

铝表面的电子关联函数*

冯伟国 孙鑫

(复旦大学物理系)

1984年5月28日收到

提 要

根据金属表面的多体波函数,建立了非均匀电子关联函数的积分方程,对此方程消除了因长程关联而出现的发散。在第一次迭代下求得了铝表面的电子关联函数的数值结果。

在文献[1]中,我们给出了金属表面的 Hartree-Fock 关联函数,本文将进一步考虑相互作用,分下述三步进行:

1. 建立关联函数的方程,并将它按短程因子 $h_{ij}(\lambda)$ 的方次进行排列,从而使此方程有较好的收敛性;
2. 分离出所有的发散项,证明它们严格相互抵消;
3. 对于铝表面,求解方程得到关联函数的数值结果。

一、关联函数的方程

n 粒子的分布函数 $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n|\lambda)$ 和关联函数 $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n|\lambda)$ 的定义为

$$P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n|\lambda) = \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N|\lambda)|^2 d\mathbf{r}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N}{\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N|\lambda)|^2 d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N}, \quad (1)$$

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n|\lambda) = \frac{P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n|\lambda)}{P(\mathbf{r}_1|\lambda) \cdot P(\mathbf{r}_2|\lambda) \dots P(\mathbf{r}_n|\lambda)}, \quad (2)$$

其中 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N|\lambda)$ 为金属表面的多体波函数,已在文献[2]中给出。将(1)式对 λ 微分后再积分就可得到二粒子分布函数满足的积分方程

$$P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda) = P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|0) \exp \left\{ \lambda u(r_{12}) + \int_0^\lambda d\lambda' \int d\mathbf{r}_3 [u(r_{13}) + u(r_{23})] P(\mathbf{r}_3|\lambda') g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3|\lambda') / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') \right\}$$

* 中国科学院科学基金资助的课题。

$$+ \frac{1}{2} \int_0^\lambda d\lambda' \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 u(r_{34}) P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') \\ \times [g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4|\lambda') - g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') g(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4|\lambda')] / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') \}. \quad (3)$$

对三、四粒子关联函数用卷积^[3]展开,并引进

$$h_{ij}(\lambda) \equiv g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j|\lambda) - 1, \quad (4)$$

从(3)式可得到关联函数 $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda)$ 的积分方程为

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda) = g_{\text{H-F}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left\{ \int_0^\lambda d\lambda' \left[\sum_{n=1}^5 K_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') + D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') \right] \right\}, \quad (5)$$

其中 $g_{\text{H-F}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 为 Hartree-Fock 关联函数,已在文献[1]中给出, K_n 是含有 n 个 $h_{ij}(\lambda)$ 的积分,

$$K_1 = \int d\mathbf{r}_3 P(\mathbf{r}_3|\lambda') h_{23}(\lambda') [u(r_{13}) - u(r_{12})], \quad (6)$$

$$K_2 = \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') h_{13}(\lambda') h_{24}(\lambda') [u(r_{34}) - u(r_{23})], \quad (7)$$

$$K_3 = \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') h_{14}(\lambda') h_{24}(\lambda') h_{34}(\lambda') [u(r_{13}) \\ - u(r_{14}) + u(r_{23}) - u(r_{24})] / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda'), \quad (8)$$

$$K_4 = \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') P(\mathbf{r}_5|\lambda') h_{15}(\lambda') h_{35}(\lambda') \{ h_{25}(\lambda') h_{34}(\lambda') \\ \times [u(r_{34}) - u(r_{35})] + [h_{14}(\lambda') h_{25}(\lambda') + h_{24}(\lambda') h_{25}(\lambda') \\ + h_{24}(\lambda') h_{45}(\lambda')] \cdot [u(r_{34}) - u(r_{45})] \} / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda'), \quad (9)$$

$$K_5 = \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 \int d\mathbf{r}_6 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') P(\mathbf{r}_5|\lambda') P(\mathbf{r}_6|\lambda') h_{46}(\lambda') h_{36}(\lambda') \\ \cdot \left\{ \frac{1}{2} [h_{15}(\lambda') h_{25}(\lambda') - h_{16}(\lambda') h_{26}(\lambda')] h_{36}(\lambda') u(r_{34}) \right. \\ \left. + h_{15}(\lambda') h_{35}(\lambda') h_{26}(\lambda') [u(r_{34}) - u(r_{45})] \right\} / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda'). \quad (10)$$

$D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda')$ 中包括两项,它们都是发散的.

$$D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') = \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') u(r_{34}) h_{14}(\lambda') h_{24}(\lambda') / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') \\ + \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 P(\mathbf{r}_3|\lambda') P(\mathbf{r}_4|\lambda') P(\mathbf{r}_5|\lambda') u(r_{34}) h_{15}(\lambda') h_{25}(\lambda') h_{45}(\lambda') \\ / g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda'). \quad (11)$$

根据 $h_{ij}(\lambda)$ 的归一化条件

$$- \int d\mathbf{r}_i P(\mathbf{r}_i|\lambda) h_{ij}(\lambda) = 1, \quad (12)$$

可证明 $D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda')$ 中的发散部分严格抵消,其结果将在下一节中给出.

关联函数方程(5)按上述方式排列有两个优点. 首先,每个 K_n 中都含有两个 u 或 h 之差,这两部分的相互抵消,使得 K_n 比较小,同时也减少了数值计算的误差. 其次,由

于 $h_{ij}(\lambda)$ 是短程的, 当 h 的方次增加时, K_n 的积分数值将减小, 这可简化多重积分的计算工作量. 对多重积分我们采用 Monte-Carlo 方法.

当 $\mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}_2$ 进入到金属内部时, 关联函数 $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda)$ 将变为各向同性的大块金属的 $g(r_{12}|\lambda)$, 同时 $P(\mathbf{r}_i|\lambda) = n$ (金属的电子密度), 这时不难看到, 含发散项的 $D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda')$ 消失, 即

$$D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda') = 0 \quad (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \text{ 在金属内部}). \quad (13)$$

并且(5)式简化为

$$g(r_{12}|\lambda) = g_{H-F}(r_{12}) \exp \left\{ \int_0^\lambda d\lambda' \left[\sum_{n=1}^3 B_n(r_{12}|\lambda') \right] \right\}, \quad (14)$$

其中

$$B_1(r_{12}|\lambda') = n^2 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 h(r_{13}|\lambda') h(r_{24}|\lambda') [u(r_{12}) + u(r_{34}) - 2u(r_{14})], \quad (15)$$

$$B_2(r_{12}|\lambda') = 2n^3 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 h(r_{13}|\lambda') h(r_{15}|\lambda') h(r_{23}|\lambda') h(r_{34}|\lambda') \\ \cdot [u(r_{13}) + u(r_{45}) - 2u(r_{14})] / g(r_{12}|\lambda'), \quad (16)$$

$$B_3(r_{12}|\lambda') = n^4 \int d\mathbf{r}_3 \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 \int d\mathbf{r}_6 h(r_{15}|\lambda') h(r_{35}|\lambda') h(r_{26}|\lambda') h(r_{46}|\lambda') h(r_{56}|\lambda') \\ \cdot [u(r_{34}) + u(r_{56}) - 2u(r_{36})] / g(r_{12}|\lambda'). \quad (17)$$

在数值求解(15)式时, 将利用(14)式作为渐近条件. 因为(14)式中的各个因子都是两点坐标差的函数, 于是可以进行 Fourier 变换, 将关联函数 $g(r_{12}|\lambda)$ 用结构因子 $s(\mathbf{k}|\lambda)$ 来表示,

$$s(\mathbf{k}|\lambda) = 1 + n \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} [g(r|\lambda) - 1], \quad (18)$$

从(14)式可得到 $s(\mathbf{k}|\lambda)$ 的方程为

$$\frac{ds(\mathbf{k}|\lambda)}{d\lambda} = s^2(\mathbf{k}|\lambda) \left\{ nc(\mathbf{k}) + \frac{1}{(2\pi)^3} \right. \\ \left. \times \int d\mathbf{k}_1 c(\mathbf{k}_1) [s(|\mathbf{k} + \mathbf{k}_1||\lambda) - 1] s^2(\mathbf{k}_1|\lambda) \right\}. \quad (19)$$

这与大块金属中结构因子的方程^[3]相一致.

二、发散项的抵消

对于库仑相互作用, $u(r_{34}) \sim 1/r_{34}$ 是长程的. 在 $D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda')$ 表达式(11)的两项中, 由于 $\mathbf{r}_3$ 没有短程因子 $h_{ij}(\lambda)$ 与外点 $\mathbf{r}_1$ 或 $\mathbf{r}_2$ 相连, 所以对 $\mathbf{r}_3$ 的积分将引起发散. 利用(12)式可将(11)式中的两项合并为

$$D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda) = \int d\mathbf{r}_4 \int d\mathbf{r}_5 P(\mathbf{r}_4|\lambda) P(\mathbf{r}_5|\lambda) h_{15}(\lambda') h_{25}(\lambda') h_{45}(\lambda') \mathcal{D}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) / \\ g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda), \quad (20)$$

其中

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) = \int d\mathbf{r}_3 P(\mathbf{r}_3|\lambda)[u(r_{34}) - u(r_{35})]. \quad (21)$$

从(21)式可见, $\mathcal{D}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda)$ 中 $u(r_{34})$ 和 $u(r_{35})$ 所产生的发散(平方发散)相互抵消. 但是, 如果对一块表面直接计算 $\mathcal{D}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda)$, 由于

$$\lim_{r_3 \rightarrow \infty} [u(r_{34}) - u(r_{35})] \sim \frac{1}{r_3^2},$$

(21)式仍然要出现线性发散, 文献[2]曾指出该发散的来源和消去的方法.

将一大块金属解理成两块对称的表面时(见图1), 正确处理这个模型的做法是同时考虑解理后的这两块表面, 再令两块表面间的距离 $2z_G \rightarrow \infty$.

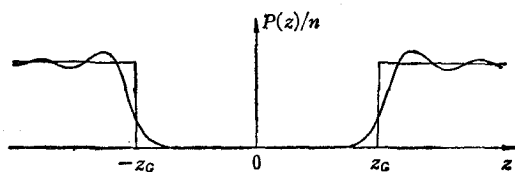


图 1

如果只考虑一块表面, (21)式是线性发散的. 但是, 同时考虑两块表面后, (21)式是收敛的, 其结果为(推导过程见附录)

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) = \mathcal{D}(z_4|\lambda) - \mathcal{D}(z_5|\lambda), \quad (22)$$

其中

$$\mathcal{D}(z|\lambda) = 2\pi a n \left[\mathcal{F}(z|\lambda) + \frac{1}{nb} \mathcal{P}(z|\lambda) - \mathcal{K}(z + z_G) \right], \quad (23)$$

且

$$\mathcal{F}(z|\lambda) = 2 \int_{-z_G}^{\infty} dz' \left[\frac{1}{n} P(z|\lambda) - \theta(-z_G - z) \right] (z' - z), \quad (24)$$

$$\mathcal{P}(z|\lambda) = \int_0^{\infty} [P(z + z'|\lambda) - P(z - z'|\lambda)] e^{-bz'} dz', \quad (25)$$

$$\mathcal{K}(z) = \theta(z) z^2, \quad (26)$$

式中 a 和 b 为相关因子

$$u(r) = -\frac{a}{r} (1 - e^{-br}) \quad (27)$$

中金属的特性常数, 其数值见文献[2].

将(24)–(26)式代入(20)式就可得到发散消除后的有限结果.

三、金属铝的数值结果

求解(5)式可得到金属表面的非均匀关联函数

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|1). \quad (28)$$

因为

$$g_{H-F}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \geq \frac{1}{2}, \quad (29)$$

而且 $K_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda)$ 和 $D(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda)$ 都是实数, 这就保证了关联函数大于零, 这是本文方法的优点. 其它方法求得的关联函数 $g(0)$ 可能出现负值^[4], 那是违反关联函数的定义的.

由于 K_n 中含有多重积分, 用多次迭代法求解积分方程(5)的计算量是非常大的. 考虑到 $K_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\lambda)$ 随 λ 的变化比较缓慢, 本文只作第一次迭代, 即用 $g_{H-F}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 来计算 K_n 和 D . 对于金属铝 ($r_s = 2.07$), $a = 2e^2/\hbar\omega_p = 1.82 \text{ \AA}$, $b = 1.40 \text{ \AA}^{-1}$, $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 的数值结果如图 2—4 所示. 因为金属表面的非均匀关联函数 $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 是三个变量 z_1 , z_2 和 $R = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$ 的函数, 它可表为

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g(z_1, z_2, R). \quad (30)$$

图 2—4 分别对应于三个不同的 z_1 的位置: $k_F z_1 = 0.2, -1.8, -3.8$ (以表面的 Gibbs 面为原点). 对于每个 z_1 的数值, 图 (a) 是 $g_{H-F}(z_1, z_2, R)$, 图 (b) 是 $g(z_1, z_2, R)$, 图中的横坐标为 $k_F(z_2 - z_1)$, 纵坐标为关联函数的数值. 每个图中给出了三条曲线, 从下向上, 它

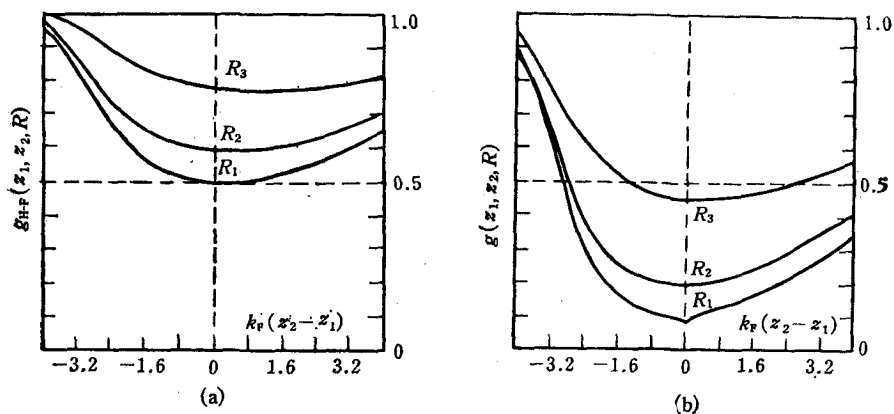


图 2 $k_F z_1 = 0.2$

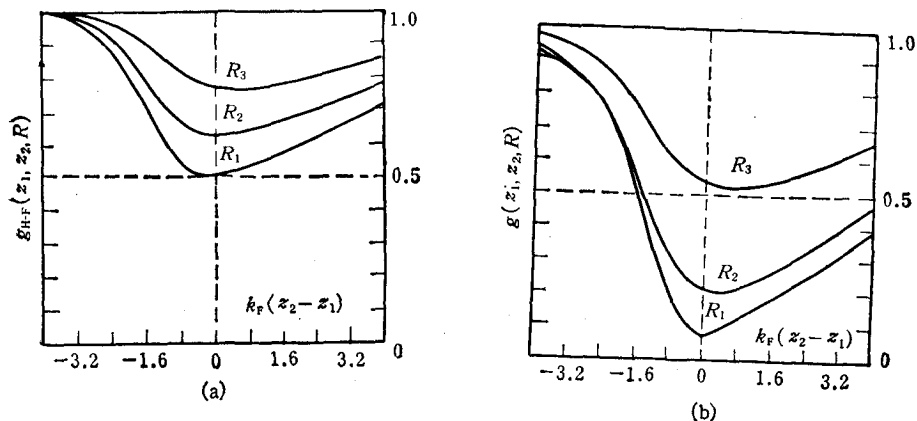
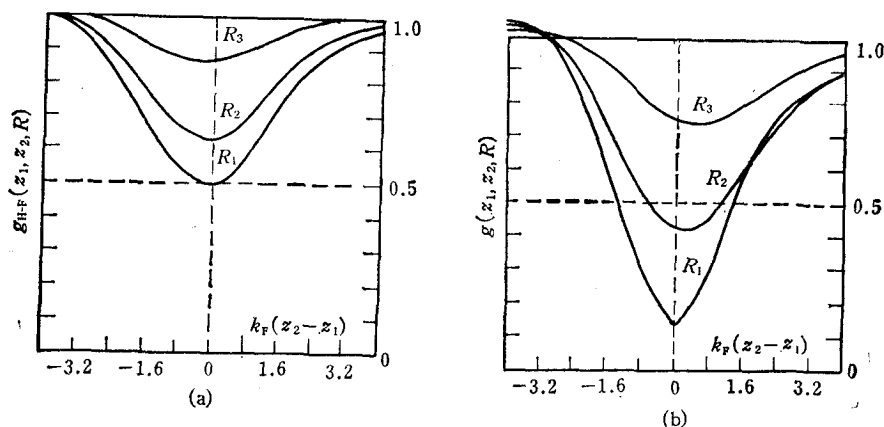


图 3 $k_F z_1 = -1.8$

图 4 $k_F z = -3.8$

们分别对应于三个不同的 R 的数值: $k_F R_1 = 0$; $k_F R_2 = 1.2$; $k_F R_3 = 2.4$.

由图可见,对于非均匀的关联函数,在 z_1 的两边是不对称的,离表面愈近,不对称性愈显著.当 z_1 和 z_2 进入金属内部时, $g(r_1, r_2)$ 将趋向均匀电子气的关联函数^[3].

我们正设法用多次迭代法来求解积分方程(5),以便得到准确的解.并进一步用非均匀的关联函数来计算功函数.

附 录

由于电荷密度分布只与 z 有关,故(21)式可简化为

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda) &= \int d\mathbf{r}_3 P(z_3 | \lambda) dx_3 dy_3 [u(r_{34}) - u(r_{35})] \\ &= \int d\mathbf{r}_3 P(z_3 | \lambda) \cdot 2\pi \int_{|z_3 - z_4|}^{|z_3 - z_5|} \xi u(\xi) d\xi.\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

令

$$u_l(r) = -\frac{a}{r}, \quad (\text{A.2})$$

$$u_s(r) = \frac{a}{r} e^{-br}, \quad (\text{A.3})$$

则

$$u(r) = -\frac{a}{r} (1 - e^{-br}) = u_l(r) + u_s(r). \quad (\text{A.4})$$

$u_l(r)$ 是长程的,它要引起发散. $u_s(r)$ 是短程的,不会引起发散,将 (A.4) 式代入 (A.1) 式得

$$\mathcal{Q}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda) = \mathcal{Q}_l(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda) + \mathcal{Q}_s(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda), \quad (\text{A.5})$$

其中

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_s(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda) &= 2\pi \int d\mathbf{r}_3 P(z_3 | \lambda) \int_{|z_3 - z_4|}^{|z_3 - z_5|} \xi u_s(\xi) d\xi \\ &= 2\pi \frac{a}{b} [\mathcal{P}(z_4 | \lambda) - \mathcal{P}(z_5 | \lambda)].\end{aligned}\quad (\text{A.6})$$

这里

$$\mathcal{P}(z | \lambda) = \int_0^\infty [P(z + z' | \lambda) + P(z - z' | \lambda)] e^{-bz'} dz'. \quad (\text{A.7})$$

而

$$\mathcal{Q}_l(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5 | \lambda) = 2\pi \int d\mathbf{r}_3 P(z_3 | \lambda) \int_{|z_3 - z_4|}^{|z_3 - z_5|} \xi u_l(\xi) d\xi. \quad (\text{A.8})$$

其被积函数中包含着长程关联因子 $u_l(\xi)$, 在计算时必须加以物理的分析. 首先, 表面是由大块金属解理成两个相同的半块而形成的, 因此, 解理后存在着两个对称的表面(见图 1) 此时,

$$f(z_3|\lambda) = n[\theta(-z_3 - z_G) + \theta(z_3 - z_G) + f(z_3|\lambda)], \quad (\text{A.9a})$$

且

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(z_3|\lambda) dz_3 = 0. \quad (\text{A.9b})$$

将 (A.9a) 式代入 (A.8) 式得

$$\mathcal{D}_l(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) = \mathcal{D}_{l1}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) + \mathcal{D}_{l2}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda), \quad (\text{A.10})$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{l1}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) &= 2\pi n \int_{-\infty}^{\infty} dz_3 f(z_3|\lambda) \int_{|z_3-z_4|}^{|z_3-z_5|} \xi u_l(\xi) d\xi \\ &= 2\pi n n [\mathcal{F}(z_4|\lambda) - \mathcal{F}(z_5|\lambda)]. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

这里

$$\mathcal{F}(z|\lambda) = 2 \int_z^0 dz' f(z'|\lambda)(z' - z), \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{l2}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) &= 2\pi n \int_{-\infty}^{\infty} dz_3 \theta(-z_3 - z_G) \int_{|z_3-z_4|}^{|z_3-z_5|} \xi u_l(\xi) d\xi \\ &\quad + 2\pi n \int_{-\infty}^{\infty} dz_3 \theta(z_3 - z_G) \int_{|z_3-z_4|}^{|z_3-z_5|} \xi u_l(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

这里第一项是图 1 中左边半块的贡献, 第二项是右边半块的贡献, 为了使此积分具有确定的意义, 必须对长程关联因子 $u_l(\xi)$ 加上收敛因子 $e^{-\varepsilon\xi}$, 并在最后结果中令 $\varepsilon \rightarrow 0$. 但要注意, 两个半块之间的距离为 $2z_G$, 那里是真空, 因而当考虑右边半块对左边的影响时, 其收敛因子应该是 $e^{-\varepsilon(\xi-2z_G)}$. 这样一来,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{l2}(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_5|\lambda) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (-2\pi n a) \left\{ \int_{-\infty}^{-z_G} dz_3 \int_{|z_3-z_4|}^{|z_3-z_5|} e^{-\varepsilon\xi} d\xi \right. \\ &\quad \left. + \int_{z_G}^{\infty} dz_3 \int_{|z_3-z_4|}^{|z_3-z_5|} e^{-\varepsilon(\xi-2z_G)} d\xi \right\} \\ &= 2\pi n a [\mathcal{X}(z_5 + z_G) - \mathcal{X}(z_4 + z_G)], \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

其中

$$\mathcal{X}(z) = \theta(z)z^2. \quad (\text{A.15})$$

将 (A.14) 和 (A.11) 式代入 (A.10) 式, 再将 (A.10) 和 (A.6) 式代入 (A.5) 式, 就得到正文中的 (22) 式.

参 考 文 献

- [1] 冯伟国、孙鑫, 物理学报, **33**(1984), 1719.
- [2] X. Sun, M. Farjam and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 5599.
- [3] S. Chakravarty and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 4815.
- [4] K. Singwi and M. Tosi, *Solid State Physics*, **36**(1981), 211.

THE ELECTRON CORRELATION FUNCTION OF Al SURFACE

FENG WEI-GUO SUN XIN

(Department of Physics, Fudan University)

ABSTRACT

The integral equation for the inhomogeneous electron correlation function is established on the basis of the many-body wave function of metal surface, and the divergent terms in this equation caused by the long-range correlation are eliminated. Then we get the numerical results of the correlation function for Al surface in the first iteration.