

## Дослідження електронної густини простих металів за наявності поверхні поділу «метал-вакуум»

Петро Костробій<sup>1</sup>, Богдан Маркович<sup>2</sup>, Ольга Казановська<sup>3</sup>

<sup>1</sup> д. ф.-м. н., професор, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, e-mail: petro.kostrobi@gmail.com

<sup>2</sup> к. ф.-м. н., доцент, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, e-mail: bogdan\_markovych@yahoo.com

<sup>3</sup> Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, e-mail: olgakazanivska@rambler.ru

*Запропоновано модель для опису впливу дискретної іонної підсистеми напівобмеженого металевого тіла на характеристики неоднорідного електронного газу. Використовуючи теорію збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії, отримано загальний вираз для одночастинкової функції розподілу електронів у напівобмеженому металевому тілі. Проведено розрахунок розподілу електронної густини для ряду простих металів і досліджено вплив наявності поверхні металу на нього.*

**Ключові слова:** напівобмежене металеве тіло, електронна густина, неоднорідний електронний газ.

**Вступ.** Сучасний розвиток нанотехнологій спонукає до розширення фундаментальних досліджень явищ, що відбуваються на поверхнях твердих (зокрема металевих) тіл, а також досліджень впливу поверхні поділу на характеристики твердих тіл. Незважаючи на значні досягнення експериментальних досліджень, багато характеристик твердих тіл неможливо отримати з експериментів. Однією з важливих характеристик металевих тіл із поверхнею поділу «метал-вакуум», для вивчення якої не існує прямих експериментальних методів, є електронна густина. Це вимагає побудови та дослідження математичних моделей опису електронної густини, які б враховували як реальну структуру металевого тіла, так і ефекти міжелектронної взаємодії за наявності поверхні поділу «метал-вакуум».

Уперше задачу розрахунку електронної густини для, так званої, моделі «напівобмеженого желе» (в цій моделі іонна ґратка металевого тіла замінюється рівномірно розподіленим додатним зарядом, який обмежений площиною, що паралельна до плоскої поверхні поділу «метал-вакуум») було розв'язано з використанням підходів методу функціонала густини (DFT) у роботі [1]. Відомо, що в підході DFT міжелектронні кореляції враховуються через використання самоузгодженого одночастинкового потенціалу, що є некоректним для металевих тіл [2, 3].

Вплив структури іонної ґратки досліджувався у праці [4], в якій було проведено розрахунок електронної густини для просторово-обмежених тіл з алюмінію та нікелю. Як зазначено самим автором, цей підхід нехтує міжелектронними кореляціями.

У цій праці на підставі запропонованої в [5] моделі металевого тіла з поверхнею поділу «метал-вакуум» проведено розрахунок електронної густини  $\rho(\vec{r})$  для ряду простих металів із плоскою поверхнею поділу «метал-вакуум». Отримано аналітичний вираз для електронної густини, який враховує як міжелектронні кореляції, так і реальну структуру іонної ґратки. Проведено числові розрахунки електронної густини натрію, калію й алюмінію та здійснено порівняння результатів розрахунку з результатами, які отримані у праці [4]. Досліджено вплив моделей електрон-ґраткової взаємодії на електронну густину.

### 1. Математична модель простого металу з поверхнею поділу «метал-вакуум»

Металеве тіло з плоскою поверхнею поділу «метал-вакуум» змодельовано просторовою системою  $N_{ion}$  додатно заряджених нерухомих іонів, які знаходяться у точках із декартовими координатами  $\vec{R}_j = (X_j, Y_j, Z_j)$ , де  $X_j \in (-\infty, +\infty)$ ,  $Y_j \in (-\infty, +\infty)$ ,  $Z_j \in (-\infty, z_0]$ ,  $z_0 = const$ ,  $z = z_0$  — рівняння плоскої поверхні поділу «метал-вакуум»,  $j = \overline{1, N_{ion}}$ . Заряд іона  $Z|e|$ , де  $e$  — заряд електрона,  $Z$  — валентність. У полі іонів перебувають електрони, координати яких  $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) = (\vec{r}_{||i}, z_i)$ ,  $i = \overline{1, N}$ . Гамільтоніан цієї моделі запишемо так

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N_{ion}} ew(\vec{r}_i, \vec{R}_j), \quad (1)$$

де перших два доданки — це відповідно оператор кінетичної енергії електронів і потенціальна енергія міжелектронної взаємодії, третій доданок — потенціальна енергія міжіонної взаємодії, а останній — енергія електрон-іонної взаємодії. У формулі (1):  $\Delta_i$  — оператор Лапласа,  $\hbar$  — стала Планка, яку поділено на  $2\pi$ ,  $m$  — маса електрона. Вважаємо, що система є електронейтральна, тобто  $ZN_{ion} = N$ .

Виокремимо з гамільтоніана (1) гамільтоніан моделі «напівобмеженого желе»  $H_{jell}$ , яку досліджували у працях [3, 5, 6]. Цю математичну модель будемо використовувати як базу для дослідження структурних характеристик напівобмеженого металевого тіла. У результаті отримуємо

$$H = H_{jell} + \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{j=1}^{N_{ion}} ew_{ps}(\vec{r}_i - \vec{R}_j) + \int d\vec{R} \frac{e\rho_{jell}(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} \right] + \sum_{i=1}^N V_{ion}(\vec{r}_i) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\vec{R} \int d\vec{R}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|},$$

де

$$H_{jell} = H_{jell}^{unif} + \sum_{i=1}^N V_{jell}(\vec{r}_i),$$

$$H_{jell}^{unif} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\vec{R} \int d\vec{R}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} -$$

$$-\frac{e^2 N}{V} \sum_{i=1}^N \int d\vec{R} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}|}$$

— гамільтоніан «однорідного желе»,  $V = SL$  — об'єм металевого тіла, а  $S$  — площа поверхні тіла, область зміни координат електрона:  $z \in (-L/2, +L/2)$ ;

$$V_{jell}(\vec{r}_i) = e \int d\vec{R} \frac{eN/V - \rho_{jell}(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|}$$

— частина поверхневого потенціалу, який формується «напівобмеженим желе»;

$$V_{ion}(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^{N_{ion}} e \Delta w(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$$

— частина поверхневого потенціалу, який створюється відхиленням потенціалу електрон-іонної взаємодії  $w(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$  від потенціалу  $w_{ps}(\vec{r}_i - \vec{R}_j)$  для безмежного металевого тіла  $\Delta w(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = w(\vec{r}_i, \vec{R}_j) - w_{ps}(\vec{r}_i - \vec{R}_j)$ ;

$$\rho_{jell}(\vec{R}) \equiv \rho_{jell}(Z) = \rho_0 \theta(-z_0 - Z), \quad \rho_0 = \frac{2eN}{V},$$

— розподіл іонної густини в моделі «напівобмеженого желе»,  $\theta(z)$  — функція Хевісайда. Отже, гамільтоніан (1) можна подати так

$$H = H_{jell}^{unif} + \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{j=1}^{N_{ion}} e w_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|) + \int d\vec{R} \frac{e \rho_{jell}(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} \right] + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\vec{R} \int d\vec{R}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|},$$

де  $V(\vec{r}_i) = V_{jell}(\vec{r}_i) + V_{ion}(\vec{r}_i)$  — потенціал, що описує вплив поверхні поділу «метал-вакуум» на електрони, який будемо називати поверхневим потенціалом.

## 2. Одночастинкова функція розподілу електронів

Згідно з означенням Боголюбова [7] одночастинкову функцію розподілу електронів можна записати так

$$\frac{F_1(\vec{r}_1)}{V} = \frac{Sp_1 \exp[-\beta(H - \mu N)]}{Sp \exp[-\beta(H - \mu N)]}, \quad (2)$$

де  $\mu$  — хімічний потенціал електронної підсистеми,  $\beta = 1/\theta$ ,  $\theta$  — термодинамічна температура [6], операція  $Sp_1$  для довільного оператора  $A(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  означає

$$Sp_1 A(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \int d\vec{r}_2 \dots \int d\vec{r}_N \sum_f \Phi_f^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) A(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \Phi_f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),$$

де  $\Phi_f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  — довільний повний набір функцій [7].

Як і в [2], зобразимо статистичний оператор  $\exp[-\beta(H - \mu N)]$  так

$$\exp[-\beta(H - \mu N)] = \exp[-\beta(H_0 - \mu N)] T \sigma_1(\beta) \sigma_2(\beta),$$

де  $T$  — оператор упорядкування [3], а

$$\sigma_1(\beta) = \exp \left[ -\frac{1}{2V} \int_0^\beta \sum_{\vec{q}}' \sum_k v_k(\vec{q}) \rho_k(\vec{q} | \beta') \rho_{-k}(-\vec{q} | \beta') d\beta' \right], \quad (3)$$

$$\sigma_2(\beta) = \exp \left[ \frac{ZN_{ion}}{V} \int_0^\beta \sum_{\vec{q}}' \sum_k w_k(\vec{q}) S_k(\vec{q}) \rho_k(\vec{q} | \beta') d\beta' \right]. \quad (4)$$

У виразах (3) та (4) величини  $v_k(\vec{q})$  та  $w_k(\vec{q})$  відповідно є фур'є-образи потенціалів міжелектронної й електрон-іонної взаємодії, які визначають так

$$\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}, k} v_k(\vec{q}) \exp \left[ i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{\parallel i} - \vec{r}_{\parallel j}) + ik(z_i - z_j) \right], \quad \vec{r}_{\parallel i} = (x_i, y_i),$$

$$Ze^2 w(\vec{r}_i - \vec{R}_j) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}, k} w_k(\vec{q}) \exp \left[ i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{\parallel i} - \vec{R}_{\parallel j}) + ik(z_i - Z_j) \right], \quad \vec{R}_{\parallel j} = (X_j, Y_j),$$

$S_k(\vec{q}) = \frac{1}{N_{ion}} \sum_{j=1}^{N_{ion}} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\parallel j} - ikZ_j)$  — структурний фактор іонної ґратки,

$\rho_k(\vec{q} | \beta) = \exp(\beta H_0) \rho_k(\vec{q}) \exp(-\beta H_0)$ , де  $\rho_k(\vec{q})$  — оператори флуктуації елект-

ронної густини, означені в [3],  $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i)$  — оператор Гамільтона.

Після простих перетворень вираз (2) із використанням формул (3) та (4) можна записати так

$$\frac{F_1(\vec{r}_1)}{V} = \frac{F_1^{jell}(\vec{r}_1)}{V} \frac{\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}^{(1)}}{\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}},$$

де  $F_1^{jell}(\vec{r}_1)$  — одночастинкова функція розподілу електронів у моделі «напів-обмеженого желе» [6],

$$\frac{F_1^{jell}(\vec{r}_1)}{V} = \frac{Sp_1 \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \right]}{Sp \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \right]},$$

$$\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}^{(1)} = \frac{Sp_1 \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \sigma_2(\beta) \right]}{Sp_1 \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \right]},$$

$$\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell} = \frac{Sp \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \sigma_2(\beta) \right]}{Sp \left[ \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) T \sigma_1(\beta) \right]}.$$

Розрахунок  $\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}$  проведено у праці [2], де показано, що

$$\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell} = \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\beta N_{ion}}{V} \right)^n \frac{i^n}{n!} \sum_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} S_{k_1}(\vec{q}_1) \dots S_{k_n}(\vec{q}_n) \times \right. \\ \left. \times w_{k_1}(\vec{q}_1) \dots w_{k_n}(\vec{q}_n) \bar{M}_{k_1, \dots, k_n}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) \right]. \quad (5)$$

Тут  $\bar{M}_{k_1, \dots, k_n}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) = i^n \langle \rho_{k_1}(\vec{q}_1 | 0) \dots \rho_{k_n}(\vec{q}_n | 0) \rangle_{jell, c}$  — незвідне середнє (кумулянт)  $n$ -го порядку,

$$\rho_k(\vec{q} | 0) = \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} \rho_k(\vec{q} | \beta') d\beta'.$$

Аналогічно (використовуючи методу праці [2]) можна розрахувати  $\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}^{(1)}$

$$\langle \sigma_2(\beta) \rangle_{jell}^{(1)} = \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\beta N_{ion}}{V} \right)^n \frac{i^n}{n!} \sum_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} S_{k_1}(\vec{q}_1) \dots S_{k_n}(\vec{q}_n) \times \right. \\ \left. \times w_{k_1}(\vec{q}_1) \dots w_{k_n}(\vec{q}_n) \bar{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(1)}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) \right], \quad (6)$$

де  $\bar{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(1)}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) = i^n \langle \rho_{k_1}(\vec{q}_1 | 0) \dots \rho_{k_n}(\vec{q}_n | 0) \rangle_{jell, c}^{(1)}$  — незвідне середнє (кумулянт)  $n$ -ого порядку за умови, що один електрон є видалений.

Використовуючи формули (5) і (6), одночастинкову функцію розподілу  $F_1(\vec{r})$  можна записати в такому вигляді

$$F_1(\vec{r}) = F_1^{jell}(\vec{r}) \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\beta N_{ion}}{V} \right)^n \frac{i^n}{n!} \sum_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} S_{k_1}(\vec{q}_1) \dots S_{k_n}(\vec{q}_n) \times \right. \\ \left. \times \bar{w}_{k_1}(\vec{q}_1) \dots \bar{w}_{k_n}(\vec{q}_n) \left\{ M_{k_n}^{(1)}(\vec{q}_1) \right\}^{-1} \dots \left\{ M_{k_n}^{(1)}(\vec{q}_n) \right\}^{-1} \Delta \bar{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(1)}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n) \right]. \quad (7)$$

Тут  $\Delta \bar{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(1)}(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n) = \bar{M}_{k_1, \dots, k_n}^{(1)}(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n) - M_{k_1, \dots, k_n}(\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_n)$ ,  $\bar{w}_{k_1}(\bar{q}_1) = w_{k_1}(\bar{q}_1) \times M_{k_1}^{(1)}(\bar{q}_1)$  — екранований псевдопотенціал електрон-іонної взаємодії. Зауважи-мо, що для металевих тіл:  $\xi = \sup_{k_1, \bar{q}_1} |\bar{w}_{k_1}(\bar{q}_1) / \varepsilon_F^{jell}| \ll 1$ , де  $\varepsilon_F^{jell}$  — енергія Фермі моделі «напівобмеженого желе». Це дозволяє під час числових розрахунків розвивати відповідну теорію збурень за параметром  $\xi$ .

### 3. Числові розрахунки електронної густини

Електронна густина  $\rho(\bar{r})$  є пов'язана з одностинковою функцією розподілу Боголюбова  $F_1(\bar{r})$  таким співвідношенням

$$\rho(\bar{r}) = \frac{N}{V} F_1(\bar{r}).$$

Використовуючи (7), у лінійному наближенні за параметром  $\xi$  для  $\rho(\bar{r})$  отримуємо

$$\rho(\bar{r}) = \rho^{jell}(z) \exp \left[ -\frac{\beta}{VN} \frac{1}{F_1^{jell}(z)} \sum_{j=1}^{N_{ion}} \sum_{\bar{q}} \exp(i\bar{q}(\bar{r}_{\parallel} - \bar{R}_{\parallel j})) \times \int_{-\infty}^{+\infty} w(\bar{q} | Z_j - z') \bar{M}(\bar{q} | z, z') dz' \right].$$

Тут  $\bar{M}(\bar{q} | z, z')$  — двочастинкова кореляційна функція «густина-густина» [9], яка є розв'язком такого інтегрального рівняння

$$\bar{M}(\bar{q} | z_1, z_2) = M^0(\bar{q} | z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} M^0(\bar{q} | z_1, z) v(\bar{q} | z - z') \bar{M}(\bar{q} | z', z_2) dz',$$

де  $v(\bar{q} | z) = 2\pi e^2 \exp(-\bar{q} | z|) / q$  — двовимірний фур'є-образ кулонівського потенціалу,

$$w(\bar{q} | z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\bar{q}\bar{r}) w(\bar{r}) d\bar{r},$$

$$M^0(\bar{q} | z_1, z_2) = \sum_{k_1} \sum_{k_2} \exp[i(k_1 z_1 + k_2 z_2)] \times Sp \left[ \rho_{k_1}(\bar{q} | 0) \rho_{k_2}(-\bar{q} | 0) \exp(-\beta(H_0 - \mu N)) \right]$$

— двочастинкова кореляційна функція в наближенні ідеального обміну, для розрахунку якої використані вирази для моделі поверхневого потенціалу  $V(\bar{r})$  (модель «нескінченної стінки») [3]

$$V(\vec{r}) \equiv V(z) = \begin{cases} \infty, & z > 0, \\ 0, & z \leq 0. \end{cases}$$

У числових розрахунках електрон-іонний псевдопотенціал  $w(\vec{r} - \vec{R})$  було змодельовано у двох варіантах: локальним псевдопотенціалом Краско-Гурського [10, 11]

$$w(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{ra}{r_c}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_c}\right) \quad (8)$$

та псевдопотенціалом [12]

$$w(r) = -\frac{Ze^2}{R} \left\{ \frac{R}{r} \left[ 1 - \left(1 + \beta \frac{r}{R}\right) \exp\left(-\alpha \frac{r}{R}\right) \right] - A \exp\left(-\frac{r}{R}\right) \right\}, \quad (9)$$

де  $\beta = (\alpha^3 - 2\alpha) / [4(\alpha^2 - 1)]$ ,  $A = \alpha^2/2 - \alpha\beta$ .

Числові розрахунки електронної густини проводили для ряду металів — калію, натрію та алюмінію — з використанням значень параметрів локальних псевдопотенціалів, які подані у таблиці.

Таблиця

Метал	Грань	Валентність Z	$r_s, a_B$	Псевдопотенціал Краско-Гурського [11]		Псевдопотенціал [12]	
				$a$	$r_s, a_B$	$a$	$R, a_B$
Калій	110	1	4,86	2,671	0,689	2,086	0,745
Натрій	110	1	3,93	3,362	0,487	3,074	0,528
Алюміній	100	3	2,07	3,61085	0,514	3,633	0,334

На рис. 1 подано переріз електронної густини  $\rho(\vec{r})$  калію для  $y = 0$ . Праворуч відображено результати обчислень розподілу електронної густини з використанням

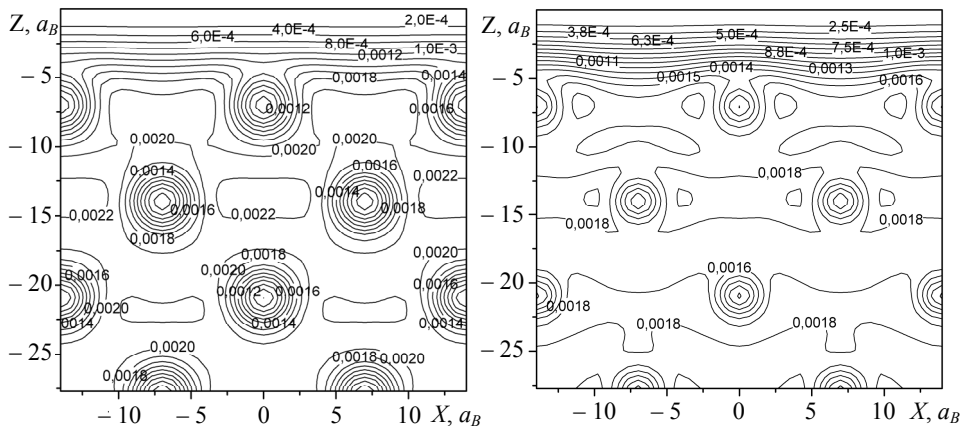


Рис. 1. Переріз електронної густини калію





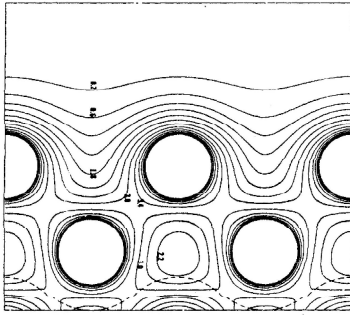


Рис. 4. Переріз електронної густини для алюмінію згідно J. E. Inglesfield, G. A. Benesh [4]

псевдопотенціалу [12]. Останній іонний шар знаходиться в т.  $z = -d/2$ , де  $d$  — період ґратки,  $d = 7,6559a_B$ .

На рис. 4 подано переріз електронної густини  $\rho(\vec{r})$  алюмінію для  $y = 3,8280a_B$ , який отримано у праці [4] (зауважимо, що електронна густина не є нормована).

**Висновки.** Як видно з рис. 1-3 результати числових розрахунків електронної густини для модельних псевдопотенціалів Краско-Гурського [10, 11] і псевдопотенціалу [12] якісно відрізняються в області між іонами ґратки. Це слід було очікувати, аналізуючи вирази (8) і (9) для цих моделей. Модель [12] на відміну від моделі Краско-Гурського дозволяє якісно враховувати відмінність електронної структури іона ґратки від воднево-подібної [10, 11], що особливо важливо для металів, для яких заряд  $Z$  іона ґратки задовольняє умову  $Z > 1$ .

Для обох моделей електрон-іонної взаємодії результати числового розрахунку електронної густини показують, що вплив поверхні поділу «метал-вакуум» стає нехтовно малим для віддалей від поверхні поділу (в глибину металевого тіла), які перевищують  $1,5d$ , де  $d$  — період іонної ґратки металевого тіла.

Порівняння проведених розрахунків електронної густини алюмінію (див. рис. 3) з результатами розрахунків [4] (рис. 4) показує, що врахування міжелектронної взаємодії призводить до якісної зміни поведінки електронної густини в міжіонній області (появляються «острівки» зміни концентрацій). Такі «острівки» відсутні в розрахунках [4], де ефектами міжелектронної взаємодії знехтували. Ці ефекти міжелектронної взаємодії помітно проявляються для алюмінію, де концентрація вільних електронів є більша, ніж у натрію та калію. Наявність поверхні поділу згладжує поведінку електронної густини, що і фізично зрозуміло: біля поверхні концентрація електронів є нижча, що призводить до зменшення впливу електронних кореляцій.

Отримані результати для електронної густини  $\rho(\vec{r})$  є важливі для побудови мапи розподілу електростатичного потенціалу поверхні металевого тіла та розрахунку розподілу електричного поля біля поверхні.

## Література

- [1] Lang, N. D. Theory of metal surfaces: charge density and surface energy / N. D. Lang, W. Kohn // Phys. Rev. B. — 1970. — Vol. 1, No 12. — P. 4555-4567.
- [2] Костробій, П. П. Ефективний потенціал парної міжіонної взаємодії для напівобмеженого металу / П. П. Костробій, Б. М. Маркович, О. З. Казановська. — Львів: 2006. — 22 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-16U).
- [3] Костробій, П. П. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали / П. П. Костробій, Б. М. Маркович // Журн. фіз. досл. — 2003. — Т. 7, № 2. — С. 195-206.

- [4] *Inglesfield, J. E.* Surface electronic structure: Embedded self-consistent calculations / *J. E. Inglesfield, G. A. Benesh* // *Phys. Rev. B.* — 1988. — Vol. 37, No 12. — P. 6682-6700.
- [5] *Kostrobij, P. P.* A new approach to calculate the thermodynamic potential of an inhomogeneous electron gas / *P. P. Kostrobij, B. M. Markovych* // *Condens. Matter Phys.* — 2003. — Vol. 6, No 2(34). — P. 347-362.
- [6] *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.
- [7] *Боголюбов, Н. Н.* Избранные труды. Т. 2 / *Н. Н. Боголюбов.* — Київ: Наук. думка, 1970. — 522 с.
- [8] *Костробій, П. П.* Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція напівобмеженого електронного газу / *П. П. Костробій, Б. М. Маркович.* — Львів: 2006. — 18 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-05U).
- [9] *Костробій, П. П.* Двочастинкова кореляційна функція «густина–густина» напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле / *П. П. Костробій, Б. М. Маркович, О. З. Казановська.* — Львів: 2006. — 15 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-15U).
- [10] *Краско, Г. Л.* Об одном модельном псевдопотенциале / *Г. Л. Краско, З. А. Гурский* // *Письма в ЖЭТФ.* — 1969. — Т. 9, № 10. — С. 596-599.
- [11] *Краско, Г. Л.* Модельный псевдопотенциал и некоторые атомные свойства щелочных и щелочноземельных металлов / *Г. Л. Краско, З. А. Гурский* // *ДАН СССР.* — 1971. — Т. 197, № 4. — С. 810-813.
- [12] *Dominant density parameters and local pseudopotentials for simple metals* / *C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster et al* // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, No 20. — P. 14001.

## **Investigation of electron density for simple metals with the «metal-vacuum» interface**

Petro Kostrobij, Bogdan Markovych, Olga Kazanovska

*An approach for the account of the influence of ionic subsystem of the semi-infinite metal body on characteristics of non-uniform electronic gas is presented. Using the theory of perturbations a general expression for the one-particle electron distribution function of the semi-infinite metal body is obtained by the pseudopotential of electron-ion interaction. Calculation of the electron density distribution for a series of simple metals is done and the influence of the metal surface on it is investigated.*

## **Исследование электронной плотности простых металлов при наличии поверхности раздела «металл-вакуум»**

Петр Костробий, Богдан Маркович, Ольга Казановская

*Предложена модель для учета влияния дискретности ионной подсистемы полуограниченного металлического тела на характеристики неоднородного электронного газа. Используя теорию возмущений по псевдопотенциалу электрон-ионного взаимодействия, получено общее выражение для одночастичной функции распределения электронов в полуограниченном металлическом теле. Проведен расчет распределения электронной плотности для ряда простых металлов и исследовано влияние на него наличия поверхности металла.*

Отримано 17.11.09