

УДК 530.415

## Розрахунок термодинамічних характеристик напівобмеженого «желе»

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

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

На сьогоднішній день найбільш поширеним методом дослідження металів з поверхнею поділу є метод функціоналу густини [1]. Проте за своєю суттю він є одночастинковим квантово-механічним підходом і внаслідок цього не дозволяє розрахувати термодинамічні характеристики металу. Альтернативою до цього підходу є запропонована у працях [2,3] квантово-статистична теорія металу з поверхнею поділу, яка дозволяє розрахувати структурні та термодинамічні характеристики з коректним врахуванням багаточастинкових кореляційних ефектів, що є також проблемою для методу функціоналу густини.

У даній праці, використовуючи метод функціонального інтегрування [2,3], для великого термодинамічного потенціалу напівобмеженого металу в межах моделі «желе»  $\Omega(T, V, \mu)$  ( $T$  – температура,  $V$  – об'єм системи,  $\mu$  – хімічний потенціал) знайдено загальний вираз. Використовуючи його та співвідношення

$$N = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V},$$

де  $N$  – кількість електронів, отримано алгебраїчне рівняння для хімічного потенціалу  $\mu$ .

Проведено числовий розрахунок великого термодинамічного потенціалу, хімічного потенціалу та тиску в системі взаємодіючого електронного газу і досліджено їхню залежність від концентрації електронів.

1. Dreizler R.M. Density functional theory / Dreizler R.M., Gross E.K.U. Springer, 1990, 317 p.
2. Костробій П.П. Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок. I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали / Костробій П.П., Маркович Б.М. // Журн. фіз. досл. –2003. –Т.7, №2. –С.195–206.
3. Kostrobij P.P. A new approach to calculate the thermodynamic potential of an inhomogeneous electron gas / Kostrobij P.P., Markovych B. M. // Condens. Matter Phys. –2003. –Vol.6, No.2(34). – P.347–362.