

Б.М. МАРКОВИЧ, І.М. ЗАДВОРНЯК

Національний університет "Львівська політехніка"

(Вул. С. Бандери, 12, Львів 79013; e-mail: bogdan_markovych@yahoo.com, ivanzadv@yahoo.com)

ЕФЕКТИВНИЙ ПОТЕНЦІАЛ МІЖЕЛЕКТРОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ НАПІВОбМЕЖЕНОГО ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ З ВРАХУВАННЯМ ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНЕ ПОЛЕ

УДК 530.145

У роботі проведено чисельний розрахунок ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії та двочастинкової кореляційної функції електронів "густина-густина" для напівобмеженого простого металу з урахуванням поправки на локальне поле. Досліджено вплив на них плоскої поверхні поділу та різних форм поправки на локальне поле.

Ключові слова: напівобмежений метал, модель "желе", ефективний потенціал, кореляційна функція.

1. Вступ

На сьогоднішній день квантово-статистична теорія фермі-систем з наявністю поверхні поділу ще далека від завершення. Актуальність теоретичного опису таких систем важко переоцінити у зв'язку з важливістю процесів, які відбуваються за наявності поверхні поділу, та бурхливим розвитком експериментальних методів дослідження поверхні.

Найпопулярнішим теоретичним методом дослідження таких систем є метод функціонала густини [1], що виник на основі добре відомого методу Томаса-Фермі, який був розроблений для атомів. За своєю природою метод функціонала густини є одночастинковим підходом і не може коректно врахувати багаточастинкові кореляційні ефекти. Тому найчастіше для енергетичних функціоналів систем з поверхнею поділу використовують наближення локальної густини, тобто беруть для розрахунків відомі вирази з теорії однорідних систем та замість концентрації електронів n покладають розподіл електронної густини $n(\mathbf{r})$. Такий підхід є дискусійним [2], оскільки наявність поверхні поділу привносить не тільки кількісну, а й якісну зміну

різних характеристик електронної системи (наприклад, виникають сили зображення і т.д.), що принципово не можна врахувати в теорії функціонала густини.

У циклі робіт [3-9] зроблено спробу побудови послідовної квантово-статистичної теорії простого металу з поверхнею поділу "метал-вакуум". Зокрема, показано, що через ефективний потенціал міжелектронної взаємодії виражається термодинамічний потенціал та структурні функції розподілу електронів напівобмеженого металу. Тому представлена робота є логічним продовженням цього циклу робіт і має на меті дослідження впливу різних апроксимаційних форм поправки на локальне поле на двочастинкову кореляційну функцію "густина-густина" та ефективний потенціал міжелектронної взаємодії.

Ефективна взаємодія між зарядженими частинками в просторово обмежених системах віддавна притягувала увагу дослідників. Зокрема, вона досліджувалася у роботах [10-18]. У роботі [10] при певних наближеннях обчислена поляризаційна частина енергії взаємодії нерухомого точкового заряду з напівобмеженим металом. За допомогою подібних наближень у роботі [11] розраховано обернену діелектричну функцію напівобмеженого металу

© Б.М. МАРКОВИЧ, І.М. ЗАДВОРНЯК, 2014

та ефективний потенціал. Для ефективного потенціалу взаємодії у роботах [12, 13] отримано асимптотики фріделівських осциляцій для великих відстаней між зарядами у площині поділу та досліджено їх вигляд від різних форм поверхні Фермі металу.

У роботах [14–17] у наближенні хаотичних фаз досліджувалося екранування зарядженої домішки поблизу поверхні металу. Зокрема, в квазікласичному випадку та в наближенні Томаса–Фермі розраховано залежність електростатичного потенціалу цієї домішки від відстані в площині поверхні та відстані до поверхні, виявлено фріделівські осциляції.

Для усунення недоліків, які притаманні методу функціонала густини, є спроби використовувати підхід GW [19] з методом функціонала густини. Так, у роботі [18] проведено розрахунок ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії з використанням наближення локальної густини для обмінно-кореляційного потенціалу.

2. Модель

Розглядаємо напівобмежений простий метал в рамках моделі “желе”, тобто, іонна підсистема металу моделюється рівномірно розподіленим додатним зарядом, який обмежений площиною поділу $z = -d$, з густиною:

$$n_+(x, y, z) \equiv n_+(z) = n_{\text{bulk}} \theta(-d - z), \quad (1)$$

де $\theta(x)$ – функція Хевісайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

n_{bulk} – концентрація електронів, $d > 0$ – параметр, який визначається самоузгоджено з умови електронейтральності

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz (n(z) - n_+(z)) = 0, \quad (2)$$

де $n(z)$ – розподіл електронної густини.

Вважатимемо, що іонна підсистема формує поверхневий потенціал для електронів, який не дозволяє їм покинути метал. Цей поверхневий потенціал моделюємо потенціальною стінкою

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & z \geq 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases} \quad (3)$$

Така модель потенціалу фізично правильно відображає реальну ситуацію та допускає аналітичні розв’язки рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(z) \right] \Psi_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha}(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{r}),$$

де m – маса електрона, $\hbar \mathbf{p}$ – двовимірний вектор імпульсу електрона у площині, яка паралельна до площини поділу, α – квантове число, яке пов’язане з рухом електрона перпендикулярно до площини поділу. Оскільки рух електрона паралельно до площини поділу є вільним, то хвильову функцію та відповідну енергію електрона можна записати так:

$$\Psi_{\mathbf{p}, \alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_{\parallel}} \varphi_{\alpha}(z), \quad E_{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2(p^2 + \alpha^2)}{2m},$$

де $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z)$ – радіус-вектор електрона, S – площа поверхні поділу,

$$\varphi_{\alpha}(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin(\alpha z) \theta(-z), \quad \alpha = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

де L визначає область зміни нормальної до площини поділу координати електрона: $z \in [-L/2, +\infty)$, причому L , а також S , прямує до безмежності так, що має місце термодинамічна границя.

3. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії

Згідно з роботою [6] двовимірний фур’є-образ за радіус-вектором \mathbf{r}_{\parallel} від ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії можна подати так:

$$g(q|z_1, z_2) = \nu(q|z_1 - z_2) +$$

$$+ \frac{\beta}{SL^2} \int_{-L/2}^{+\infty} dz \int_{-L/2}^{+\infty} dz' \nu(q|z_1 - z) \times \\ \times \mathfrak{M}(q|z, z') \nu(q|z' - z_2), \quad (4)$$

де $\nu(q|z_1 - z_2) = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z_1 - z_2|}$ – двовимірний фур’є-образ кулонівського потенціалу, z_1 та z_2 – нормальні до площини поділу координати електронів, β – обернена термодинамічна температура, $\mathfrak{M}(q|z, z')$ – кореляційна функція “густина–густина”, яка є розв’язком інтегрального рівняння Фредгольма другого роду [7]:

$$\mathfrak{M}(q|z_1, z_2) = \mathfrak{M}_0(q|z_1, z_2) +$$

$$+ \frac{\beta}{SL^2} \int_{-L/2}^{+\infty} dz \int_{-L/2}^{+\infty} dz' \mathfrak{M}_0(q|z_1, z) \times$$

$$\times \left(\nu(q|z - z') - \bar{\nu}(q|z - z') \right) \mathfrak{M}(q|z', z_2), \quad (5)$$

де $\bar{\nu}_k(q) = G_k(q)\nu_k(q)$, $\nu_k(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2+k^2}$ – тривимірний фур'є-образ кулонівського потенціалу (змінна k відповідає за розвинення Фур'є вздовж нормальної до площини поділу координати електрона), $\bar{\nu}(q|z - z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')} \bar{\nu}_k(q)$, $\mathfrak{M}_0(q|z_1, z_2)$ – двочастинкова кореляційна функція “густина–густина” в наближенні ідеального обміну [7], $G_k(q)$ – поправка на локальне поле.

У випадку низьких температур для двочастинкової кореляційної функції електронного газу в наближенні ідеального обміну в роботі [6] отримано такий вираз:

$$\mathfrak{M}_0(q|z_1, z_2) = \frac{L^2}{\beta} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(q) \times$$

$$\times \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_2) \varphi_{\alpha_1}(z_2), \quad (6)$$

де

$$\Lambda_{\alpha_1, \alpha_2}(q) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{S}{2\pi} \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2}{q^2} \times$$

$$\times \left[1 - \sqrt{1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2}} \right] \times$$

$$\times \theta \left(1 - 4q^2 \frac{p_F^2 - \alpha_1^2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - q^2)^2} \right) \theta(p_F - \alpha_1), \quad (7)$$

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

У роботі [6] показано, що в певних наближеннях для функції $\mathfrak{M}_0(q|z_1, z_2)$ можна отримати аналітичний вираз:

$$\mathfrak{M}_0(q|z, z') = -\frac{SL^2}{\beta} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\pi^2} \frac{e^{-q|z-z'|} - e^{-q|z+z'|}}{q} \times$$

$$\times \left[\frac{p_F \cos(p_F(z+z'))}{(z+z')^2} - \frac{p_F \cos(p_F(z-z'))}{(z-z')^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{\sin(p_F(z-z'))}{(z-z')^3} - \frac{\sin(p_F(z+z'))}{(z+z')^3} \right] \times$$

$$\times \theta(-z)\theta(-z'). \quad (8)$$

Зокрема, з цього виразу видно, що крім членів із залежністю від $(z - z')$, які характерні для однорідної системи, з'являються члени із залежністю від $(z + z')$. Причиною появи цих членів є наявність плоскої поверхні поділу. Тобто, у нашому підході для двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” вже в наближенні ідеального обміну враховані ефекти, які пов'язані із зображеннями. Зауважимо, що у роботах [10, 11] для поляризаційного оператора взято суму двох поляризаційних операторів однорідного електронного газу, один з яких залежить від $(z - z')$, а інший – від $(z + z')$. Проте, як показує формула (8), залежність від $(z - z')$ та $(z + z')$ не є такою простою.

У подальших чисельних розрахунках для двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” в наближенні ідеального обміну використовується вираз (6).

4. Результати чисельних розрахунків двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” та ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії

Проведено чисельні розрахунки двочастинкової кореляційної функції електронів “густина–густина” $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ згідно з рівнянням (5), узявши поправку на локальне поле $G_k(q)$ з теорії однорідного електронного газу у таких формах:

1) модифікована поправка Хаббарда [20]:

$$G_k(q) = \frac{1}{2} \frac{q^2 + k^2}{q^2 + k^2 + \xi p_F^2}, \quad (9)$$

де ξ – параметр, значення якого наведені нижче;

2) поправка Ічімару [21]:

$$G_k(q) = AQ^4 + BQ^2 + C +$$

$$+ \left[AQ^4 + \left(B + \frac{8}{3}A \right) Q^2 - C \right] \times$$

$$\times \frac{4 - Q^2}{4Q} \ln \left| \frac{2 + Q}{2 - Q} \right|, \quad (10)$$

де $Q = \sqrt{q^2 + k^2}/p_F$, параметри A , B та C є розмірними і наведені в роботі [21].

Усі чисельні розрахунки виконані для калію ($r_S = 4,86 a_B$).

Маючи чисельний розв'язок рівняння (5) та підставивши його в (4), отримуємо двовимірний

фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії. Зробивши обернене перетворення Фур'є за змінною \mathbf{q} та врахувавши, що двовимірний фур'є-образ ефективного потенціалу залежить лише від модуля вектора \mathbf{q} , отримуємо ефективний потенціал міжелектронної взаємодії:

$$g(r_{\parallel}, z_1, z_2) = \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}r_{\parallel}} g(q|z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} dq q J_0(qr_{\parallel}) g(q|z_1, z_2),$$

де $J_0(x)$ – циліндрична функція Бесселя нульового порядку.

На рис. 1–3 подано результати розрахунків двочастинкової кореляційної функції електронів “густина–густина” $\mathfrak{M}(q|z_1, z_2)$ (розв’язок інтегрального рівняння Фредгольма другого роду (5)) з використанням різних поправок на локальне поле, а також без неї (наближення хаотичних фаз).

Якщо один з електронів знаходиться в глибині металу, то ця функція є симетричною відносно нормальної до площини поділу координати зафіксованого електрона та має гострий пік при збіганні нормальних до площини поділу координат двох електронів (див. рис. 1), тобто електрони корелюють між собою та не відчують впливу поверхні.

Якщо один з електронів наближається до поверхні поділу, то на двочастинкову кореляційну функцію електронів ще починає впливати поверхня поділу. Гострий симетричний пік, який спостерігався на рис. 1, втрачає симетричність та розширюється: крім електронних кореляцій ще виникає ефективне відштовхування від площини поділу (див. рис. 2). Внаслідок цього відштовхування за подальшого наближення електрона до поверхні поділу максимум двочастинкової кореляційної функції електронів є не при збіганні нормальних до площини поділу координат двох електронів, як це було в глибині металу (див. рис. 1), а дещо зсунутий лівіше від поверхні поділу (з рис. 3 видно, що максимум знаходиться поблизу $-2,7a_B$).

Крім того, з цих рисунків видно, що різна форма поправки на локальне поле якісно не змінює поведінку двочастинкової кореляційної функції електронів, але змінює кількісно. Використання наближення хаотичних фаз приводить до найменших відхилень двочастинкової кореляційної функції електронів, тоді як поправка Ічімару приво-

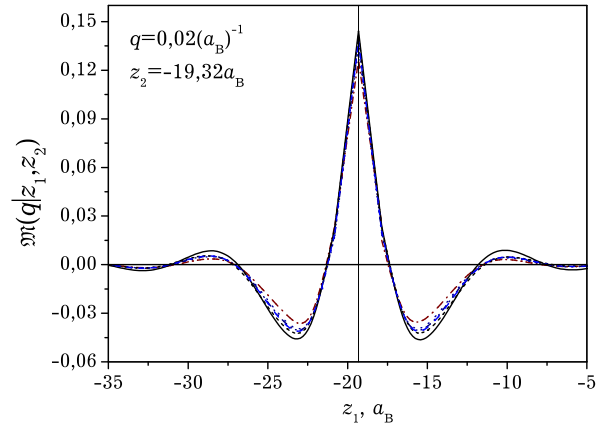


Рис. 1. Залежність двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” (в безрозмірній формі) від однієї нормальної до площини поділу координати електрона, інша нормальна до поверхні поділу координата електронів зафіксована ($z_1 = -19,57a_B$); $q = 0,02a_B^{-1}$

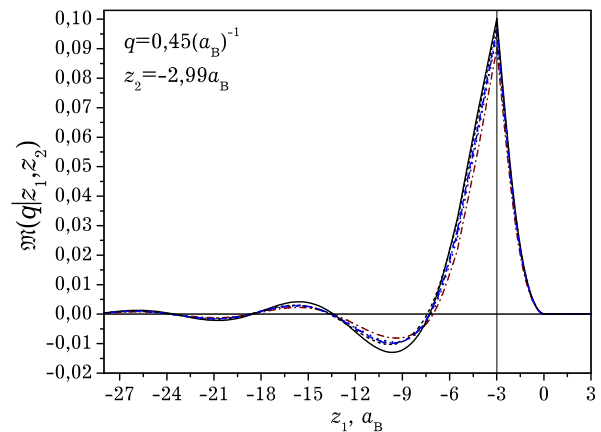


Рис. 2. Залежність двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” (в безрозмірній формі) від однієї нормальної до площини поділу координати електрона, інша нормальна до поверхні поділу координата електронів зафіксована ($z_1 = -2,99a_B$); $q = 0,45a_B^{-1}$

Позначення на рисунках

Тип лінії	Апроксимація
—	Ічімару
- - - -	Гелдарт та Воско ($\xi = 2$)
- · - · -	$G_k(q) \equiv 0$
- - - - -	Хаббард ($\xi = 1$)
· · · · ·	Шем ($\xi = 1 + \frac{4}{\pi p_F a_B}$)
- · · · ·	Анімалу ($\xi = 1 + \frac{2}{\pi p_F a_B}$)

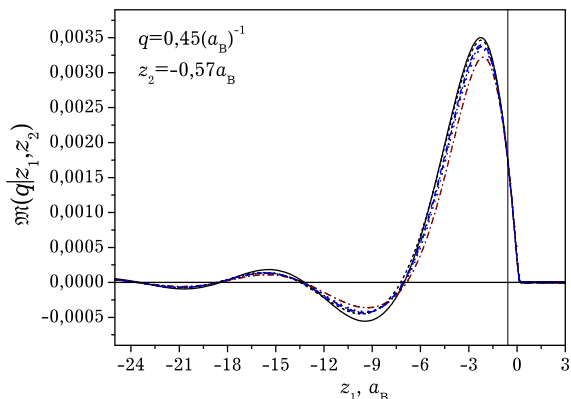


Рис. 3. Залежність двочастинкової кореляційної функції “густина–густина” (в безрозмірній формі) від однієї нормальної до площини поділу координати електрона, інша нормальна до поверхні поділу координати електронів зафіксована ($z_1 = -0,57a_B$); $q = 0,45a_B^{-1}$

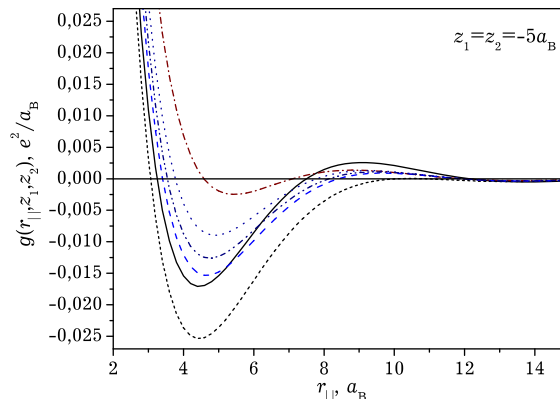


Рис. 5. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція відстані між електронами у площині поділу, нормальні до поверхні поділу координати електронів зафіксовані ($z_1 = z_2 = -5a_B$)

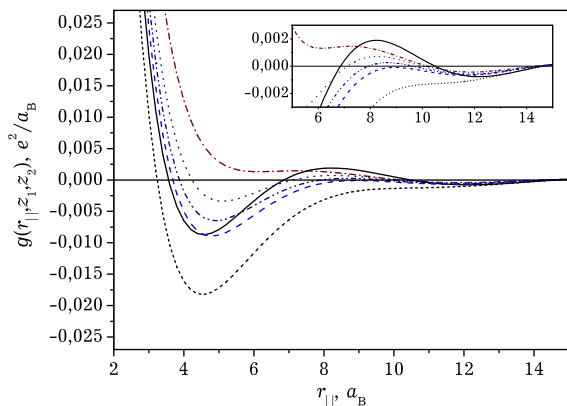


Рис. 4. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція відстані між електронами у площині поділу, нормальні до поверхні поділу координати електронів зафіксовані в глибині металу ($z_1, z_2 \rightarrow -\infty$)

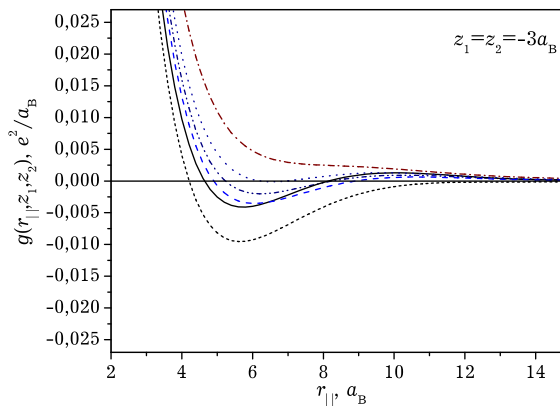


Рис. 6. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція відстані між електронами у площині поділу, нормальні до поверхні поділу координати електронів зафіксовані ($z_1 = z_2 = -3a_B$)

дить до найбільших відхилень. Розраховані значення двочастинкової кореляційної функції електронів з використанням інших форм поправки на локальне поле знаходяться між значеннями, які отримані у наближенні хаотичних фаз та з використанням поправки Ічімару.

На рис. 4–9 подано результати розрахунків ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії $g(r_{\parallel}, z_1, z_2)$ з використанням різних поправок на локальне поле, а також без неї (наближення хаотичних фаз).

На рис. 4 подано ефективний потенціал взаємодії між електронами, які знаходяться в глибині ме-

талу, тобто вони не відчувають впливу поверхні поділу. З цього рисунка видно, що врахування поправки на локальне поле приводить до появи потенціальної ями на відстанях від 4,5–5 a_B залежно від вигляду цієї поправки. Глибина цієї потенціальної ями також залежить від вигляду поправки на локальне поле. Найглибшу потенціальну яму дає поправка Хаббарда, а наймілкішу – поправка Шема. Решта розглянутих поправок забезпечують проміжні глибини потенціальних ям. Крім того, наближення хаотичних фаз (тобто розрахунки без врахування поправки на локальне поле, штрихпунктирна лінія) в однорідній системі приводить

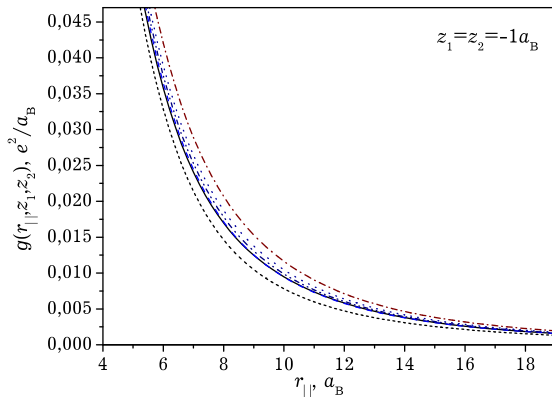


Рис. 7. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція відстані між електронами у площині поділу, нормальні до поверхні поділу координати електронів зафіксовані ($z_1 = z_2 = -1a_B$)

до відсутності потенціальної ями на цих відстанях. На великих відстанях спостерігаються фріделівські осциляції [12, 13, 22], тоді як в ефективному потенціалі, який розрахований у роботі [18], вони відсутні.

На рис. 5 подано залежність ефективного потенціалу взаємодії між електронами від відстані між електронами в площині, нормальні координати електронів: $z_1 = z_2 = -5a_B$. На такій відстані від поверхні поділу спостерігається значне поглиблення потенціальної ями, навіть використання наближення хаотичних фаз приводить до потенціальної ями. Причиною цього є немонотонна поведінка розподілу електронної густини $n(z)$ біля поверхні поділу [4], а саме: біля поверхні поділу є чергування плоских шарів з меншими та більшими концентраціями електронів, ніж у глибині металу. Внаслідок того у збагачених електронами шарах колективні ефекти є значнішими і відбувається сильніше екранування електронів. У збіднених шарах навпаки: екранування послаблюється, відштовхування між електронами посилюється (див. рис. 6). За подальшого наближення електронів до поверхні поділу переважає відштовхування між електронами (див. рис. 7). При подальшому зростанні нормальних до поверхні поділу координат електронів ефективний потенціал міжелектронної взаємодії прямує до кулонівського потенціалу:

$$\lim_{z_1, z_2 \rightarrow \infty} g(r_{\parallel}, z_1, z_2) = \frac{e^2}{\sqrt{r_{\parallel}^2 + (z_1 - z_2)^2}}.$$

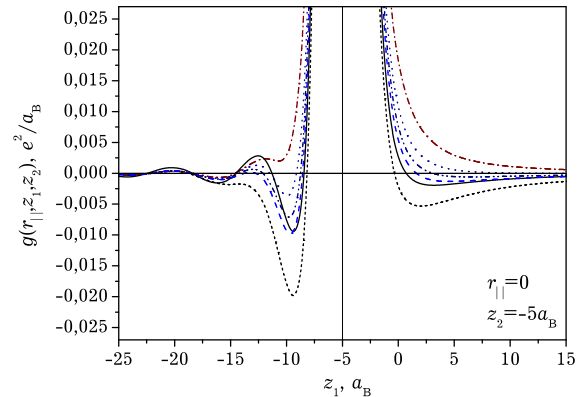


Рис. 8. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція нормальній до поверхні поділу координати одного з електронів, інша координата зафіксована ($z_2 = -5a_B, r_{\parallel} = 0$)

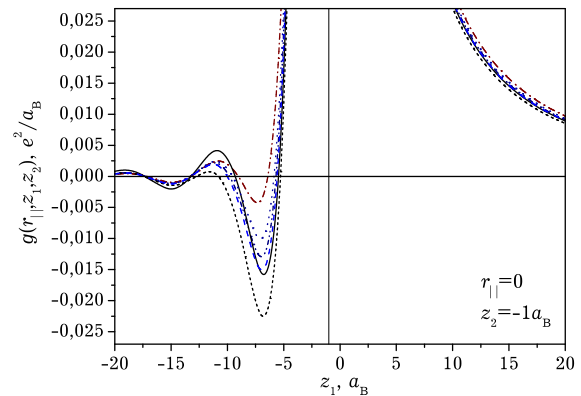


Рис. 9. Ефективний потенціал міжелектронної взаємодії як функція нормальній до поверхні поділу координати одного з електронів, інша координата зафіксована ($z_2 = -1a_B, r_{\parallel} = 0$)

Таку ж поведінку показано на рис. 8 та рис. 9. Тут подано залежність ефективного потенціалу взаємодії між електронами від нормальній до поверхні поділу координати одного з електронів, інший – зафіксований, а відстань між електронами в площині поділу дорівнює нулеві ($r_{\parallel} = 0$). Наявність поверхні поділу приводить до несиметричності ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії відносно нормальній до поверхні поділу координати. Лівіше від зафіксованого електрона є більше електронів, екранування сильніше, тому спостерігаються потенціальні ями та фріделівські осциляції. Правіше від нього – електронів менше, потенціальна яма мілкіша або взагалі зникає.

5. Висновки

У роботі проведено розрахунок двочастинкової кореляційної функції електронів та ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії з використанням різних, відомих з теорії однорідного електронного газу, форм поправки на локальне поле.

Досліджено поведінку двочастинкової кореляційної функції електронів, яка залежить від нормальних до поверхні поділу координат електронів, та досліджено вплив на неї різних форм поправки на локальне поле. Зокрема, виявлено, що наявність поверхні поділу приводить до додаткового ефективного відштовхування електронів від поверхні поділу, максимум двочастинкової кореляційної функції спостерігається не при збіганні координат електронів, як це є у глибині металу, а дещо зсунутий від поверхні поділу.

Досліджено поведінку ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії, яка залежить від нормальних до поверхні поділу координат електронів та від відстані між електронами у площині поділу, досліджено вплив на неї різних форм поправки на локальне поле. Наші розрахунки показують, що в металі біля поверхні поділу є плоскі шари, в яких поведінка ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії є суттєво різною, а саме: в одних шарах є осцилююча поведінка ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії з глибшими потенціальними ямами, а в інших – з меншими або взагалі відсутніми. За рахунок цього біля поверхні металу виникають додаткові механічні напруження, які можуть приводити до появи тріщин та інших дефектів.

1. R.M. Dreizler and E.K.U. Gross, *Density Functional Theory* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1990).
2. А.М. Сарры, М.Ф. Сарры, Физ. тв. тела **54**, 1237 (2012).
3. П.П. Костробій, Б.М. Маркович, Журн. фіз. досл. **7**, 195 (2003).
4. П.П. Костробій, Б.М. Маркович, Журн. фіз. досл. **7**, 298 (2003).
5. P.P. Kostrobij and B.M. Markovych, *Condens. Matter Phys.* **6**, 347 (2003).
6. P.P. Kostrobij and B.M. Markovych, *Condens. Matter Phys.* **9**, 747 (2006).
7. П.П. Костробій, Б.М. Маркович, О.З. Казановська, *Двочастинкова кореляційна функція "густина-густина" напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле* (Львів, 2006). [Препр.

НАН України. Інститут фізики конденсованих систем; ICMP-06-15U].

8. P.P. Kostrobij and B.M. Markovych, *Condens. Matter Phys.* **11**, 641 (2008).
9. P.P. Kostrobij and B.M. Markovych, *AIP Conf. Proc.* **1198**, 78 (2009).
10. А.В. Сидякин, ЖЭТФ. **58**, 573 (1970).
11. F. Bechstedt, R. Enderlein, фтв D. Reichardt, *Phys. Stat. Sol. (b)* **117**, 261 (1983).
12. А.М. Габович, Э.А. Пашицкий, ФТТ **18**, 377 (1976).
13. А.М. Gabovich, L.G. P'chenko, E.A. Pashitski, and Yu.A. Romanov, *Sov. Phys. JETP* **48**, 124 (1978).
14. D.E. Beck, V. Celli, G. Lo Vecchio, and A. Magnaterra, *Nuovo Cimento B* **68**, 230 (1970).
15. D.E. Beck and V. Celli, *Phys. Rev. B* **2**, 2955 (1970).
16. G. Fano and A. Magnaterra, *Nuovo Cimento* **2 D**, 1187 (1983).
17. G. Lo Vecchio and A. Magnaterra, *Lettero al Nuovo Cimento* **31**, 465 (1981).
18. G. Fratesi, G.P. Brivio, and L.G. Molinari, *Phys. Rev. B* **69**, 245113 (2004).
19. F. Aryasetiawan, and O. Gunnarsson, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 237 (1998).
20. В.Д. Горобченко, Е.Г. Максимов, УФН **130**, 65 (1980).
21. S. Ichimaru, and K. Utsumi, *Phys. Rev. B* **24**, 7385 (1981).
22. У. Харрисон, *Теория твердого тела* (Мир, Москва, 1972).

Одержано 28.02.14

Б.М. Маркович, І.М. Задворняк

ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ЭЛЕКТРОНАМИ
ДЛЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННОГО ЭЛЕКТРОННОГО
ГАЗА С УЧЕТОМ ПОПРАВКИ НА ЛОКАЛЬНОЕ ПОЛЕ

Резюме

В работе проведен численный расчет эффективного потенциала взаимодействия между электронами и двухчастичной корреляционной функции электронов "плотность-плотность" для полуограниченного простого металла с учетом поправки на локальное поле. Исследовано влияние на них плоской поверхности раздела и различных форм поправки на локальное поле.

Б.М. Markovych, I.M. Zadvorniak

EFFECTIVE POTENTIAL
OF ELECTRON-ELECTRON INTERACTION
IN THE SEMIINFINITE ELECTRON GAS
WITH REGARD FOR THE LOCAL-FIELD CORRECTION

The effective potential of electron-electron interaction and the two-particle "density-density" correlation function have been calculated for a simple semiinfinite metal making allowance for the local-field correction. The influence of a flat interface and various models of local-field correction on the results of calculations are analyzed.