

П.П. Костробій, Б.М. Маркович, І.М. Задворняк

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

МОДЕЛЮВАННЯ КОРЕЛЯЦІЙНОЇ ФУНКЦІЇ ДЛЯ ВИПАДКУ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТЕНЦІАЛУ СКІНЧЕНОЇ ВЕЛИЧИНИ

Розглядаємо систему, яка складається з металевого підкладу і тонкої електронної плівки, що нанесена на поверхню підкладу. Площа поверхні плівки вважається макроскопічно великою. Металевий підклад моделюється напівобмеженим "желе".

Вважаємо, що поверхневий потенціал моделюється таким чином:

$$V(z) = W \cdot \theta(z) = \begin{cases} W, & z > 0, \\ 0, & z < 0; \end{cases}$$

де $W = \frac{s^2 \hbar^2}{2m}$, а величина s задає висоту бар'єру.

Власні функції поверхневого потенціалу задовольняють рівняння Шредінгера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi_\alpha(\vec{r}) = E_\alpha(\vec{p}) \varphi_\alpha(\vec{r}),$$

де $E_\alpha(\vec{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_\alpha$, $\varepsilon_\alpha = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m}$ – власні значення потенціалу, α – квантове число, \vec{p} – імпульс електрона, \vec{r} – двовимірний радіус-вектор електрона, Δ – оператор Лапласа.

Якщо енергія частинок не перевищує значення поверхневого потенціалу, тобто $\varepsilon_\alpha < W$, то власні функції мають вигляд

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L + \frac{2}{\sqrt{s^2 - \alpha^2}}}} \left(-\sin\left(\alpha z - \arcsin \frac{\alpha}{s}\right) \cdot \theta(-z) + \frac{\alpha}{s} \cdot e^{-\sqrt{s^2 - \alpha^2} z} \cdot \theta(z) \right). \quad (1)$$

У випадку, коли енергія частинок перевищує значення поверхневого потенціалу ($\varepsilon_\alpha > W$), отримано такі власні функції:

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha(z) = & \left(\operatorname{tg} \frac{\alpha L}{2} \cdot \cos \alpha z + \sin \alpha z \right) \cdot \theta(-z) + \left(\operatorname{tg} \frac{\alpha L}{2} \cdot \cos\left(\sqrt{\alpha^2 - s^2} z\right) + \right. \\ & \left. + \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 - s^2}} \sin\left(\sqrt{\alpha^2 - s^2} z\right) \right) \cdot \theta(z). \end{aligned} \quad (2)$$

Досліджено двочастинкову кореляційну функцію, вираз для якої наведено в [1], для власних функцій вигляду (1) та (2). Проведено порівняння отриманих результатів зі значеннями кореляційної функції для нескінченно великого потенціального бар'єру ($W \rightarrow \infty$), який було досліджено в [1].

1. Костробій П.П., Маркович Б.М., Казановська О.З. Двочастинкова кореляційна функція "густина-густина" напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле. – Львів: 2006. – 16с., (Препр./ НАН України. ІФКС. ІСМР–06–15U).