

**ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ НАПІВОбМЕЖЕНОГО “ЖЕЛЕ”.
I. НАБЛИЖЕННЯ ТОМАСА-ФЕРМІ**

П. Костробій^a, О. Уханська^a, О. Кекало^{a, *}

^aНаціональний університет “Львівська політехніка”
(79013, Львів, вул. С.Бандери 12)
kekalo.alex@gmail.com

(Отримано 20 квітня 2007 р.)

Розглянуто задачу розрахунку хімічного потенціалу μ напівобмеженого взаємодіючого “желе”. Отримано рівняння для знаходження μ і знайдено його розв’язок у наближенні Томаса-Фермі, що відповідає методу функціоналу густини (DFT). Показано, що в цьому наближенні в термодинамічній границі ($N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \frac{N}{V} = const$) хімічний потенціал не залежить від сил зображення і є додатно визначеним для всіх концентрацій $\frac{N}{V}$, характерних для металів.

Ключові слова: напівобмежене желе, хімічний потенціал.

PACS: 71.45.Gm

УДК: 530.145

Вступ

Значний прогрес у розвитку експериментальних досліджень електронних властивостей поверхонь металів спричинив потребу розроблення нових теоретичних методів та моделей для пояснення явищ, що проходять на межі розділу “метал-вакуум”.

Історично першою та найуживанішою теоретичною моделлю для описання електронних властивостей поверхонь простих металів є модель “напівобмеженого желе” – система N взаємодіючих за кулонівським законом електронів у полі неперіодичної (вздовж осі, що перпендикулярна до плоскої поверхні розділу “метал-вакуум”) іонної ґратки. Вплив останньої враховується як через формування поверхневого потенціалу $V(\mathbf{r}) \equiv V(z)$ (Oz – вісь порушення періодичності), який не дозволяє електронам покинути метал, так і через компенсуюче поле рівномірно розподіленого додатного заряду з густиною

$$\rho(\mathbf{r}) \equiv \rho_{jelle}(z) \equiv \bar{n} \theta(-z - d),$$

обмеженого площиною розділу “метал-вакуум” $z = -d$. Тут $\bar{n} = \frac{N}{V}$ – середня густина електронів, V – об’єм системи, $d > 0$ – параметр, що визначається з умови електронейтральності

$$\int \{\rho(z) - \rho_{jelle}(z)\} dz = 0,$$

де $\rho(z)$ – густина електронів;

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad \text{– функція Хевісайда.}$$

Основним теоретичним методом дослідження характеристик такої моделі є метод функціоналу густини (DFT) [1], який за своєю ідеологією, незважаючи на його модифікації, є одночастинковим методом. Важливим параметром, який використовує DFT, є хімічний потенціал μ (див. [1]), для розрахунку якого потрібно коректно враховувати вплив багаточастинкових кореляцій, чого не можна досягнути в методі DFT.

У цій праці використанням розвинутого в [2–4] методу врахування багаточастинкових кореляцій в моделі напівобмеженого “желе” розглянуто задачу розрахунку хімічного потенціалу μ напівобмеженого “желе”. Отримане для μ рівняння розв’язане аналітично в одночастинковому (Томас-Фермі) наближенні. Показано, що в цьому наближенні зникає вплив “сил зображення” на хімічний потенціал. Проведено числові розрахунки μ як функції концентрації електронів і показано, що в області концентрацій електронів, характерних для металів, хімічний потенціал є додатно визначеним.

I. Хімічний потенціал напівобмеженого “желе”. Основні співвідношення

Згідно з означенням [5] хімічний потенціал μ визначається з умови

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \tag{1}$$

де Ω – термодинамічний потенціал.

* Автор-респондент

У [2–4] методом функціонального інтегрування отримано такий вираз для термодинамічного потенціалу Ω моделі напівобмеженого “желе”:

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_1 + \Omega_{int}, \quad (2)$$

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \ln \left[1 + \exp \left\{ \beta(\mu - \varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) \right\} \right] \quad (3)$$

термодинамічний потенціал невзаємодіючого напівобмеженого “желе”:

$$\Omega_1 = -\frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{|\mathbf{q}|} \times \left[1 + \exp \left\{ -\beta(\mu - \varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) \right\} \right]^{-1}, \quad (4)$$

а

$$\Omega_{int} = -\frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\omega} \ln \det \|G(\mathbf{q}, \omega)\| - \sum_{\mathbf{q}} \ln \det \|V(\mathbf{q}, 0)\| \right\}. \quad (5)$$

У виразах (3)–(5) введено такі позначення:

$$\|G(\mathbf{q}, \omega)\| = \left\{ \|V(\mathbf{q}, 0)\|^{-1} - \|D(\mathbf{q}, \omega)\| \right\}^{-1}, \quad (6)$$

$$\hat{D} = \|D(\mathbf{q}, \omega)\| = \|M\| \cdot \left\{ \|I + \hat{V}\hat{M}\| \right\}^{-1}, \quad (7)$$

$$\hat{V} = \|V(\mathbf{q}, 0)\| = \|\nu_{k_1}(\mathbf{q})\delta_{k_1+k_2, 0}\|, \quad (8)$$

де

$$\nu_{k_1}(\mathbf{q}) = \frac{\beta}{V} \frac{4\pi e^2}{q^2 + k^2}, \quad (9)$$

$$\hat{M} = \|M\| = \|M_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega)\|,$$

$M_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega)$ – кореляційна функція “густина-густина” для моделі напівобмеженого “желе” [4],

$I = \|\delta_{k_1+k_2, 0}\|$ – одинична матриця,

$\delta_{k_1+k_2, 0}$ – символ Кронекера,

$\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})$ – одночастинкові енергії невзаємодіючого напівобмеженого “желе” [2],

β – обернена температура [5],

$$\mathbf{q} = (q_x, q_y), \quad q_i = \frac{2\pi}{\sqrt{S}} n_i, \quad n_i = \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$\omega = \frac{2\pi}{\beta} m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$k = \frac{2\pi}{L} l, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$L = \frac{2V}{S}$, V – об’єм системи, S – площа поверхні розділу “метал-вакуум”.

Підставивши (3)–(5) в (1) і врахувавши, що тільки кореляційна функція $M_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega)$ залежить від хімічного потенціалу μ , отримуємо таке рівняння для знаходження μ :

$$N = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mu)) + \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mu)) + \frac{1}{2\beta} \sum_{k_1, k_2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\omega} \frac{\partial}{\partial \mu} D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega, \mu) \cdot G_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega, \mu). \quad (10)$$

Тут $G_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega, \mu)$ – екранований потенціал міжелектронної взаємодії для напівобмеженого “желе”, який є розв’язком інтегрального рівняння (див. означення (6))

$$\hat{G} = (\hat{V}^{-1} - \hat{D})^{-1} = (I - \hat{V}\hat{D})^{-1} \hat{V}, \quad (11)$$

а

$$n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) = \left[1 + \exp \left\{ -\beta(\mu - \varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) \right\} \right]^{-1} \quad (12)$$

функція розподілу Фермі-Дірака [5].

Для подальшого аналізу рівняння (10) зручно перейти в (\mathbf{q}, z) -представлення, ввівши Фур’є образ $G_{k_2 k_1}(\mathbf{q}, \omega, \mu)$ за правилом

$$G_{\mathbf{q}}(z_1, z_2 | \omega, \mu) = \sum_{k_1, k_2} \exp \{-ik_1 z_1\} \times \exp \{-ik_2 z_2\} G_{k_2 k_1}(\mathbf{q}, \omega, \mu). \quad (13)$$

В (\mathbf{q}, z) -представленні рівняння (10) можна переписати так:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mu)) + \frac{1}{V} \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mu))}{\partial \mu} + \frac{1}{2\beta V} \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz_1 \int_{-L/2}^{L/2} dz_2 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\omega} G_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) \times \frac{\partial}{\partial \mu} D(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2), \quad (14)$$

де

$$D(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) = \sum_{k_1, k_2} \exp \{-ik_1 z_1 - ik_2 z_2\} \times D_{k_1, k_2}(\mathbf{q}, \omega, \mu). \quad (15)$$

Рівняння (15) (як і (10)) є точним рівнянням для знаходження хімічного потенціалу μ і достатньо складним навіть для числового аналізу. З метою спрощення знаходження розв’язку $\mu(N, V, \beta)$ рівняння (15) запишемо це рівняння в наближенні Томаса-Фермі [2], що відповідає ідеології DFT (див. [1]).

II. Рівняння для μ в наближенні Томаса-Фермі

У наближенні Томаса-Фермі, згідно з [2]

$$\begin{aligned} G(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) &\approx G(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) = \\ &= \frac{\beta}{S} 2\pi e^2 \{ G_1(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) \theta(-z_1) \theta(-z_2) + \\ &\quad + G_2(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) \theta(z_1) \theta(z_2) + \\ &\quad + G_3(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) \theta(-z_1) \theta(z_2) \\ &\quad + G_4(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) \theta(z_1) \theta(-z_2) \}, \end{aligned} \quad (16)$$

де

$$\begin{aligned} G_1(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) &= \frac{1}{Q} \left[e^{-Q|z_1-z_2|} + \frac{Q-q}{Q+q} e^{Q(z_1+z_2)} \right], \\ G_2(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) &= \frac{1}{q} \left[e^{-q|z_1-z_2|} - \frac{Q-q}{Q+q} e^{-q(z_1+z_2)} \right], \\ G_3(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) &= \frac{2}{Q+q} e^{Qz_1-qz_2}, \\ G_4(\mathbf{q}, 0, \mu | z_1, z_2) &= \frac{2}{Q+q} e^{Qz_2-qz_1}, \\ Q &= \sqrt{q^2 + \kappa_{TF}^2}, \quad \kappa_{TF}^2 = \frac{4\pi e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}, \mu))}{\partial \mu}, \end{aligned} \quad (17)$$

κ_{TF} – обернений радіус Томаса-Фермі [5]. У цьому ж наближенні

$$D(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) \approx M^{RPA}(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2), \quad (18)$$

де $M^{RPA}(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2)$ – кореляційна функція “густина-густина” в наближенні хаотичних фаз (RPA), означена в [2], і

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\omega} D(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) &\approx \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\omega} M^{RPA}(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) \approx \\ &\approx -L^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{\mathbf{p}} \varphi_{\alpha_1}^*(z_1) \varphi_{\alpha_2}^*(z_1) \varphi_{\alpha_1}(z_2) \varphi_{\alpha_2}(z_2) \times \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial \mu} n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})). \end{aligned} \quad (19)$$

В (19) $\varphi_\alpha(z)$ – хвильові функції, що відповідають одночастинковим енергіям $\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})$. Оскільки система функцій $\{\varphi_\alpha(z)\}$ є повною, тобто

$$\sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}^*(z_1) \varphi_{\alpha}^*(z_2) = \delta(z_1 - z_2)$$

($\delta(t)$ – функція Дірака), то

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\omega} D(\mathbf{q}, \omega, \mu | z_1, z_2) &\approx \\ &\approx -L^2 \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{p}} \varphi_{\alpha}^*(z_1) \varphi_{\alpha}(z_2) \delta(z_1 - z_2) \frac{\delta n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}))}{\partial \mu} \end{aligned} \quad (20)$$

і тому рівняння (14) для знаходження μ можна переписати так:

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) + \frac{1}{V} \frac{1}{2S} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \frac{\partial n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}))}{\partial \mu} \\ &\quad - \frac{1}{2\beta V} \frac{1}{L^2} \int_{-L/2}^{L/2} dz \sum_{\mathbf{q}} G(\mathbf{q}, 0, \mu | z, z) \times \\ &\quad \times \sum_{\alpha, \mathbf{p}} \frac{\partial n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}))}{\partial \mu} |\varphi_\alpha(z)|^2. \end{aligned} \quad (21)$$

III. Числові результати

Як видно із структури рівняння (21), для знаходження його розв’язку – хімічного потенціалу μ – необхідно задати як одночастинковий спектр $\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})$, так і одночастинкові хвильові функції $\varphi_\alpha(z)$ невзаємодіючого напівобмеженого “желе”. Останні однозначно визначаються поверхневим потенціалом $V(z)$, який в цій праці моделюватимемо нескінченно високим бар’єром [1]

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & z \geq 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases}. \quad (22)$$

Така модель $V(z)$ добре описує металічні системи з поверхнею розділу “метал-вакуум”, для яких виконується умова $W \gg \mu$, де W – робота виходу [1]. Для моделі (22) поверхневого потенціалу $V(z)$

$$\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}) = \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 + \alpha^2), \quad (23)$$

$$\varphi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \sin \alpha z \theta(-z).$$

Тут $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$,

$$p_{i=x,y} = \frac{2\pi n_i}{\sqrt{S}}, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

$$\alpha = \frac{2\pi g}{L}, \quad g \in N,$$

m – маса електрона, \hbar – стала Планка [5].

Оскільки для металічних систем завжди виконується нерівність $\beta\mu \gg 1$ [5], внаслідок чого

$$n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p})) = \theta(\mu - \varepsilon_\alpha(\mathbf{p})), \quad (24)$$

$$\frac{\partial n(\varepsilon_\alpha(\mathbf{p}))}{\partial \mu} = \delta(\mu - \varepsilon_\alpha(\mathbf{p})),$$

то в термодинамічній границі ($L\kappa_{TF} \gg 1$, $S\kappa_{TF}^2 \gg 1$), замінивши в рівнянні (21) підсумовування за змінними \mathbf{q} , \mathbf{p} , α інтегруванням за правилом [6]

$$\frac{1}{L} \sum_{\alpha} \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\alpha;$$

$$\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y;$$

$$\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dq_x dq_y,$$

отримаємо:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \theta(\mu - \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})) = \frac{1}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{3/2},$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha} \delta(\mu - \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{1/2}. \quad (25)$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha} \delta(\mu - \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p})) \cdot \left[\frac{1}{2s} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q} - \frac{1}{2\beta} \int_{-L/2}^{L/2} dz \sum_{\mathbf{q}} G(\mathbf{q}, 0, \mu | z, z) \cdot |\varphi_{\alpha}(z)|^2 \right] =$$

$$= \frac{\varkappa_{TF}^3}{8\pi} + \varkappa_{TF}^2 \lim_{\substack{y \rightarrow \infty \\ (y=L\varkappa_{TF})}} \frac{1}{y} \int_0^{\infty} x dx \dots$$

$$\dots \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} \frac{\sqrt{x^2+1}-x}{\sqrt{x^2+1}+x} \left(1 - e^{-2y\sqrt{x^2+1}} \right). \quad (26)$$

Тут

$$\frac{\varkappa_{TF}^3}{8\pi} = \frac{1}{\pi^{5/2}} \frac{1}{a_B^{3/2}} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/4} \mu^{3/4}, \quad (27)$$

a_B – борівський радіус [6]. Оскільки

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{1}{y} \int_0^{\infty} \frac{x}{\sqrt{x^2+1}} \frac{\sqrt{x^2+1}-1}{\sqrt{x^2+1}+1} \left(1 - e^{-2y\sqrt{x^2+1}} \right) dx = 0,$$

що означає відсутність впливу сил зображення на хімічний потенціал μ у наближенні Томаса-Фермі, то з врахуванням (25), (26), (27) рівняння (21) можна записати так:

$$r_s^{-3} = \frac{4}{9\pi} (\mu^*)^{3/2} + \frac{4}{3\pi^{3/2}} (\mu^*)^{3/4}. \quad (28)$$

Тут введено параметр Гелл-Манна-Бракнера r_s [1], який визначається умовою

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3} r_s^3 a_B^3,$$

а

$$\mu^* = \mu \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m a_B^2} \right)^{-1}.$$

Розв'язок (28) легко знайти

$$\mu^* = \left[\frac{3}{2\sqrt{\pi}} \left(\sqrt{1 + \frac{\pi^2}{r_s^3}} - 1 \right) \right]^{4/3}. \quad (29)$$

Числові результати залежності μ^* як функції r_s (а значить функції концентрації $\frac{N}{V}$) наведені в таблиці та на рис. 1. Результати розрахунку μ показують (це видно і з формули (29)), що на відміну від моделі однорідного “желе” [7], хімічний потенціал μ є додатно-визначеним у всій області зміни параметра r_s , характерних для металів ($r_s = 2 \div 6$).

На рис.2 зображено розраховані залежності $\frac{\mu^*}{\mu_0}$, як функції параметра r_s , а μ_0 – хімічний потенціал незваємодіючого напівобмеженого “желе”

($\mu_0 = \left(\frac{9\pi}{4r_s^3} \right)^{2/3}$ – розв'язок рівняння

$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\alpha} \theta(\mu - \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{p}))$). Результати розрахунку показують, що для металічних систем ($r_s = 2 \div 6$) при розрахунку поверхневих властивостей потрібно враховувати значну ($\frac{\mu^*}{\mu_0} = 0.02 \div 0.25$) зміну хімічного потенціалу μ , що не враховують під час використання методу функціоналу густини (DFT) [1].

Залежність μ^* та $\frac{\mu^*}{\mu_0}$ від r_s

r_s	μ^*	μ^*/μ_0
1	2,42594	0,65866
2	0,31307	0,34000
3	0,07454	0,18214
4	0,02502	0,10870
5	0,01049	0,07119
6	0,00511	0,04997

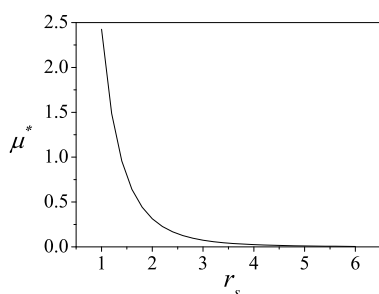


Рис. 1. Залежність μ^* від r_s

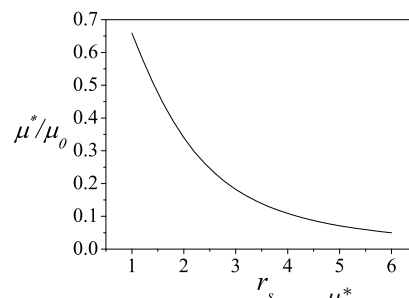


Рис. 2. Залежність $\frac{\mu^*}{\mu_0}$ від r_s

Література

- [1] Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электронного газа. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
- [2] Костробій П.П., Маркович Б.М. // Журн. фізичних досліджень. – 2003. – 7, № 2. – С. 195–206.
- [3] Костробій П.П., Маркович Б.М. // Журн. фізичних досліджень. – 2003. – 7, № 3. – С. 298–312.
- [4] Kostrobiiy P.P., Markovych B.M. // Condens Matter Phys. – 2003. – 6, № 2(34). – P. 347–362.
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.І. – М.: Физматгиз, 2002. – 613 с.
- [6] Вакарчук І.О. Квантова механіка. – Львів: В-во Львів. Нац. ун-ту імені Івана Франка, 2004. – 783 с.
- [7] Ваврух М.В., Крохмальський Т.Е. Препринт ИТФ-86-146Р. – К., 1986. – 48 с.

CHEMICAL POTENTIAL OF SEMIINFINITE JELLIUM. I. THOMAS-FERMI'S APPROXIMATION

P. Kostrobiiy^a, O. Ukhanska^a, O. Kekalo^{a, *}

^a*Lviv Polytechnic National University*
(12, S.Bandera Str., Lviv 79013)
kekalo.alex@gmail.com

The problem of calculation of the semiinfinite jellium chemical potential μ is considered. The equation for determination of chemical potential μ is obtained and its solution in Thomas-Fermi's approximation is founded. It is shown, that in this approximation in thermodynamic limit $\left(N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \frac{N}{V} = const\right)$ the chemical potential μ does not depend on image forces and is positively defined for all metallic concentrations.

Keywords: semiinfinite jellium, chemical potential

PACS: 71.45.Gm

UDK: 530.145

*Corresponding author