

К-219

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

17-90-468

КАРДЕНАС ПОНСЕ РОЛАНДО ХОСЕ

УДК 538.975

**ЭЛЕКТРОННЫЕ АСПЕКТЫ
ТЕОРИИ ХЕМОСОРБЦИИ
ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ
ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ**

Специальность: 01.04.02 - теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1990

**Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
Объединенного института ядерных исследований**

Научные руководители:

доктор физико-математических наук,
профессор

Федянин В. К.

кандидат физико-математических наук

Гавриленко Г. М.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор

С. Ф. Тимашев

доктор физико-математических наук

В. Ф. Лось

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

ЛГУ, кафедра статистической физики

Автореферат разослан

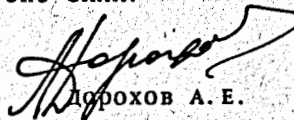
"24" октября 1990 года.

Защита диссертации состоится "21" ноября 1990 года.

на заседании специализированного Ученого совета К047.01.01
Лаборатории теоретической физики Объединенного института
ядерных исследований, г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

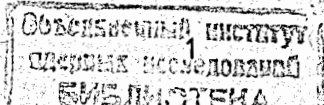
Ученый секретарь Совета


Дорохов А. Е.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы: В последние годы наблюдается растущий интерес к исследованиям по физике поверхностных явлений и, в частности, к теории хемосорбции. Причинами такого интереса служат, с одной стороны, большое прикладное значение этих исследований, которые позволяют глубже понять сущность физических механизмов катализа, коррозии, гидролиза и других технологических процессов. С другой стороны, такие системы, в которых имеется граница раздела фаз, интересные также и с точки зрения фундаментальных исследований. Так открытие большого многообразия фазовых переходов типа порядок-беспорядок в адсорбате и принадлежащих в зависимости от симметрии подложки различным классам универсальности в своем критическом поведении позволяет непосредственно проверить и уточнить общие положения теории фазовых переходов для двухмерных систем.

Совершенствование методов расчета зонной структуры поверхности методами квантовой механики и особенно привлечение в теорию поверхностных явлений таких подходов, как метод модельных гамильтонианов, метод функционала плотности, кластерные модели квантовой химии и других позволило понять ряд особенностей физики поверхности [1, 2]. Тем не менее, в области фундаментальных исследований хемосорбции эксперимент, вообще говоря, опережает теорию. Имеется ряд особенностей, свойственных исключительно хемосорбционным процессам, таких, например, как сильные корреляционные эффекты в хемосорбированных системах адсорбент-адсорбат, которые еще не до конца поняты, с другой стороны, повышенные требования к самосогласованности описания, по сравнению с объемными задачами, затрудняют формулировки моделей и интерпретацию получаемых результатов. В этой связи исследование, обобщающее несколько частных моделей или подходов и позволяющее выявить их ограниченность, несомненно является полезным.



Полное описание хемосорбированных систем требует самосогласованного микроскопического описания электронных и термодинамических (ионных) свойств атомных субмонослойных покрытий. До настоящего момента эти две стороны проблемы рассматриваются независимо друг от друга. Кроме того, в большинстве работ по теории хемосорбции при описании электронных свойств рассматриваются два предельных случая: адсорбция отдельных атомов (предел малых концентраций) и полное заполнение монослоя. Однако для описания реальных хемосорбированных систем представляет значительный интерес вычисление электронных характеристик адсорбата во всем интервале субмонослойных покрытий $0 \leq \theta \leq 1$.

Предложенный в работе /3/ и развитый в диссертации метод составных гамильтонианов Андерсона-Изинга позволяет описывать самосогласованным образом электронные и ионные свойства субмонослойных покрытий поверхностей кристаллических твердых тел. В рамках формализма метода выводятся модельные гамильтонианы типа Андерсона и Изинга, устанавливая явным образом их взаимосвязь при исследовании хемосорбции. Основное преимущество этого подхода состоит в том, что он, благодаря его микроскопической природе, позволяет делать неэмпирические расчеты, сохраняя в то же время относительную простоту метода модельных гамильтонианов при учете различных корреляционных эффектов в адсорбате.

Основные цели работы: В соответствии с перечисленным выше основными целями диссертации являются:

1. - Построение в рамках метода составных гамильтонианов аппарата для теоретического описания хемосорбции водородоподобных атомов на металлических поверхностях с учетом различных корреляционных эффектов в электронном компоненте адсорбата.

2. - Применение развитого формализма для описания электронных характеристик атомных субмонослойных покрытий поверхностей переходных металлов при хемосорбции водорода. Исследование носит модельный характер и на данном этапе мы

не претендуем на точное воспроизведение конкретных экспериментов.

Научная новизна и практическая ценность: В диссертации реализуются широкие возможности использования метода составных гамильтонианов Андерсона-Изинга для описания хемосорбционных систем:

- На основе простой, но точно решаемой модели показана общая схема обработки гамильтониана системы адсорбат-адсорбент, включая ионные корреляционные эффекты. Показано, что электронные корреляционные функции имеют смысл условных вероятностей.

- Дается обобщение стандартной модели Андерсона /4/ на случай конечных субмонослойных покрытий с учетом дополнительных взаимодействий в электронном компоненте адсорбата, которые до настоящего момента учитывались полуфеноменологически.

- Проведены численные расчеты зависимости электронных характеристик систем от концентрации примеси на поверхности. Результаты расчетов хорошо согласуются с имеющимися представлениями о характере хемосорбционной связи и позволяют оценить значения параметров модели Андерсона и применимость различных приближенных методов ее обработки. Показано, что в модели может произойти магнитный фазовый переход второго рода и возможен кроссовер в критическом поведении магнитного момента на примесях.

- Показано, что учет влияния частичного заполнения орбитали адатома существенный при количественном описании хемосорбции. Такое взаимодействие должно быть учтено наряду с кулоновскими корреляциями на адатоме при работе с гамильтонианом Андерсона.

Предложенная схема расчета может быть успешно применена для описания экспериментальных систем, при этом затраты при вычислениях ниже по сравнению с традиционными методами. Обобщение формализма на более сложные адсорбенты или на учет других взаимодействий не составляет принципиальных трудностей.

Апробация работы: Результаты, представляемые в диссертации, докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ, Центра прикладных исследований для развития ядерной энергетики (Гавана, Куба), в Институте физики при университете М. Кюри (Люблин, Польша), в Международном центре теоретической физике (Триест, Италия), на 10-ой Конференции IUPAC по химической термодинамике (Прага, 1988), на XVIII Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений (Калинин, 1988) и на III Всесоюзном школа-семинаре "Теоретико-групповые и компьютерно-алгебраические методы исследований нелинейных проблем физики", (Рахов, 1989).

Публикации: По материалам диссертации опубликовано 8 работ.

Объем работы: Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Она содержит 110 страниц машинописного текста, 29 рисунков и библиографический список из 111 названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Введение содержит краткое обсуждение проблем описания хемосорбированных металлических поверхностей. Излагается цель работы, показывается ее новизна и практическая ценность. Дается план диссертации.

Первая глава носит вводный характер. В §1 обсуждается полуфеноменологическое описание хемосорбции на основе модели Андерсона и его различных модификаций. Дается краткая дискуссия проблем, возникающих при попытке связать параметры модели с атомными характеристиками и с результатами расчетов из первых принципов.

В §2 дается краткое изложение метода составных гамильтонианов Андерсона-Изинга. Обсуждается проблема квантования системы с неопределенностью части фазовых состояний, такая проблема характерна для большинства примесных задач, когда конфигурация расположения примесей не фиксирована. Показывается, что квантование системы нужно проводить с

операторными функциями электронных и ионных полей в виде:

$$\psi^+(X) = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ \varphi_{k\sigma}^+(X) + \sum_{\alpha\sigma} N_{\alpha} b_{\alpha\sigma}^+ \varphi_{\alpha\sigma}^+(X), \quad \psi(X) = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma} \varphi_{k\sigma}(X) + \sum_{\alpha\sigma} N_{\alpha} b_{\alpha\sigma} \varphi_{\alpha\sigma}(X), \quad (1)$$

$$\phi^+(R) = \sum_{\alpha\eta} c_{\alpha\eta}^+ \varphi_{\alpha\eta}^+(R), \quad \phi(R) = \sum_{\alpha\eta} c_{\alpha\eta} \varphi_{\alpha\eta}(R), \quad N_{\alpha} = \sum_{\eta} c_{\alpha\eta}^+ \varphi_{\alpha\eta}(R),$$

где амплитуды $a_{k\sigma}^+$, $a_{k\sigma}$, $b_{\alpha\sigma}^+$ и $b_{\alpha\sigma}$ являются ферми операторами рождения и уничтожения электрона металла и примесного электрона в состояниях (k, σ) и (α, σ) соответственно, σ спиновая переменная. Амплитуды $c_{\alpha\eta}^+$ и $c_{\alpha\eta}$ являются операторами рождения и уничтожения примесного иона в центре адсорбции α во внутреннем состоянии η , эти операторы подчиняются коммутационным соотношениям Паули. Такое определение полей отличается от стандартного присутствием ионных операторов в электронных полях и определяет составную структуры гамильтониана системы, который дается выражением

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{\alpha\sigma} N_{\alpha} \left\{ E_{\alpha} n_{\alpha\sigma} + \frac{U}{2} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha-\sigma} - \right. \\ \left. - \sum_k \left[\left(v_{\alpha\alpha k} n_{\alpha-\sigma} - v_{\alpha k} \right) b_{\alpha\sigma}^+ a_{k\sigma} + \text{э.с.} \right] \right\} + \\ + \sum_{\substack{\alpha \neq \beta \\ \alpha\beta k k' \sigma \sigma'}} v_{\alpha k \beta k'} N_{\alpha} N_{\beta} b_{\alpha\sigma}^+ a_{k\sigma}^+ b_{\beta\sigma} a_{k'\sigma} + H^{**} + c,$$

где в явном виде выписаны взаимодействия, играющие определяющую роль в описании электронных и термодинамических свойств хемосорбированных покрытий /3/. Они описывают эффекты гибридизации атомных орбиталей адатомов с волновыми функциями электронов подложки, приводящие к образованию сильной химической связи между адсорбатом и адсорбентом.

Слагаемое H^{**} включает процессы, обычно не рассматриваемые в простых моделях хемосорбции /1/, хотя и играющие важную роль для самосогласованного описания /3/. Константы взаимодействия $V_{\alpha\alpha k}$, $V_{\alpha k}$ и другие являются матричными элементами, вычисленными от кулоновских взаимодействий между электронами и ионными остовами по базисным волновым функциям. Гамильтониан H по отношению к электронным операторам имеет вид гамильтониана Андерсона, по отношению к ионным операторам он имеет вид гамильтониана Изинга.

В §3 обсуждаются основные моменты расчета характеристик системы с помощью техники двух временных функций Грина /5/. Показано, что электронные свойства системы определяются через корреляционные функции вида $\langle N_{\alpha} n_{\alpha\sigma} \rangle$, $\langle N_{\alpha} n_{\alpha\sigma} N_{\beta} n_{\beta\sigma} \rangle$, ... Эти функции имеют смысл вероятности локализации электрона на центре адсорбции α при условии, что данный центр уже занят ионом адатома. На простом точно решаемом примере делается самосогласованный расчет ионных и электронных характеристик, выводится изотерма адсорбции Ленгмюра и показывается, что константа Ленгмюра в таком случае выражается через электронные характеристики примесей.

В главе 2 исследуется зависимость электронных характеристик системы адсорбат-адсорбент от степени покрытия поверхности в рамках самосогласованного приближения Хартри-Фока.

В §1 рассматривается прямое обобщение модели Андерсона на случай стохастического распределения адатомов над поверхностью. Покрытие считается фиксированным внешним параметром. Для ионных корреляций принято приближение Брегга-Вильямса. Показано, что в таком случае система описывается функцией Грина вида

$$G_{\sigma}(\omega) = \frac{\langle N_{\alpha} n_{\alpha\sigma} ; n_{\alpha\sigma}^{\dagger} \rangle}{\theta} = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\Omega} \int d\varphi \frac{1}{\omega - E_{\sigma} - (1-\theta)L(\omega) - \theta P_{\sigma}(\omega)}, \quad (3)$$

где $P_{\sigma}(\omega)$ - это двумерное фурье-образ функции Гримли

$$P_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_k \frac{V_{\alpha k} V_{k\beta}}{\omega - \epsilon_k}, \quad L(\omega) = P_{\alpha\alpha}(\omega) \quad \text{- это функция Ньюнса,}$$

$E_{\sigma} = E_{\alpha} + U n_{-\sigma}$ и $n_{\sigma} = \langle N_{\alpha} n_{\alpha\sigma} \rangle / \theta$. На рис. 1 и 2 показаны (в безразмерных единицах) результаты расчета электронных характеристик для двух часто используемых модельных плотностей состояний подложки. Видно, что существование примесного магнетизма сильно связано с величиной отношения U/V ($V = |V_{\alpha k}|$). При больших значениях этого отношения наблюдаются магнитные состояния адатомов, при малых адатомы находятся в парамагнитном состоянии. При промежуточных значениях этой величины наблюдается как стимулирование так и подавление примесного магнетизма с покрытием. Такое поведение интерпретируется как фазовый переход второго рода. В области существования магнитных решений наблюдается слабая зависимость остальных характеристик от покрытия, в остальных случаях энергия хемосорбции растет с покрытием и заряд подавляется с ростом θ , хотя этот последний эффект зависит в некоторой степени от параметров модели. Изменения в ΔE составляют $\approx 10\%$ от ее величины, что согласуется с имеющимися представлениями о косвенном взаимодействии адатомов. Зависимость плотности состояний адатома от θ показывает одну общую закономерность для всех моделей подложки: при $\theta \rightarrow 1$ наблюдается тенденция к образованию двух зон (связывающие и разрыхляющие состояния). Из результатов, представленных на рис. 1 и 2 следует, что качественное поведение ΔE , μ и q почти не зависит от модели подложки.

В §2 обсуждается наблюдаемый в системе магнитный фазовый переход. Показано, что всегда существуют решения, соответствующие парамагнитным состояниям адатомов, но в зависимости от покрытия и значений параметров модели могут иметь место и магнитные решения. В таких случаях наблюдается фазовый переход с критическим индексом $\nu = 1/2$ и показана возможность кроссовера в критическом поведении магнитного момента. Критические точки образуют некоторую гиперповерхность, которая включает те точки, в которых имеют место немагнитные решения и в то же время выполняется

известный критерий Андерсона для существования примесного магнетизма

$$-1 = \frac{d}{dn_{\downarrow}} \int_{\sigma}^E d\omega \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\uparrow}(\omega) = \frac{d}{dn_{\downarrow}} n_{\uparrow} \Big|_{n_{\downarrow}=n_{\uparrow}} \quad (4)$$

В §3 исследуется влияние заселенности орбитали адатома на взаимодействие адсорбат-адсорбент. Такое взаимодействие, иногда называемое динамическим описывается, слагаемым пропорциональным $V_{\alpha\alpha\alpha k}$ в гамильтониане (2). Показано, что в этом случае система описывается функцией Грина, аналогичной (3) с перенормированными E_{σ} , $L(\omega)$ и $P_{\sigma}(\omega)$. Последние функции становятся зависящими от спина и должны теперь определяться самосогласованно. Результаты расчетов показывают, что качественное поведение системы не меняется, но достигается лучшее согласие с экспериментальными данными, указывающие на почти нейтральную адсорбцию водорода. Вклад такого взаимодействия приводит к эффектам, сравнимы с эффектами обусловленными кулоновскими корреляциями на адатоме, которые обсуждаются в главе 3. Оценка этого взаимодействия, примерно 30% от V . Перенормировка значений параметров, обусловленная этим взаимодействием приводит к тому, что симметрия в плотности состояний адатома может не соответствовать начальной симметрии расположения уровней адатома E_{α} и $E_{\alpha}+U$ как видно из рис.3. Параметер ζ определяется из приближенного соотношения $V_{\alpha k} \approx \zeta V_{\alpha\alpha\alpha k}$ и $\eta = E_{\alpha} - E_f + U/2$ является мерой начальной симметрии системы.

На рис.4 показаны результаты расчетов заряда адатома при разных ζ . Исползовались параметры, моделирующие хемосорбции водорода на хроме. Видно что выбор $\zeta \approx 0.1+0.3$ приводит к значениям заряда сравнимые с результатами более точного учета кулоновских корреляций на адатоме. Кроме того, увеличение ζ приводит к уменьшению эффективного значения V и следовательно, к уменьшению косвенного взаимодействия ада-

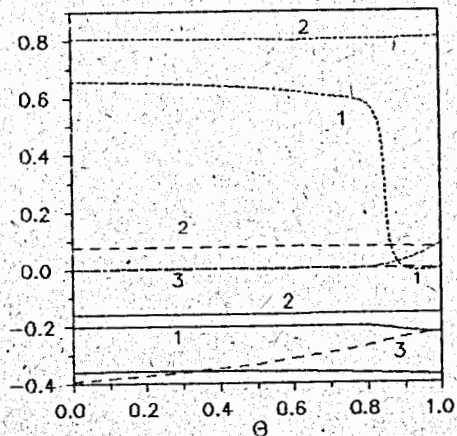


Рис.1.-Значения ΔE (—), μ (---) и q (· · ·) как функции θ для постоянной плотности состояний подложки и параметров гамильтониана:

- 1) $E=-0.50$, $U=1.0$, $V=0.4$,
- 2) $E=-0.50$, $U=1.5$, $V=0.4$,
- 3) $E=-0.50$, $U=0.5$, $V=0.4$.

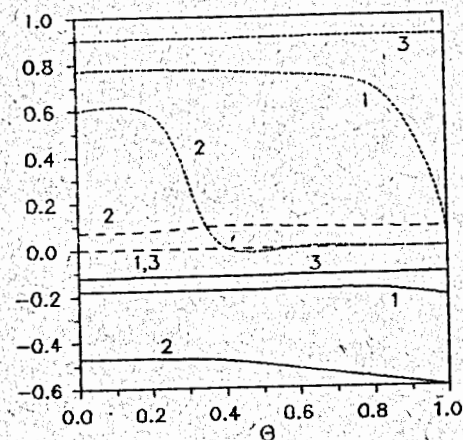


Рис.2.-Значения ΔE (—), μ (---) и q (· · ·) как функции θ для плотности состояний вольфрама и параметров гамильтониана:

- 1) $E=-0.50$, $U=1.0$, $V=0.4$,
- 2) $E=-0.95$, $U=2.4$, $V=0.8$,
- 3) $E=-0.95$, $U=1.9$, $V=0.4$.

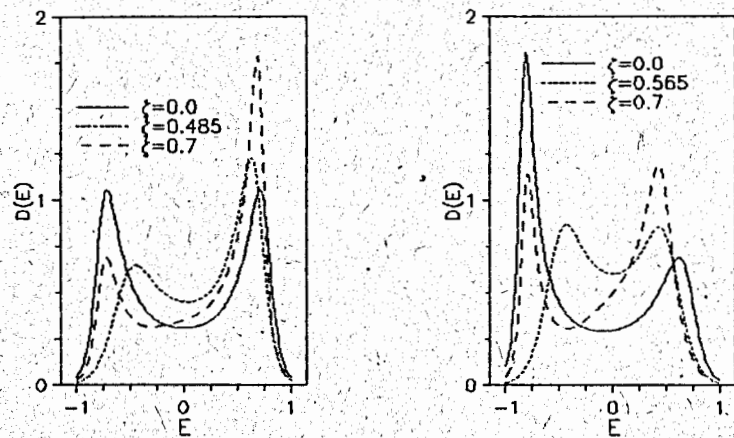


Рис. 3. - Зависимость плотности электронных состояний от ζ , при $\theta=0$, для параметров гамильтониана:

а) $E=-0.5, U=1.0, V=0.6$ ($\eta=0$) и б) $E=-0.8, U=1.0, V=0.6$ ($\eta=0$).

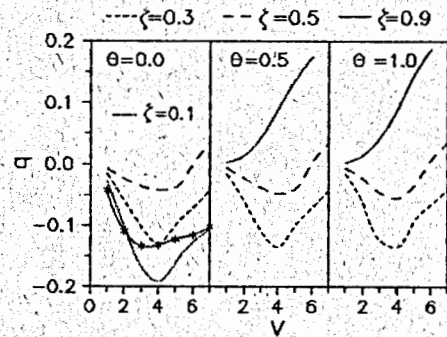


Рис. 4. - Заряд адатома q , при разных значениях θ и ζ , от V . Кривая $-*-*$ соответствует результатам работы /6/.

томов. В расчетах это выявляется в более слабую зависимости свойств системы от покрытия.

В главе 3 рассматривается влияние электронных корреляционных эффектов на характеристики в рамках формализма Бреннинга и Шонхамера /6/ при исследовании адсорбции

отдельных атомов. В этой главе делается упор на исследование зависимости заряда и плотности состояний адатома от степени покрытия поверхности.

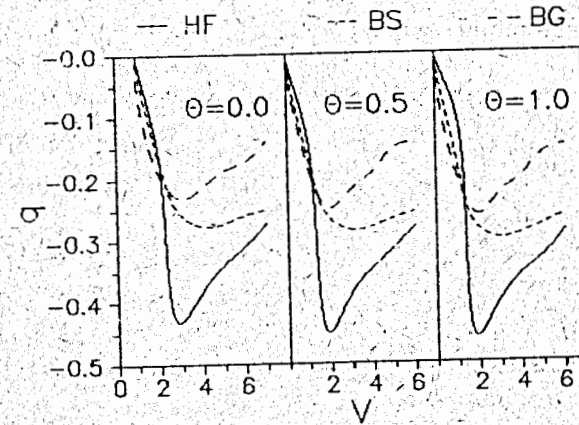


Рис. 5. - Зависимость заряда адатома от V и от θ для T_i , рассчитана с помощью разных схем учета корреляций на адатоме. HF - приближение ХФ, BS - приближение БШ с электронными корреляторами рассчитаны в нулевом порядке по V , BG - приближение БШ с самосогласованным расчетом электронных корреляторов.

В §1 рассматривается стандартная модель Андерсона, обобщенная на случай конечных субмонослойных покрытий. Результаты для заряда адатома ниже хартри-фоковских расчетов, как это видно из рис. 5. На этом рисунке сравниваются, кроме того, две схемы расчета электронных корреляционных функций: заменяя некоторые из них значениями при $V=0$ как это делалось в /6/ (кривые BS) и полный самосогласованный расчет всех корреляторов (кривые BG). В последнем случае результаты ближе к эксперименту. Качественное

поведение параметров мало отличается от результатов расчетов в приближении Хартри-Фока.

В §2 исследуется влияние динамического взаимодействия на электронные характеристики системы адсорбат-адсорбент. Результаты расчетов подтверждают выводы, сделанные при хартри-фоковском рассмотрении о перенормировке параметров модели за счет этого взаимодействия, в том числе об ослаблении косвенного взаимодействия адатомов и о нарушении или восстановлении начальной симметрии параметров системы.

В заключении суммируются основные полученные результаты и формулируются основные выводы данных исследований.

Основные результаты диссертации, выдвигаемые для защиты:

1. - В рамках метода составных гамильтонианов Андерсона-Изинга развит формализм для описания системы адсорбент-адсорбат. Предложенный формализм дает микроскопическое обоснование широко используемым в теории хемосорбции модельным гамильтонианам и, благодаря его простоте, позволяет понять физическую сущность рассматриваемых явлений и проводить надежные расчеты, требуя при этом намного меньше затрат, чем традиционно используемые в теории хемосорбции теоретические подходы.

2. - Проведено обобщение стандартной модели Андерсона на случай конечных субмонослойных покрытий. Показано, что хотя результирующий гамильтониан не содержит слагаемое, описывающее прямое взаимодействие адатомов, он отличается от модели идеального, решеточного газа. В нашем формализме это проявляется в том, что для расчета одноэлектронных характеристик системы необходимо знание многочастичных корреляционных функций ионов адатомов.

3. - Анализ поведения электронных свойств показывает, что магнитный момент на примеси согласуется с критерием Андерсона во всем интервале субмонослойных покрытий. В присутствии примесного магнетизма зависимость электронных характеристик от покрытия слабая. В парамагнитных случаях

энергия хемосорбции растет с покрытием, что согласуется с расчетами из первых принципов. Изменения в энергии составляют примерно 10% от ее величины, что хорошо согласуется с существующими представлениями о природе взаимодействия адатомов с подложкой. Перенос заряда либо подавляется покрытием, либо мало зависит от него, такое поведение наблюдается на эксперименте и в расчетах другими методами. С ростом покрытия плотность состояний на адатоме внутри зоны уменьшается, что приводит к образованию двух зон из разрыхляющих и связывающих состояний.

4. - Существование примесного магнетизма во многом определяется отношением U/V . Для больших значений этой величины наблюдается сильный примесный магнетизм, а при $U/V \leq 1$ адатомы находятся в парамагнитном состоянии. При промежуточных значениях $U/V \approx 2$ в системе имеет место магнитный фазовый переход управляемый покрытием. Из анализа поведения системы в критической области следует, что происходит фазовый переход второго рода. Однако есть указания на наличие кроссовера в критическом поведении системы, как и в результатах численных расчетов, так и в аналитических выражениях для критического индекса, вычисляемого в приближении Хартри-Фока.

5. - Исследовано влияние частичного заполнения примесного уровня на свойства системы. Показано, что такое взаимодействие перенормирует не только величину взаимодействия между адатомом и подложкой, но и эффективное расположение примесных уровней. Кроме того, оно подавляет вклад заряженных конфигураций адатомов. Учет этого взаимодействия необходим для самосогласованного количественного описания хемосорбции так как оно приводит к эффектам сравнимым с кулоновскими корреляциями на адатоме. Предварительная оценка величины этого взаимодействия при хемосорбции водорода на переходных металлах примерно 30-50% от величины взаимодействия адатома с подложкой.

6. - Хотя приближение ХФ дает во многих случаях разумные результаты для количественного описания системы требуется более точный учет кулоновских корреляций на адатоме.

формализм учета этих корреляций с точностью до второго порядка по V и до любого порядка по U обобщен на случае конечных субмонослойных покрытий, включая учет динамического взаимодействия адатома с подложкой. Показано, что основные черты хартри-фоковского описания воспроизводятся, но в то же время количественное согласие с имеющимися данными намного лучше.

7.-Принятая схема расцепления ионных корреляционных функций, по-видимому, должна быть улучшена, так как в ней не учитываются возможные скоррелированные расположения ионов над поверхностью, что имеет место для некоторых экспериментальных систем. Развитие формализма для учета этого факта не составляет принципиальных трудностей и является одним из направлений будущей доработки метода составных гамильтонианов, к которому можно добавить, например, описание хемосорбции кислорода и исследование открытых систем, в которых концентрация адатомов не фиксируется, а определяется внешними условиями, например, температурой и давлением.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. R.Cardenas, G.M.Gavrilenko, V.K.Fedyanin, A model for chemisorption at finite submonolayer coverages, Phys. Lett. A, vol.131, N°6, 1988, pp.404-406.
2. R.Cardenas, V.K.Fedyanin, G.M.Gavrilenko, Chemisorption on metals at finite submonolayer coverages 10th IUPAC conference on chemical thermodynamics, Prague, 1988, program booklet II, pp.D24.
3. Г. М. Гавриленко, Р. Карденас, В. К. Федянин, Магнетизм примесного слоя в составной модели Адерсона-Изинга, Программа XVIII Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений, Калинин, 1988, стр. 50.
4. G.M.Gavrilenko, R.Cardenas, V.K.Fedyanin, On the coverage dependence of chemisorption characteristics on metals, Surf.Sci vol.217, 1989, pp.468-488.
5. R.Cardenas, Hydrogen chemisorption on a tight-binding

solid: Influence of partial occupation of the impurity level, Preprint ICTP, IC/89/375, Trieste, 1989, 16 pages.

6. R.Taranko, R.Cardenas, E.Taranko, V.K.Fedyanin, Electron correlation effects at finite submonolayer coverages, Surf.Sci in press; also Chemisorption at finite submonolayer coverages: Influence of the electron correlation effects, JINR Communications, E17-89-570, Dubna, 1989, 17 pages.
7. R.Taranko, R.Cardenas, E.Taranko, V.K.Fedyanin, On hydrogen chemisorption on metals: The electron correlation effects, Internal Report ICTP, IC/89/47, Trieste, 1989, 14 pages.
8. E.Taranko, R. Taranko, R. Cardenas and V.K. Fedyanin, Electron correlation effects in chemisorption theory, Annales Univ. M.Curie-Sklodowska in press.

ЛИТЕРАТУРА

1. Т. Д. Эйнштейн, Д. Г. Герц, Д. Шриффер, Проблемы теории хемосорбции, в книге Теория хемосорбции, Москва: Мир, 1983, стр. 256-324.
2. K.Christman, Interaction of hydrogen with solid surfaces, Surf.Sci.Reports, vol.9, 1988, pp.1-163.
3. G.M.Gavrilenko, New microscopical approach in the theory of adsorberd layers, Physica A, vol.150, 1988, pp.137-178.
4. D.M.Newns, Self-consistent model of hydrogen chemisorption, Phys.Rev., vol.178, N°3, 1969, pp.1123-1135.
5. Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, Запоздывающие и опережающие функции Грина в статистической физике, ДАН СССР, т.126, вып.1, 1959, стр.53-56.
6. W.Brenig, K.Schönhammer, On the theory of chemisorption, Z.Physik, vol.267, 1974, pp.201-208.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 октября 1990 года.