

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДОВ И ПОЛЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКОМ ОСТРИИ

М. А. Кожушнер^{a}, В. С. Посвянский^a, Б. В. Лидский^a,*

*В. Л. Боднева^a, Л. И. Трахтенберг^{a,b**}*

^a *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^b *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 августа 2019 г.,
после переработки 14 сентября 2019 г.
Принята к публикации 18 сентября 2019 г.

Найдено распределение электрического поля и зарядов в наноразмерном металлическом усеченном конусе в сильном электрическом поле. Геометрия задачи соответствует элементам шероховатости поверхности, а также игле сканирующего туннельного микроскопа. Показано, что происходит сильное, на десятки процентов, изменение плотности электронов вдоль оси конуса. Поле проникает в глубь металлической иглы на расстояния порядка нанометра. Заметно меняется положение уровня Ферми вблизи верхнего основания конуса. Показано, что барьер, через который туннелируют электроны при входе или выходе из иглы, асимметричен и зависит от знака внешнего электрического поля.

DOI: 10.31857/S0044451020020042

1. ВВЕДЕНИЕ

Согласно классической электростатике (см., например, [1]), постоянное электрическое поле не проникает в толщу металла, а изменение плотности зарядов происходит лишь на поверхности. Однако такая идеализированная картина, непроникновение в металл, справедлива лишь при недостижимо высокой плотности электронов в металле или на достаточно больших расстояниях от поверхности в глубине металла. В некоторых работах при рассмотрении воздействия электрического поля на массивные образцы проникновение поля в металл уже принималось во внимание. Так, в работе [2] при расчете работы выхода электронов из металла учитывалось возникновение электрического поля вблизи плоской поверхности при туннельном выходе электронов через поверхность. Рассмотрение глубины и характера проникновения поля в металл через плоскую по-

верхность в зависимости от электронной плотности показало значительное изменение работы выхода электронов в сильных электрических полях [3]. Было также показано [4], что взаимодействие точечного заряда с металлической поверхностью, во-первых, зависит от знака заряда и, во-вторых, заметно меньше классического взаимодействия с «зеркальным отражением» из-за проникновения поля от внешнего заряда в металл. Наведенный заряд при этом находится не только на поверхности, но и внутри металла.

Следует, однако, иметь в виду, что в указанных работах, где учитывался отход от общепринятого рассмотрения воздействия электрического поля на металлический образец [1], рассматривались макрообъекты. Вместе с тем, современный уровень исследований требует детального изучения взаимодействия электрического поля не только с микро-, но и с нанообъектами. Действительно, изучаемая поверхность, как правило, шероховата. А форма элемента шероховатости вполне соответствует конусу или усеченному конусу, причем размер такого конуса — это нанометры.

* E-mail: kozhushner@gmail.com

** E-mail: litrakh@gmail.com

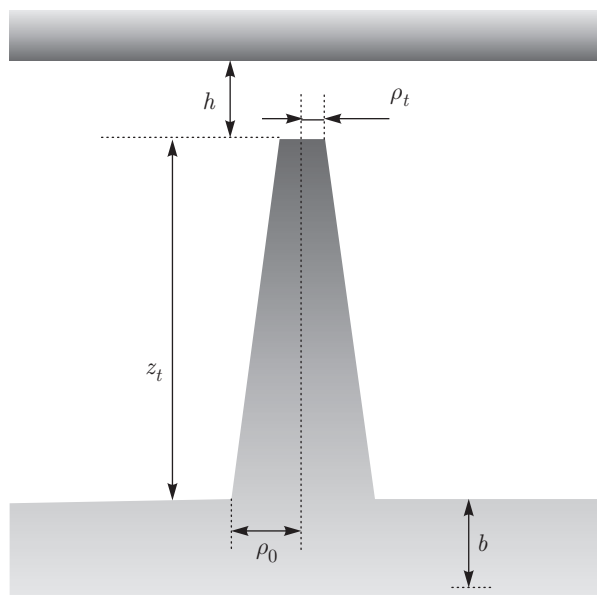


Рис. 1. Схематическое изображение иглы и плоского электрода: ρ_t — радиус верхнего основания усеченного конуса (иглы), h — расстояние между вершиной конуса и плоским электродом, z_t — высота усеченного конуса, ρ_0 — радиус нижнего основания усеченного конуса, b — расстояние от нижнего основания конуса до точки, где потенциал и напряженность поля равны нулю

Кроме того, за последние декады для исследования строения поверхности проводников, структуры электронных и колебательных уровней поверхности и адсорбатов [5–9] широкое распространение получил метод, использующий сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) [5], размер острия иглы которого тоже составляет нанометры. При этих измерениях электрические поля в области между острием СТМ и исследуемой поверхностью имеют величину порядка 10^7 В/см и для правильного истолкования результатов эксперимента необходимо знать реальную плотность электронов у конца иглы и распределение поля в межэлектродном промежутке. Именно эта актуальная задача, определение указанных величин для конусообразного металлического электрода, в зависимости от приложенного напряжения, параметров конуса и электронной плотности в материале электрода, будет решаться в данной работе.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим металлический образец, на поверхности которого находится наноразмерный усеченный конус (рис. 1). Равновесное распределение электронов внутри металла в электрическом поле и ве-

личина поля в металле и вне его отвечают минимуму полной свободной энергии системы. Будем полагать, что металл находится при температуре $T = 0$, поскольку в рассматриваемых нами полях изменение энергии электрона на расстояниях порядка атомных много больше $k_B T$. Для электронной системы металла будем использовать модель свободного электронного газа, что является неплохим приближением в случае кубической симметрии решетки и закрытой поверхности Ферми, например, для вольфрама (см. [10]). Тогда плотность полной свободной энергии в электрическом поле в металле и вне его может быть записана через плотность электронов в металле $n_-(\mathbf{r})$ и электростатический потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ (здесь и в дальнейшем используется атомная система единиц):

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \frac{3^{5/3} n^{4/3}}{10} [n_-(\mathbf{r})]^{5/3} - 0.235 [n_-(\mathbf{r})]^{4/3} + \frac{1}{8\pi} [\nabla\varphi(\mathbf{r})]^2. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое — плотность кинетической энергии электронного газа [11], второе слагаемое — плотность обменно-корреляционной энергии [12], третье слагаемое — плотность электростатической энергии (эффективная масса электрона полагается равной массе свободного электрона). Для простоты в выражении для плотности энергии учтены только главные слагаемые, а существенно меньшими корреляционной добавкой [2] и неоднородной добавкой к кинетической энергии [13, 14] будем пренебрегать. Потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ определяется уравнением Лапласа:

$$\Delta\varphi = -4\pi[n_+ - n_-(\mathbf{r})] \quad (2a)$$

— внутри металла

$$\Delta\varphi = 0 \quad (2b)$$

— вне металла.

Исходя из геометрии задачи (рис. 1), граничные условия для уравнений (2) имеют вид

$$\varphi = 0, \quad z = -b, \quad (2c)$$

$$\varphi = \varphi_0, \quad z = z_t + h. \quad (2d)$$

Здесь n_+ — постоянная плотность положительных зарядов, z_t — высота усеченного конуса, h — расстояние от верхнего основания конуса до поверхности второго электрода, b — расстояние от нижнего основания конуса до точки в образце, где напряженность поля и потенциал можно считать равными нулю,

φ_0 — заданная разность потенциалов между электродами. В области, где $\nabla\varphi(\mathbf{r}) = 0$, плотность n_- не зависит от координат и $n_- = n_+$. Распределение электронов и потенциала отвечает минимуму полной энергии \mathcal{E} :

$$\mathcal{E} = \int d\mathbf{r} \varepsilon(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Мы не учитываем туннельной составляющей плотности электронов вне металла [2, 3], так как при больших значениях φ_0 влияние туннелирования на изменение плотности электронов в игле существенно меньше, чем от проникновения поля в иглу.

3. ГЕОМЕТРИЯ ЭЛЕКТРОДА, ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЛА И МЕТОД РАСЧЕТА

Рассмотрим усеченный конус с достаточно широким нижним основанием (см. рис. 1), у которого высота z_t и радиус вершины конуса ρ_t полагаются постоянными, $z_t = 30$ (15 Å) и $\rho_t = 2$ (1 Å). Расчеты проводились для радиусов нижнего основания конуса $\rho_0 = 5, 10, 30$ и средних плотностей положительных зарядов $n_+ = 0.01$ ($6.755 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$) и 0.02 ($1.351 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$), которые соответствуют плотностям в реальных металлах. Рассматривались шесть различных значений разностей потенциалов между плоским электродом и иглой $\varphi_0 = \pm 0.03675, \pm 0.0735, \pm 0.11025$ ($\pm 1 \text{ В}, \pm 2 \text{ В}, \pm 3 \text{ В}$). Расстояние между вершиной конуса и поверхностью электрода h во всех случаях было одним и тем же, $h = 10$ (5 Å). Размеры конуса, расстояния и напряжения характерны для СТМ. Выбор конической формы электрода — иглы СТМ — обусловлен методом ее приготовления — срезание проволоки (например, вольфрамовой) под острым углом, а затем ее протравливание. При этом минимальный радиус верхнего основания, который этим способом можно получить, соответствует атомным размерам. Именно такой радиус и использовался в расчетах. Интересно, что коническая форма иглы туннельного микроскопа наблюдалась в эксперименте (см. [15]).

Минимизация функционала (3) позволяет получить зависимость $n_-(\varphi)$. При выводе этой зависимости будет учтено, что при $z = -b$, с учетом условия (2b), выполняется равенство $n_+ = n_-$. Отметим, что выполнение краевого условия (2c) приводит к тому, что закон сохранения заряда не выполняется, так как электроны уходят (или приходят) с противоположной границы металла. Закон сохранения был бы

выполнен, если бы задача рассматривалась в границах всего металлического образца. В результате правая часть уравнения (2a) становится нелинейной функцией потенциала φ . Для решения задачи использовалась неявная разностная схема с нерегулярной двумерной сеткой, узлы которой сгущались к границе металла [16].

4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДОВ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Как показывают расчеты, поле заметно проникает в металл в области острия. Оказалось, что отношение потенциала у вершины усеченного конуса φ_{top} к полному напряжению φ_0 , φ_{top}/φ_0 , не зависит (в пределах точности расчета) от величины φ_0 , а зависит лишь от геометрии конуса, т. е. от радиуса нижнего основания (высота и радиус верхнего основания конуса в расчетах не менялись) и от n_+ . Значения отношения φ_{top}/φ_0 для различных плотностей n_+ и различных радиусов ρ_0 представлены в табл. 1.

Для примера, на рис. 2 показаны зависимости потенциала от координаты z на оси металлического конуса ($n_+ = 0.01$) при полном напряжении $\varphi_0 = 0.03675$ (1 В). Расчет проводился при различных радиусах основания конуса (нуль потенциала располагается в металле на уровне нижнего основания конуса, т. е. при $b \approx 0$).

Абсолютная величина напряженности поля заметно увеличивается у вершины иглы (рис. 3) по сравнению с полем у плоского электрода и постепенно стремится к нулю в глубине иглы. При изменении знака потенциала меняется только знак напряженности, но не ее величина. Нетрудно видеть (рис. 3), что эта абсолютная величина напряженности у верхнего основания конуса уменьшается, а у второго электрода растет с увеличением радиуса нижнего основания. Напряженность вблизи вершины для $\rho_0 = 5$ ат. ед. примерно в 4 раза больше, чем у

Таблица 1. Значения отношений φ_{top}/φ_0 в зависимости от радиуса нижнего основания усеченного конуса ρ_0 и плотности n_+

n_+	ρ_0		
	5	10	30
φ_{top}/φ_0			
0.01	0.27	0.24	0.18
0.02	0.24	0.21	0.16

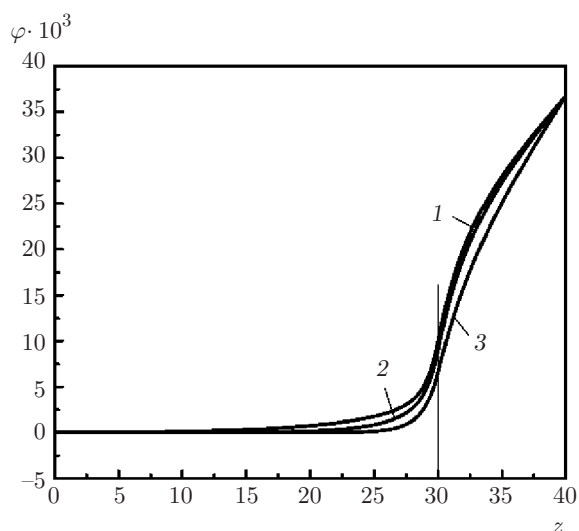


Рис. 2. Зависимость электростатического потенциала от координаты вдоль оси конуса при разных радиусах нижнего основания конуса: $\rho_0 = 5$ ат.ед. (кривая 1), $\rho_0 = 10$ ат.ед. (кривая 2), $\rho_0 = 30$ ат.ед. (кривая 3). Вертикальной линией отмечен край иглы — $z = z_t$. Расчет проводился для $n_+ = 0.01$ и $\varphi_0 = 0.03675$ (1 В)

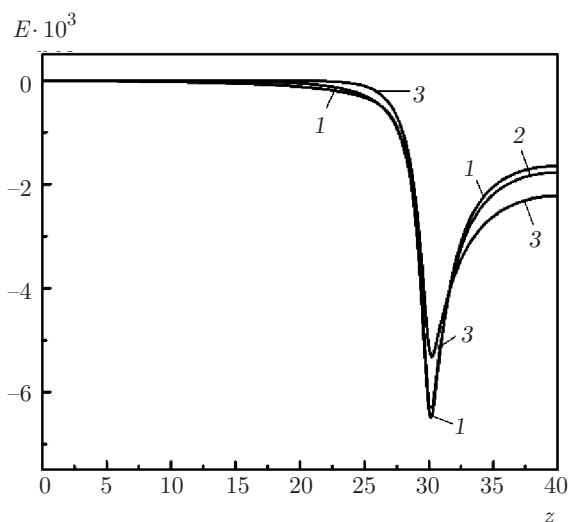


Рис. 3. Напряженность поля $E = d\varphi/dz$ по оси конуса для случая $n_+ = 0.01$ и $\varphi_0 = 0.03675$ (1 В) при разных радиусах нижнего основания конуса: $\rho_0 = 5$ ат.ед. (кривая 1), $\rho_0 = 10$ ат.ед. (кривая 2), $\rho_0 = 30$ ат.ед. (кривая 3)

плоского электрода. Максимальное увеличение этого отношения в случае конуса заметно больше, чем известное увеличение поля, — в 3 раза у поверхности металлической сферы [1].

Плотность электронов в металле вблизи вершины конуса заметно отличается от n_+ , причем она несколько изменяется вдоль радиуса у вершины ко-

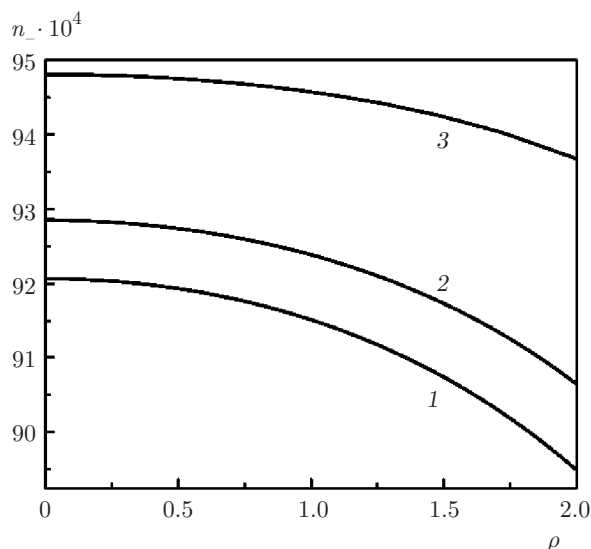


Рис. 4. Зависимость плотности электронов у вершины конуса от расстояния до его оси при разных радиусах основания конуса: $\rho_0 = 5$ ат.ед. (кривая 1), $\rho_0 = 10$ ат.ед. (кривая 2), $\rho_0 = 30$ ат.ед. (кривая 3). Полное приложенное напряжение равно $\varphi_0 = -0.03675$ (-1 В) и средняя плотность положительных зарядов $n_+ = 0.01$

Таблица 2. Значения отношений $\Delta \bar{n}_{z_t}/n_+$ в зависимости от радиуса нижнего основания усеченного конуса ρ_0 и плотности n_+ при $\varphi_0 = 0.03675$ (1 В)

n_+	ρ_0		
	5	10	30
	$\Delta \bar{n}_{z_t}/n_+$		
0.01	0.094	0.083	0.058
0.02	0.052	0.045	0.033

нуса. Согласно расчету, относительное изменение плотности электронов вблизи верхнего основания конуса квадратично зависит от его радиальной координаты ρ :

$$\frac{n_-(\rho) - n_-(0)}{n_+} = k(\rho_0)\rho^2. \tag{4}$$

Зависимость $n_-(\rho)$, при $n_+ = 0.01$ и $\varphi_0 = -0.03675$ (-1 В), для различных ρ_0 изображена на рис. 4. Отсюда следует, что соответствующая средняя плотность электронов равна

$$\bar{n}_{z_t} = \frac{n_-(\rho_t) + n_-(0)}{2}. \tag{5}$$

Именно эта средняя плотность используется в табл. 2 как плотность электронов вблизи верхнего

основания конуса. В этой таблице представлены значения приповерхностной относительной плотности электронов

$$\Delta \bar{n}_{z_t} / n_+ = (\bar{n}_{z_t} - n_+) / n_+$$

в зависимости от величины n_+ и радиуса нижнего основания конуса ρ_0 при $\varphi_0 = 0.03675$ (1 В). Расчеты показывают, что при напряжениях до нескольких вольт величина $\Delta \bar{n}_{z_t}$ с точностью до нескольких процентов пропорциональна φ_0 . При изменении знака φ_0 соответственно меняется и знак $\Delta \bar{n}_{z_t}$. Величина $\Delta \bar{n}_{z_t}$ уменьшается с ростом ρ_0 и слабо увеличивается с ростом n_+ . Из табл. 1 и 2 следует, что относительное изменение плотности электронов у верхнего основания конуса и величина поля внутри металла уменьшаются с ростом плотности зарядов в металле.

Проводились также расчеты для радиусов верхнего основания $\rho_t > 2$ (1 Å). Однако зависимости для электростатического потенциала, напряженности поля и плотности электронов не показали ничего нового по сравнению с зависимостями, полученными при изменении радиуса нижнего основания. При этом важно, что совпадают не только закономерности изменения указанных величин, но и амплитуда этих изменений при увеличении радиуса соответствующего основания.

Полученные результаты позволяют рассчитывать туннельный ток в СТМ. Предположим для простоты, что работа выхода электрона из иглы и поверхности электрода одинаковая. Рассмотрим сначала случай, когда туннельный ток соответствует переходу электронов из иглы в исследуемую поверхность, т.е. положительной разности потенциалов между поверхностью и иглой. При напряжении φ_0 уровень Ферми поверхности электрода опускается на ту же величину (см. рис. 5). Верхняя энергетическая граница туннельного барьера следует за ходом $-\varphi(z)$ (см. рис. 2) и оказывается заметно ниже линии (штрихпунктир), соответствующей нулевому полю в игле (рис. 5).

Следует иметь в виду, что положение локального уровня Ферми в игле всегда следует за $-\varphi(z)$ и далеко от вершины оказывается выше уровня Ферми поверхности (см. рис. 5) на величину напряжения φ_0 . Тогда вблизи поверхности иглы при неизменной плотности электронов уровень Ферми был бы выше лишь на величину $\varphi_0 - \varphi_{top}$. Но и максимальная энергия электронов у вершины также увеличивается, следовательно, плотность электронов возрастает. Вместе с ростом плотности должен подниматься ло-

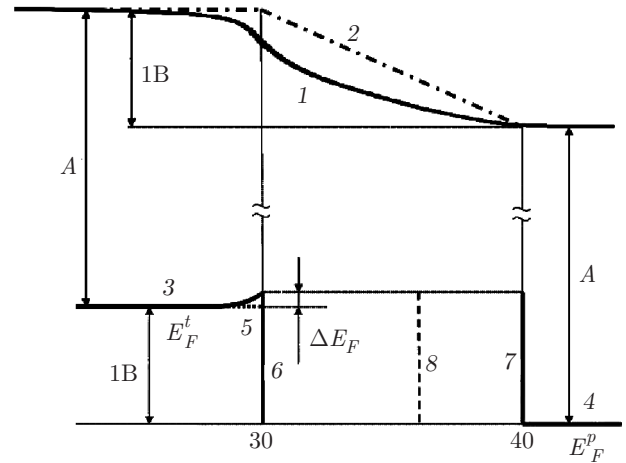


Рис. 5. Изменение энергии электронов ($-\varphi(z)$) вдоль оси иглы от точки b до поверхности плоского электрода (сплошная кривая 1) при $\varphi_0 = 0.03675$, штрихпунктирная линия 2 — ход энергии электронов ($-\varphi(z)$) при неучете проникновения поля в иглу. В нижней части рисунка горизонтальные сплошные линии показывают положения уровня Ферми иглы (слева 3) и плоского электрода (справа 4). Пунктиром слева (в игле 5) отмечено положение уровня Ферми, если поле не проникает в иглу. Вертикальными линиями 6, 7 отмечены границы двух электродов, а вертикальной штриховой линией 8 — интервал энергий электронов, туннелирующих из иглы, A — работа выхода электронов из металла

кальный уровень Ферми $E_F(\bar{n}_{z_t})$. В принятой нами модели электронного газа

$$E_F(n_-) = \left(3\pi^2 n_- / 2\sqrt{2}\right)^{2/3}. \quad (6)$$

Тогда увеличение энергии Ферми на краю иглы по отношению к энергии Ферми в металле без поля ($n_- = n_+$), связанное с изменением электронной плотности $\Delta \bar{n}_{z_t}$, имеет вид

$$\Delta E_F(\bar{n}_{z_t}) = E_F(n_+) \left[(1 + \Delta \bar{n}_{z_t} / n_+)^{2/3} - 1 \right]. \quad (7)$$

Для $n_+ = 10^{-2}$, согласно выражению (6), $E_F(10^{-2}) = 0.223 \approx 6$ В, и расчеты показывают (см. табл. 2), что при $\varphi_0 = 1$ В величина $\Delta \bar{n}_{z_t} / n_+ = 0.094$. Тогда прирост уровня Ферми $\delta E_F(\bar{n}_{z_t}) \approx 0.37$ В, а результирующая разность между уровнями Ферми вершины иглы и поверхности равна

$$\Delta E_F = -(\varphi_0 - \varphi_{top}) + \delta E_F(\bar{n}_{z_t}). \quad (8)$$

Подставляя в выражение (8) данные из табл. 1, получаем $\Delta E_F = 0.1$ В.

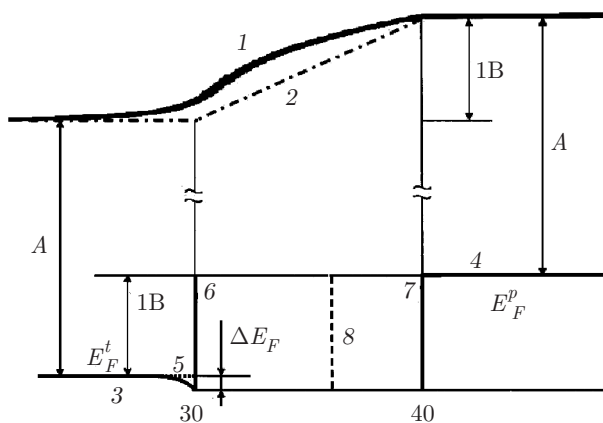


Рис. 6. Изменение энергии электронов $(-\varphi(z))$ вдоль оси иглы от точки b до поверхности плоского электрода (сплошная кривая 1) при полной разности потенциалов между поверхностью и иглой $\varphi_0 = -0.03675$, штрихпунктирная линия 2 — ход энергии $(-\varphi(z))$ при неучете проникновения поля в иглу. В нижней части рисунка горизонтальные сплошные линии показывают положения уровня Ферми иглы (слева 3) и плоского электрода (справа 4). Пунктиром слева (в игле 5) отмечено положение уровня Ферми, если поле не проникает в иглу. Вертикальными линиями 6, 7 отмечены границы двух электродов, а вертикальной штриховой линией 8 — интервал энергий электронов, туннелирующих из поверхности плоского электрода в иглу, A — работа выхода электронов из металла

Следовательно, проникновение поля в иглу существенно увеличивает туннельный ток. Это происходит по двум причинам: 1) увеличение диапазона энергий туннелирующих электронов с 1 эВ до 1.1 эВ, т.е. увеличение количества туннелирующих электронов; 2) уменьшение туннельного барьера из-за проникновения поля в иглу и из-за увеличения энергии добавочных туннелирующих электронов.

При изменении знака напряжения (см. рис. 6) электроны туннелируют из поверхности в иглу. Теперь истинная верхняя граница потенциального барьера (сплошная линия на рис. 6) оказывается выше границы барьера (штрихпунктирная линия) без учета проникновения поля в иглу. При этом абсолютная величина φ_{top} не зависит от знака потенциала, и модуль величины $\Delta\bar{n}_{z_t}$ при небольших напряжениях, около 1–2 В, не меняется при изменении знака напряжения. Тогда, поскольку $\Delta\bar{n}_{z_t}/n_+ \ll 1$, сдвиг уровня Ферми у вершины иглы (согласно (8)) такой же по величине, но меняет знак. Таким образом, число электронов, которые могут принять участие в туннелировании, такое же, как и при положительном напряжении. Однако теперь барьер для туннелирования существенно больше, и поток электронов

из поверхности в иглу меньше, чем при положительном напряжении.

Таким образом, при узкой вершине иглы величина туннельного тока в СТМ должна заметно, на десятки процентов, зависеть от знака напряжения при достаточно больших значениях напряжения, $\varphi_0 \geq 1$ В, даже если игла и плоский электрод сделаны из одного и того же металла. Асимметрия туннельного тока связана именно с различной геометрией электродов.

Использование для описания наноразмерного металлического объекта модели желе (размазанность и постоянство положительного заряда), конечно, не может дать точного решения задачи. Вместе с тем, эта модель применима, когда относительное изменение плотности заряда значительно меньше единицы, а результирующее поле внутри металла существенно меньше внутриатомного. Оба эти признака относятся к рассматриваемому в данной работе случаю.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что электрическое поле заметно проникает в область наноразмерной металлической иглы — усеченного конуса. Задача решалась для характеристик конуса, которые соответствуют реальной шероховатости поверхности и параметрам иглы туннельного микроскопа. Величины приложенного напряжения отвечают условиям работы сканирующего туннельного микроскопа. Оказалось, что изменение потенциала в пространстве между основанием иглы и вершиной составляет существенную, в десятки процентов, долю от полной разности потенциалов между электродами. Эта доля зависит главным образом от отношения радиусов нижнего и верхнего оснований конуса.

Кроме того, приложенное электрическое поле значительно меняет плотность электронов вблизи вершины, и знак изменения, естественно, зависит от знака потенциала. Изменение величины потенциального барьера для туннелирования электронов между конусом и плоским электродом при изменении полярности приводит к существенной асимметрии величины туннельного тока. Все это необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных, полученных с помощью СТМ.

Величина электрического поля вблизи верхнего основания конуса оказалась примерно в четыре раза больше приложенного поля, т.е. наноразмерные выступы на поверхности приводят к существен-

ному увеличению поля вблизи них. Это явление необходимо принимать во внимание при изучении влияния электрического поля на приповерхностные химические реакции.

Благодарности. Авторы благодарны М. И. Иким за помощь в работе.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания, тема 45.22 № 0082-2018-0003 (регистрационный номер АААА-А18-118012390045-2), а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 19-07-00141, 18-29-02012).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, Т. VIII *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).
2. J. R. Smith, *Phys. Rev.* **181**, 522 (1969).
3. М. Б. Паргеньский, Я. Г. Смородинский, *ФТТ* **16**, 644 (1974).
4. М. А. Кожушнер, В. С. Посвянский, Б. В. Лидский, М. И. Иким, *Хим. физика* **37**, 35 (2018).
5. G. Binnig, H. Rohrer, C. Verber, and E. Weibel, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 178 (1981).
6. R. J. Hamers and Y. J. Wang, *Chem. Rev.* **96**, 1261 (1996).
7. E. Meyer, H. J. Hug, and R. Bennewitz, *Scanning Probe Microscopy*, Springer, Berlin (2004).
8. S. Kovalevskii, F. Dalidchik, M. Grishin, N. Kolchenko, and B. Shub, *Appl. Phys. A* **66**, 125 (1998).
9. I. Diez-Perez, J. Hihath, Y. Lee, L. Yu, L. Adamska, M. A. Kozhushner, I. I. Oleynik and N. Tao, *Nature Chem.* **1**, 635 (2009).
10. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, Т. V *Статистическая физика*, Наука, Москва (1995).
12. E. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
13. Д. А. Киржниц, *ЖЭТФ* **32**, 115 (1957).
14. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1971).
15. S. I. Bozhko, S. V. Chekmazov, V. Usov, O. Lübben, A. M. Ionov, H.-C. Wu, V. N. Semenov, M. E. Nesterova, S. A. Krasnikov, and I. V. Shvets, *J. Appl. Phys.* **122**, 235301 (2017).
16. С. К. Годунов, В. С. Рябенский, *Разностные схемы*, Наука, Москва (1977).