

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Петро Петрович Костробій
Богдан Михайлович Маркович
Ольга Зіновіївна Казановська

ЕФЕКТИВНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ПАРНОЇ МІЖІОННОЇ
ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ НАПІВОВМЕЖЕНОГО МЕТАЛУ

Роботу отримано 29 вересня 2006 р.

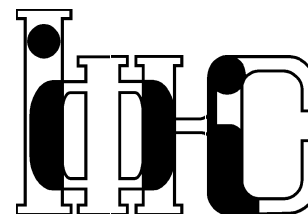
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-06-16U

П. П. Костробій*, Б. М. Маркович*, О. З. Казановська*

ЕФЕКТИВНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ПАРНОЇ МІЖІОННОЇ
ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ НАПІВОВМЕЖЕНОГО МЕТАЛУ

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

ЛЬВІВ

УДК: 530.145

PACS: 71.45.Gm, 71.10.-w, 73.20.-r

Ефективний потенціал парної міжіонної взаємодії для напівобмеженого металу

П. П. Костробій, Б. М. Маркович, О. З. Казановська

Анотація. Запропоновано підхід для врахування впливу дискретності іонної підсистеми напівобмеженого металу на характеристики неоднорідного електронного газу, в основу якого покладено теорію збурень по псевдопотенціалу електрон-іонної взаємодії. Проведено розрахунок ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії та досліджено вплив наявності поверхні металу на нього.

An effective interionic potential for a semi-infinite metal

P. P. Kostrobij, B. M. Markovych, O. Z. Kazanovska

Abstract. An approach for the account of influence of an ionic subsystem of the semi-infinite metal on characteristics of a non-uniform electronic gas is presented. In a basis of this approach there is a perturbation theory on an electron-ionic pseudopotential. Calculation of the effective interionic potential is made and influence of a surface of the semi-infinite metal on it is investigated.

Подається в Condens. Matter Phys.

Submitted to Condens. Matter Phys.

1. Вступ

Значний прогрес в розвитку експериментальних методів досліджень електронних властивостей поверхонь металів викликав потребу до розробки нових теоретичних моделей для розуміння суті явищ і процесів, що проходять на межі розділу “метал–газ”. Історично першою та найбільш вживаною теоретичною моделлю для опису електронних властивостей поверхонь простих (з $s-p$ зв’язками) металів став метод функціоналу густини (DFT) [1, 2] і його модифікації (метод стабілізованого желе) [3]. Ці моделі достатньо добре описують основні (одночастинкові) властивості неоднорідного електронного газу і не враховують як вплив іонної ґратки металу, так і вплив багаточастинкових ефектів в неоднорідному електронному газі. Вплив дискретності іонної густини на характеристики напівобмеженого “желе” шляхом побудови теорії збурень по псевдопотенціалу електрон-іонної взаємодії був зроблений в роботах [1, 2, 4, 5], в яких однак лінійний відгук електронної густини на ґратковий потенціал не враховував ефекти неоднорідності електронної підсистеми.

В даній роботі шляхом узагальнення квантово-статистичного підходу до опису властивостей напівобмеженого “желе” [9–13] пропонується новий підхід до розрахунку впливу дискретності іонної підсистеми на характеристики неоднорідного електронного газу, в основу якого покладено теорію збурень по псевдопотенціалу електрон-іонної взаємодії з врахуванням неоднорідності електронної підсистеми. Для ілюстрації ефективності запропонованого підходу проведено розрахунки ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії та досліджено вплив наявності поверхні металу на нього. Показано, що ефективна міжіонна взаємодія в приповерхневих шарах різко відрізняється від такої взаємодії в глибині металу.

2. Постановка задачі

Розглядаємо напівобмежений метал, іони якого мають заряд Ze та координати \mathbf{R}_j ($-\infty < X_j, Y_j < +\infty$, $Z_j \leq z_0$, $Z_0 = \text{const}$, $z = Z_0$ — площина поділу), $j = 1, \dots, N_{\text{іон}}$. Вважаємо, що іони є нерухомими. У полі іонів знаходяться електрони з координатами \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$. Тоді гамільтоніан такої системи записується так:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \frac{(\mathcal{Z}e)^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N_{\text{ion}}} e w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j), \quad (2.1)$$

де перші два доданки представляють відповідно кінетичну енергію електронів та потенціальну енергію міжелектронної взаємодії, третій доданок — потенціальна енергія міжіонної взаємодії, а останній — енергія електрон-іонної взаємодії. Вважаємо, що система є електронейтральною, тобто

$$\mathcal{Z}N_{\text{ion}} = N. \quad (2.2)$$

Виділимо з гамільтоніану (2.1) гамільтоніан моделі “желе” H_{jell} , яка досліджувалася у працях [9–11]. Цю модель напівобмеженого металу будемо використовувати як базову при розгляді термодинамічних та структурних характеристик напівобмеженого металу. У результаті отримуємо

$$H = H_{\text{jell}} + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{ion}}} e w_{\text{ps}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) + \int d\mathbf{R} \frac{e \rho_{\text{jell}}(\mathbf{R})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \right) + \sum_{i=1}^N V_{\text{ion}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \frac{(\mathcal{Z}e)^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}, \quad (2.3)$$

де

$$H_{\text{jell}} = H_{\text{jell}}^{\text{unif}} + \sum_{i=1}^N V_{\text{jell}}(\mathbf{r}_i), \quad (2.4)$$

$$H_{\text{jell}}^{\text{unif}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} - \frac{e^2 N}{V} \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{R} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \quad (2.5)$$

— гамільтоніан однорідного “желе”, $V = SL$ — об’єм системи, S — площа поверхні напівобмеженого металу, L визначає область зміни нормальної до поверхні металу координати електрона: $z \in (-L/2, +L/2)$, $S \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$,

$$V_{\text{jell}}(\mathbf{r}_i) = e \int d\mathbf{R} \frac{eN/V - \rho_{\text{jell}}(\mathbf{R})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \quad (2.6)$$

— частина поверхневого потенціалу, який формується напівобмеженим “желе”.

Потенціал електрон-іонної взаємодії представимо так:

$$w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = w_{\text{ps}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) + \Delta w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j), \quad (2.7)$$

де $w_{\text{ps}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ — періодичний потенціал електрон-іонної взаємодії у випадку необмеженого металу (псевдопотенціал), $\Delta w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ — відхилення потенціалу електрон-іонної взаємодії напівобмеженого металу від періодичного. Тоді

$$V_{\text{ion}}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j=1}^{N_{\text{ion}}} e \Delta w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \quad (2.8)$$

— частина поверхневого потенціалу, який створюється відхиленням $\Delta w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ справжнього потенціалу електрон-іонної взаємодії напівобмеженого металу $w(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$ від такого, що є у необмеженому металі,

$$\rho_{\text{jell}}(\mathbf{R}) \equiv \rho_{\text{jell}}(Z) = \rho_0 \theta(-d - Z), \quad \rho_0 = \frac{eN}{SL/2} \quad (2.9)$$

— розподіл іонної густини в моделі “желе” напівобмеженого металу, параметр d визначається умовою електронейтральності.

Отже, гамільтоніан задачі можна представити так:

$$H = H_{\text{jell}}^{\text{unif}} + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^{N_{\text{ion}}} e w_{\text{ps}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) + \int d\mathbf{R} \frac{e \rho_{\text{jell}}(\mathbf{R})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \right) + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \frac{(\mathcal{Z}e)^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{R}' \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}, \quad (2.10)$$

де

$$V(\mathbf{r}_i) = V_{\text{jell}}(\mathbf{r}_i) + V_{\text{ion}}(\mathbf{r}_i) \quad (2.11)$$

— сумарний поверхневий потенціал, в якому знаходяться електрони.

Потенціал електрон-іонної взаємодії будемо моделювати нелокальним модельним псевдопотенціалом

$$w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) = -\frac{\mathcal{Z}e}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} + \sum_l f_l(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) P_l, \quad (2.12)$$

де

$$P_l = \sum_{m=-l}^m |Y_{l,m}\rangle \langle Y_{l,m}| \equiv \sum_{m=-l}^m |l, m\rangle \langle l, m| \quad (2.13)$$

— проєкційний оператор, причому

$$\sum_l P_l = 1, \quad (2.14)$$

l та m — орбітальне та магнітне квантові числа відповідно. Явний вигляд функцій $f_l(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ залежить від вибраного модельного псевдопотенціалу.

Будемо вважати, що поверхневий потенціал $V(\mathbf{r})$ є функцією лише нормальної до площини поділу координати електрона

$$V(\mathbf{r}) = V(z).$$

Тоді у представленні вторинного квантування, яке побудоване на хвильових функціях

$$\Psi_{\mathbf{p},\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{||}} \varphi_{\alpha}(z), \quad \mathbf{r} = (\mathbf{r}_{||}, z),$$

де $\varphi_{\alpha}(z)$ та ε_{α} — власні функції та власні значення рівняння Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \varphi_{\alpha}(z) = \varepsilon_{\alpha} \varphi_{\alpha}(z),$$

гамільтоніан (2.10) можна записати так:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{p},\alpha} E_{\alpha}(\mathbf{p}) a_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha}(\mathbf{p}) + \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}) \\ & - \frac{Z N_{\text{ion}}}{SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) + \frac{e N_{\text{ion}}}{SL} \sum_{\mathbf{q},k} S_k(\mathbf{q}) \sum_l f_k^l(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}) \\ & - \frac{N}{2S} \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}}' Z^2 \nu(\mathbf{q}|Z_i - Z_j) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{||i} - \mathbf{R}_{||j})}, \quad (2.15) \end{aligned}$$

де штрих біля суми означає відсутність за рахунок умови електро-нейтральності (2.2) доданків з $\mathbf{q} = 0$, $\nu_k(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / (q^2 + k^2)$ та $f_k^l(\mathbf{q})$ — тривимірні фур'є-образи кулонівського потенціалу та нелокальної частини псевдопотенціалу (2.12):

$$\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \frac{1}{SL} \sum_{\mathbf{q},k} \nu_k(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||i} - \mathbf{r}_{||j}) + ik(z_i - z_j)},$$

$$f_l(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{SL} \sum_{\mathbf{q},k} f_k^l(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{||i} - \mathbf{R}_{||j}) + ik(z_i - Z_j)}, \quad \mathbf{R}_{||j} = (X_j, Y_j),$$

$\nu(\mathbf{q}|z) = 2\pi e^2 e^{-q|z|} / q$ — двовимірний фур'є-образ кулонівського потенціалу:

$$\frac{e^2}{r} = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} \nu(\mathbf{q}|z) e^{-\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}},$$

$E_{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \varepsilon_{\alpha}$ — енергія електрона в стані (\mathbf{p}, α) ,

$$S_k(\mathbf{q}) = \frac{1}{N_{\text{ion}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{ion}}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{||j} - ikZ_j} \quad (2.16)$$

— структурний фактор,

$$\rho_k(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p},\alpha_1,\alpha_2} \langle \alpha_1 | e^{ikz} | \alpha_2 \rangle a_{\alpha_1}^{\dagger}(\mathbf{p}) a_{\alpha_2}(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \quad (2.17)$$

$$\tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}) = \sum_m \sum_{\mathbf{p}_1,\alpha_1} \sum_{\mathbf{p}_2,\alpha_2} \langle \mathbf{p}_1, \alpha_1 | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||} + ikz} | l, m \rangle \langle l, m | \mathbf{p}_2, \alpha_2 \rangle a_{\alpha_1}^{\dagger}(\mathbf{p}_1) a_{\alpha_2}(\mathbf{p}_2), \quad (2.18)$$

$$\langle \alpha_1 | \dots | \alpha_2 \rangle = \int dz \varphi_{\alpha_1}^*(z) \dots \varphi_{\alpha_2}(z),$$

$$\langle l, m | \dots | \mathbf{p}_2, \alpha_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} \int d\mathbf{r}_{||} \int dz Y_{l,m}(\theta, \phi) \dots e^{i\mathbf{p}_2 \mathbf{r}_{||}} \varphi_{\alpha_2}(z).$$

3. Велика статистична сума

Розглянемо велику статистичну суму напівобмеженого металу

$$\Xi = \text{Sp} e^{-\beta(H - \mu N)}, \quad (3.1)$$

де μ — хімічний потенціал електронної підсистеми. Враховуючи (2.15), отримаємо

$$\Xi = C e^{-\beta H_{\text{ii}}} \text{Sp} e^{-\beta H_0' - \beta H_{\text{ee}} - \beta H_{\text{ei}}}, \quad (3.2)$$

де

$$C = \exp \left(\beta \frac{N}{2S} \sum_{\mathbf{q}}' \nu(\mathbf{q}|0) \right),$$

$$H_{\text{ii}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}}' Z^2 \nu(\mathbf{q}|Z_i - Z_j) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{||i} - \mathbf{R}_{||j})},$$

$$\begin{aligned}
H'_0 &= \sum_{\mathbf{p}, \alpha} (E_\alpha(\mathbf{p}) - \mu) a_\alpha^\dagger(\mathbf{p}) a_\alpha(\mathbf{p}), \\
H_{ee} &= \frac{1}{2SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \rho_{-k}(-\mathbf{q}), \\
H_{ei} &= -\frac{ZN_{\text{ion}}}{SL} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}) \\
&\quad + \frac{eN_{\text{ion}}}{SL} \sum_{\mathbf{q}, k} S_k(\mathbf{q}) \sum_l f_k^l(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}). \tag{3.3}
\end{aligned}$$

Перейшовши до представлення взаємодії, велику статистичну суму запишемо так:

$$\Xi = C e^{-\beta H_{ii}} \Xi_0 \langle TS(\beta) \rangle_0, \tag{3.4}$$

де

$$\Xi_0 = \text{Sp} e^{-\beta H'_0}, \quad \langle \dots \rangle_0 = \frac{1}{\Xi_0} \text{Sp} (e^{-\beta H'_0} \dots), \tag{3.5}$$

$$S(\beta) = S_1(\beta) S_2(\beta),$$

$$S_1(\beta) = \exp \left[-\frac{1}{2SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \rho_{-k}(-\mathbf{q}|\beta') \right], \tag{3.6}$$

$$\begin{aligned}
S_2(\beta) &= \exp \left[\frac{ZN_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}}' \sum_k \nu_k(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \right. \\
&\quad \left. - \frac{eN_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}, k} \sum_l S_k(\mathbf{q}) f_k^l(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') \right], \tag{3.7}
\end{aligned}$$

$$\rho_k(\mathbf{q}|\beta') = e^{\beta' H'_0} \rho_k(\mathbf{q}) e^{-\beta' H'_0}, \quad \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') = e^{\beta' H'_0} \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}) e^{-\beta' H'_0}.$$

Враховуючи, що згідно з умовою (2.14)

$$\sum_l \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') = \rho_k(\mathbf{q}|\beta'),$$

вираз (3.7) можна представити так:

$$\begin{aligned}
S_2(\beta) &= \exp \left[-\frac{N_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}, k, l} w_k^l(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') \right. \\
&\quad \left. - \frac{ZN_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{k, l} \nu_k(0) S_k(0) \rho_k(0|\beta') \right], \tag{3.8}
\end{aligned}$$

де $w_k^l(\mathbf{q}) = -Z\nu_k(\mathbf{q}) + e f_k^l(\mathbf{q})$.

Оскільки

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = \frac{S}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} \dots,$$

то перший доданок в (3.8) пропорційний до S^0 , а другий — $1/S$. Внаслідок цього при $S \rightarrow \infty$ другий доданок зникає, у результаті отримуємо

$$S_2(\beta) = \exp \left[-\frac{N_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}, k, l} w_k^l(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') \right]. \tag{3.9}$$

Виділимо в (3.4) гамільтоніан напівобмеженого металу в моделі “желе”, характеристики якого досліджено в [9], тоді велику статистичну суму (3.4) можна представити через середнє по виділеному гамільтоніану:

$$\Xi = C e^{-\beta H_{ii}} \Xi_{\text{jell}} \langle S_2(\beta) \rangle_{\text{jell}}, \tag{3.10}$$

де

$$\Xi_{\text{jell}} = \text{Sp} \left(e^{-\beta H'_0} T S_1(\beta) \right),$$

$$\langle \dots \rangle_{\text{jell}} = \frac{1}{\Xi_{\text{jell}}} \text{Sp} \left(e^{-\beta H'_0} T S_1(\beta) \dots \right). \tag{3.11}$$

Перейшовши від температурного представлення до частотного згідно з правилом ($A = \{\rho, \tilde{\rho}^l\}$):

$$A_k(\mathbf{q}|\nu) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\beta' e^{i\nu\beta'} A_k(\mathbf{q}|\beta'),$$

$$A_k(\mathbf{q}|\beta') = \sum_{\nu} e^{-i\nu\beta'} A_k(\mathbf{q}|\nu),$$

де ν — бозівська частота, отримуємо

$$\langle S_2(\beta) \rangle_{\text{jell}} = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\beta N_{\text{ion}}}{SL} \right)^n \frac{i^n}{n!} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} \sum_{l_1, \dots, l_n} S_{k_1}(\mathbf{q}_1) \dots \right. \\ \left. \times S_{k_n}(\mathbf{q}_n) w_{k_1}^{l_1}(\mathbf{q}_1) \dots w_{k_n}^{l_n}(\mathbf{q}_n) \overline{\mathfrak{M}}_{k_1, \dots, k_n}^{l_1, \dots, l_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \right], \quad (3.12)$$

де

$$\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, \dots, k_n}^{l_1, \dots, l_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = i^n \left\langle \tilde{\rho}_{k_1}^{l_1}(\mathbf{q}_1|0) \dots \tilde{\rho}_{k_n}^{l_n}(\mathbf{q}_n|0) \right\rangle_{\text{jell}, c} \quad (3.13)$$

— незвідне середнє (кумулянт) n -го порядку.

У частковому випадку локального псевдопотенціалу $w(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ функція $f_i(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$ не залежить від орбітального квантового числа l :

$$f_i(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) \equiv f(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j).$$

Тоді, використавши умову (2.14), отримуємо

$$\sum_l w_k^l(\mathbf{q}) \tilde{\rho}_k^l(\mathbf{q}|\beta') = w_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta'),$$

де $f_k(\mathbf{q})$ — тривимірний фур'є-образ функції $f(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)$. Враховуючи це, $S_2(\beta)$ (3.9) запишеться так

$$S_2(\beta) = \exp \left[-\frac{N_{\text{ion}}}{SL} \int_0^\beta d\beta' \sum_{\mathbf{q}, k} w_k(\mathbf{q}) S_k(\mathbf{q}) \rho_k(\mathbf{q}|\beta') \right], \quad (3.14)$$

де $w_k(\mathbf{q})$ — фур'є-образ локального псевдопотенціалу

$$w_k(\mathbf{q}) = -Z\nu_k(\mathbf{q}) + ef_k(\mathbf{q}).$$

Усереднивши (3.14) по напівобмеженому “желе” згідно з (3.11), отримуємо

$$\langle S_2(\beta) \rangle_{\text{jell}} = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\beta N_{\text{ion}}}{SL} \right)^n \frac{i^n}{n!} \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} S_{k_1}(\mathbf{q}_1) w_{k_1}(\mathbf{q}_1) \dots \right. \\ \left. \times \dots S_{k_n}(\mathbf{q}_n) w_{k_n}(\mathbf{q}_n) \overline{\mathfrak{M}}_{k_1, \dots, k_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) \right], \quad (3.15)$$

де $\overline{\mathfrak{M}}_{k_1, \dots, k_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = i^n \langle \rho_{k_1}(\mathbf{q}_1|0) \dots \rho_{k_n}(\mathbf{q}_n|0) \rangle_{\text{jell}, c}$.

4. Ефективний потенціал міжйонної взаємодії

Велику статистичну суму Ξ (3.10) у випадку локального псевдопотенціалу можна представити так

$$\Xi = C \Xi_{\text{jell}} \exp \left[-\beta \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{\text{ion}}} \left(\frac{(Ze)^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} + v^{\text{ind}}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \right) \right. \\ \left. - \beta \sum_{n>2} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, \dots, i_n=1}^{N_{\text{ion}}} v(\mathbf{R}_{i_1}, \dots, \mathbf{R}_{i_n}) \right], \quad (4.1)$$

де

$$\sum_{i, j=1}^{N_{\text{ion}}} v^{\text{ind}}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = \left(\frac{N_{\text{ion}}}{SL} \right)^2 \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sum_{k_1, k_2} S_{k_1}(\mathbf{q}_1) S_{k_2}(\mathbf{q}_2) v_{k_1, k_2}^{\text{ind}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \quad (4.2)$$

$$v_{k_1, k_2}^{\text{ind}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = -\beta w_{k_1}(\mathbf{q}_1) w_{k_2}(\mathbf{q}_2) \overline{\mathfrak{M}}_{k_1, k_2}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \quad (4.3)$$

— фур'є-образ індукованого двочастинкового потенціалу міжйонної взаємодії, який спричинений непрямою взаємодією між іонами через електронну підсистему,

$$\sum_{i_1, \dots, i_n=1}^{N_{\text{ion}}} v(\mathbf{R}_{i_1}, \dots, \mathbf{R}_{i_n}) = \left(\frac{N_{\text{ion}}}{SL} \right)^n \\ \times \sum_{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n} \sum_{k_1, \dots, k_n} S_{k_1}(\mathbf{q}_1) \dots S_{k_n}(\mathbf{q}_n) v_{k_1, \dots, k_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \quad (4.4)$$

$$v_{k_1, \dots, k_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n) = -\beta^{n-1} i^n w_{k_1}(\mathbf{q}_1) \dots w_{k_n}(\mathbf{q}_n) \\ \times \overline{\mathfrak{M}}_{k_1, \dots, k_n}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n), \quad n > 2, \quad (4.5)$$

— фур'є-образ n -частинкового потенціалу міжйонної взаємодії.

Розглянемо ефективний двочастинковий потенціал міжйонної взаємодії

$$v(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{(Ze)^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} + v^{\text{ind}}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \quad (4.6)$$

в (\mathbf{q}, z) -представленні

$$v(\mathbf{q}|Z_1, Z_2) = Z^2 \nu(\mathbf{q}|Z_1 - Z_2) \\ + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int dz' w(\mathbf{q}|Z_1 - z) \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z, z') w(\mathbf{q}|z' - Z_2), \quad (4.7)$$

де використано властивість періодичності системи в площині XU ,

$$\overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2|z, z') = \sum_{k, k'} e^{ikz + ik'z'} \overline{\mathfrak{M}}_{k, k'}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2),$$

$$\overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2|z, z') \equiv \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}_1|z, z') \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0},$$

$w(\mathbf{q}|z)$ — двовимірний Фур'є-образ псевдопотенціалу:

$$w(\mathbf{q}|z) = \int d\mathbf{r}_{||} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{||}} w(\mathbf{r})$$

У праці [13] отримано інтегральне рівняння двочастинкової кореляційної функції $\overline{\mathfrak{M}}$ з врахуванням поправки на локальне поле

$$\begin{aligned} \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z_1, z_2) &= \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}|z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int dz' \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}|z_1, z) \\ &\times [\nu(\mathbf{q}|z - z') - \overline{\nu}(\mathbf{q}|z - z')] \overline{\mathfrak{M}}(\mathbf{q}|z', z_2), \end{aligned} \quad (4.8)$$

де

$$\overline{\nu}_k(\mathbf{q}) = G_k(\mathbf{q}) \nu_k(\mathbf{q}), \quad \overline{\nu}(\mathbf{q}|z - z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')} \overline{\nu}_k(\mathbf{q}).$$

Для двочастинкової кореляційної функції електронного газу в наближенні ідеального обміну \mathfrak{M}^0 в праці [12] отримано такий вираз:

$$\mathfrak{M}^0(\mathbf{q}|z_1, z_2) = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2), \quad (4.9)$$

де

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\mathbf{q}) &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \left[1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \right] \\ &\times \theta \left(1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \theta(p_F - \alpha_1), \end{aligned} \quad (4.10)$$

де $p_F = (9\pi/4)^{1/3}/r_S$ — імпульс Фермі, r_S — параметр Бракнера в одиницях радіуса Бора a_B ,

5. Результати чисельних розрахунків ефективного потенціалу парної міжіонної взаємодії

Для подальших чисельних розрахунків будемо використовувати для $G_k(\mathbf{q})$ апроксимацію у такому вигляді [6–8]:

$$G_k(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \frac{q^2 + k^2}{q^2 + k^2 + \xi p_F^2}, \quad (5.1)$$

тоді

$$\overline{\nu}(\mathbf{q}|z - z') = \frac{\pi e^2}{\sqrt{q^2 + \xi p_F^2}} \exp\left(-\sqrt{q^2 + \xi p_F^2} |z - z'|\right).$$

В якості поверхневого потенціалу будемо розглядати нескінченно високу потенціальну стінку. У цьому випадку власні функції та власні значення є такими:

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(-z), \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \alpha = \frac{2\pi k}{L}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

В якості модельного локального псевдопотенціалу візьмемо псевдопотенціал Краско-Гурського [15, 16]

$$w(r) = -\frac{\mathcal{Z}e^2}{r} + \frac{\mathcal{Z}e^2}{r} \left(1 + \frac{ra}{r_c}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_c}\right), \quad (5.3)$$

двовимірний фур'є-образ якого

$$\begin{aligned} w(\mathbf{q}|z) &= -\frac{2\pi \mathcal{Z}e^2}{q} \exp(-q|z|) + 2\pi \mathcal{Z}e^2 \\ &\times \left[\frac{a|z|}{1 + (qr_c)^2} + r_c \frac{1 + a + (qr_c)^2}{(1 + (qr_c)^2)^{3/2}} \right] \exp\left(-\sqrt{1 + (qr_c)^2} \frac{|z|}{r_c}\right). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Подальші чисельні розрахунки ефективного потенціалу міжіонної взаємодії проведено для калію. У цьому випадку параметри r_S , a та r_c є такими: $r_S = 4.86 a_B$, $a = 2.0333$, $r_c = 0.7777 a_B$, $\mathcal{Z} = 1$. На рис.1–рис.5 подано результати цих розрахунків. Суцільна лінія відповідає наближенню хаотичних фаз, тобто $G_k(\mathbf{q}) = 0$. Штрихова — наближення хаотичних фаз з використанням апроксимацій, які запропоновані у праці [12]; у цьому випадку двочастинкова кореляційна функція в наближенні ідеального обміну має такий простий вигляд:

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}^0(\mathbf{q}|z, z') &= -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{q} \left(e^{-q|z-z'|} - e^{-q|z+z'|} \right) \theta(-z) \theta(-z') \\ &\times \left[\frac{p_F \cos(p_F(z+z'))}{(z+z')^2} - \frac{p_F \cos(p_F(z-z'))}{(z-z')^2} \right. \\ &\left. + \frac{\sin(p_F(z-z'))}{(z-z')^3} - \frac{\sin(p_F(z+z'))}{(z+z')^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Проведено розрахунки $v(R_{||}, Z_1, Z_2)$ з використанням поправки на локальне поле (5.1): штрихпунктирна — $\xi = 1$ (аналог апроксимації Хаббарда для однорідного електронного газу), пунктирна

— $\xi = 2$ (аналог апроксимації Гелдарта та Воско для однорідного електронного газу), штрихдвопунктирна — $\xi = 1 + \frac{2}{\pi p_F a_B}$ (аналог апроксимації Анімалу для однорідного електронного газу), штрихова (з короткими штрихами) — $\xi = 1 + \frac{4}{\pi p_F a_B}$ (аналог апроксимації Шема для однорідного електронного газу).

На рис.1 та рис.2 подано ефективний потенціал міжіонної взаємодії

$$v(R_{||}, Z_1, Z_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dq q J_0(qR_{||}) v(q|Z_1, Z_2)$$

як функцію віддалі між іонами в площині поділу $R_{||}$ при однакових нормальних до площини поділу координатах іонів $Z_1 = Z_2$. При $Z_1 = Z_2 = -30 a_B$ ефективний потенціал має такий ж вигляд, як у випадку необмеженого металу. Тобто при таких нормальних іонних координатах обмеженість металу не впливає на ефективний потенціал міжіонної взаємодії. При використанні наближення хаотичних фаз спостерігається при $R_{||} \simeq 18 a_B$ потенціальна яма з дуже малою глибиною. Врахування поправок на локальне поле призводить до зсуву вліво потенціальної ями та до її поглиблення, у цьому випадку потенціальна яма знаходиться приблизно на віддалі постійної ґратки для калію. Наближення хаотичних фаз з використанням апроксимацій, які призводять до простого аналітичного виразу (5.5), дає фізично правильний результат — глибока потенціальна яма, яка знаходиться приблизно на віддалі постійної ґратки. При наближенні двох іонів до площини поділу спостерігається зменшення глибини потенціальної ями та зсув ями вправо (рис.1(нижній) та рис.2(верхній)). Це призводить до того, що рівноважна віддалі між іонами в площині поділу зростає. Це може призвести до перебудови ґратки у площині поділу біля поверхні. При подальшому наближенні двох іонів до площини поділу (рис.2(нижній)) потенціальна яма зникає, іони відштовхуються. Фізично така поведінка є зрозумілою, оскільки ефективне міжіонне притягання виникає за рахунок екранування електронами, які знаходяться між ними. Як відомо (див., наприклад, [11]), біля поверхні поділу електронна густина є меншою, ніж в глибині металу. При наближенні двох іонів до площини поділу між ними стає менше електронів, за рахунок яких відбувається ефективне притягання, і прямий відштовхувальний потенціал переважає над притягуючим.

На рис.3 — рис.5 подано ефективний потенціал міжіонної взаємодії як функцію координати одного з іонів (Z_1), тоді як координати

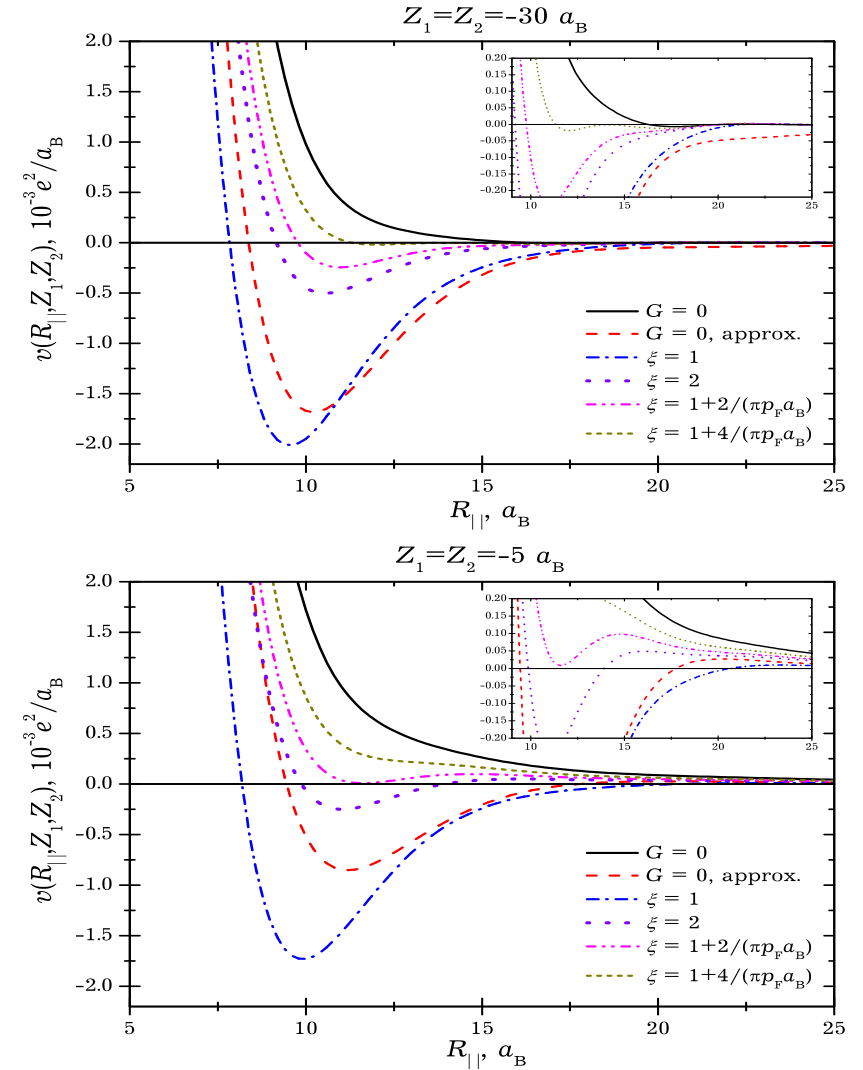


Рис. 1. Залежність ефективного потенціалу міжіонної взаємодії від відстані між іонами в площині поділу. Верхній рисунок — нормальні до площини поділу координати іонів рівні $-30 a_B$, нижній — нормальні до площини поділу координати іонів рівні $-5 a_B$.

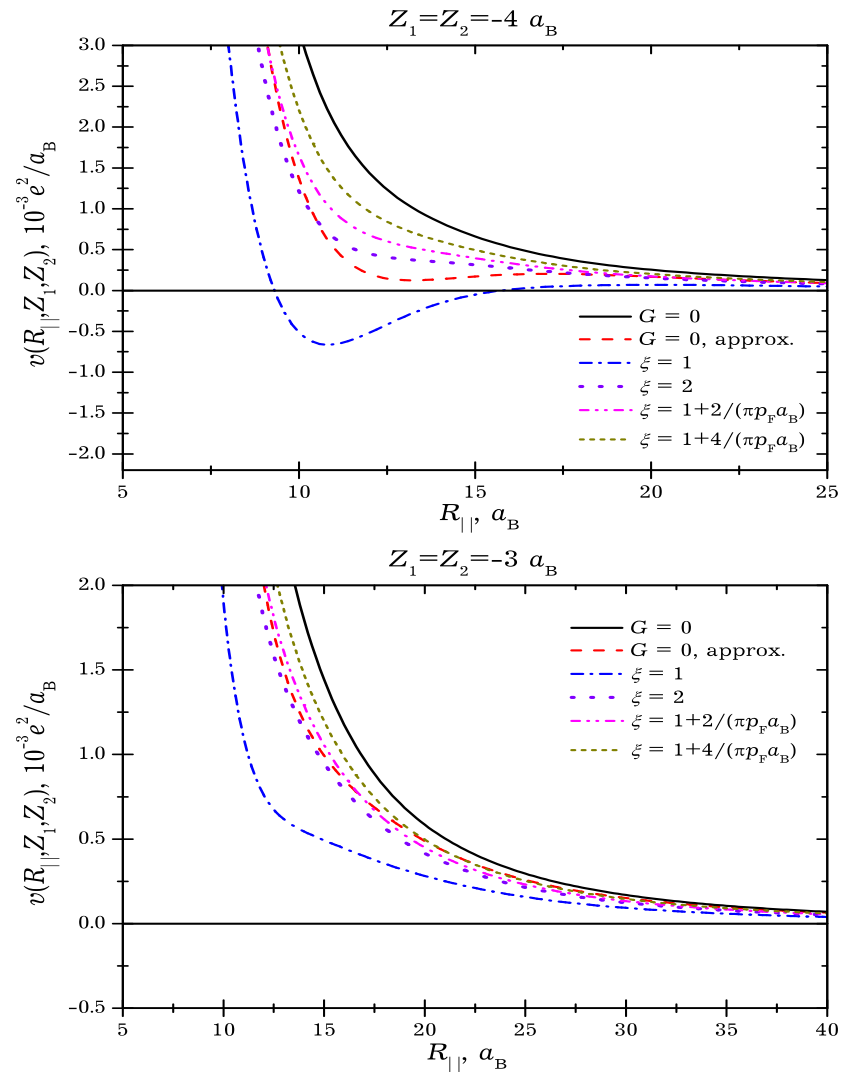


Рис. 2. Залежність ефективного потенціалу міжіонної взаємодії від відстані між іонами в площині поділу. Верхній рисунок — нормальній до площини поділу координати іонів рівні $-4 a_B$, нижній — нормальній до площини поділу координати іонів рівні $-3 a_B$.

ната іншого іона (Z_2) зафіксована, два іони знаходяться на одній нормальній до поверхні поділу прямій ($R_{||} = 0$). В глибині металу (рис.3(верхній)) ефективний потенціал міжіонної взаємодії є симетричним, глибина потенціальної ями та її положення таке ж, як і на рис.1(верхній), тобто ефективний потенціал в глибині металу має циліндричну симетрію. При наближенні до поверхні поділу одного з іонів (з координатою Z_2) спостерігається порушення симетричності потенціальних ям. Глибина потенціальної ями в області $Z_1 > Z_2$ спочатку зменшується (рис.3(нижній)), потім зростає (рис.4), а при подальшому наближенні до площини поділу — зникає (рис.5). Така поведінка ефективного потенціалу міжіонної взаємодії спричинена тим, що електронна густина є осцилюючою функцією нормальної до поверхні поділу координати, а біля поверхні поділу вона спадає до нуля. Внаслідок цього, якщо між іонами є мало електронів, то глибина ями зменшується, посилюється ефективне відштовхування (рис.3(нижній), рис.5). Якщо між іонами є надлишок електронів, то глибина ями збільшується, посилюється ефективне притягання (рис.4). Така поведінка ефективного потенціалу міжіонної взаємодії спричинює зміщення по нормалі приповерхневих іонних шарів.

На рис.6 та рис.7 подано ефективний потенціал міжіонної взаємодії як функцію координати одного з іонів (Z_1) та міжіонної віддалі в площині поділу ($R_{||}$), тоді як координата іншого іона (Z_2) зафіксована. Розрахунки проведено для випадку $\xi = 1$. З цих рисунків також видно порушення циліндричної симетрії при наближенні до поверхні поділу. При наближенні іона до поверхні поділу (рис.6(середній та нижній)) виникає найглибша потенціальна яма між зафіксованим іоном та площиною поділу. При подальшому наближенні (рис.7(верхній та середній)) ця яма зникає, утворюється дві симетричні відносно $R_{||} = 0$ ями з меншою глибиною. При $Z_2 = 0$ виникає одна потенціальна яма при $Z_2 = -9.4 a_B$ (рис.7(нижній)). З останнього рисунку видно, що міжіонна взаємодія для останніх шарів в площині поділу має відштовхувальний характер, а між шарами — притягальний. Така анізотропна поведінка ефективного потенціалу є причиною перебудови ґратки металу біля поверхні поділу.

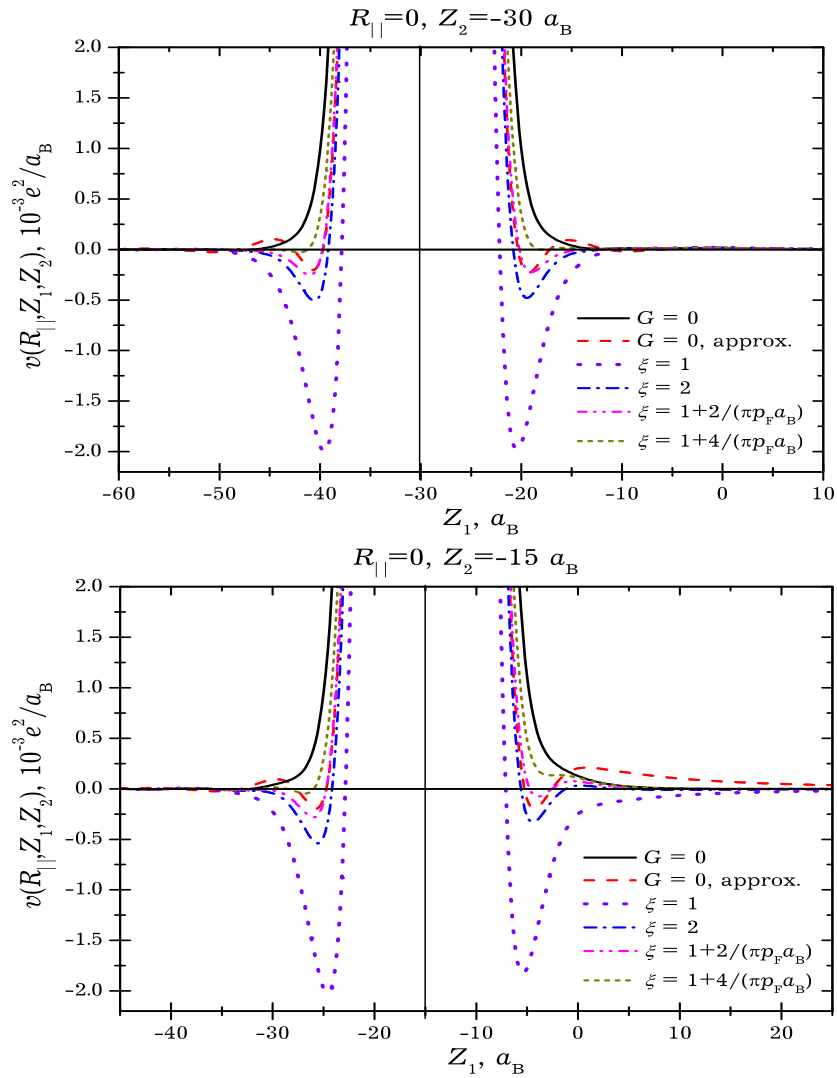


Рис. 3. Залежність ефективного потенціалу міжйонної взаємодії від відстані між іонами по нормалі до площини поділу ($R_{||} = 0$). Верхній рисунок — нормальна координата одного з іонів рівна $-30 a_B$, нижній — нормальна координата одного з іонів рівна $-15 a_B$.

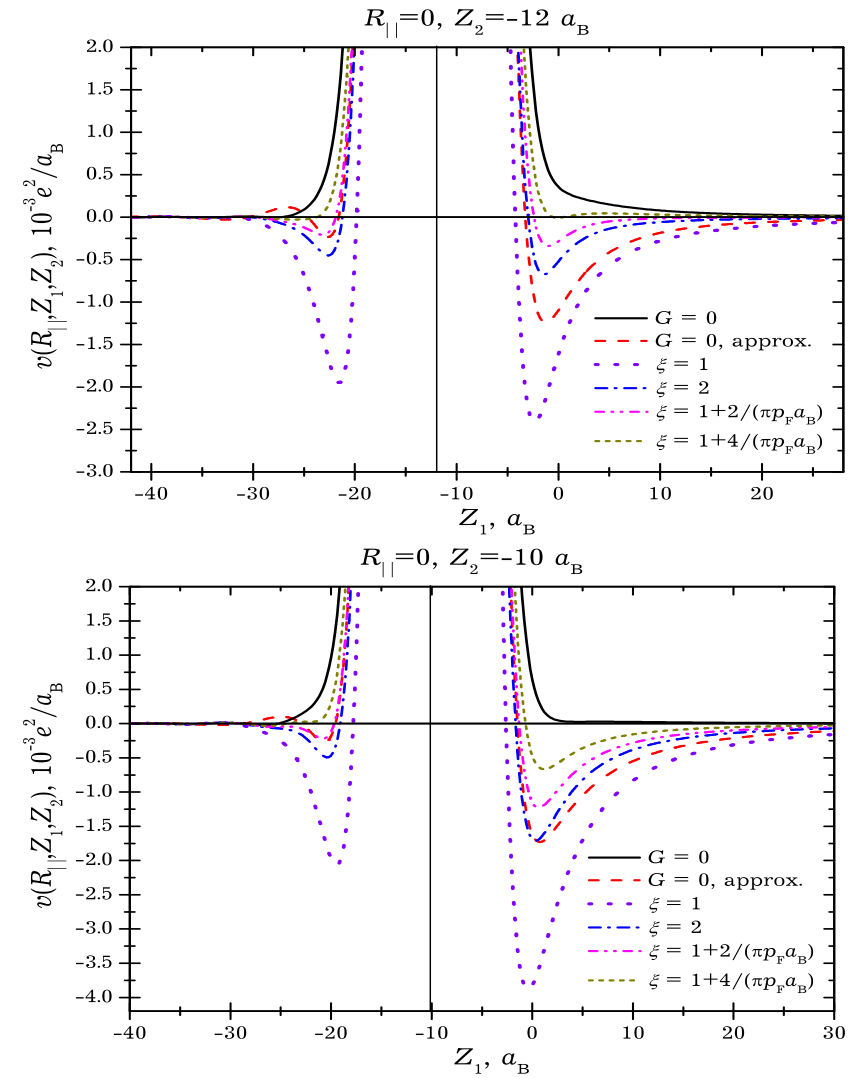


Рис. 4. Залежність ефективного потенціалу міжйонної взаємодії від відстані між іонами по нормалі до площини поділу ($R_{||} = 0$). Верхній рисунок — нормальна координата одного з іонів рівна $-12 a_B$, нижній — нормальна координата одного з іонів рівна $-10 a_B$.

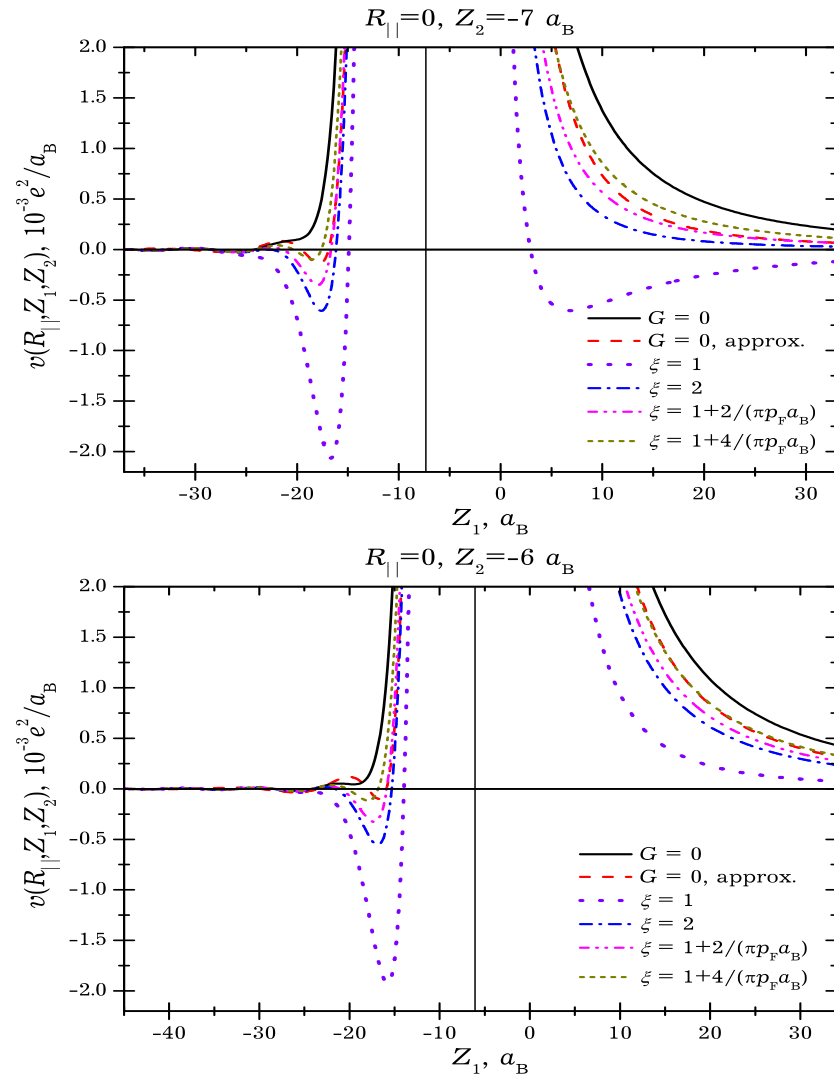


Рис. 5. Залежність ефективного потенціалу міжйонної взаємодії від відстані між іонами по нормалі до площини поділу ($R_{||} = 0$). Верхній рисунок — нормальна координата одного з іонів рівна $-7 a_B$, нижній — нормальна координата одного з іонів рівна $-6 a_B$.

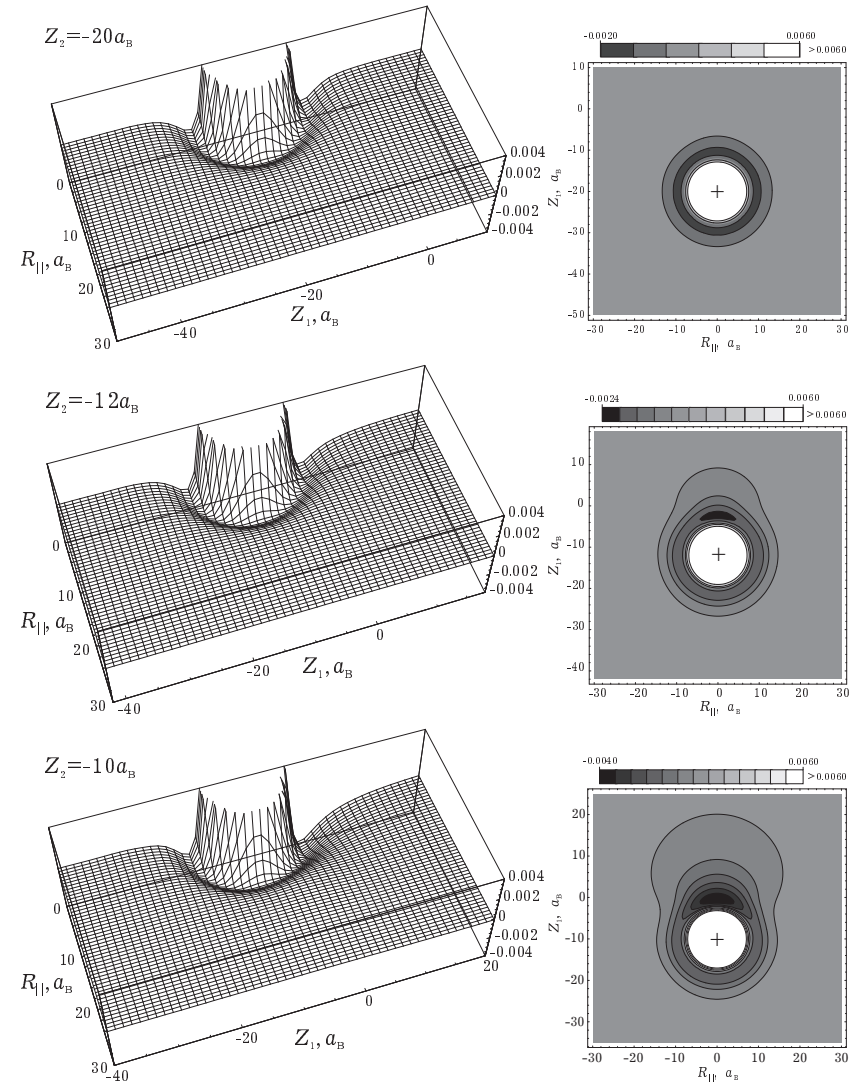


Рис. 6. Залежність ефективного потенціалу міжйонної взаємодії від відстані між іонами. Верхні рисунки — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = -20 a_B$, середні — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = -12 a_B$, нижні — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = -10 a_B$.

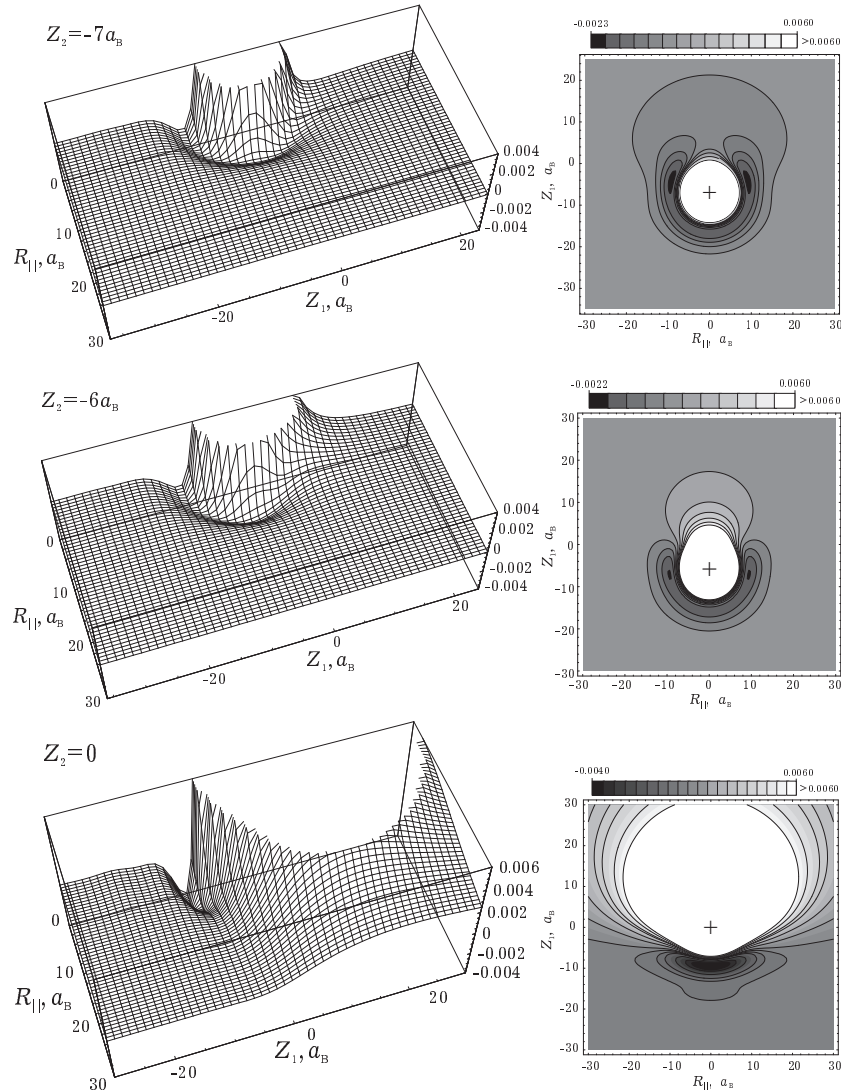


Рис. 7. Залежність ефективного потенціалу міжіонної взаємодії від відстані між іонами. Верхні рисунки — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = -7a_B$, середні — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = -6a_B$, нижні — один з іонів зафіксований в точці $R_{||} = 0$, $Z_2 = 0$.

6. Висновки

Запропоновано підхід для врахування впливу дискретності іонної підсистеми напівобмеженого металу на характеристики неоднорідного електронного газу, в основу якого покладено теорію збурень по псевдопотенціалу електрон-іонної взаємодії з врахуванням неоднорідності електронної підсистеми. Ефективність цього підходу проілюстровано проведенням розрахунків ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії. Показано, що наявність поверхні приводить до анізотропної поведінки ефективного потенціалу, що є причиною перебудови приповерхневих шарів кристалічної ґратки.

Література

1. Lang N. D., Kohn W. Theory of metal surfaces: charge density and surface energy // Phys. Rev. B. 1970. Vol.1, n.12. P.4555–4567.
2. Lang N. D., Kohn W. Theory of metal surfaces: work function // Phys. Rev. B. 1971. Vol.3, n.4. P.1215–1223.
3. Kiejna A. Stabilized jellium—simple model for simple—metal surfaces // Prog. Surf. Sci. 1999. Vol.61. P.85–125.
4. Fiolhais C., Henriques C., Sarría I, Pitarke J. M. Metallic slabs: perturbative treatments on based on jellium // 2000. cond-mat/0009105.
5. Rose J. H., Dobson J. F. Face dependent surface energies of simple metals // Solid State Comm. 1981. Vol.37, n.2. P.91–96.
Dobson J. F., Rose J. H. Surface properties of simple metals via inhomogeneous linear electronic response. I. Theory // J. Phys. C. 1982. Vol.15. P.7429–7456.
Dobson J. F., Harris G. H. Static electronic susceptibility of the Lang-Kohn jellium surface // Phys. Rev. B. 1983. Vol.27. P.6542–6544.
6. Mahan Gerald. D. Many-particle physics, 1990 Plenum Press, New York, p. 1032.
7. Shyu Wei-Mei, Singwi K. S., Tosi M. P. Many-electron correlation effects on the metallic interionic potential // Phys. Rev. B. 1971. Vol.3, n.2. P.237–243.
8. Shyu Wei-Mei, Wehling J. H., Cordes M. R., Gaspari G. D. Pseudopotential form factor and interionic potential in simple metals: many-electron effects // Phys. Rev. B. 1971. Vol.4, n.6. P.1802–1815.
9. Kostrobij P. P., Markovych B. M. A new approach to calculate the

- thermodynamic potential of an inhomogeneous electron gas // *Condens. Matter Phys.* 2003. Vol.6, n.2(34). P.347–362.
10. Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали // *Журн. фіз. досл.* 2003. Т.7, №2. С.195–206.
 11. Костробій П. П., Маркович Б. М. Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: II. Функції розподілу // *Журн. фіз. досл.* 2003. Т.7, №3. С.298–312.
 12. Костробій П. П., Маркович Б. М. Ефективний потенціал між-електронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція напівобмеженого електронного газу. –Львів: 2006. –18с., (Препр./ НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-05U). To be appear in *Condens. Matter Phys.*
 13. 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. –15с., (Препр./ НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-15U).
 14. Горобченко В. Д., Максимов Е. Г. Диэлектрическая проницаемость электронного газа // *УФН.* 1980. Т.130, вып.1. С.65–111.
 15. Краско Г. Л., Гурский З. А. Об одном модельном псевдопотенциале // *Письма в ЖЭТФ.* 1969. Т.9, №10. С.596–599.
 16. Краско Г. Л., Гурский З. А. Модельный псевдопотенциал и некоторые атомные свойства щелочных и щелочноземельных металлов // *ДАН СССР.* 1971. Т.197, №4. С.810–813.
-

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; Yu. Rudavskii, *Lviv*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavrukh, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*.

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +380(322)760908; Fax: +380(322)761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>