

Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на електронну структуру напівобмеженого металу

Богдан Маркович¹, Іван Задворняк²

¹ к. ф.-м. н., доцент, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, e-mail: bogdan_markovych@yahoo.com

² Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, e-mail: ivanzadv@yahoo.com

Досліджено вплив зовнішнього постійного електричного поля прикладеного перпендикулярно до поверхні поділу на парний ефективний потенціал міжелектронної взаємодії й унарну функцію розподілу електронів для моделі напівобмеженого «желе». Показано, що наявність зовнішнього статичного електричного поля призводить до зміни електронної структури напівобмеженого металу біля поверхні поділу (на віддальх від поверхні поділу порядку одного періоду ґратки).

Ключові слова: парний ефективний потенціал міжелектронної взаємодії, унарна функція розподілу електронів, двочастинкова кореляційна функція «густина-густина», рівняння Шредінґера, напівобмежений метал, модель напівобмеженого «желе».

Вступ. У зв'язку з інтенсивними експериментальними дослідженнями тунельної мікроскопії, скануючої тунельної спектроскопії, польової іонної мікроскопії актуальною є задача дослідження електронної густини металу в умовах накладання зовнішнього електричного поля. Відомо [1], що локальна електронна структура напівобмеженого металу біля поверхні поділу «метал–вакуум» значною мірою визначається поверхневим потенціалом, який відображає наявність поверхні поділу. Оскільки вигляд поверхневого потенціалу невідомий, то його часто моделюють так, щоб він адекватно описував вплив поверхні поділу «метал–вакуум» на поведінку системи.

У циклі робіт [2-6] було запропоновано підхід, який коректно враховує ефекти, що пов'язані з присутністю поверхні поділу, та показано, що наявність поверхні поділу призводить до зміни парного ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії у приповерхневій області для моделі напівобмеженого «желе». У праці [7] розглянуто розрахунок функцій розподілу електронів для моделі просто-риво-обмеженої системи на основі методу функціонального інтегрування. Згідно з підходом, який запропоновано у праці [7], для розрахунку функції розподілу електронів потрібно знати функцію розподілу невзаємодіючої електронної системи й ефективний потенціал парної міжелектронної взаємодії за наявності плоскої поверхні поділу.

Для розрахунку ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії важливо знати двочастинкову кореляційну функцію [8-10], яка є важливою характеристикою

електронної підсистеми напівобмеженого металу та впливає на локальну електронну структуру напівобмеженого металу біля поверхні поділу. Дослідження кореляційної функції було проведено у праці [9]. Зокрема, у роботі [8] показано, що наявність зовнішнього електричного поля призводить до сильної зміни кореляційної функції на віддальх від поверхні поділу порядку $10a_B$ ($a_B = 0,52918 \text{ \AA}$).

У цій роботі досліджено вплив поля на парний ефективний потенціал між-електронної взаємодії та густину розподілу електронів у моделі напівобмеженого «желе». Розрахунки виконані з урахуванням поправки на локальне поле. За поверхневий потенціал взято «лінійно-модифіковану» модель, яка у випадку відсутності поля набуває вигляду сходинки скінченної висоти.

1. Формулювання задачі

Розглянемо систему, яка складається з N електронів, що містяться в області $\Omega = \{ (x, y, z) : -\sqrt{S}/2 \leq x \leq \sqrt{S}/2, -\sqrt{S}/2 \leq y \leq \sqrt{S}/2, -L/2 \leq z \leq L/2 \}$ у полі додатного неоднорідно розподіленого заряду з густиною $\rho(\vec{R}) = \rho(\vec{R}_{||}, Z)$, де $\vec{R}_{||} = (X, Y)$. Будемо вважати, що виконується термодинамічна границя: $\lim_{N, S, L \rightarrow \infty} N/(SL) = const$.

Гамільтоніан системи запишемо у вигляді:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i - e \sum_{i=1}^N \phi(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} d\vec{R}_1 \int_{\Omega} d\vec{R}_2 \frac{\rho(\vec{R}_1)\rho(\vec{R}_2)}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}, \quad (1)$$

де $\hbar = h/2\pi$; h — стала Планка; m — маса електрона; e — заряд електрона; Δ_i — оператор Лапласа; \vec{r} — радіус-вектор електрона; $\phi(\vec{r}) = \int_{\Omega} d\vec{R} \frac{\rho(\vec{R})}{|\vec{R} - \vec{r}|}$ — потенціал, що створюється додатнім зарядом.

Для моделі напівобмеженого «желе» гамільтоніан (1), як показано в роботі [5], має вигляд:

$$H = H_{jell}^{unif} + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i).$$

$$\text{Тут } H_{jell}^{unif} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{e^2 N}{SL/2} \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} d\vec{R} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \frac{(eN)^2}{2(SL/2)^2} \int_{\Omega} d\vec{R} \int_{\Omega} d\vec{R}' \frac{1}{|\vec{R} - \vec{R}'|}$$

$$\text{— гамільтоніан необмеженого «желе», } V(\vec{r}_i) = e \int_{\Omega} d\vec{R} \frac{eN/(SL/2) - n_+(\vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} +$$

$$+ \frac{1}{2N} \int_{\Omega} d\vec{R} \int_{\Omega} d\vec{R}' \frac{n_+(\vec{R}) n_+(\vec{R}') - [eN/(SL/2)]^2}{|\vec{R} - \vec{R}'|} \text{ — поверхневий потенціал.}$$

Вважатимемо, що поверхня поділу «метал–вакуум» є плоскою й описується рівнянням $Z = -d = const$. Для такої моделі $n_+(\vec{R}) = n_+(Z) = n_{bulk} \theta(-d - Z)$ ($\theta(z)$ — функція Хевісайда), $n_{bulk} = \frac{eN}{SL/2}$ та поверхневий потенціал є функцією тільки нормальної до поверхні поділу координати електрона $V(\vec{r}) \equiv V(z)$.

За накладання зовнішнього постійного електричного поля перпендикулярно до поверхні поділу «метал–вакуум» поверхневий потенціал змодельємо так («лінійно-модифікована» модель):

$$V(z) = \begin{cases} W + eEz, & z > 0, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad (2)$$

де E — напруженість зовнішнього електричного поля, напрямленого перпендикулярно до поверхні поділу «метал–вакуум» у сторону металу; $W = \hbar^2 s^2 / (2m)$; W — висота бар'єру на поверхні поділу «метал–вакуум».

Зауважимо, що для $E = 0$ потенціал (2) набуває вигляду сходинки скінченної висоти (випадок відсутності поля, який розглянуто у праці [10]), а для $E \rightarrow \infty$ зі співвідношення (2) отримуємо модель нескінченно високої потенціальної стінки (випадок непроникної стінки, який розглянуто, зокрема, у роботі [3]).

Власні функції $\phi_\alpha(z)$ такого потенціалу є розв'язками рівняння Шредінгера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \phi_\alpha(z) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(z) \quad (3)$$

і задовольняють крайову умову

$$\forall \alpha < s : \phi_\alpha(-L/2) = 0. \quad (4)$$

Тут $\varepsilon_\alpha = \hbar^2 \alpha^2 / (2m)$, α — квантове число.

Розв'язки задачі (3), (4) такі:

$$\phi_\alpha(z) = \frac{2}{\sqrt{L}} \left\{ \sin(\alpha z + \gamma_\alpha) \theta(-z) + \sin(\gamma_\alpha) \frac{\text{Ai} \left[k^{1/3} z + k^{-2/3} (s^2 - \alpha^2) \right]}{\text{Ai} \left[k^{-2/3} (s^2 - \alpha^2) \right]} \theta(z) \right\},$$

де $k = \frac{2m e E}{\hbar^2}$, $\gamma_\alpha = \arctg \left\{ \alpha k^{-1/3} \frac{\text{Ai} \left[k^{-2/3} (s^2 - \alpha^2) \right]}{\text{Ai}' \left[k^{-2/3} (s^2 - \alpha^2) \right]} \right\}$; $\text{Ai}(z)$ — функція Ейрі;

α визначається з умови (4), тобто є розв'язком рівняння:

$$\alpha = 2\pi n / L + \gamma_\alpha, \quad n \in \mathbb{N}.$$

2. Густина розподілу електронів

Густина розподілу електронів, як показано у праці [7], обчислюється за формулою:

$$n(z) = n_0(z) \exp \left(-\frac{f_0(z)}{n_0(z)} \sum_{\substack{\bar{q}, \\ (\bar{q} \neq 0)}} \tilde{g}(q, z, z) \right). \quad (5)$$

Тут $n_0(z) = \frac{2}{\pi^2} \int \left[|\phi_\alpha(z)|^2 (p_F^2 - \alpha^2) \right] d\alpha$ — густина розподілу невзаємодіючої системи;

$f_0(z) = \frac{\partial}{\partial \mu} n_0(z)$; $p_F = \frac{\sqrt{2m\mu}}{\hbar}$; μ — хімічний потенціал електронної підсистеми;

z — нормальна до площини поділу координата електрона; $\tilde{g}(q, z_1, z_2)$ — Фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії $g(q | z_1, z_2)$, в якому виключена самодія. Ефективний потенціал означено таким чином:

$$g(\vec{r}_{||}, z_1, z_2) = \sum_{\bar{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}_{||}} g(q | z_1, z_2).$$

Фур'є-образ ефективного потенціалу $g(q | z, z)$ визначається таким виразом [3]:

$$g(q | z_1, z_2) = V(q | z_1 - z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int dz' V(q | z_1 - z) \tilde{\mathfrak{M}}(q | z, z') V(q | z' - z_2), \quad (6)$$

де $V(q | z_1 - z_2) = \frac{2\pi e^2}{q} e^{-q|z_1 - z_2|}$ — двовимірний Фур'є образ кулонівського потенціалу; $\tilde{\mathfrak{M}}(q | z, z')$ — кореляційна функція «густина-густина», яка є розв'язком інтегрального рівняння Фредгольма другого роду [9]:

$$\tilde{\mathfrak{M}}(q | z_1, z_2) = \mathfrak{M}_0(q | z_1, z_2) + \frac{\beta}{SL^2} \int dz \int dz' \mathfrak{M}_0(q | z_1, z) [v(q | z - z') - \bar{v}(q | z - z')] \tilde{\mathfrak{M}}(q | z', z_2).$$

Тут $\bar{v}_k(q) = G_k(q)v_k(q)$, $\bar{v}(q | z - z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')} \bar{v}_k(q)$; β — обернена термодинамічна температура; $G_k(q)$ — елемент матриці поправки на локальне поле, для якого використано апроксимацію [11]:

$$G_k(q) = \frac{1}{2} \frac{q^2 + k^2}{q^2 + k^2 + \xi p_F^2}. \quad (7)$$

Двочастинкова кореляційна функція «густина–густина» в наближенні ідеального обміну [9]:

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

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

$$f(q, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{\alpha_2^2 - \alpha_1^2 + q^2}{q^2} \theta(p_F - \alpha_1) \left\{ 1 - \sqrt{1 - 4q^2 (p_F^2 - \alpha_1^2)} / (\alpha_2^2 - \alpha_1^2 + q^2) \right\} \theta \left[1 - 4q^2 (p_F^2 - \alpha_1^2) / (\alpha_2^2 - \alpha_1^2 + q^2)^2 \right].$$

Числові розрахунки двочастинкової кореляційної функції «густина–густина» $\mathfrak{M}_0(q|z_1, z_2)$ для моделі поверхневого потенціалу (2) за різних значень напруженості E подані у праці [8].

3. Числові розрахунки ефективного потенціалу $g(\bar{r}_\parallel, z_1, z_2)$ та густини розподілу електронів

Виконавши обернене Фур'є-перетворення ефективного потенціалу $g(q|z_1, z_2)$, отримаємо вираз для обчислення ефективного потенціалу:

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

Тут $J_0(x)$ — функція Бесселя нульового порядку.

На рис. 1а, 1в й 1д подано залежність $g(r_\parallel, z_1, z_2)$ від відстані між електронами у площині поділу r_\parallel для фіксованих нормальних до площини поділу координат електронів z_1 і z_2 за різних значень напруженості зовнішнього електричного поля. На рис. 1б, 1г й 1е зображено залежність $g(r_\parallel, z_1, z_2)$ від однієї з координат (координати z_1), якщо зафіксовано іншу координату та відстань між електронами у площині поділу.

Дослідження проведені для калію (параметр Бракнера $r_s = 4,86$, період ґратки $b = 9,87 a_B$ [12]). Для числових розрахунків використано апроксимацію Хаббарда (апроксимація (7) для $\xi = 1$), висоту бар'єру задано параметром $s = cp_F$ (при цьому $W \approx c^2 \mu$), $p_F = (9\pi/4)^{1/3} / r_s$, $c = 1,01$, а за хімічний потенціал взято $\mu = \mu_0$, де μ_0 — хімічний потенціал незваженої системи електронів за наявності поверхні поділу.

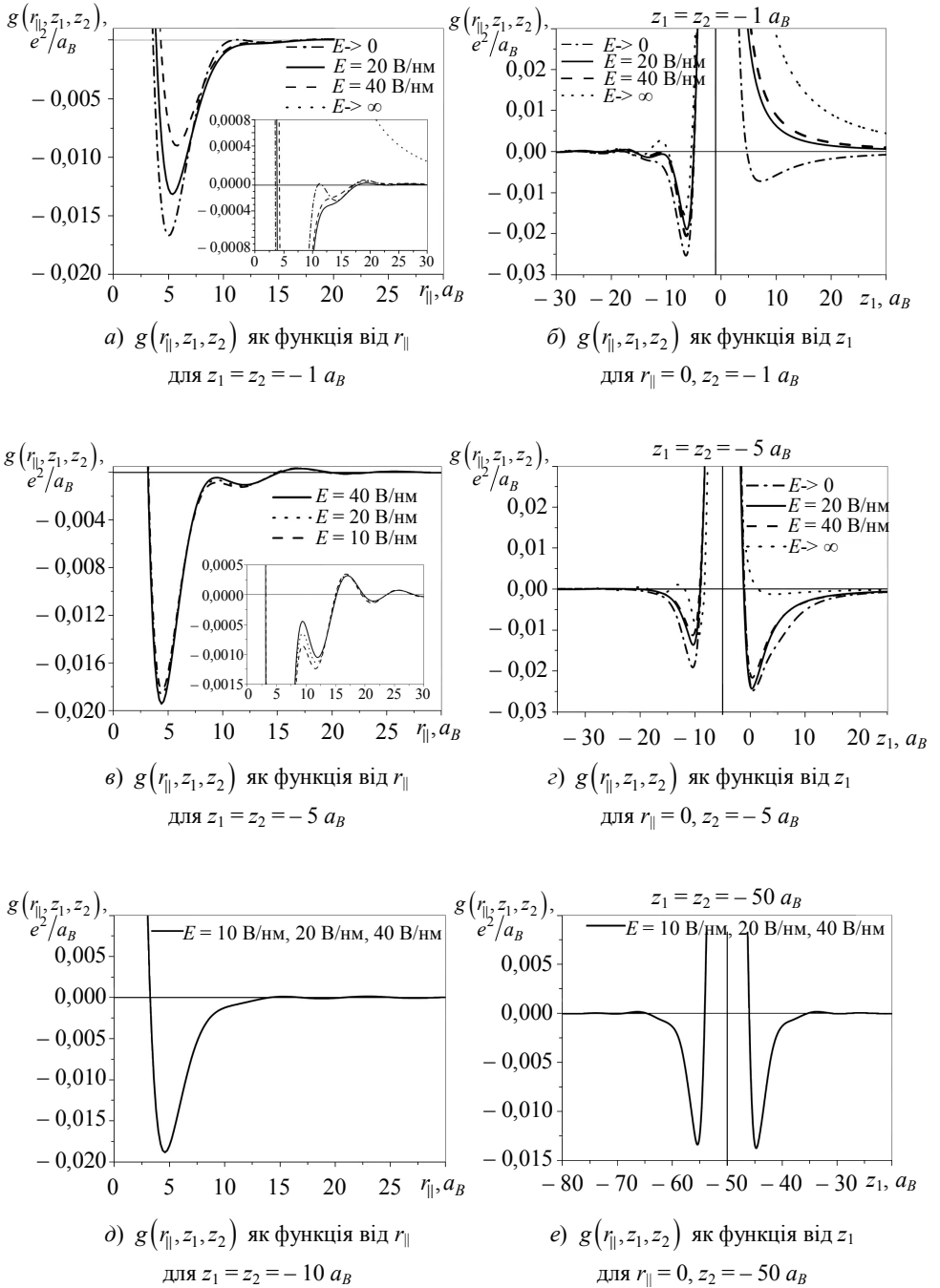


Рис. 1. Ефективний потенціал $g(r_{\parallel}, z_1, z_2)$ як функція від одної з координат за фіксованих двох інших для різних значень напруженості зовнішнього електричного поля

У приповерхневій області сильно проявляється вплив зовнішнього електричного поля на потенціал міжелектронної взаємодії (рис. 1а та 1б). Це відбувається внаслідок різкої зміни електронної густини біля поверхні поділу «метал–вакуум». Також із цим пов'язані сильні осциляції у графічній залежності ефективного потенціалу від r_{\parallel} (рис. 1а та 1в). Зі збільшенням напруженості поля E зменшується глибина потенціальної ями, а для $E \rightarrow \infty$ потенціальної ями не спостерігаємо.

На рис. 1в та 1г подано результати числового розрахунку $g(r_{\parallel}, z_1, z_2)$ на відстанях від поверхні поділу, що дорівнюють половині періоду ґратки b . Числові результати показують, що зовнішнє електричне поле має менший вплив на поведінку в електронній підсистемі.

У разі віддалення електронів від поверхні поділу в глибину металу на відстань, яка перевищує період ґратки b (див. рис. 1д та 1е) вплив напруженості зовнішнього поля зовсім не проявляється й ефективний потенціал парної міжелектронної взаємодії є однаковим для різних значень напруженості поля. На рис. 1е залежність ефективного потенціалу є симетричною щодо прямої $z_1 = z_2$, чого ще не спостерігаємо на рис. 1г. Це означає, що на таких відстанях від поверхні (порядку періоду ґратки b) вплив поверхні та зовнішнього електричного поля є зникаюче малим.

На рис. 2а-2г зображено проекцію потенціалу $g(r_{\parallel}, z_1, z_2)$ на площину $z_1 O r_{\parallel}$. На рис. 2г (у глибині металу на віддалі від поверхні порядку $5b$) спостерігаються концентричні кільця, на рис. 2а-2в (у приповерхневій області) вони деформуються.

Отримані результати в глибині металу (на відстанях $2 \div 5b$) співпадають із результатами для нескінченно високого поверхневого потенціалу [3] (що відповідає напруженості $E \rightarrow \infty$) і потенціальної сходинки [10] ($E \rightarrow 0$). Це говорить про зникнення впливу поверхні поділу на характеристики системи у разі віддалення від поверхні на відстані більші, ніж два періоди ґратки b . Також у цьому випадку ефективний потенціал парної міжелектронної взаємодії прямує до кулонівського, оскільки вплив індукованої взаємодії стає меншим.

Густина розподілу електронів

$$n(z) = n_0(z) \exp \left(- \frac{f_0(z)}{n_0(z)} \sum_{\substack{\vec{q}, \\ (\vec{q} \neq 0)}} \tilde{g}(q, z, z) \right).$$

На рис. 3 подано залежність $n(z)$ від нормальної до площини поділу координати z для різних значень напруженості зовнішнього електричного поля.

Розрахунки показують, що збільшення напруженості зовнішнього електричного поля призводить до зсуву електронної густини всередину металу (рис. 3). Це пояснюється тим, що у разі збільшення напруженості підвищується потенціальний бар'єр на межі «метал–вакуум» і електрону стає важче покинути метал.

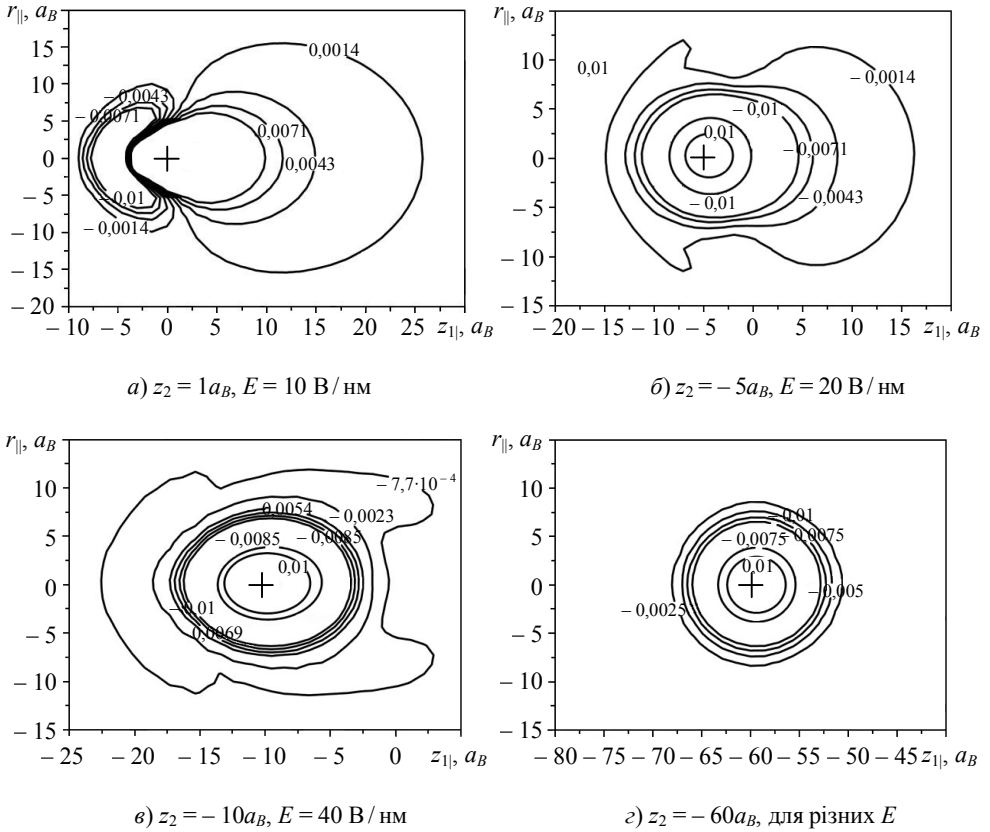


Рис. 2. Проекція ефективного потенціалу на вісь $z_1Or_{||}$, якщо зафіксовано координату одного з електронів $z = z_2$ та напруженість зовнішнього електричного поля E

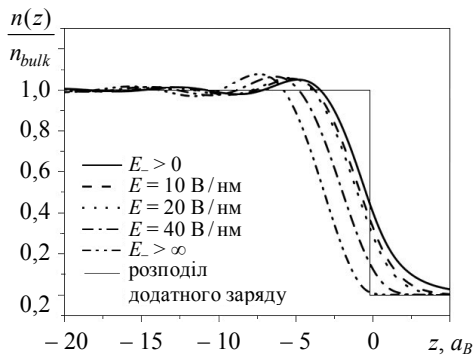


Рис. 3. Густина розподілу електронів $n(z)$ як функція від нормальної до площини поділу координати для різних значень напруженості зовнішнього електричного поля

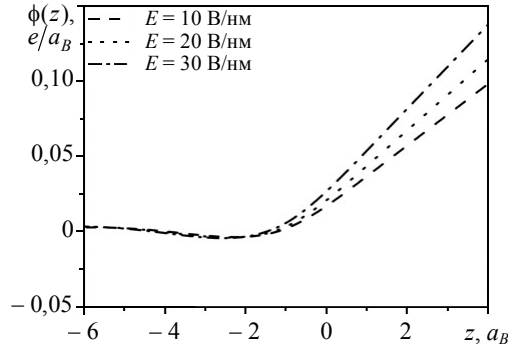


Рис. 4. Електростатичний потенціал $\phi(z)$ як функція від нормальної до площини поділу координати для різних значень напруженості зовнішнього електричного поля

4. Розрахунок електростатичного потенціалу

Знаючи електронну густину (5), можна знайти електростатичний потенціал $\phi(z)$, який для моделі напівобмеженого «желе» є розв'язком рівняння Пуассона [4]:

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} = -4\pi e (n(z) - n_+(z)), \quad (8)$$

де $n_+(z) = n_{bulk}\theta(-d - z)$ — унарна функція розподілу додатного компенсуючого заряду в моделі напівобмеженого «желе», $n_{bulk} = 3/(4\pi r_s^3)$, d — параметр, що визначається умовою електронейтральності: $\int_{-\infty}^{+\infty} (n(z) - n_+(z)) dz = 0$. З умови електронейтральності слідує, що $d = -0,18a_B$.

Розв'язок рівняння (8)

$$\phi(z) = \phi(-\infty) + 4\pi e \int_{-\infty}^z [(z' - z)(n(z') - n_+(z'))] dz'. \quad (9)$$

На рис. 4 подано залежність електростатичного потенціалу (9) від нормальної до площини поділу координати для різних значень напруженості зовнішнього електричного поля.

Для $z > 2a_B$ (поза металом) електростатичний потенціал має правильну поведінку, тобто $\phi(z) \rightarrow eEz$ (рис. 4).

Висновки. Досліджено вплив зовнішнього однорідного електричного поля на електронну підсистему напівобмеженого металу. Встановлено, що прикладене поле спричиняє зміну ефективної міжелектронної взаємодії навіть у перпендикулярному до поля напрямку. Наявність зовнішнього електричного поля впливає на зміну

ефективного потенціалу й електронної густини в приповерхневій області (у разі віддалення від поверхні на віддаль порядку одного періоду ґратки (тобто до $10a_B$)). У глибині металу (на віддаль від поверхні більших за два періоди ґратки) отримані нами результати співпадають для різних значень напруженості прикладеного зовнішнього електричного з результатами, отриманими для нескінченно високого поверхневого потенціалу [3] (що відповідає напруженості $E \rightarrow \infty$). Це означає, що вплив поверхні «метал–вакуум» і прикладеного зовнішнього поля є значимими лише в приповерхневій області порядку десяти борівських радіусів.

Література

- [1] *Kohn W., Mattsson A. E.* Edge electron gas // *Physical Review Letters*. — 1998. — Vol. 115, No 16. — P. 3487-3490.
- [2] *Костробій П. П., Маркович Б. М.* Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали // *Журнал фіз. досл.* — 2003. — Т. 7, № 2. — С. 195-205.
- [3] *Kostrobij P. P., Markovych B. M.* An effective potential of electron-electron interaction in semi-infinite jellium // *Condens. Matter Phys.* — 2006. — Vol. 9, No 4. — P. 747-756.
- [4] *Костробій П. П., Маркович Б. М.* Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на електронну густину напівобмеженого металу // *Укр. фіз. журнал*. — 2007. — Т. 52, № 3. — С. 170-174.
- [5] *Kostrobij P. P., Markovych B. M.* Semi-infinity metal: perturbative treatment based on semi-infinity jellium // *Condens. Matter Phys.* — 2008. — Vol. 4, No 56. — P. 641-651.
- [6] *Kostrobij P. P., Markovych B. M.* Semi-infinity metal: thermodynamic potential and effective interionic pair potential // *American Institute of Physics*. — 2009. — Vol. 1198. — P. 78 -86.
- [7] *Костробій П. П., Маркович Б. М.* Статистична теорія просторово-обмежених електронних систем: II Функції розподілу // *Журн. фіз. досл.* — 2003. — Т. 7, № 3. — С. 298-312.
- [8] *Костробій П. П., Маркович Б. М., Задворняк І. М.* Двочастинкова кореляційна функція «густина–густина» напівобмеженого металу: вплив зовнішнього електричного поля // *Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології*. — 2011. — Вип. 14. — С. 63-72.
- [9] *Костробій П. П., Маркович Б. М., Казановська О. З.* Двочастинкова кореляційна функція «густина–густина» напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле. — Львів, НАН України. ІФКС, 2006. — 16 с. (Препр. / НАН України. ІФКС; ISMP-06-15U).
- [10] *Костробій П. П., Маркович Б. М.* Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали. — Львів, НАН України. ІФКС, 2002. — 36 с. (Препр. / НАН України. ІФКС; ISMP-02-02U).
- [11] *Mahan G. D.* Many-Particle Physics. — New York: Plenum Press, 1990. — 1032 p.
- [12] *Куммель Ч.* Введение в физику твердого тела. — Москва: Наука, 1978. — 789с.

Investigation of the influence of external static electric field on electronic structure of semi-infinity metal

Bogdan Markovych, Ivan Zadvorniak

The influence of static electric field applied perpendicular to the surface on pair effective potential of electron-electron interaction and on density distribution function for the model of semi-infinity «jellium» is investigated. It is shown that the presence of the external static electric field leads to the considerable change of electron structure of semi-infinity metal for the distances from the surface equal approximately one period of lattice.

Богдан Маркович, Иван Задворняк

Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на електронну структуру ...

Исследование влияния внешнего статического электрического поля на электронную структуру полугограниченного металла

Богдан Маркович, Иван Задворняк

Исследовано влияние внешнего постоянного электрического поля приложенного перпендикулярно поверхности раздела на парный эффективный потенциал электрон-электронного взаимодействия и на унарную функцию распределения электронов для модели полугограниченного «железа». Показано, что наличие внешнего статического электрического поля приводит к изменению электронной структуры полугограниченного металла у поверхности раздела (на расстояниях от поверхности раздела порядка одного периода решетки).

Отримано 17.04.13