) \arctg \frac{p_F}{Q(\lambda)},$$

то вираз (J.3) набуває вигляду

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n_{\alpha}(\mathbf{p}) \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_{\alpha}(z)|^2 g(q, z, z, \lambda) = \\ & = e^2 \frac{SL}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q(\lambda)} \frac{p_F^3}{3} + e^2 \frac{Sd}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q(\lambda)} \frac{p_F^3}{3} + \\ & + e^2 \frac{S}{8\pi^2} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q^2(\lambda)} \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \times \\ & \times \left(\frac{2}{3}p_F^3 + Q^2(\lambda)p_F - Q(\lambda)(p_F^2 + Q^2(\lambda)) \arctg \frac{p_F}{Q(\lambda)} \right), \end{aligned}$$

де перший доданок є об'ємною частиною цього виразу, а решта — поверхневою.

Щоб розрахувати середнє від оператора кількості частинок необхідно ще обчислити такий вираз у випадку низьких температур:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{p})}{\partial \mu} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_{\alpha}(z)|^2 g(q, z, z, 1) = \\ & = -\frac{1}{2} \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\pi e^2}{2} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q} \sum_{\alpha} |C_{\alpha}|^2 \theta(p_F - \alpha) \times \\ & \times \left[L + 2d + \frac{Q - q}{Q + q} \frac{\alpha^2}{(Q^2 + \alpha^2)Q} \right] = \\ & = -\frac{1}{2} \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\pi e^2}{2} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q} \int_0^{p_F} d\alpha \times \\ & \times \left[L + 2d + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} \frac{\alpha^2}{(Q^2 + \alpha^2)Q} \right]. \quad (\text{J.4}) \end{aligned}$$

Оскільки

$$\int_0^{p_F} d\alpha \frac{\alpha^2}{Q^2 + \alpha^2} = p_F \left(1 - \frac{Q}{p_F} \arctg \frac{p_F}{Q} \right),$$

то вираз (J.4) набуває вигляду

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n_{\alpha}(\mathbf{p})}{\partial \mu} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz |\varphi_{\alpha}(z)|^2 g(q, z, z, 1) = \\ & = -\frac{SL}{(2\pi)^2} \frac{p_F}{a_B} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q} - \frac{Sd}{2\pi^2} \frac{p_F}{a_B} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q} - \\ & - \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{p_F}{a_B} \int_0^{\infty} dq \frac{q}{Q^2} \frac{Q - q}{Q + q} \left(1 - \frac{Q}{p_F} \arctg \frac{p_F}{Q} \right), \end{aligned}$$

де перший доданок є об'ємною частиною цього виразу, а решта — поверхневою.

Розрахунок інтеграла (J.2) є аналогічним, проте значно громіздкішим. Для $\alpha_1 \neq 0$ та $\alpha_2 \neq 0$ отримуємо, що

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_1 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dz_2 \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2) g(q, z_1, z_2, \lambda) = \\ & = \frac{2\pi e^2}{Q(\lambda)} |C_{\alpha_1}|^2 |C_{\alpha_2}|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^d dz_1 \int_{-\frac{L}{2}}^d dz_2 \sin(\alpha_1(d - z_1)) \sin(\alpha_2(d - z_1)) \times \\ & \times \sin(\alpha_2(d - z_2)) \sin(\alpha_1(d - z_2)) \times \\ & \times \left[e^{-Q(\lambda)|z_1 - z_2|} + \frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} e^{Q(\lambda)(z_1 + z_2 - 2d)} \right] = \\ & = \frac{\pi e^2}{2} |C_{\alpha_1}|^2 |C_{\alpha_2}|^2 g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) L + \frac{\pi e^2}{2} |C_{\alpha_1}|^2 |C_{\alpha_2}|^2 g_2(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) \end{aligned}$$

де

$$g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) = \frac{Q^2(\lambda) + \alpha_1^2 + \alpha_2^2}{(Q^2(\lambda) + \alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 - 4\alpha_1^2 \alpha_2^2} \quad (\text{J.5})$$

$$g_2(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) = \left\{ 2g_1(q, \alpha_1, \alpha_2, \lambda) d + \left(\frac{Q(\lambda) - q}{Q(\lambda) + q} - 2 \right) \frac{16Q(\lambda)\alpha_1^2\alpha_2^2}{[(Q^2(\lambda) + \alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 - 4\alpha_1^2\alpha_2^2]^2} \right\}. \quad (\text{J.6})$$

Література

1. Dreizler R. M., Gross E. K. U. *Density Functional Theory* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1990).
2. Теория неоднородного электронного газа: Пер. с англ. Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. –М.: Мир, 1987. 400 с. [Theory of the inhomogeneous electron gas. Edited by S. Lundqvist, N. H. March (Plenum Press, New York and London, 1983)].
3. Партенский М. В. Самосогласованная электронная теория металлической поверхности // Усп. физ. наук. –1979. –Т.128. –С.69–106.
4. Сарры А. М., Сарры М. Ф. К теории функционала плотности // Физ. тв. тела. –2012. –Т.54. –С.1237–1243.
5. Lang N. D., Kohn W. Theory of metal surfaces: charge density and surface energy // Phys. Rev. –1970. –Vol.B1. –P.4555–4568.
6. Perdew J. P., Monnier R. Surface energy of simple metals self-consistent inclusion of the ion potential // Phys. Rev. Lett. –1976. –V.37. –P.1286–1289.
7. Monnier R., Perdew J. P. Surfaces of real metal by the variational self-consistent method // Phys. Rev. –1978. –V.17. –P.2595–2611.
8. Appelbaum J. A., Hamann D. R. Electronic structure of the Cu(111) surface // Sol. St. Comm. –1978. –V.27. –P.881–883.
9. Paash G., Hietschold M. Surface energies of simple metals (I) // Phys. Stat. Sol. B. –1975. –V.67. –P.743–754.
10. Hietschold M., Paash G., Ziesche P. Surface energies of simple metals (II) // Phys. Stat. Sol. B. –1975. –V.70. –P.653–662.
11. Perdew J. P., Tran H. Q., Smith E. D. Stabilized jellium: structureless pseudopotential model for the cohesive and surface properties of metals // Phys. Rev. B. –1990. –V.42. –P.11627–11636.
12. Shore H. B., Rose J. H. Theory of ideal metals // Phys. Rev. Lett. –1991. –V.66. –P.2519–2522.
13. Rose J. H., Shore H. B. Bonding energetics of metals: Explanation of trends // Phys. Rev. B. –1991. –V.43. –P.11605–11611.
14. Schmit J., Lucas A. A. Plasmon theory of the surface energy of metals – I // Sol. St. Comm. –1972. –V.11. –P.415–418.

15. Craig R. A. Dynamic contributions to the surface energy of simple metals // Phys. Rev. B. –1972. –V.6. –P.1134–1142.
16. Peuckert V. Microscopic theory of some surface effects in a dense electron gas // Z. Physik. –1971. –V.241. –P.191–204.
17. Kohn W. Correlation effects in the surface energy of metals // Sol. St. Comm. –1973. –V.13. –P.323–324.
18. Feibelman P. J. On the plasmon contribution to the surface energy of metals // Sol. St. Comm. –1973. –V.13. –P.319–321.
19. Jonson M., Srinivasan G. On the plasmon-theory of the surface energy of metals // Phys. Lett. –1973. –V.43A. –P.427–428.
20. Craig R. A. On the collective contribution to the surface energy of simple metals // Sol. St. Comm. –1973. –V.13. –P.1517–1519.
21. Heinrichs J. Theory of the plasmon contribution to the surface energy of metals // Sol. St. Comm. –1973. –V.13. –P.1599–1602.
22. Harris J., Jones R. O. On the surface energy of a bounded electron gas // Phys. Lett. –1974. –V.46A. –P.407–408.
23. Harris J., Jones R. O. The surface energy of a bounded electron gas // J. Phys. F. –1974. –V.4. –P.1170–1186.
24. Paash G. Dynamic contribution to the surface energy // Phys. Stat. Sol. B. –1974. –V.65. –P.221–229.
25. Wikborg E., Inglesfield J. E. The exchange and correlation energy at a metal surface // Sol. St. Comm. –1975. –V.16. –P.335–339.
26. Lang N. D., Sham L. J. Exchange-correlation in inhomogeneous systems – a comment on the surface energy problem // Sol. St. Comm. –1975. –V.17. –P.581–584.
27. Jonson M., Srinivasan G. Correlation contribution to the surface energy of metals // Phys. Scripta. –1974. –V.10. –P.262–272.
28. Paash G., Wonn H. Electrons in a well potential: density of states, surface energy, and phase rule for wave functions // Phys. Stat. Sol. B. –1975. –Vol.70. –P.555–566.
29. El-Mamoun E., Röpke G. Exchange energy of a strongly inhomogeneous electron gas // Phys. Stat. Sol. B. –1977. –Vol.82. –P.617–625.
30. Sahni V., Krieger J., B., Gruenebaum J. Metal surface properties in the linear potential approximation // Phys. Rev. B. –1977. –V.15. –P.1941–1949.
31. Sahni V., Gruenebaum J. Metal surface properties in the infinite and step-potential approximation // Phys. Rev. B. –1977. –V.15. –P.1929–1935.
32. Wang J. S.-Y., Rasolt M. Study of the density gradient expansion in the surface energy calculation for metals // Phys. Rev. B. –1976. –V.13. –P.5330–5337.

33. Rasolt M., Wang J. S.-Y., Kahn L. M. Convergence of the gradient expansion in metallic surface-energy calculations // *Phys. Rev. B.* –1977. –V.15. –P.580–583.
34. Rasolt M., Geldart D. J. W. Gradient corrections in the exchange and correlation energy of an inhomogeneous electron gas // *Phys. Rev. Lett.* –1975. –V.35. –P.1234–1237.
35. Rose J. H., Shore H. B., Geldart D. J. W., Rasolt M. Calculation of ground state surface properties of simple metals including non-local effects of the exchange and correlation energy // *Sol. St. Comm.* –1976. –V.19. –P.619–622.
36. Gupta A. K., Singwi K. S. Gradient corrections to the exchange-correlation energy of electrons at metal surfaces // *Phys. Rev. B.* –1977. –V.15. –P.1801–1810.
37. Perdew J. P., Langreth D. C., Sahni V. Corrections to the local density approximation: gradient expansion versus wave-vector analysis for the metallic surface problem // *Phys. Rev. Lett.* –1977. –V.38. –P.1030–1033.
38. Langreth D. C., Perdew J. P. The exchange-correlation energy of a metallic surface // *Sol. St. Comm.* –1975. –V.17. –P.1425–1429.
39. Langreth D. C., Perdew J. P. Exchange-correlation energy of a metallic surface: wave-vector analysis // *Phys. Rev. B.* –1977. –V.15. –P.2884–2901.
40. Krotscheck E., Kohn W., Qian G.-X. Theory of inhomogeneous quantum systems. IV. Variational calculations of metal surfaces // *Phys. Rev. B.* –1985. –V.32. –P.5693.
41. Krotscheck E., Kohn W. Nonlocal screening in metal surfaces // *Phys. Rev. Lett.* –1986. –V.57. –P.862–865.
42. Zhang Z. Y., Langreth D. C., Perdew J. P. Planar-surface charge densities and energies beyond the local-density approximation // *Phys. Rev. B.* –1990. –V.41. –P.5674.
43. Langreth D. C., Mehl M. J. Easily implementable nonlocal exchange-correlation energy functional // *Phys. Rev. Lett.* –1981. –V.47. –P.446 .
44. Li X.-P., Needs R. J., Martin R. M., Ceperley D. M. Green's-function quantum Monte Carlo study of a jellium surface // *Phys. Rev. B.* –1992. –V.45. –P.6124–6130.
45. Acioli P. H., Ceperley D. M. Diffusion Monte Carlo study of jellium surfaces: Electronic densities and pair correlation functions // *Phys. Rev. B.* –1996. –V.54. –P.17199–17207.
46. Pitarke J. M., Eguiluz A. G. Surface energy of a bounded electron gas: analysis of the accuracy of the local-density approximation via

- ab initio self-consistent-field calculations // *Phys. Rev. B.* –1998. –V.57. –P.6329–6332.
47. Runge E., Gross E. K. U. Density-functional theory for time-dependent systems // *Phys. Rev. Lett.* –1984. –V.52. –P.997–1000.
48. Gross E. K. U., Kohn W. Time-dependent density-functional theory // *Adv. Quantum Chem.* –1990. –V.21. –P.255–291.
49. Костробій П. П., Маркович Б. М. Поверхнева енергія напівобмеженого металу у моделі «желе» // *Укр. фіз. журн.* –2002. –Т.47, №12. –С.1180–1184.
50. Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: II. Функції розподілу // *Журн. фіз. досл.* –2003. –Т.7, №3. –С.298–312.
51. Takahashi K., Onzawa T. Simple formula for the surface energy by a shifted-step-potential approximation // *Phys. Rev. B.* –1993. –V.48. –P.5689–5691.
52. 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.
53. Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали // *Журн. фіз. досл.* –2003. –Т.7, №2. –С.195–206.
54. Kostrobij P. P., Markovych B. M. An effective potential of electron-electron interaction in semi-infinite jellium // *Condens. Matter Phys.* –2006. –Vol.9, No.4(48). –P.747–756.
55. Костробій П. П., Маркович Б. М. Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на електронну густину напівобмеженого металу // *Укр. фіз. журн.* –2007. –Т.52, №2. –С.170–174. [Kostrobij P. P., Markovych B. M. Investigation of the influence of external electric field on the electron density of semi-bounded metal // *Ukr. J. Phys.* –2007. –V.52, N.2. –P.167–171.]
56. Маркович Б., Задворняк І. Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на електронну структуру напівобмеженого металу // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.* –2013. –В.17. –С.120–130.
57. Вакарчук И. А., Рудаковский Ю. К. Метод функционального интегрирования в теории спиновых систем // *Теор. мат. физ.* –1981. –Т.49, №2. –С.234–247.
58. Юхновский И. Р., Костробий П. П. Статистическая теория ограниченных ферми-систем. Приближение хаотических фаз. –К.: 1980. 33 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теор. физики; ИТФ-80-79Р).

59. Беллман Р. Введение в теорию матриц. –М.: Наука, 1969. 367 с. [Bellman R. Introduction to matrix analysis. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987, p.430.]
 60. Kleinert H. Gauge fields in condensed matter. Vol.I, “Superflow and vortex lines”. World Scientific (Singapore, 1989), p.742.
 61. Stratton R. The surface free energy of a metal-I: Normal state // Philos. Mag. –1953. –V.44. –P.1236–1246.
 62. Sugiyama I. D. Theory of formation energy of the external and the internal surface for free electron metals // J. Phys. Soc. Japan. – 1960. –V.15. –P.965–982.
 63. Newns D. M. Dielectric response of a semi-infinite degenerate electron gas // Phys. Rev. B. –1970. –V.1, N.8. –P.3304–3322.
 64. Вакарчук І. О. Вступ до проблеми багатъох тіл. –Львів: Львівський національний університет ім. І. Франка, 1999, –220 с.
 65. Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика. Мир (Москва, 1964), с.255. [Kadanoff L. P., Baym G. Quantum Statistical Mechanics. W. A. Benjamin, Inc. (New York, 1962), p.203.]
 66. Кієжна А., Войцєховський К. F. Metal surface electron physics. Pergamon, 1996, p.303.
 67. Пааш Г., Хитшольд М. Поверхности твердых тел. В книге “Достижения электронной теории металлов”: в 2-х т.; пер. с нем. –М.: Мир, 1984.
 68. Huntington R. Calculations of surface energy for a free-electron metal // Phys. Rev. –1951. –V.81. –P.1035–1039.
 69. Moore I. D., March N. H. Density matrices and exchange hole for metal surfaces // Ann. Phys. –1976. –V.97. –P.136.
 70. Sugiyama I. D. An extended form of Weyl-Laue theorem and its application to surface problems // J. Phys. Soc. Japan. –1959. –V.14. –P.977–978.
 71. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. Мир (Москва, 1967), с.382. [Pines D., Nozières P. The theory of quantum liquids. W. A. Benjamin, Inc. (New York, Amsterdam, 1966)].
-

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; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlady, *Ljubljana*; 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: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>