

## Моделювання ефективного потенціалу парної міжіонної взаємодії для напівобмеженого металевого тіла

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

<sup>1</sup> к. ф.-м. н., професор, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, e-mail: kostroby@polynet.lviv.ua

<sup>2</sup> к. ф.-м. н., Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів

<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 на характеристики металевого тіла з плоскою поверхнею розділу «метал-вакуум». Використовуючи теорію збурень за потенціалом електрон-іонної взаємодії отримано вираз для великої статистичної суми даної моделі в наближенні парних іон-іонних взаємодій. Проведено розрахунок ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії та досліджено вплив наявності поверхні розділу на нього. Показано, що наявність поверхні розділу приводить до анізотропної поведінки ефективного потенціалу, що є причиною перебудови приповерхневих шарів кристалічної ґратки.*

**Ключові слова:** ефективний потенціал парної міжіонної взаємодії, неоднорідний електронний газ, напівобмежене металеве тіло.

**Вступ.** Сучасний розвиток експериментальних методів досліджень електронних властивостей поверхонь металів вимагає розробки нових теоретичних моделей для опису явищ та процесів, які відбуваються на межі поділу «метал-вакуум». Ефективним математичним методом опису електронних властивостей поверхонь простих (з *s-p* зв'язками) металів є метод функціоналу густини (DFT) [1, 2] та його модифікації (метод «стабілізованого желе») [3]. Ці методи достатньо добре описують основні (одночастинкові) властивості неоднорідного електронного газу, але не враховують ні впливу іонної ґратки металу, ані багаточастинкових ефектів у неоднорідному електронному газі. Вплив дискретності іонної густини на характеристики «напівобмеженого желе» шляхом побудови теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії досліджено в роботах [1, 2, 4, 5]. Однак, у згаданих працях не враховано вплив неоднорідності електронної підсистеми.

У роботах [9-12] на основі узагальнення квантово-статистичного підходу до опису властивостей «напівобмеженого желе» запропоновано новий підхід для розрахунку впливу дискретності іонної підсистеми на характеристики неоднорідного електронного газу. В його основу закладено теорію збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії з врахуванням неоднорідної електронної підсистеми. У даній роботі для ілюстрації ефективності запропонованого підходу

наведено результати розрахунку ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії та досліджено вплив поверхні розділу на його поведінку.

## 1. Постановка задачі

Металеve тіло з плоскою поверхнею розділу «метал-вакуум» моделюємо просторовою системою  $N_{ion}$  додатно заряджених нерухомих іонів, розміщених у точках із декартовими координатами  $\vec{R}_j(X_j, Y_j, Z_j)$ , де  $X_j \in [-\infty, +\infty]$ ,  $Y_j \in [-\infty, +\infty]$ ,  $Z_j \in [-\infty, Z_0]$ ,  $Z_0 = const$  — рівняння поверхні розділу «метал-вакуум»,  $j = \overline{1, N_{ion}}$ . Заряд іона  $Z|e|$ , де  $e$  — заряд електрона. Приймаємо, що іони є нерухомими. У полі іонів перебувають електрони з координатами  $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) = (\vec{r}_{||i}, z_i)$ ,  $i = \overline{1, N}$ . Гамільтоніан такої 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 перші дві складові відповідно є кінетичною енергією електронів і потенціальною енергією міжелектронної взаємодії, третя складова — потенціальною енергією міжіонної взаємодії, а остання — енергією електрон-іонної взаємодії. У формулі (1)

$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$  — оператор Лапласа,  $\hbar$  — стала Планка,  $m$  — маса електрона. Приймаємо, що система є електронейтральною, тобто

$$ZN_{ion} = N. \quad (2)$$

Потенціал електрон-іонної взаємодії подамо так

$$w(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = w_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|) + \Delta w(\vec{r}_i, \vec{R}_j), \quad (3)$$

де  $w_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|)$  — потенціал електрон-іонної взаємодії у випадку відсутності поверхні розділу «метал-вакуум» (псевдопотенціал),  $\Delta w(\vec{r}_i, \vec{R}_j)$  — зміна потенціалу електрон-іонної взаємодії, зумовлена наявністю поверхні розділу «метал-вакуум». Зауважимо, що  $w_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|)$  є періодичною функцією координат іонів [15, 16].

Виокремимо з гамільтоніану (1) гамільтоніан  $H_{jell}$  моделі «напівобмеженого желе» [9-11]. Тоді

$$H = H_{jell} + \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j=1}^{N_{ion}} ew_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|) + \int \frac{e\rho_{jell}(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} d\vec{R} \right) + \sum_{i=1}^N V_{ion}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\vec{R} \int \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} d\vec{R}', \quad (4)$$

де

$$H_{jell} = H_{jell}^{unif} + \sum_{i=1}^N V_{jell}(\vec{r}_i), \quad (5)$$

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

$$-\frac{e^2 N}{V} \sum_{i=1}^N \int \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} d\vec{R} \quad (6)$$

— гамільтоніан «однорідного желе»,  $V = SL$  — об'єм, а  $S$  — площа поверхні тіла,  $L$  визначає область зміни нормальної до поверхні розділу координати електрона:  $z \in (-L/2, +L/2)$ ,  $S \rightarrow \infty$ ,  $L \rightarrow \infty$ ,

$$V_{jell}(\vec{r}_i) = e \int \frac{eNV^{-1} - \rho_{jell}(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} d\vec{R}, \quad (7)$$

$$V_{ion}(\vec{r}_i) = \sum_{j=1}^{N_{ion}} e \Delta w(\vec{r}_i, \vec{R}_j), \quad (8)$$

$$\rho_{jell}(\vec{R}) \equiv \rho_{jell}(Z) = \rho_0 \theta(-Z_0 - Z), \quad \rho_0 = \frac{2eN}{SL} \quad (9)$$

— розподіл іонної густини в моделі «напівобмеженого желе»,  $\theta(Z)$  — функція Гевісайда.

Таким чином, гамільтоніан (1) можна подати так

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

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \frac{(eN)^2}{2V^2} \int d\vec{R} \int \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|} d\vec{R}', \quad (10)$$

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

Прийемо, що поверхневий потенціал  $V(\vec{r})$  є функцією лише нормальної до поверхні розділу координати електрона  $V(\vec{r}) = V(z)$ . Запишемо гамільтоніан (10) у представленні вторинного квантування [17], яке побудоване на хвильових функціях

$$\Psi_{\vec{p}, \alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}_{\parallel}) \varphi_{\alpha}(z), \quad \vec{r} = (\vec{r}_{\parallel}, z) = (x, y, z),$$

де  $\vec{p}$  — векторна змінна, фур'є-спряжена до  $\vec{r}_{\parallel}$ ,  $\varphi_{\alpha}(z)$  та  $\varepsilon_{\alpha}$  — власні функції та власні значення рівняння Шредінгера

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

У цьому представленні

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{p}, \alpha} E_{\alpha}(\vec{p}) a_{\alpha}^{\dagger}(\vec{p}) a_{\alpha}(\vec{p}) + \frac{1}{2SL} \sum_{\vec{q}} \sum_k' v_k(\vec{q}) \rho_k(\vec{q}) \rho_{-k}(-\vec{q}) - \\ & - \frac{ZN_{ion}}{SL} \sum_{\vec{q}} \sum_k' w_k(\vec{q}) S_k(\vec{q}) \rho_k(\vec{q}) - \frac{N}{2S} \sum_{\vec{q}}' v(\vec{q} | 0) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} \frac{1}{S} \sum_{\vec{q}}' Z^2 v(\vec{q} | Z_i - Z_j) \exp[i\vec{q} \cdot (\vec{R}_{\parallel i} - \vec{R}_{\parallel j})], \end{aligned} \quad (11)$$

де штрих біля символу суми означає відсутність доданків з  $\vec{q} = 0$  в силу умови електронейтральності (2),  $a_{\alpha}^{\dagger}(\vec{p})$  та  $a_{\alpha}(\vec{p})$  — оператори породження та знищення електрона в стані  $(\vec{p}, \alpha)$  [17]

$$\begin{aligned} v_k(\vec{q}) = & 4\pi e^2 / (q^2 + k^2), \quad q = |\vec{q}|, \quad k = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = & \frac{1}{SL} \sum_{\vec{q}, k} v_k(\vec{q}) \exp[i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{\parallel i} - \vec{r}_{\parallel j}) + ik(z_i - z_j)], \end{aligned}$$

$v(\vec{q} | z) = 2\pi e^2 \exp(-q |z|) / q$  — двовимірний фур'є-образ кулонівського потенціалу,  $\vec{q} = (q_x, q_y)$ ,  $q_{x,y} = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} m_{x,y}$ ,  $m_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{r} = & \frac{1}{S} \sum_{\vec{q}} v(\vec{q} | z) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}), \\ w(\vec{r}_i - \vec{R}_j) = & \frac{1}{SL} \sum_{\vec{q}, k} w_k(\vec{q}) \exp[i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{\parallel i} - \vec{R}_{\parallel j}) + ik(z_i - Z_j)], \quad \vec{R}_{\parallel j} = (X_j, Y_j), \end{aligned}$$

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

$$S_k(\vec{q}) = \frac{1}{N_{ion}} \sum_{j=1}^{N_{ion}} \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\parallel j} - ikZ_j) \quad (12)$$

— структурний фактор іонної ґратки,

$$\rho_k(\vec{q}) = \sum_{\vec{p}, \alpha_1, \alpha_2} \langle \alpha_1 | \exp(ikz) | \alpha_2 \rangle a_{\alpha_1}^\dagger(\vec{p}) a_{\alpha_2}(\vec{p} - \vec{q}), \quad (13)$$

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

## 2. Ефективний парний потенціал міжйонної взаємодії

Розглянемо велику статистичну суму [17] для напівобмеженого металевого тіла

$$\Xi = \text{Sp} \exp(-\beta(H - \mu N)), \quad (14)$$

де  $\mu$  — хімічний потенціал електронів,  $\beta$  — обернена температура. У наближенні парних міжйонних взаємодій її можна записати у вигляді [12]

$$\Xi = \Xi_{jell} \exp \left[ -\beta \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^{N_{ion}} V(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \right] \quad (15)$$

де

$$V(\vec{R}_i, \vec{R}_j) = \frac{(Ze)^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + V^{ind}(\vec{R}_i, \vec{R}_j)$$

— ефективний двочастинковий потенціал парної міжйонної взаємодії, фур'є-образ якого задовольняє рівняння

$$V(\vec{q} | Z_1, Z_2) = Z^2 v(\vec{q} | Z_1 - Z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int w(\vec{q} | Z_1 - z) \overline{M}(\vec{q} | z, z') w(\vec{q} | z' - Z_2) dz', \quad (16)$$

а  $w(\vec{q} | z) = \int \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_{\parallel}) w(\vec{r}) d\vec{r}_{\parallel}$  — двовимірний фур'є-образ псевдопотенціалу  $w_{ps}(|\vec{r}_i - \vec{R}_j|)$ .

У праці [13] показано, що двочастинкова кореляційна функція  $\overline{M}$  із врахуванням поправки на локальне поле є розв'язком інтегрального рівняння

$$\overline{M}(\vec{q} | z_1, z_2) = M^0(\vec{q} | z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int M^0(\vec{q} | z_1, z) \times \\ \times [v(\vec{q} | z - z') - \bar{v}(\vec{q} | z - z')] \overline{M}(\vec{q} | z', z_2) dz', \quad (17)$$

де  $\bar{v}(\vec{q} | z - z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')} \bar{v}_k(\vec{q})$ ,  $\bar{v}_k(\vec{q}) = G_k(\vec{q}) v_k(\vec{q})$ ,  $G_k(\vec{q})$  — поправка на локальне поле [13]. Згідно з [14]

$$M^0(\vec{q} | z_1, z_2) = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\vec{q}) \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2), \quad (18)$$

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(\vec{q}) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \left[ 1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \times \right. \\ \left. \times \theta \left( 1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \right] \theta(p_F - \alpha_1), \quad (19)$$

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

### 3. Результати числових розрахунків ефективного потенціалу парної міжйонної взаємодії

Для числових розрахунків  $V(\vec{R}_1, \vec{R}_2)$  використаємо для  $G_k(\vec{q})$  апроксимацію [6-8]

$$G_k(\vec{q}) = \frac{1}{2} \frac{q^2 + k^2}{q^2 + k^2 + \xi p_F^2}. \quad (20)$$

Тоді

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

Змоделюємо поверхневий потенціал  $V(z)$  наступним чином

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & z \geq 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases}$$

У цьому випадку власні функції та власні значення є такими

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(-z), \quad \varepsilon_\alpha = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}, \quad \alpha = \frac{2\pi k}{L}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (21)$$

Електрон-іонний псевдопотенціал  $w(|\vec{r} - \vec{R}|)$  змоделюємо псевдопотенціалом Краско-Гурського [15, 16]

$$w(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2}{r} \left( 1 + a \frac{r}{r_c} \right) \exp\left(-\frac{r}{r_c}\right), \quad (22)$$

де  $a$  і  $r_c$  — параметри псевдопотенціалу. Двовимірний фур'є-образ  $w(r)$  є такий

$$w(\vec{q} | z) = -\frac{2\pi Ze^2}{q} \exp(-q|z|) + 2\pi Ze^2 \times \\ \times \left[ \frac{a|z|}{1 + (qr_c)^2} + r_c \frac{1 + a + (qr_c)^2}{[1 + (qr_c)^2]^{3/2}} \right] \exp\left(-\sqrt{1 + (qr_c)^2} \frac{|z|}{r_c}\right). \quad (23)$$

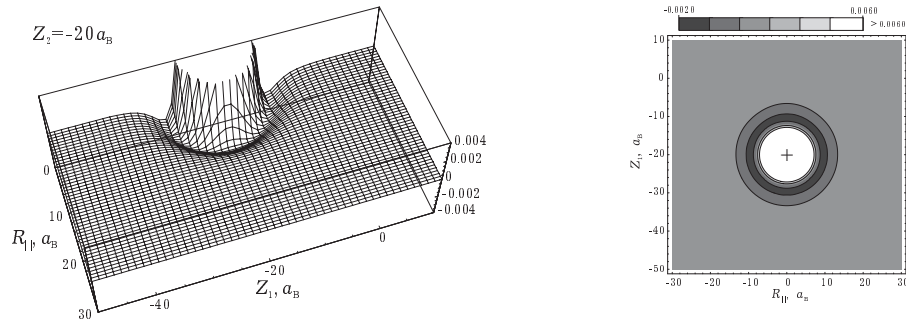


Рис. 1

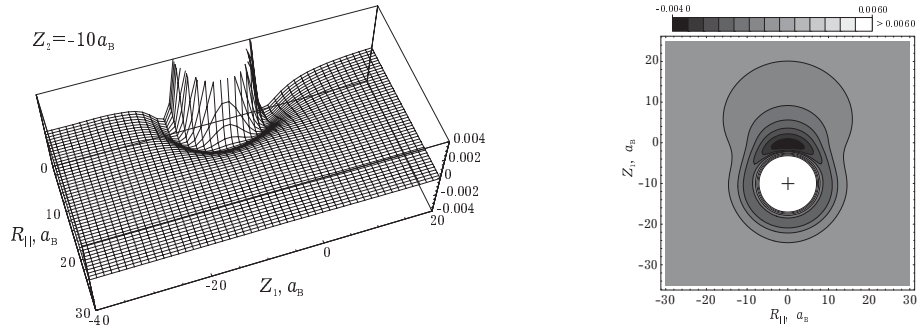


Рис. 2

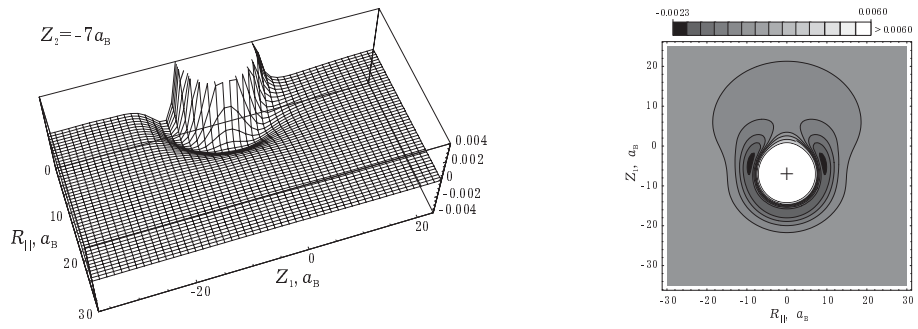


Рис. 3

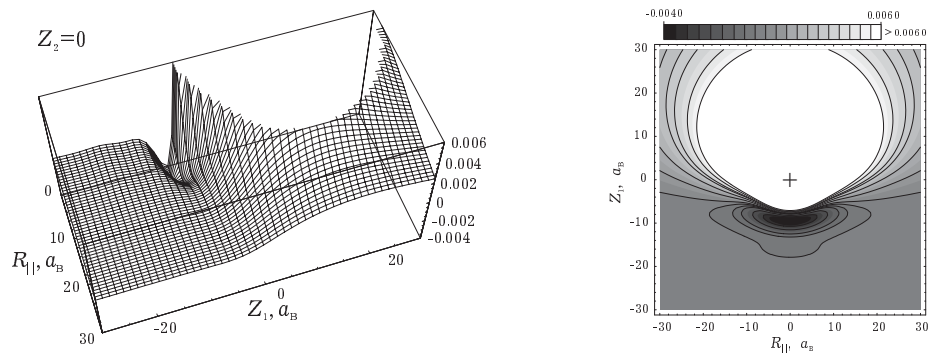


Рис. 4

Числові розрахунки ефективного потенціалу міжіонної взаємодії проведено для калію. У цьому випадку параметри  $r_s$ ,  $a$  та  $r_c$  є такими

$$r_s = 4,86a_B, \quad a = 2,0333, \quad r_c = 0,7777a_B, \quad Z = 1.$$

На рис. 1-4 зображено ефективний потенціал міжіонної взаємодії

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

як функцію координати одного з іонів ( $Z_1$ ) та міжіонної віддалі в площині поділу ( $R_{\parallel}$ ), тоді як координата іншого іона ( $Z_2$ ) зафіксована. Розрахунки проведено для  $\xi = 1$ . У глибині металу (рис. 1) ефективний потенціал міжіонної взаємодії є симетричним. Із наближенням іона з координатою  $Z_2$  до поверхні розділу спостерігається порушення симетричності потенціальної ями. При  $Z_2 = -10a_B$  (рис. 2) виникає найглибша потенціальна яма між зафіксованим іоном та площиною розділу. Коли іон перебуває в т.  $Z_2 = -7a_B$  (рис. 3) ця яма зникає, натомість утворюються дві симетричні відносно  $R_{\parallel} = 0$  потенціальні ями меншої глибини. При  $Z_2 = 0$  виникає одна потенціальна яма в т.  $Z_1 = -9,4a_B$  (рис. 4). На основі рис. 4 можна зробити висновок, що міжіонна взаємодія для приповерхневих шарів має відштовхувальний характер, а між шарами в глибині металу — притягальний. Така поведінка ефективного потенціалу є причиною перебудови ґратки металу біля поверхні розділу.

**Висновки.** Запропонований у [12] підхід для врахування впливу дискретності іонної підсистеми напівобмеженого металевого тіла на характеристики неоднорідного електронного газу, в основу якого закладено теорію збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії з урахуванням неоднорідності електронної підсистеми, використано для розрахунків ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії псевдопотенціальних моделей неперехідних металів з поверхнею розділу «метал-вакуум». Ефективність цього підходу проілюстровано розрахунками ефективного парного потенціалу міжіонної взаємодії. Показано, що наявність поверхні розділу призводить 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, № 12. — P. 4555-4567.
- [2] Lang N. D., Kohn W. Theory of metal surfaces: work function // Phys. Rev. B. — 1971. — Vol. 3, № 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., Sarria I, Pitarke J. M. Metallic slabs: perturbative treatments on based on jellium // 2000. cond-mat / 0009105.
- [5] Rose J. H., Dobson J. F. // Solid State Comm. — 1981. — Vol. 37. — P. 91.



- [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, № 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, № 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, № 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., Казановська О. З.* Ефективний потенціал парної міжіонної взаємодії для напівобмеженого металу. — Львів: 2006. — 22 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-16U).
- [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. — 15 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-15U).
- [14] *Костробій П. П., Маркович Б. М.* Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії та двочастинкова кореляційна функція напівобмеженого електронного газу. — Львів: 2006. — 18 с. (Препр. / НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ISMP-06-05U).
- [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.
- [17] *Боголюбов Н. Н.* Избранные труды. Т. 2. — К.: Наук. думка, 1970. — 522 с.

## **Modelling the Effective Pair Interionic Potential for a Semi-infinite Metal Body**

Petro Kostrobij, Bogdan Markovych, Olga Kazanovska

*An approach for the account of influence of a discrete ionic subsystem on characteristics of a metal body limited by a flat «metal-vacuum» interface is presented. Using the perturbation theory on pseudo-potential of electron-ionic interaction, expression for the grand partition function of the considered model in approximation of pair interionic interaction is derived. Calculation of the effective pair potential of interionic interaction is made and influence on it of the metal surface is investigated. It is shown, that presence of an interface causes anisotropic behaviour of the effective potential that is the reason of reconstruction of crystal lattice near to the surface.*

## **Моделирование эффективного потенциала парного межоионного взаимодействия для полугораниченного металлического тела**

Петр Костробий, Богдан Маркович, Ольга Казановская

*Предложен подход для учета влияния дискретной ионной подсистемы на характеристики металлического тела с плоской поверхностью раздела «металл-вакуум». Используя теорию возмущений по псевдопотенциалу электрон-ионного взаимодействия, получено выражение для большой статистической суммы данной модели в приближении парных ион-ионных взаимодействий. Проведен расчет эффективного парного потенциала ион-ионного взаимодействия и исследовано влияние на него поверхности раздела металла. Показано, что наличие поверхности раздела приводит к анизотропному поведению эффективного потенциала, что является причиной реконструкции приповерхностных слоев кристаллической решетки.*

Отримано 17.11.06