

ELEKTRONSKE KONCENTRACIJE U KVANTNOM NANOPARALELOPIPEDU

Jovan Šetrajić, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

Vjekoslav Sajfert, Tehnički fakultet «Mihajlo Pupin», Zrenjanin, Univerzitet u Novom Sadu

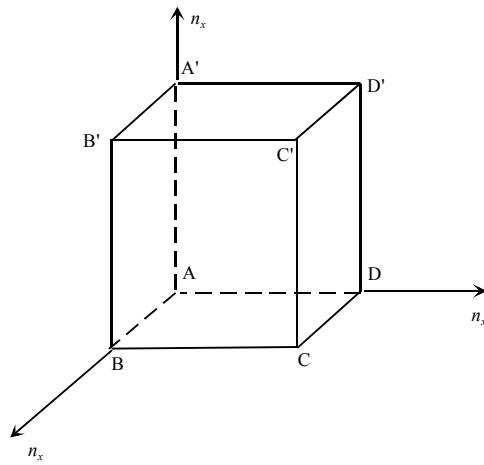
Stevo Jaćimovski, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu

Bratislav Tošić, Vojvođanska akademija nauka i umetnosti, Novi Sad

Sadržaj – Ispitane su elektronske koncentracije u kvantnom nanoparalelopipedu. U analizi je korišćen Habardov model elektronskog hamiltonijana u aproksimaciji najbližih suseda. Nađena je elektronska Grinova funkcija koja zavisi od šest nezavisnih prostornih koordinata. Pomoću spektralne intenzivnosti ove Grinove funkcije određene su elektronske korelacione funkcije i elektronske koncentracije. Numerički su sračunate elektronske koncentracije u nanoparalelopipedu sa $3 \times 3 \times 3$ atomska sloja. Ispostavilo se da se u nanoparalelopipedu javlja ant-iskin efekt: elektronska koncentracija najveća je u centralnoj tački i opada ka granicama. Ovo je potpuno razumljivo s obzirom na činjenicu da su elektronska stanja stojeći talasi a ovi imaju čvorove na granicama strukture.

1. UVOD

Kvantni nanoparalelopiped je struktura čije su sve tri ivice reda nanometra. To znači da mu je translaciona simetrija narušena u pravcu svih kordinatnih osa. Nanoparalelopiped je predstavljen na slici 1.1.



Slika 1.1: Model kvantnog nanoparalelopipeda

Koordinate rogljeva paralelopipeda, jednačine ivica i jednačine strana date su respektivno sa:

$$\begin{array}{llll} A(0,0,0) & A'(0,0,N_z) & B(N_x,0,0) & B'(N_x,0,N_z) \\ C(N_x,N_y,0) & C'(N_x,N_y, N_z) & D(0,N_y,0) & D'(0,N_y, N_z) \end{array} \quad (1.1)$$

$$\begin{array}{ll} (AB) & n_y = 0 \quad n_z = 0 \\ (CD) & n_y = N_y \quad n_z = 0 \\ (A'B') & n_y = 0 \quad n_z = N_z \\ (C'D') & n_y = N_y \quad n_z = N_z \\ (AA') & n_x = 0 \quad n_y = 0 \\ (BC) & n_x = N_x \quad n_z = 0 \\ (CC') & n_x = N_x \quad n_y = N_y \\ (AD) & n_x = 0 \quad n_z = 0 \\ (B'C') & n_x = N_x \quad n_z = N_z \end{array} \quad (1.2)$$

$$\begin{array}{llll} (A'D') & n_x = 0 & n_z = N_z \\ (BB') & n_x = N_x & n_y = 0 \\ (DD') & n_x = 0 & n_y = N_y \\ ABCD & n_z = 0 & A'B'C'D' & n_z = N_z \\ AA'DD' & n_x = 0 & BB'CC' & n_x = N_x \\ AA'BB' & n_y = 0 & CC'DD' & n_y = N_y \end{array} \quad (1.3)$$

Ovde ćemo metodom Grinovih funkcija ispitati prostorni raspored elektronskih koncentracija, smatrujući da je nanoparalelopiped "isečen" iz metalne proste kubne idealne strukture.

2. GRINOVA FUNKCIJA ELEKTRONSKOG PODSISTEMA NANOPARALELOPIPEDA

Habardov model elektronskog hamiltonijana, uzet u aproksimaciji najbližih suseda [1–8], ima oblik:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} W_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}} W_{\vec{n}, \vec{n} + \vec{\lambda}} a_{\vec{n}}^+ a_{\vec{n} + \vec{\lambda}}, \quad (2.1)$$

gde su W jon-jon interakcije, a^+ i a operatori kreacije i anihilacije elektrona, a vektor $\vec{\lambda}$ povezuje najbliže susede atoma u čvoru rešetke \vec{n} .

Elektronski podsistem analiziraćemo pomoću antikomutatorske Grinove funkcije [9–14]:

$$\Gamma_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(t) \equiv \langle \langle a_{n_x, n_y, n_z}(t) | a_{m_x, m_y, m_z}^+(0) \rangle \rangle = \Theta(t) \langle \langle a_{n_x, n_y, n_z}(t), a_{m_x, m_y, m_z}^+(0) \rangle \rangle, \quad (2.2)$$

gde je $\Theta(t)$ Heavisajdova step funkcija.

Diferenciranjem (2.1) po vremenu uz korišćenje jednačine kretanja nalazi se jednačina koja određuje izvod funkcije Γ po vremenu [15–19]. U tako dobijenoj jednačini izvrši se Fourier-transformacija vreme-frekvencija:

$$\Gamma_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \Gamma_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(\omega) \quad (2.3)$$

Funkcija $\Gamma_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(\omega)$ se faktorizuje:

$$\Gamma_{n_x, n_y, n_z; m_x, m_y, m_z}(\omega) = \alpha_{n_x, m_x}(\omega) \beta_{n_y, m_y}(\omega) \gamma_{n_z, m_z}(\omega), \quad (2.4)$$

tako da dobijamo:

$$\begin{aligned} & \beta_{n_y, m_y} \gamma_{n_z, m_z} \left[W(\alpha_{n_x+1, m_x} + \alpha_{n_x-1, m_x}) + \rho_\alpha \alpha_{n_x, m_x} \right] + \\ & + \alpha_{n_x, m_x} \gamma_{n_z, m_z} \left[W(\beta_{n_y+1, m_y} + \beta_{n_y-1, m_y}) + \rho_\beta \beta_{n_y, m_y} \right] + \\ & + \alpha_{n_x, m_x} \beta_{n_y, m_y} \left[W(\gamma_{n_z+1, m_z} + \gamma_{n_z-1, m_z}) + \rho_\gamma \gamma_{n_z, m_z} \right] + \end{aligned}$$

$$+ \left[W\beta_{N_y-1,m_y} + (\varepsilon_\beta + W)\beta_{N_y,m_y} \right] \alpha_{N_x,m_x} \gamma_{k_z} = \quad (2.5) \\ = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z},$$

gde je:

$$\rho_\alpha + \rho_\beta + \rho_\gamma \equiv \rho = E - 6W. \quad (2.6)$$

Jednačina (2.5) važi za idealnu strukturu. U nanoparalelopipedu struktura je narušena u sva tri pravca, pa se moraju uzeti u obzir granični uslovi. Uzećemo najprostije granične uslove. Ovi iskazuju odsutnost slojeva $n_x = -1$, $n_x = N_x + 1$, $n_y = -1$, $n_y = N_y + 1$, $n_z = -1$ i $n_z = N_z + 1$. Analitički iskazani ovi uslovi glase:

$$W_{0,n_y,n_z;-1,m_y,m_z} = W_{N_x,n_y,n_z;N_x+1,m_y,m_z} = 0; \\ W_{n_x,0,n_z;m_x,-1,m_z} = W_{n_x,N_y,n_z;m_x,N_y+1,m_z} = 0; \quad (2.7) \\ W_{n_x,n_y,0;m_x,m_y,-1} = W_{n_x,n_y,N_z;m_x,n_y,N_z+1} = 0.$$

Kada se primene granični uslovi, jednačina (2.5) se raspada na 27 različitih jednačina [20–22] (u stvari ih je $(N_x + 1)(N_y + 1)(N_z + 1)$), od kojih samo jedna zadržava formu (2.5) i to za sledeće intervale indeksa n_x , n_y i n_z :

$$1 \leq n_x \leq N_x - 1; 1 \leq n_y \leq N_y - 1; \\ 1 \leq n_z \leq N_z - 1. \quad (2.8)$$

U preostalih 26 jednačina, strukture:

$$W(\alpha_{n_x+1,m_x} + \alpha_{n_x-1,m_x}) + \rho_\alpha \alpha_{n_x,m_x}; \\ W(\beta_{n_y+1,m_y} + \beta_{n_y-1,m_y}) + \rho_\beta \beta_{n_y,m_y}; \quad (2.9) \\ W(\gamma_{n_z+1,m_z} + \gamma_{n_z-1,m_z}) + \rho_\gamma \gamma_{n_z,m_z}$$

se deformišu i prelaze u šest mogućih formi:

$$W\alpha_{1,m_x} + (\rho_\alpha + W)\alpha_{0,m_x}; \\ W\alpha_{N_x-1,m_x} + (\rho_\alpha + W)\alpha_{N_x,m_x}; \quad (2.10) \\ W\beta_{1,m_y} + (\rho_\beta + W)\beta_{0,m_y}; \\ W\beta_{N_y-1,m_y} + (\rho_\beta + W)\beta_{N_y,m_y}; \\ W\gamma_{1,m_z} + (\rho_\gamma + W)\gamma_{0,m_z}; \\ W\gamma_{N_z-1,m_z} + (\rho_\gamma + W)\gamma_{N_z,m_z}.$$

Treba naglasiti da se u rogljevima paralelopipeda deformišu sve tri strukture (2.9), po ivicama nanoparalelopipeda deformišu se samo dve od njih, dok se na stranama nanoparalelopipeda deformiše samo jedna. Može se pokazati da se pomoću smena:

$$\alpha_{n_x,m_x}(\omega) = \sum_{v=1}^{N_x} a_{v,m_x}(\omega) \left[\sin(n_x + 1) \frac{\pi v}{N_x + 1} - \sin n_x \frac{\pi v}{N_x + 1} \right]; \quad (2.11)$$

$$\beta_{n_y,m_y}(\omega) = \sum_{\mu=1}^{N_y} b_{\mu,m_y}(\omega) \left[\sin(n_y + 1) \frac{\pi \mu}{N_y + 1} - \sin n_y \frac{\pi \mu}{N_y + 1} \right];$$

$$\gamma_{n_z,m_z}(\omega) = \sum_{\lambda=1}^{N_z} c_{\lambda,m_z}(\omega) \left[\sin(n_z + 1) \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} - \sin n_z \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} \right]$$

svih 27 različitih jednačina svode na jedan jedinstven oblik za sve $n_x \in [0, N_x]$, $n_y \in [0, N_y]$ i $n_z \in [0, N_z]$:

$$\sum_{v=1}^{N_x} \sum_{\mu=1}^{N_y} \sum_{\lambda=1}^{N_z} a_{v,m_x} b_{\mu,m_y} c_{\lambda,m_z}.$$

$$\cdot \left[2W \left(\cos \frac{\pi v}{N_x + 1} + \cos \frac{\pi v}{N_y + 1} + \cos \frac{\pi v}{N_z + 1} \right) + \rho \right] \\ \cdot \prod_{i=x,y,z} \left[\sin(n_i + 1) \frac{\pi v}{N_i + 1} - \sin n_i \frac{\pi v}{N_i + 1} \right] = \\ = \frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{n_x,m_x} \delta_{n_y,m_y} \delta_{n_z,m_z}. \quad (2.12)$$

Kronekerovi simboli se uzimaju u reprezentaciji stojećih talasa:

$$\delta_{n_i,m_i} = \frac{1}{N_i + 1} \sum_{v=1}^{N_i} \left[\sin(n_i + 1) \frac{\pi v}{N_i + 1} - \sin n_i \frac{\pi v}{N_i + 1} \right] \\ \cdot \left[\sin(m_i + 1) \frac{\pi \mu}{N_i + 1} - \sin m_i \frac{\pi \mu}{N_i + 1} \right]; \quad i = x, y, z \quad (2.13)$$

a veličine a_{v,m_x} , b_{μ,m_y} i c_{λ,m_z} se izražavaju na sladeći način:

$$a_{v,m_x} = \frac{1}{N_x + 1} g_v(\omega) \left[\sin(m_x + 1) \frac{\pi v}{N_x + 1} - \sin m_x \frac{\pi v}{N_x + 1} \right]; \\ b_{\mu,m_y} = \frac{1}{N_y + 1} g_\mu(\omega) \left[\sin(m_y + 1) \frac{\pi \mu}{N_y + 1} - \sin m_y \frac{\pi \mu}{N_y + 1} \right]; \\ c_{\lambda,m_z} = \frac{1}{N_z + 1} g_\lambda(\omega) \left[\sin(m_z + 1) \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} - \sin m_z \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} \right]. \quad (2.14)$$

Posle zamena (2.13) i (2.14) u (2.15) i uvođenje oznaka:

$$g_v(\omega) g_\mu(\omega) g_\lambda(\omega) = G_{v,\mu,\lambda}(\omega) \quad (2.15)$$

jednačina (2.15) se svodi na:

$$G_{v,\mu,\lambda}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{\omega - \omega_{v,\mu,\lambda}}, \quad (2.16)$$

gde je

$$\omega_{v,\mu,\lambda} = \frac{E_{v,\mu,\lambda}}{\hbar}. \quad (2.17)$$

Spektralna intenzivnost funkcije G je data sa [11–17]:

$$I_G = \frac{G(\omega + i\delta) - G(\omega - i\delta)}{\frac{\hbar\omega}{e^{\Theta} + 1}} = \frac{\delta(\omega - \omega_{v,\mu,\lambda})}{\frac{\hbar\omega}{e^{\Theta} + 1}}; \quad (2.18)$$

$$\delta \rightarrow 0^+.$$

Korelaciona funkcija dobija se operatorskom primenom Kronekerovih simbola δ_{n_x,m_x} , δ_{n_y,m_y} i δ_{n_z,m_z} na

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega I_G(\omega) e^{-i\omega t} \quad [12, 16]. \quad \text{S obzirom na (2.13) i (2.18) nala-}$$

zimo sledeći izraz za korelacionu funkciju:

$$\langle a_{m_x,m_y,m_z}^+(0) a_{n_x,n_y,n_z}(t) \rangle = \frac{1}{N_x + 1} \frac{1}{N_y + 1} \frac{1}{N_z + 1} \cdot \\ \cdot \sum_{v=1}^{N_x} \sum_{\mu=1}^{N_y} \sum_{\lambda=1}^{N_z} \frac{e^{-i\omega_{v,\mu,\lambda} t}}{\frac{E_{v,\mu,\lambda}}{e^{\Theta} + 1}} \left[\sin(n_x + 1) \frac{\pi v}{N_x + 1} - \sin n_x \frac{\pi v}{N_x + 1} \right] \\ \cdot \left[\sin(m_x + 1) \frac{\pi \mu}{N_x + 1} - \sin m_x \frac{\pi \mu}{N_x + 1} \right] \\ \cdot \left[\sin(l_z + 1) \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} - \sin l_z \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} \right].$$

$$\begin{aligned} & \cdot \left[\sin(n_y + 1) \frac{\pi\mu}{N_y + 1} - \sin n_y \frac{\pi\mu}{N_y + 1} \right] \\ & \cdot \left[\sin(m_y + 1) \frac{\pi\mu}{N_y + 1} - \sin m_y \frac{\pi\mu}{N_y + 1} \right] \\ & \cdot \left[\sin(n_z + 1) \frac{\pi\lambda}{N_z + 1} - \sin n_z \frac{\pi\lambda}{N_z + 1} \right] \\ & \cdot \left[\sin(m_z + 1) \frac{\pi\lambda}{N_z + 1} - \sin m_z \frac{\pi\lambda}{N_z + 1} \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

3. NUMERIČKA ANALIZA ELEKTRONSKIH KONCENTRACIJA

Dobijeni izraz za elektronsku korelacionu funkciju (2.19) omogućuje da se odrede elektronske koncentracije u nanoparalelopipedu. Pre nego što se pređe na određivanje elektronske koncentracije treba se podsetiti da se kod elektrona i korelaciona funkcija i elektronska koncentracija moraju izračunavati u reprezentaciji hemijskog potencijala [13,23] zbog toga što se broj elektrona u sistemu održava. To znači da se u izrazu (2.19) za korelacionu funkciju umesto energije $E_{v,\mu,\lambda}$ mora koristiti razlika te energije i hemijskog potencijala koji ćemo označiti sa Φ . Prema tome u (2.19) se vrši prelaz:

$$E_{v,\mu,\lambda} \rightarrow E_{v,\mu,\lambda} - \Phi \quad (3.1)$$

Hemijski potencijal se može definisati kao maksimalna vrednost elektronske energije u prvoj Briluenovoj zoni. To znači da je:

$$\Phi = (E_{v,\mu,\lambda})_{max} = 4W \sin^2 \frac{N_x}{N_x + 1} \frac{\pi}{2} \cdot \sin^2 \frac{N_y}{N_y + 1} \frac{\pi}{2} \sin^2 \frac{N_z}{N_z + 1} \frac{\pi}{2} \quad (3.2)$$

Elektronska koncentracija se dobija tako što se u korelacionoj funkciji izvrši prelaz (3.1), vreme t se izjednači sa nulom i izjednače se prostorni indeksi. Tako dolazimo do izraza za elektorsku koncentraciju:

$$\begin{aligned} C(n_x, n_y, n_z) &= \frac{1}{N_x + 1} \frac{1}{N_y + 1} \frac{1}{N_z + 1} \cdot \\ &\cdot \sum_{v=1}^{N_x} \sum_{\mu=1}^{N_y} \sum_{\lambda=1}^{N_z} \frac{1}{e^{-\frac{E_{v,\mu,\lambda} - \Phi}{\Theta}} + 1} \cdot \\ &\cdot \left[\sin(n_x + 1) \frac{\pi v}{N_x + 1} - \sin n_x \frac{\pi v}{N_x + 1} \right]^2 \cdot \\ &\cdot \left[\sin(n_y + 1) \frac{\pi \mu}{N_y + 1} - \sin n_y \frac{\pi \mu}{N_y + 1} \right]^2 \cdot \\ &\cdot \left[\sin(n_z + 1) \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} - \sin n_z \frac{\pi \lambda}{N_z + 1} \right]^2 \end{aligned} \quad (3.3)$$

koja je kao što se vidi funkcija sva tri prostorna indeksa n_x , n_y i n_z .

Na osnovu formule (3.3) numerički su analizirane elektronske koncentracije u nanokocki sa ivicama 3x3x3. To znači da je u (3.3) uzeto da je $N_x = N_y = N_z = 2$. Za sobnu temperaturu $T = 300$ K je $\Theta = k_B T = 4,14 \cdot 10^{-21}$ J. Uzeto je da konstanta jon-jon interakcije iznosi $W = 1,885 \cdot 10^{-19}$ J. Izračunate koncentracije date su u tabeli 3.1. Analiza rezultata datih u tabeli 3.1 pokazuje da je koncentracija elektrona najveća u centralnoj tački posmatrane kocke, tj. za $n_x = n_y = n_z = 1$. Koncentracije su najmanje u rogljevima kocke. Takođe se zapaža da se visoke koncentracije pojavljaju u onim tačkama koje sadrže dva centralna indeksa 1, a nešto manje su u tačkama koje sadrže jedan centralni indeks. Najmanje su koncentracije u onim tačkama koje sadrže samo granične indekse 0 i 2.

| n_x | n_y | n_z | C |
|-------|-------|-------|-------|
| 0 | 0 | 0 | 0,117 |
| 0 | 0 | 1 | 0,219 |
| 0 | 0 | 2 | 0,117 |
| 0 | 1 | 0 | 0,219 |
| 0 | 1 | 1 | 0,375 |
| 0 | 1 | 2 | 0,219 |
| 0 | 2 | 0 | 0,117 |
| 0 | 2 | 1 | 0,219 |
| 0 | 2 | 2 | 0,117 |
| 1 | 0 | 0 | 0,219 |
| 1 | 0 | 1 | 0,375 |
| 1 | 0 | 2 | 0,219 |
| 1 | 1 | 0 | 0,375 |
| 1 | 1 | 1 | 0,500 |
| 1 | 1 | 2 | 0,375 |
| 1 | 2 | 0 | 0,219 |
| 1 | 2 | 1 | 0,375 |
| 1 | 2 | 2 | 0,219 |
| 2 | 0 | 0 | 0,117 |
| 2 | 0 | 1 | 0,219 |
| 2 | 0 | 2 | 0,117 |
| 2 | 1 | 0 | 0,219 |
| 2 | 1 | 1 | 0,375 |
| 2 | 1 | 2 | 0,219 |
| 2 | 2 | 0 | 0,117 |
| 2 | 2 | 1 | 0,219 |
| 2 | 2 | 2 | 0,117 |

Tabela 3.1 Elektronske koncentracije u čvorovima nanokocke

Navedeni pregled rasporeda elektronskih koncentracija ukazuje na pojavu antiskin-efekta u kvantnoj kocki. Kod kvantne kocke elektroni su koncentrisani u unutrašnjosti kocke, a na granicama ih ima najmanje. Ovaj rezultat je fizički jasan: elektronska stanja u kvantnoj kocki su stopeći talasi sa čvorovima na granicama i maksimalnom elongacijom u centralnim delovima kocke. Iz formule (3.3) se može zaključiti da nikakvo povećavanje jedne od nanodimensija ne može bitno promeniti prostornu raspodelu elektrona u kvantnom nanoparalelopipedu.

ZAKLJUČAK

U rezimeu analize elektronskih koncentracija u kvantnom naoparalelopipedu bitno je istaći sledeće činjenice. Prva je da, zbog narušenja simetrije u tri pravca, koncentracije zavise od tri prostorna indeksa. Druga činjenica – pojava antiskin-efekta u kvantnom nanoparalelopipedu – je posledica toga što su elektronska stanja stojeći talasi sa čvorovima na granicama strukture.

LITERATURA

- [1] Tošić B.S., *Statistička fizika*, PMF, Novi Sad 1978.
- [2] Kittel C., *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York 2005.
- [3] Ziman J.M., *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, Cambridge 1972.
- [4] Ibach H. and Lüth H., *Solid State Physics, An Introduction to Principles of Material Science 3rd edition*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 2003.
- [5] Jones W. and March N., *Theoretical Solid State Physics*, Dover, New York 1985.
- [6] Kittel C., *Quantum Theory of Solids*, John Wiley & Sons, New York 1986.
- [7] Landau L.D. and Lifshitz E.M., *Statistical Physics*, Pergamon Press, London 1958.
- [8] Plakida N.M., *Condensed Matter Physics* **1**, 57-63 (1998)
- [9] Sajfert V., Šetrajčić J., Tošić B., Đajić R., Czechoslovak Journal of Physics **54** (9), 975–988 (2004).
- [10] Sajfert V., Šetrajčić J.P., Jaćimovski S., Tošić B., *Physica E*: **25**/4, 479–491 (2004).
- [11] P.Taylor and O. Heinonen, *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge 2002.
- [12] Doniach S. and Sondheimer E.H., *Green's Functions for Solid State Physists*, Imperial College Press, London 1999.
- [13] Tyablikov S.V., *Methods in the Quantum Theory in Magnetism*, Plenum Press, New York 1967.
- [14] Abrikosov A. A., Gorkov L.P., Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover, New York 1975.
- [15] Davydov A.S., *Quantum mechanics*, Pergamon Press 1976.
- [16] Harrison W., *Solid State Theory*, Dover, New York 1979.
- [17] G. Strobl, *Condensed Matter Physics, Crystals, Liquid Crystals and Polymers*, Springer-Verlag, Berlin 2004.
- [18] Popov D., Jaćimovski S.K., Tošić B.S. and Šetrajčić J.P., *Physica A* **317**, 129–139 (2003).
- [19] Tošić B.S., Šetrajčić J.P., Mirjanić D.Lj. and Bundalo Z.V., *Physica A* **184**, 354–366 (1992).
- [20] Agarwal R.P., *Difference Equations and Inequalities: Theory, Methods and Applications*, Marcel Dekker, New York 2000.
- [21] Goldberg S., *Introduction to Difference Equations*, Dover, New York 1986.
- [22] Elaydi S.N., *An Introduction to Difference Equations*, Springer, Berlin 1999.
- [23] Agranovich V.M. and Galanin M.D.: *Migration of Electron Energy Excitations in Condensed Matter*, Nauka, Moscow 1978 (in Russian).

Abstract – Electron concentrations in metallic nanoparallelepiped are investigated. The Hubbard model electron Hamiltonian was used in the nearest neighbours approximation. The electron Green's function depending on six independent coordinates was calculated. The electron correlation function and the electron concentrations derived with help of spectral intensity of electron Green's function are determined. The electron concentrations in nanoparallelepiped containing 3x3x3 layers were numerically calculated. It turned out that in nanoparallelepiped the anti skin-effect takes place: the electro concentration is maximal in the central point of nanoparallelepiped and takes minimal values in boundary points. It is quite understandable since the standing waves have node at boundaries.

ELECTRON CONCENTRATIONS IN QUANTUM NANOPARALLELEPIPED

Jovan Šetrajčić, Vjekoslav Sajfert, Stevo Jaćimovski, Bratislav Tošić.