

Investigation the influence of external electric field on pair effective potential of electron-electron interaction in semi-infinity metal

Petro Kostrobij, Bogdan Markovych,
Ivan Zadvorniak¹

Applied mathematics Department, Lviv Polytechnic National University, UKRAINE, Lviv, S. Bandera street 12
¹E-mail: ivanZadv@yahoo.com

The calculation of pair effective potential of electron-electron interaction is conducted. The influence of the external static electric field (in perpendicular direction to the interface "metal-vacuum") on the value of such potential is investigated.

The semi-infinity metal that modeled by so-called semi-infinity jellium is considered. In such model the interface "metal-vacuum" is plain and the surface potential is the function of only normal to the surface coordinate of electron. The surface potential modeled by the expression (1), allowing to find analytical solution to Schrödinger equation.

The calculation of effective potential of electron-electron interaction needs to find two-particle correlation function "density-density". The calculations of two-particle correlation function "density-density" are performed in random phases approximation (RPA) [2] and in a case of Coulomb interaction [2]. An effective potential of electron-electron interaction is calculated by the expression (3) taking into account (2). These calculations were performed for the different values of the external static electric field strength.

The numerical results show (see fig.1-2) that near the surface (for the distances from the surface equal approximately one period of lattice) the value of effective potential is essentially different for the different values of the external static electric field strength. In the metal depth (for the distances from the surface equal more than two periods of lattice) the influence of the electric field strength is not appear (see fig.3). That's why the external electric field is not permeate on such distances from the surface.

The research was performed for potassium (the Brueckner parameter $r_s = 4,86$, the lattice period $5,225 \text{ \AA}$ [3]).

Дослідження впливу зовнішнього електричного поля на парний ефективний потенціал міжелектронної взаємодії в напівобмеженому металі

Петро Костробій, Богдан Маркович,
Іван Задворняк¹

Кафедра прикладної математики, Національний університет "Львівська політехніка", УКРАЇНА, м.Львів, вул.С.Бандери, 12
¹E-mail: ivanZadv@yahoo.com

Досліджено вплив зовнішнього потійного електричного поля на парний ефективний потенціал міжелектронної взаємодії для моделі напівобмеженого «желе». Показано, що наявність поля приводить до сильної зміни ефективного потенціалу в приповерхневій області.

Ключові слова – кореляційна функція, парний ефективний потенціал, напівобмежений метал, поверхневий потенціал.

I. Вступ

В даній роботі досліджується парний ефективний потенціал міжелектронної взаємодії для напівобмеженого металу, коли перпендикулярно до поверхні поділу прикладено зовнішнє постійне електричне поле. Дослідження проведені для різних значень напруженості електричного поля, зокрема і у випадку відсутності поля (коли $E = 0$).

II. Модель

Розглянемо систему, яка складається з N електронів, що містяться в області

$$\Omega = \left\{ (x, y, z): -\sqrt{S}/2 \leq x \leq \sqrt{S}/2, \right. \\ \left. -\sqrt{S}/2 \leq y \leq \sqrt{S}/2, -L/2 \leq z \leq L/2 \right\}$$

у полі додатного неоднорідно розподіленого заряду з густиною

$$r = r(r_{\parallel}, z) = r_0 q(-z-d),$$

де $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$ – двовимірний радіус-вектор електрона в площині, яка паралельна до площини поділу $z = -d$,

$$r_0 = \frac{eN}{SL/2}, \quad e - \text{заряд електрона.}$$

Така система називається моделлю «желе» напівобмеженого металу, причому $N, S, L \rightarrow \infty$ так, що виконується термодинамічна границя:

$$\lim_{N, S, L \rightarrow \infty} \frac{N}{SL} = \text{const.}$$

У цій моделі поверхня поділу «метал-вакуум» є плоскою і поверхневий потенціал є функцією тільки нормальної до поверхні. Розглянемо модель лінійного поверхневого потенціалу, тобто

$$V(\mathbf{r}) = V(z) = \begin{cases} W + eEz, & z > 0, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad (1)$$

де W – висота бар'єру, E – напруженість прикладеного перпендикулярно до поверхні постійного електричного поля

Зауважимо, що при $E = 0$ потенціал (1) набуває вигляду сходинок скінченної висоти (випадок відсутності поля), а при $E \rightarrow \infty$ з (1) отримуємо модель нескінченно високої потенціальної стінки [2].

III. Результати числових розрахунків ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії

Фур'є-образ ефективного потенціалу міжелектронної взаємодії [1]

$$g(q|z_1, z_2) = V(q|z_1 - z_2) + \frac{1}{SL^2} \times \int dz \int dz' V(q|z_1 - z) \tilde{M}(q|z, z') V(q|z' - z_2), \quad (2)$$

де $V(q|z_1 - z_2) = \frac{2p e^2}{q} e^{-q|z_1 - z_2|}$ – двовимірний Фур'є

образ кулонівського потенціалу, $\tilde{M}(q|z, z')$ – кореляційна функція «густина-густина», яка є розв'язком інтегрального рівняння Фредгольма другого роду [2].

Виконавши обернене Фур'є-перетворення ефективного потенціалу, отримуємо вираз:

$$g(r_{||}, z_1, z_2) = \frac{1}{2p} \int_0^\infty q J_0(qr_{||}) g(q|z_1, z_2) dq, \quad (3)$$

де $J_0(x)$ – функція Бесселя нульового порядку.

На рис. 1 – 3 подано залежність $g(r_{||}, z_1, z_2)$ від $r_{||}$ для фіксованих нормальних до площини поділу координатах електронів z_1 і z_2 при різних значеннях напруженості зовнішнього електричного поля, зокрема і в граничних випадках (коли $E = 0$ та $E \rightarrow \infty$). Дослідження проведені для калію (параметр Бракнера $r_s = 4,86$, період ґратки $5,225 \text{ \AA}$ ($9,87 a_B$) [3]).

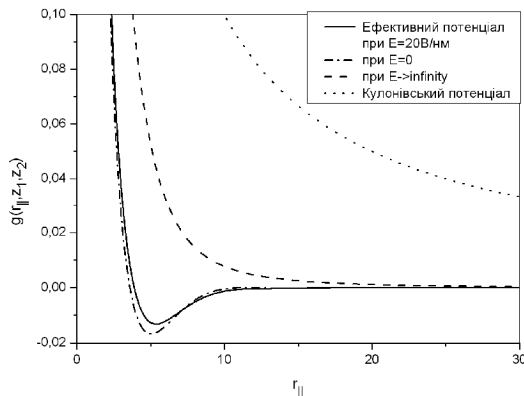


Рис.1 $g(r_{||}, z_1, z_2)$ при $z_1 = z_2 = -1 a_B$.

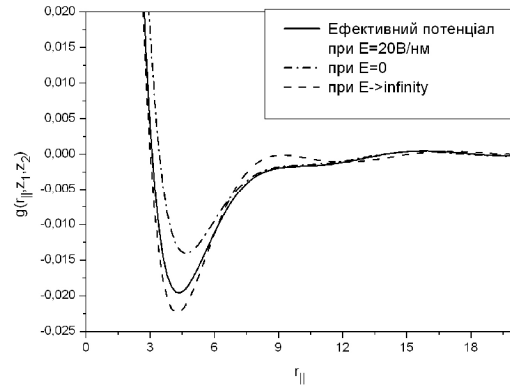


Рис.2 $g(r_{||}, z_1, z_2)$ при $z_1 = z_2 = -7 a_B$.

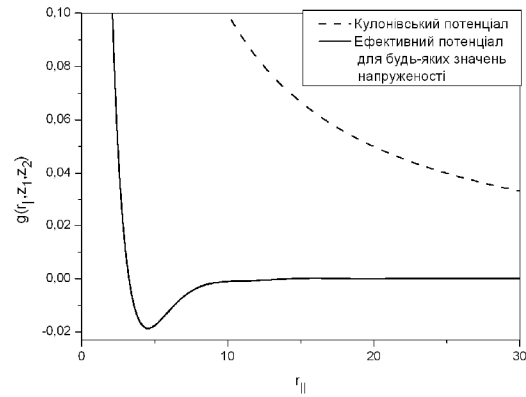


Рис.3 $g(r_{||}, z_1, z_2)$ при $z_1 = z_2 = -27 a_B$.

Висновок

Чисельні результати показують (див. рис.1-2), що в приповерхневій області (на віддальх від поверхні поділу «метал-вакуум» порядку одного періоду ґратки) величина ефективного потенціалу суттєво відрізняється для різних значень напруженості прикладеного зовнішнього електричного поля. В глибині металу, тобто на віддальх більших за два періоди ґратки від поверхні поділу (див. рис.3) вплив напруженості вже не проявляється, а це означає, що прикладене зовнішнє електричне поле не проникає на такі віддалі.

Література

- [1] P. P. Kostrobij, B.M. Markovych. An effective potential of electron-electron interaction in semi-infinite jellium // Condens. Matter Phys. 9 (4), pp.747–756. (2006)
- [2] П.П. Костробій, Б.М. Маркович, О.З. Казановська. Двочастинкова кореляційна функція «густина-густина» напівобмеженого електронного газу із врахуванням поправки на локальне поле. – Львів: 2006. – 16с., (Препр./ НАН України. ІФКС. ІСМР–06–15U).
- [3] Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967.