Краткие сообщения по физике № 8 1978

ЭКРАНИРОВКА В НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМАХ

С. Г. Акопов, Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик

УДК 537.312.62

Рассматривается экранирование кулоновского взаимодействия в неоднородных системах в квазиклассическом приближении применительно к металлической грануле с зеркальным отражением электронов от границы. Экранирование оказывается более слабым, чем дебаевское.

В связи с изучением в последние годы неоднородных сверхпроводящих систем возникает вопрос об учете влияния неоднородностей на экранировку кулоновского взаимодействия. Экранировка в однородных системах с достаточно хорошей точностью описывается приближением Томаса-Ферми (ПТФ), в рамках которого экранирующий потенциал имеет хорошо известный дебаевский вид.

Однако в неоднородных системах для справедливости этого выражения необходимо выполнение не только условия квазиклассичности $L \gg \hbar/p_F$ (p_F - импульс Ферми), но и более жесткого условия $L \gg 1/\varkappa$; здесь L - характерная длина, на которой сказывается неоднородность системы, $\varkappa$ - обратный радиус Дебая. Оказывается возможно определить закон экранирования и в случае $1/\varkappa \sim L \gg \gg \hbar/p_F$. Получающееся в результате уравнение для потенциала является обобщением линеаризованного уравнения ПТФ с учетом всех квазиклассических эффектов.

В качестве примера рассматривается задача об экранировке кулоновского взаимодействия в сферической металлической грануле конечных размеров. Экранирование оказывается более слабым, чем в ПТФ.

I. Распределение потенциала φ в системе описывается уравнением Пуассона [ж)]:

$$\Delta\varphi(\bar{x}) = -4\pi\rho(\bar{x}). \qquad (I)$$

Введем поляризационный оператор $\Pi(\bar{x},\bar{x}',t)$ следующим соотношением:

$$\rho(\bar{x},t) = \rho_e(\bar{x},t) + \int\limits_{-\infty}^{0} dt' \int d^3\bar{x}' \, \Pi(\bar{x},\bar{x}',t+t')\varphi(\bar{x}',t'), \qquad (2)$$

где ρ - полная, ρ_e - внешняя плотность заряда. Чтобы избежать появления неопределенных выражений при вычислении интеграла в (2), положим в рассматриваемом статическом случае

$$\varphi(\bar{x},t) = \varphi(\bar{x})\exp\eta t, \quad \eta \to +0. \qquad (3)$$

В рамках квазиклассического описания справедливо выражение для поляризационного оператора /I/:

$$\Pi(\bar{x},\bar{x}',t) = -\frac{p_F(\bar{x})}{\pi^2}\frac{d}{dt}\langle\delta(\bar{x}(t)-\bar{x}')\rangle_n, \qquad (4)$$

где $x(t)$ - закон движения классической частицы в самосогласованном поле ($\ddot{\bar{x}}(t) = -\nabla\varphi(\bar{x})$, $\bar{x}(0) = \bar{x}$, $|\dot{\bar{x}}(0)| = p_F(\bar{x})$), $\langle\ldots\rangle_n$ - символ усреднения по направлению n вектора $\dot{\bar{x}}(0)$.

Тогда из (2) - (4) находим:

$$\rho(\bar{x}) - \rho_e(\bar{x}) = -\frac{p_F(\bar{x})}{\pi^2}\varphi(\bar{x}) + \frac{p_F(\bar{x})}{\pi^2}\eta\int\limits_0^{\infty} dt e^{-\eta t}\langle\varphi(\bar{x}(t))\rangle_n. \qquad (5)$$

Используя (I) и (5), можно записать:

ж) Здесь и ниже используются атомные единицы $e = \hbar = m_e = 1$.

$$\left.\begin{aligned} \Delta\varphi(\bar{x}) &= \varkappa^2\varphi(\bar{x}) - \varkappa^2 Q\{\varphi(\bar{x})\}, \\ Q\{\varphi(\bar{x})\} &= \eta\int_0^\infty dt e^{-\eta t}\langle\varphi(\bar{x}(t))\rangle_n, \end{aligned}\right| \qquad (6)$$

где $\varkappa^2 = (4/\pi)p_F(\bar{x})$.

2. Раскроем выражение для Q в случае сферически-симметричного распределения потенциала φ:

$$\eta\int_0^\infty dt\ e^{-\eta t}\langle\varphi(\bar{x}(t))\rangle_n = \langle\langle\varphi(r(t))\rangle_t\rangle_n, \qquad (7)$$

где $\langle\ldots\rangle_t$ означает усреднение по t, $r(t) = |\bar{x}(t)|$. Рассмотрим случай финитного движения, тогда $r(t)$ – периодическая функция и операция $\langle\ldots\rangle_t$ сводится к усреднению $\varphi(r(t))$ за период:

$$Q = \left\langle\frac{1}{T}\int_0^T\varphi(r(t))dt\right\rangle_n = \int_0^{\pi/2}\sin\psi\ \frac{\int[\varphi(r')/p_r(\psi)]dr'}{\int[1/p_r(\psi)]dr'}\,d\psi, \qquad (8)$$

где $p_r(\psi) = \left[p^2(r') - (r/r')^2p^2(r)\sin^2\psi\right]^{1/2}$ – радиальная часть импульса, интегрирование по r' в (8) производится по классически доступной области.

Если же движение инфинитно, то $\langle\langle\varphi(\bar{x}(t))\rangle_t\rangle_n = 0$. Последнее легко понять, поскольку при инфинитном движении частица пребывает конечное время в области сколь угодно мало отличного от нуля потенциала φ, а время, в течение которого производится усреднение, неограничено велико. Можно показать, что в области применимости уравнения (6) к однородному металлу $Q \equiv 0$, и экранирование кулоновского взаимодействия в рамках квазиклассики полностью описывается ПТФ.

3. Рассмотрим экранировку заряда z, помещенного в центр сферической гранулы радиуса R. Предполагаем, что электроны зеркального отражаются от поверхности гранулы; $p_F(x) = \text{const}$ внутри гранулы. Граничные условия имеют вид

$$r\varphi(r)\big|_{r=0} = Z;$$
$$\varphi(R) = 0 \quad \text{(для нейтральной гранулы).} \tag{9}$$

Переходя в (6) к величинам $\varphi(r) = \chi/r$, $r/R = t$, $r'/R = \tau$, $\varkappa R = \alpha$, получим следующее уравнение для χ:

$$\chi''(t) - \alpha^2\chi(t) + (\alpha^2/t)\int_0^1 d\tau\,\chi(\tau)K(t,\tau) = 0 \tag{I0}$$

с граничными условиями $\chi(0) = Z$, $\chi(1) = 0$, где

$$K(t,\tau) = \begin{cases} (a^2 + b_1^2)^{-1/2}F(\varphi_1, l_1), & \tau < t; \\ (1/a)F(\varphi_2, l_2), & \tau > t, \end{cases}$$

$a = (1/t^2 - 1)^{1/2}$, $b_1 = (\tau^2/t^2 - 1)^{1/2}$, $b_2 = (1 - \tau^2/t^2)^{1/2}$,

$\varphi_1 = \arccos b_1$, $\varphi_2 = \operatorname{arctg}(1/b_2)$, $l_1 = a/(a^2 + b_1^2)^{1/2}$,

$l_2 = (a^2 + b_2^2)^{1/2}/a$, F – эллиптический интеграл I рода.

Решение уравнения (I0) имеет предельный вид:

$$\varphi(r) = Z/r - Z/R + (Z\varkappa^2 r/2)\left[1 - (r/R)(\ln R/r + 1)\right], \quad \varkappa R \ll 1,^{*)} \tag{II}$$

$$\varphi(r) = (Z/r)\exp(-\varkappa r) + (Z/\varkappa^2 R r^2), \quad \varkappa R \gg 1. \tag{I2}$$

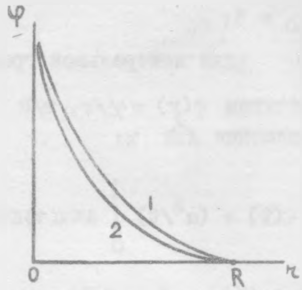
Формула (I2) справедлива при $e^{-\varkappa r}\varkappa^2 Rr \gg 1$.

Зависимость $\varphi(r)$ представлена на рис. I (кривая I). Для сравнения приведено также решение в линейном ПТФ (кривая 2)

$$\varphi(r) = (Z/r)(\operatorname{sh}\varkappa(R - r)/\operatorname{sh}\varkappa R). \tag{I3}$$

---

*) Этот случай можно реализовать для полупроводника.



Р и с. I.

Отсюда видно, что учет всех необходимых эффектов в рамках квазиклассики приводит к ослаблению экранировки по сравнению с экранировкой в ПТФ

Поступила в редакцию
II мая I978 г.

Л и т е р а т у р а

I. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпатаковская, УФН, II7. I (I975).