

П.П. Костробій, Б.М. Маркович, О.М. Уханська
*Національний університет “Львівська політехніка”,
 вул. С. Бандери, 12, 79013, м. Львів, Україна*

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДЕЯКИХ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛІВ З ПОВЕРХНЕЮ ПОДІЛУ “МЕТАЛ-ВАКУУМ”

Розглянута задача математичного моделювання хімічного потенціалу $\mu(\rho_0, T)$ електронної підсистеми напівобмеженого металу з поверхнею поділу “метал-вакуум”. В основу математичної моделі такої системи покладено модель “напівобмеженого желе” – системи N взаємодіючих за кулонівським законом електронів в полі іонної ґратки, вплив якої враховується як через формування поверхневого потенціалу $V(z)$ (Oz – вісь, перпендикулярна до плоскої площини поділу “метал-вакуум”), який не дозволяє електронам покинути метал, так і через компенсуюче поле рівномірно розподіленого додатного заряду з густиною $\rho^+ \equiv \rho_{jelle}^+(z) = \rho_0 \theta(-z-d)$. Тут d – параметр, що визначається з умови електронейтральності [1], ρ_0 – середня густина електронів, T – температура. Отримане в [2] для такої математичної моделі рівняння щодо визначення $\mu(\rho_0, T)$ має такий вигляд:

$$N = \sum_{\vec{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\vec{p}), \mu) + \frac{1}{2S} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{q}} \frac{2\pi e^2}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\vec{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\vec{p}), \mu) + \quad (1)$$

$$+ \frac{1}{2\beta} \sum_{k_1 k_2} \sum_{\vec{q}, \omega} \frac{\partial}{\partial \mu} D_{k_1 k_2}(\vec{q}, \omega, \mu) \cdot G_{k_2 k_1}(\vec{q}, \omega, \mu).$$

Матриці G, D та розподіл $n(\varepsilon_\alpha(\vec{p}), \mu)$ по енергіях $\varepsilon_\alpha(\vec{p})$ означені в [2]; e – заряд електрона, β – обернена термодинамічна температура.

Побудована регулярна процедура знаходження розв’язків цього рівняння, а також знайдено числовий розв’язок рівняння (1) для $\mu(\rho_0, T)$ в наближенні “дзеркального розсіяння” [3] в області низьких ($T \rightarrow 0$) температур. Досліджено залежність $\mu(z, T)$ для даної математичної моделі металу з поверхнею поділу “метал-вакуум”.

1. Костробій П.П., Маркович Б.М. // Журнал фізичних досліджень. – 2003. – 7, № 2. – С. 195-206.
2. Костробій П., Уханська О., Кекало О. // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2007. № 601: Фізико-математичні науки. – С. 73-77.
3. Костробій П. Реакційно-дифузійні процеси в системах з поверхнею поділу “метал-газ”: квантово-статистичний опис. Докторська дисертація. – Львів. 2009.