

ПРО ОДНУ МОДЕЛЬ ТОНКОЇ ЕЛЕКТРОННОЇ ПЛІВКИ

П.П. Костробій, І.А. Рижа

Національний університет “Львівська політехніка”
(79013, Львів, вул. С. Бандери 12)

(Отримано 2 грудня 2011 р.)

Розглядається модель модифікованої потенціальної ями Пешля-Теллера. Для цієї моделі розв’язано задачу про розрахунок функції розподілу густини електронів, досліджено впливи параметрів потенціальної ями на форму розподілу густини. Проведені числові розрахунки хімічного потенціалу μ та одночастинкової енергії $\langle E \rangle$, досліджено їхню залежність від параметрів ями та товщини плівки. Результати числових розрахунків порівнюються з аналогічними розрахунками μ та $\langle E \rangle$ для моделі прямокутної потенціальної ями.

Ключові слова: тонкі металеві плівки, хімічний потенціал, функції розподілу.

PACS: 71.45.Gm

УДК: 530.145

Вступ

Сучасні підходи до математичного моделювання структурних та термодинамічних характеристик тонкоплівкових металевих систем ґрунтуються на ідеології методу функціоналу густини (DFT), в якій наявність поверхонь поділу моделюється одночастинковим потенціалом зовнішнього поля $V(\vec{r}_i)$ ($\vec{r}_i$ – радіус-вектор частинки). [1]

Запропонований у [2] квантово статистичний підхід до опису металевих систем з поверхнею поділу “метал-вакуум”, теж вимагає розрахунку властивостей системи відліку, за яку вибирається невзаємодіюча система електронів у зовнішньому полі.

Тому задача розрахунку характеристик системи невзаємодіючих електронів з двома поверхнями поділу “електрони-вакуум” є актуальною. Для моделей поверхневого потенціалу (що описують наявність поверхні “електрони-вакуум”) типу “нескінченна яма” або прямокутна потенціальна яма така задача розв’язана [3].

У цій праці розглянуто задачу розрахунку середньої енергії, хімічного потенціалу та функції розподілу густини електронів для випадку моделювання поверхневого потенціалу потенціалом Пешля-Теллера [4] і проведено порівняння з аналогічними результатами розрахунку цих величин для моделі прямокутної потенціальної ями.

І. Опис моделі

Розглянемо систему N невзаємодіючих електронів, що знаходяться в плівці, обмеженій плоскими поверхнями поділу “електрони-вакуум”, рівняння яких є $z = -\frac{L}{2}$ та $z = \frac{L}{2}$. Положення електрона будемо задавати радіус-вектором $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$.

Гамільтоніан такої моделі ($\hbar$ – стала Планка, m – маса електрона)

$$H = \sum_{i=1}^N H(\vec{r}_i) = - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(\vec{r}_i) \right\}, \quad (1)$$

де $V(\vec{r}_i)$ – одночастинковий потенціал, який описує наявність поверхонь поділу, $\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ – оператор Лапласа.

Змоделюємо $V(\vec{r}_i)$ модифікованим потенціалом Пешля-Теллера [4]

$$V(\vec{r}_i) \equiv V(z) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \lambda(\lambda - 1) \left(1 - \frac{1}{\cosh^2 \alpha z} \right), \quad (2)$$

який правильно моделює асимптотику поверхневого потенціалу [5]. Тут α , λ – параметри потенціалу ($\lambda > 1$).

Хвильова функція Φ розглядуваної моделі, яка задовольняє стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H\Phi = E\Phi, \quad (3)$$

може бути записана через одночастинкові хвильові функції $\varphi_f(\vec{r}_i)$:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \det \|\varphi_f(\vec{r}_i)\|. \quad (4)$$

Одночастинкові хвильові функції $\varphi_f(\vec{r}_i)$ задовольняють рівняння Шредінгера:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(z) \right\} \varphi_f(\vec{r}) = E_f \varphi_f(\vec{r}). \quad (5)$$

Розв’язки рівняння (5) шукаємо у вигляді:

$$\varphi_f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \psi_n(z), \quad (6)$$

де $k_x = \frac{2\pi}{\sqrt{S}}n_x$, $k_y = \frac{2\pi}{\sqrt{S}}n_y$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $f = \{k_x, k_y, n\}$, а $\psi_n(z)$ є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right) \psi_n(z) = \varepsilon_n \psi_n(z). \quad (7)$$

Одночастинкові енергії E_f у цьому випадку є такими:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \varepsilon_n. \quad (8)$$

Розв'яжемо рівняння (7), для моделі (2) потенціалу $V(z)$. Ввівши змінну $y = \text{ch}^2 \alpha z$ і зробивши підстановку $\psi = y^{\lambda/2} v(y)$, рівняння (7) зводимо до вигляду [4]

$$y(1-y)v'' + [c - (a+b+1)y]v' - abv = 0, \quad (9)$$

$$\text{де } c = \lambda + \frac{1}{2}, \quad a = \frac{1}{2} \left(\lambda - \sqrt{\lambda(\lambda-1) - \frac{\varepsilon^2}{\alpha^2}} \right), \\ b = \frac{1}{2} \left(\lambda + \sqrt{\lambda(\lambda-1) - \frac{\varepsilon^2}{\alpha^2}} \right), \quad \varepsilon^2 = \frac{2m\varepsilon_n}{\hbar^2}.$$

Загальний розв'язок рівняння (9) відомий [6]:

$$v(y) = A_1 {}_2F_1\left(a, b, \frac{1}{2}; 1-y\right) + \\ + A_2 (1-y)^{1/2} {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; 1-y\right), \quad (10)$$

де ${}_2F_1(a, b, c; z)$ – гіпергеометрична функція.

Враховуючи (10), для $\psi_n(z)$ маємо

$$\psi_n(z) = C_1 \text{ch}^\lambda \alpha z {}_2F_1\left(\frac{n+1}{2}, \lambda - \frac{n+1}{2}, \frac{1}{2}; -\text{sh}^2 \alpha z\right), \quad (11)$$

коли n – парне, або

$$\psi_n(z) = C_2 \text{ch}^\lambda \alpha z \text{sh} \alpha z {}_2F_1\left(\frac{n}{2} + 1, \lambda - \frac{n}{2}, \frac{3}{2}; -\text{sh}^2 \alpha z\right), \quad (12)$$

коли n – непарне.

Тут C_1, C_2 – сталі, які знаходяться з умови нормування, $\varepsilon_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda - 1 - n)^2 + U_0$, $n \leq \lambda - 1$ – енергії зв'язаних станів [4], де

$$U_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \lambda(\lambda - 1). \quad (13)$$

II. Хімічний потенціал μ моделі модифікованої потенціальної ями Пешля-Теллера

Для знаходження хімічного потенціалу μ розглядуваної моделі електронної плівки скористаємося означенням [7]

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad (14)$$

де

$$\Omega = -\beta \sum_{\{f\}} \sum_{\sigma} \ln[1 + \exp\{\beta(\mu - E_f)\}] - \quad (15)$$

термодинамічний потенціал системи невзаємодіючих електронів, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обернена температура, k_B – стала Больцмана [3].

Рівняння (14) з використанням (15) можна переписати так:

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{V} \sum_{\{f\}} n(E_f). \quad (16)$$

Тут

$$n(E_f) = \frac{1}{1 + \exp\{\beta(\mu - E_f)\}} - \quad (17)$$

функція розподілу Фермі-Дірака, V – об'єм системи.

В області низьких температур ($\beta\mu \gg 1$) $n_f(\varepsilon(p, n)) = \theta(\mu - \varepsilon(p, n))$, де $\theta(t)$ – функція Хевісайда [6], і тому рівняння (16) має простий вигляд:

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{V} \sum_{\{f\}} \theta(\mu - E_f). \quad (18)$$

Ввівши параметр Гелл-Манна-Бракнера $r_s = \frac{\langle r \rangle}{a_B} = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi N}} \frac{V}{a_B}$ та $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2}$, де a_B – Борівський радіус, перепишемо рівняння (18) у безрозмірній формі:

$$\frac{3L^*}{2r_s^3} = \sum_{n=0}^{\lambda-1} \{ \mu^* - (\alpha^*)^2 [\lambda(\lambda-1) - (\lambda-1-n)^2] \} \times \\ \times \theta\{ \mu^* - (\alpha^*)^2 [\lambda(\lambda-1) - (\lambda-1-n)^2] \}. \quad (19)$$

$$\text{Тут } L^* = \frac{L}{a_B}; \quad \alpha^* = \alpha a_B; \quad \mu^* = \frac{\mu}{\varepsilon_0}.$$

Числовий розв'язок рівняння (19) зображено на рис. 1–3, як графік залежності хімічного потенціалу моделі потенціальної ями Пешля-Теллера від параметра r_s при заданих α, λ, L .

На рис. 4 наведено графічне порівняння результатів розрахунку $\mu(r_s)$ для моделі потенціальної ями Пешля-Теллера (2) з аналогічними результатами, отриманими для моделі прямокутної потенціальної ями такого типу:

$$V(z) = \begin{cases} -U_0, & \text{коли } |z| < \alpha, \\ 0, & \text{коли } |z| > \alpha; \end{cases} \quad (20)$$

де параметр U_0 визначається (13).

Як видно з рис.4, вибір моделі для $V(z)$ впливає як на якісну поведінку хімічного потенціалу, так і на його величину. Це означає, що при розрахунку таких характеристик, як хімічний потенціал, слід прискіпливо відноситися до вибору моделі поверхневого потенціалу.

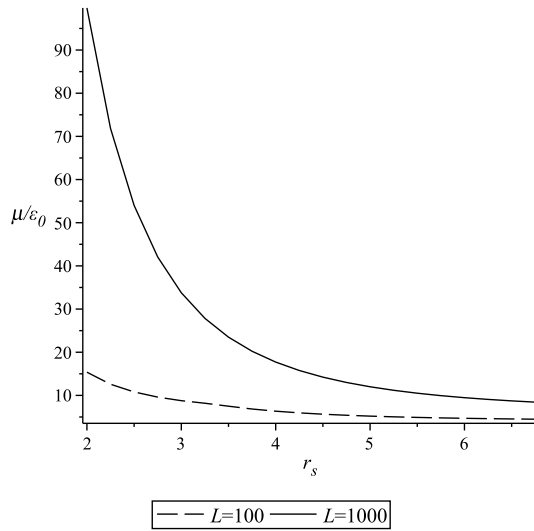


Рис. 1. Графік залежності μ моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\alpha = 2$, $\lambda = 2$ та заданому L .

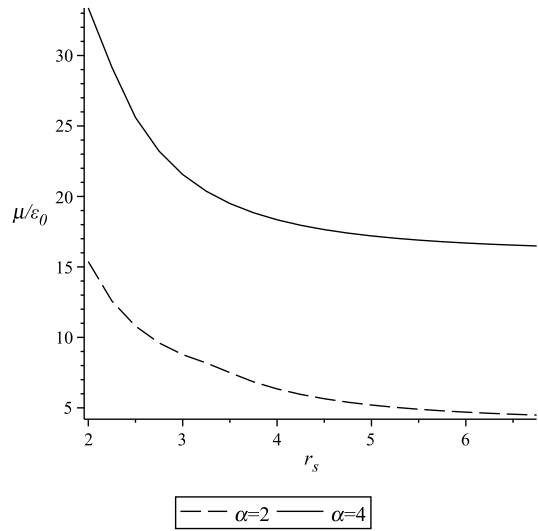


Рис. 2. Графік залежності μ моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\lambda = 2$, $L = 100$ та заданому α .

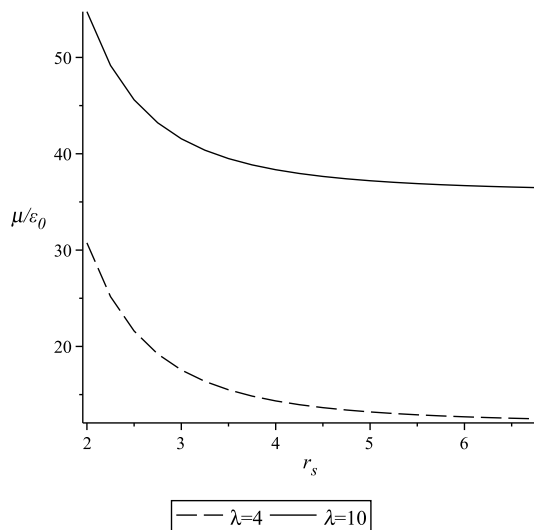


Рис. 3. Графік залежності μ моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\alpha = 2$, $L = 100$ та заданому λ .

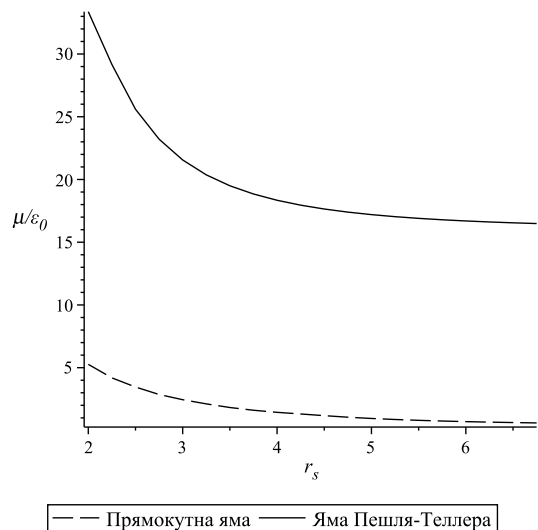


Рис. 4. Графік залежності μ від параметра r_s при $\alpha = 4$, $\lambda = 2$, $L = 100$.

III. Одночастинкова енергія

Обчислимо середню енергію на одну частинку

$$\varepsilon = \frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\{f\}} E_f n(E_f), \quad (21)$$

де E_f – одночастинкові енергії, які визначаються (8), $n(E_f)$ – функція розподілу Фермі-Дірака (17).

В області низьких температур ($\beta\mu \gg 1$) вираз (21) має вигляд:

$$\varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{\{f\}} E_f \theta(\mu - E_f). \quad (22)$$

Ввівши параметр Гелл-Мана-Бракнера r_s та ε_0 , перепишемо (22) у безрозмірній формі:

$$\varepsilon^* = \frac{r_s^3}{3L^*} \sum_{n=0}^{\lambda-1} \left\{ (\mu^*)^2 - (\alpha^*)^4 [\lambda(\lambda-1) - (\lambda-1-n)^2]^2 \right\} \theta \{ \mu^* - (\alpha^*)^2 [\lambda(\lambda-1) - (\lambda-1-n)^2] \}. \quad (23)$$

Тут $L^* = \frac{L}{a_B}$; $\alpha^* = \alpha a_B$; $\mu^* = \frac{\mu}{\varepsilon_0}$; $\varepsilon^* = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$.

Числовий розрахунок середньої енергії ε зображено на рис. 5–7 у вигляді графіка залежності ε від

параметра r_s при заданих α , λ , L .

Розрахунок одностинкової енергії підтверджує висновки щодо вибору моделі $V(z)$, які справедливі для розрахунку хімічного потенціалу.

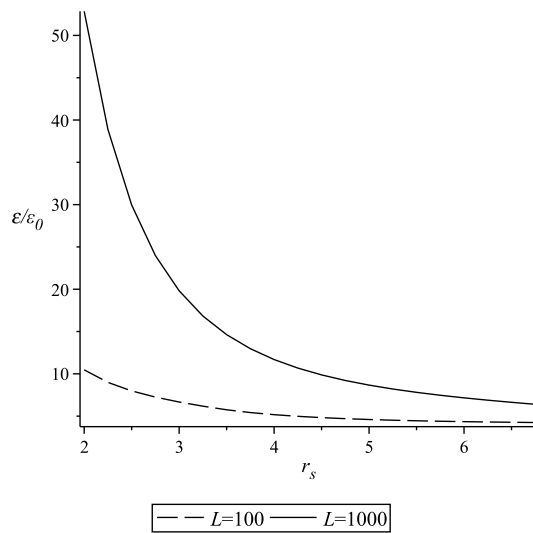


Рис. 5. Графік залежності ε моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\alpha=2$, $\lambda=2$ та заданому L .

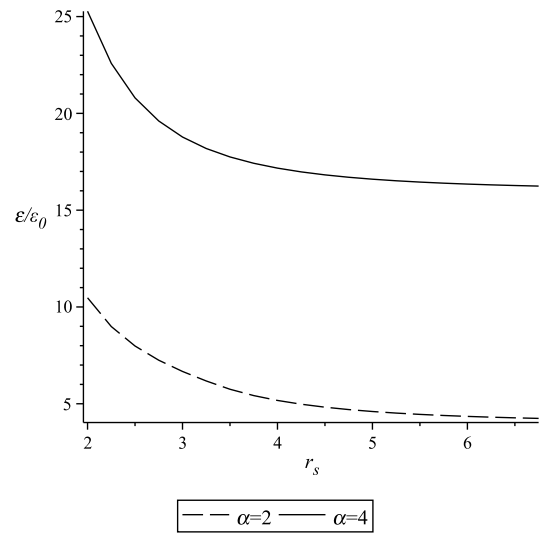


Рис. 6. Графік залежності ε моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\lambda=2$, $L=100$ та заданому α .

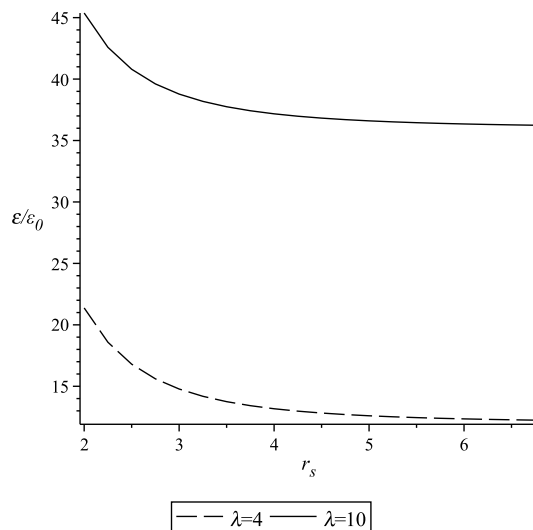


Рис. 7. Графік залежності ε моделі Пешля-Теллера від параметра r_s при $\alpha=2$, $L=100$ та заданому λ .

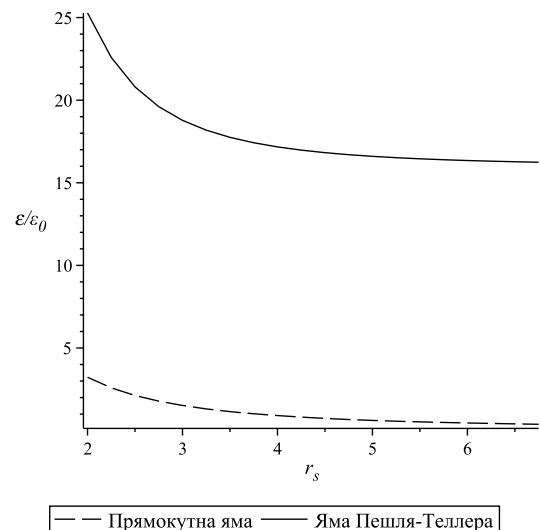


Рис. 8. Графік залежності ε від параметра r_s при $\alpha=4$, $\lambda=2$, $L=100$.

IV. Функція розподілу густини електронів

Визначимо функцію розподілу густини $F_1(\vec{r})$ згідно з означенням за Боголюбовим [8]:

$$\frac{F_1(\vec{r})}{V} = \frac{Sp_{(1)} \exp\{-\beta(H - \mu N)\}}{Sp \exp\{-\beta(H - \mu N)\}}, \quad (24)$$

де μ – хімічний потенціал.

Операція $Sp_{(1)}$ в означенні (24) для довільного оператора $\hat{A}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$ визначена так:

$$Sp_{(1)}[\hat{A}] = \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \sum_{\{f\}} \Phi_{\{f\}}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \times \\ \times \hat{A}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \Phi_{\{f\}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N),$$

$$\frac{N}{V} F_1(z) = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \sum_{n=0}^{\lambda-1} |\psi_n(z)|^2 \left(\mu + \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 (\lambda - 1 - n)^2 - U_0 \right) \theta \left(\mu + \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 (\lambda - 1 - n)^2 - U_0 \right), \quad (26)$$

де $\psi_n(z)$ задається (11)-(12), U_0 – виразом (13).

Числовий розрахунок нормованої одночастинкової функції розподілу $F_1(z)$ при заданих параметрах α , λ , L та r_s зображено на рис. 8–11, з яких видно, що одночастинкова функція розподілу має правильну поведінку.

Як видно з наведених розрахунків для функції розподілу вибір моделі для поверхневого потенціалу $V(z)$ приводить до різкої зміни (у два рази) розміру приповерхневої області, в якій зменшується концентрація електронів. Це фізично зрозуміло, оскільки на поведінку унарної функції розподілу $F_1(z)$ більше впливає ефективна площа поверхневого потенціалу [4] (див. рис.13).

де $\Phi_{\{f\}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ – хвильова функція розглядуваної системи, $\{f\}$ – сукупність квантових станів системи.

Використавши методику [3], вираз (24) для $F_1(\vec{r})$ легко можна звести до вигляду

$$\frac{N}{V} F_1(\vec{r}) = 2 \sum_{\{f\}} |\varphi_f(\vec{r})|^2 n(E_f), \quad (25)$$

де $n(E_f)$ – означене виразом (17).

Для моделі потенціальної ями Пешля-Теллера отримуємо (в області $\beta\mu \gg 1$)

Висновки

У роботі розглянуто модель тонкої плівки, що описується модифікованою потенціальною ямою Пешля-Теллера. Для цієї моделі розглянуто задачу про розрахунок хімічного потенціалу і функції розподілу густини електронів, досліджено впливи параметрів потенціальної ями та товщини плівки на форму розподілу густини. Показано, що розраховані характеристики залежать (якісно та кількісно) від вибору моделі потенціальної ями, що необхідно враховувати під час моделювання тонких електронних плівок.

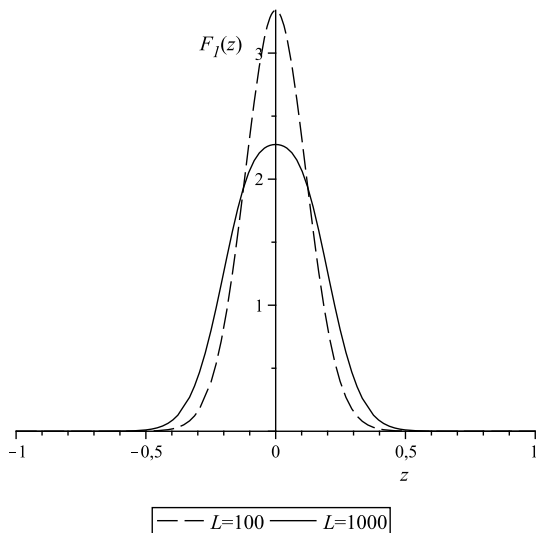


Рис. 9. Графік $F_1(z)$ моделі потенціальної ями Пешля-Теллера при $\alpha = 2$, $\lambda = 10$, $r_s = 2$.

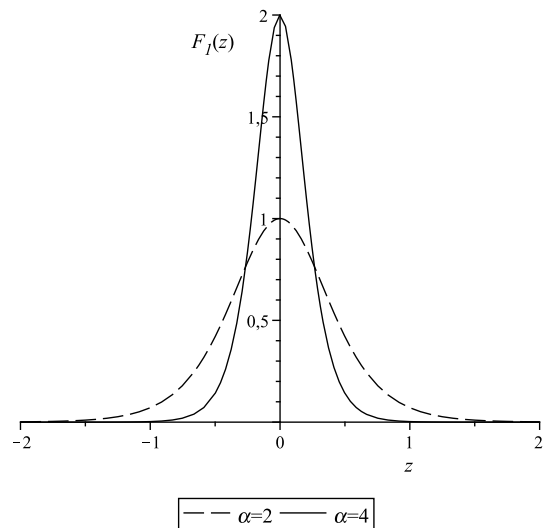


Рис. 10. Графік $F_1(z)$ моделі потенціальної ями Пешля-Теллера при $\lambda = 2$, $L = 100$, $r_s = 6$.

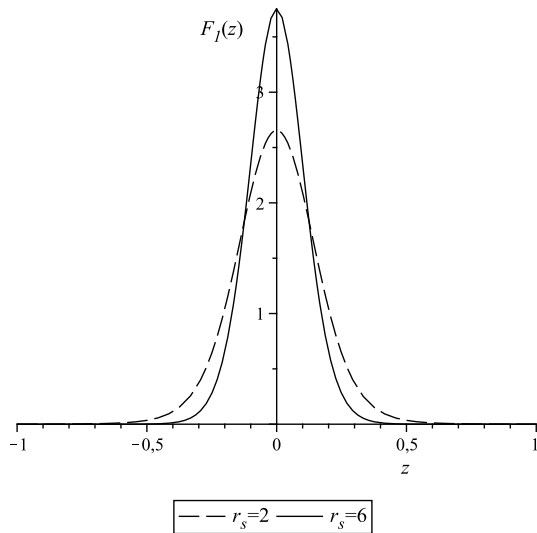


Рис. 11. Графік $F_I(z)$ моделі потенціальної ями Пешля-Теллера при $\alpha = 4$, $\lambda = 4$, $L = 1000$.

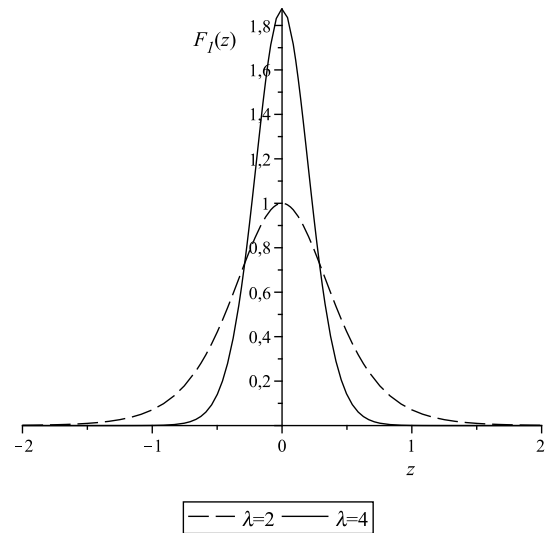


Рис. 12. Графік $F_I(z)$ моделі потенціальної ями Пешля-Теллера при $\alpha = 2$, $L = 10$, $r_s = 2$.

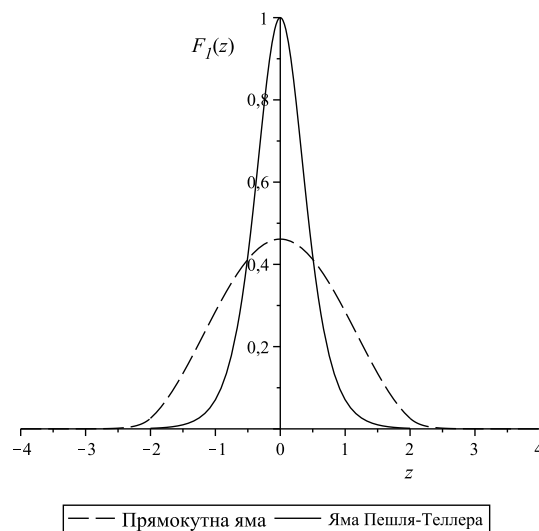


Рис. 13. Графік $F_I(z)$ при $\alpha = 2$, $\lambda = 2$, $L = 100$, $r_s = 2$.

Література

- [1] Теория неоднородного электронного газа: Пер. с англ./ Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. – М.: Мир, 1987. – 400с.
- [2] Костробій П.П., Маркович Б.М. Статистична теорія просторово-обмежених систем заряджених фермі-частинок: I. Метод функціонального інтегрування та ефективні потенціали // Журн. фіз. досл. – 2003. – Т.7, №2. – С.195–206.
- [3] 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.

- [4] Флюгге З. Задачи по квантовой механике: В 2 т. – М.: Мир, 1974. 832с.
- [5] Маркович Б.М. Приватні зауваження.
- [6] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. Для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1978. –
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.І. – М.: Физматгиз, 2002. – 613 с.
- [8] Боголюбов Н.И. Избранные труды. Т.2. – К.: Наукова думка, 1970. – 552 с.

ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ ТОНКОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛЕНКИ

П.П. Костробий, И.А. Рыжа

*Национальный университет “Львовська политехника”,
ул. С. Бандеры, 12, Львов, 79013, Украина*

Рассматривается модель модифицированной потенциальной ямы Пешля-Теллера. Для этой модели решена задача расчета функции распределения плотности электронов, исследовано влияние параметров потенциальной ямы на форму распределения плотности. Проведены численные расчеты химического потенциала μ и одночастичной энергии $\langle E \rangle$, исследована их зависимость от параметров ямы и толщины пленки. Результаты численных расчетов сравниваются с аналогичными расчетами μ и $\langle E \rangle$ для модели прямоугольной потенциальной ямы.

Ключевые слова: тонкие металлические пленки, химический потенциал, функции распределения.

2000 MSC: 74.45.Gm

УДК: 530.145

A MODEL FOR THIN ELECTRON FILM

P.P. Kostrobij, I.A. Ryzha

*National University “Lvivska Politechnika”
(79013, Lviv, S. Bandera str. 12)*

The Pöschl-Teller potential model is considered. For this model the problem of calculation of electron density distribution function is solved, the influence of parameters of well potential on the form of distribution function is examined. Calculations of chemical potential μ and one-particle energies $\langle E \rangle$ are computed, their dependencies on parameters of well potential and thickness of a thin metal film are investigated. Results of the calculations are compared to the similar calculations of μ and $\langle E \rangle$ for the finite potential well model.

Key words: thin metal films, chemical potential, distribution functions.

PACS: 71.45.Gm

УДК: 530.145