

УДК 530.145

## Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на унарну функцію розподілу електронів в напівобмеженому металі

Маркович Б. М., к.ф.-м.н., доц. каф. ПМ

Задворняк І. М., асистент каф. ПМ

Національний університет «Львівська політехніка»  
(вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна)

В праці [1] запропоновано послідовний підхід, в якому на основі методу функціонального інтегрування проводиться розрахунок багаточастинкових функцій розподілу електронів для моделі просторово-обмежених систем, що є проблемою в інших підходах [2,3]. Згідно із цим підходом для розрахунку унарної функції розподілу електронів потрібно знати функцію розподілу невзаємодіючої електронної системи та ефективний потенціал парної міжелектронної взаємодії за наявності плоскої поверхні поділу. Вираз для обчислення ефективного потенціалу отримано методом функціонального інтегрування в праці [4].

В даній роботі проведено дослідження унарної функції розподілу електронів в системі, яка є напівобмеженим металом, що моделюється напівобмеженим «желе». Ми припускаємо, як і в праці [5], що до поверхні прикладено зовнішнє постійне електричне поле з напруженістю  $E$ . Але для опису системи в якості поверхневого потенціалу взято лінійний потенціал

$$V(z) = (W + eEz)\theta(z), \quad (1)$$

де  $W$  – висота потенціальної сходинок,  $e$  – заряд електрона,  $z$  – нормальна до площини поділу координата електрона. Поверхневий потенціал (1) при  $E = 0$  набуває вигляду сходинок скінченної висоти, а при  $E \rightarrow \infty$  перетворюється на непроникну стінку.

Проведено дослідження впливу зовнішнього електричного поля на унарну функцію розподілу електронів. Показано, що збільшення напруженості зовнішнього електричного поля призводить до зсуву електронної густини в глибину металу.

1. Костробій П. П. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: II Функції розподілу / П. П. Костробій, Б. М. Маркович // Журн. фіз. досл. — 2003. — Т. 7, № 3. — С. 298–312.
2. Zhagn Z. Y. Planar-surface charge densities and energies beyond the local-density approximation / Z. Y. Zhagn, D. C. Langreth, J. P. Perdew // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 41, № 9. — P.5674–5684.
3. Acioli P. H. Diffusion Monte Carlo study of jellium surfaces: electronic densities and pair correlation functions / P. H. Acioli, D. M. Ceperley // Phys. Rev. B. — 1996. — V. 54, № 23. — P. 17199–17207.
4. Kostrobij P. P. An effective potential of electron-electron interaction in semi-infinite jellium / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych // Condens. Matter Phys. — 2006. — V. 9, № 4. — P. 747–756.
5. Kostrobij P. P. Investigation of the influence of external electric field on the electron density of semi-bounded metal / P. P. Kostrobij, B. M. Markovych // Ukr. J. Phys. — 2007. — V. 52, № 2. — P. 167–171.