

PARTICULA CARGADA EN PRESENCIA DE UNA SUPERFICIE METALICA SEGUN EL MODELO DE REFLEXION ESPECULAR

J. Gervasoni, N. Arista, V. H. Ponce

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, CC. 439, 8400 San Carlos de Bariloche

Se estudia el potencial y la densidad de carga inducida por una partícula cargada cerca de la superficie de un metal.

Se utiliza el modelo de reflexión especular y distintas constantes dieléctricas que tienen en cuenta las diversas excitaciones del material.

Se calcula la longitud de apantallamiento de la carga y se compara con otros cálculos más sofisticados (teoría de la funcional densidad, Hartree-Fock,...)

INTRODUCCION: DESCRIPCION DEL MODELO

Usamos el modelo de reflexión especular¹, en el que el sólido es aproximado por un jellium, donde el efecto de los núcleos iónicos de la red es simulado por un fondo uniforme de carga positiva (que garantiza la neutralidad de carga).

El modelo de reflexión especular (barrera infinita para la superficie y jellium para el sólido), es equivalente a tratar dos pseudomedios infinitos extendidos, con las condiciones de contorno adecuadas.

Si la partícula está dentro del material, tenemos:

a) un gas de electrones infinito, que contiene a la partícula, su imagen y una densidad de carga superficial a determinar por las condiciones de contorno.

b) un vacío infinito de que contiene una densidad de carga superficial de signo contrario a la del sólido, debido a la continuidad del vector desplazamiento eléctrico $D(r,t)$. (Ver figura 1).

Si la partícula es externa al material, tenemos un caso análogo al anterior, sólo que ahora es el vacío el que contiene a la carga y su imagen.

Obtenemos los potenciales (ϕ) y densidades de carga (h) para cada pseudomedio a partir de la ecuación de Poisson.

RESULTADOS

Usando la constante dieléctrica del modelo de Thomas-Fermi, $\epsilon(q) = 1 + (q_0/q)^2$, con q_0 definido de la siguiente manera: $q_0^2 = 4\pi e^2 \partial n_0 / \partial \mu$, donde n_0 : densidad homogénea de carga electrónica del medio y m : potencial químico, tenemos:

a) para la carga estática interior al material:

i) en el material:

$$\phi_M(r) = Q \int dk \frac{k J_0(k\rho)}{\lambda} \left[e^{-\lambda|z-z_0|} + e^{-\lambda|z-z_0|-2\lambda} e^{-\lambda|z-z_0|} (k+\lambda) \right] \quad (1)$$

$$n_m(r) = \frac{-q_0^2}{4\pi} \phi^m(r) \quad (2)$$

ii) en el vacío:

$$\phi^v(r) = 2Q \int dk k J_0(k\rho) e^{-kz} e^{-\lambda z} (k+\lambda) \quad (3)$$

$$\eta^v(r) = Q / \pi \delta(z) \int dk k^2 J_0(k\rho) e^{-\lambda z} / (k+\lambda) \quad (4)$$

donde la única fuente es la carga superficial.

b) para la carga estática exterior al material:

iii) en el material:

$$\phi^m(r) = 2Q \int dk k J_0(k\rho) e^{-kz_0} e^{-\lambda z} (k+\lambda) \quad (5)$$

$$\eta^m(r) = Q q_0^2 / (2\pi) \int dk k J_0(k\rho) e^{-kz_0} e^{-\lambda z} / (k+\lambda) \quad (6)$$

iv) en el vacío:

$$\phi^v(r) = Q \int dk J_0(k\rho) \left[e^{-kz-z_0} + e^{-kz+z_0} - 2\lambda e^{-kz+z_0} (k+\lambda) \right] \quad (7)$$

$$\eta^v(r) = -(Q/\pi) \delta(z) \int dk k J_0(k\rho) \lambda e^{-kz_0} / (k+\lambda) \quad (8)$$

donde: Q : carga de la partícula; J_0 : función de Bessel de primera especie; z_0 : distancia de la partícula a la superficie r ; z : vector paralelo y distancia normal, respectivamente, a la superficie; k : vector de onda paralelo a la misma y $l = +k^2 + q_0^2$. Obviamente, las soluciones válidas son aquellas don-

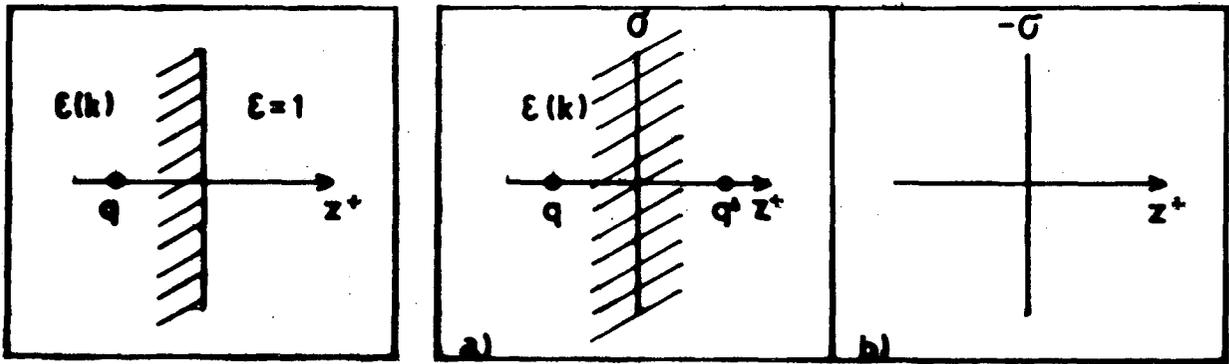


Figura 1: a) gas de electrones infinito -b) vacío extendido

de está el sistema físico real. Los potenciales cumplen la condición de ser continuos en z y la integral en volumen de la densidad de carga resulta ser $-Q$.

Para la carga externa, el potencial (7) tiene las siguientes contribuciones: el primer término entre corchetes es el potencial debido a la carga, y da Q/R ; el segundo es el potencial imagen y da Q/R' ; y el tercero es la corrección al potencial imagen para distancias finitas. Se observa que para grandes distancias la corrección se anula, obteniendo para el potencial total la contribución $Q/R - Q/R'$; con $R = \sqrt{r^2 + (z - z_0)^2}$ y $R' = \sqrt{r^2 + (z + z_0)^2}$. El potencial¹ en el medio posee la misma forma, salvo un factor λ^{-1} .

La longitud de apantallamiento es proporcional a λ^{-1} . Se observa la necesidad de poner un corte en k , ya que de lo contrario, el potencial se apantalla sobre la carga. Cuando $k=0$, la longitud de apantallamiento es igual a q_0^{-1} . Vemos, entonces, que la superficie modifica la longitud de apantallamiento de la carga en el medio.

CONCLUSIONES

De los gráficos 1) y 2), tomados para distintas distancias de la carga a la superficie del aluminio, se observa que cuanto más cerca esté la partícula de la superficie, más importante es el término de carga inducida total debido a la presencia de la partícula. Este resultado está de acuerdo con los resultados ya aceptados^{2, 4} de que la superficie es una perturbación al sistema de una carga en el medio.

Si ponemos la constante dieléctrica de Lindhard (con $w \rightarrow 0$), se observa que básicamente es una extensión del método de Thomas-Fermi, pues se adopta un punto de vista local y se busca una descripción en términos de la densidad electrónica local.

En ambos gráficos, las distancias se miden en

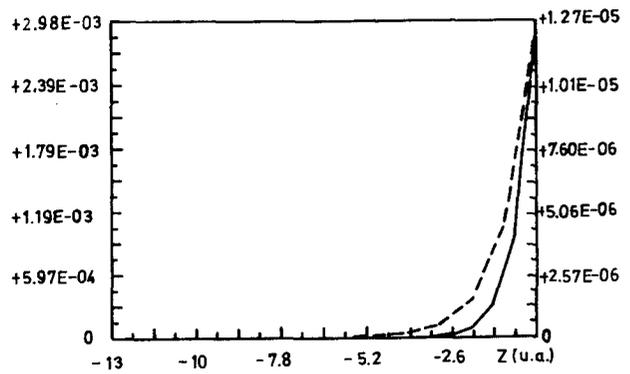


Gráfico 1: Valores de la densidad de carga inducida superficial — $z_0 = 0.001$ u.a.; — $z_0 = 5$ u.a.

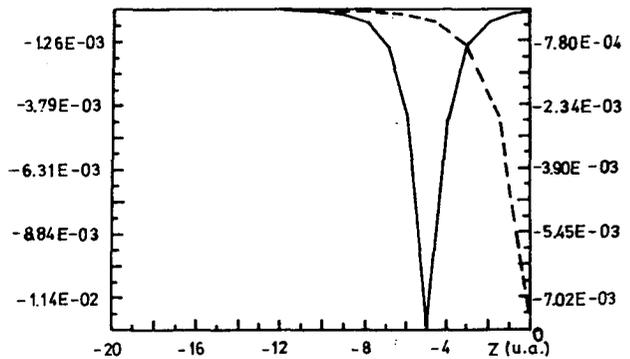


Gráfico 2: Valores de la densidad de carga inducida total, para los mismos valores de z_0 que en el gráfico 1.

unidades atómicas (u.a.) y la escala de la izquierda corresponde a la curva punteada.

Comparación con la teoría de la funcional densidad: debe tenerse en cuenta que el método de Thomas-Fermi es un caso particular de la formulación de la teoría de la funcional densidad de Hohenberg-Kohn, en que la funcional $G[n(r)]$ se evalúa en una aproximación local que incluye sólo la energía cinética. Esta aproximación supone que la densidad es

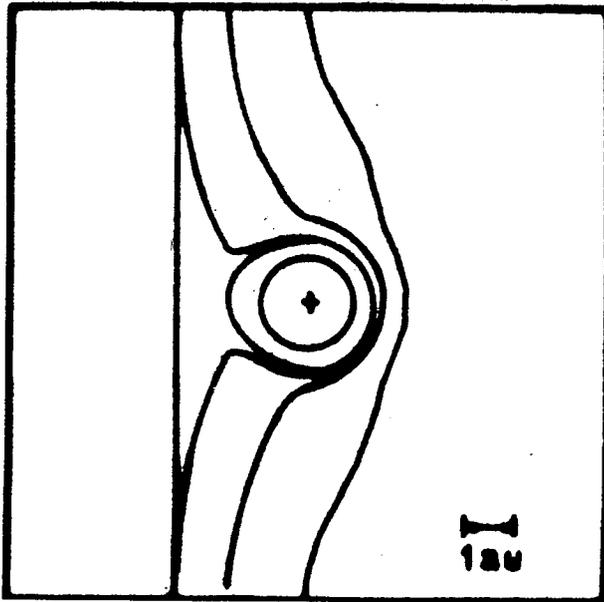


Gráfico 3: Contorno de densidad electrónica, según este modelo, para $z_0 = 2$ u.a., para Cobre ($Z=1$), en un sustrato de Aluminio.

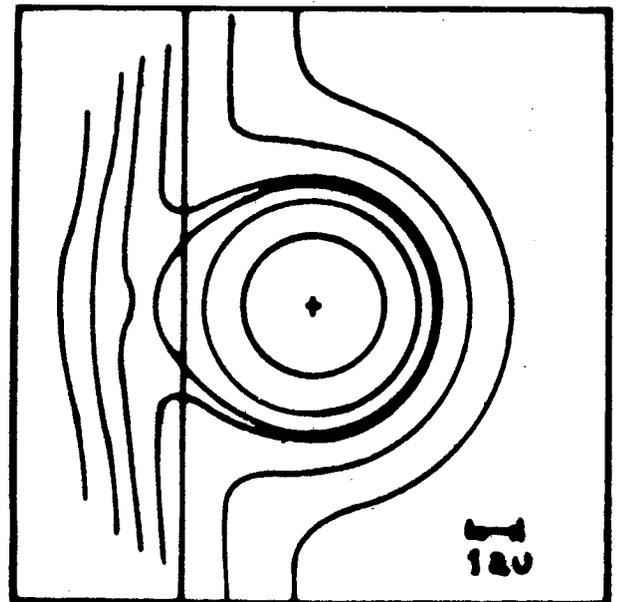


Gráfico 4: Contorno de densidad electrónica, según el modelo de Hohenberg-Kohn, para $z_0 = 2$ u.a., para Cloro, en un sustrato de alta densidad ($r_s = 2$).

fuertemente uniforme, lo cual es obviamente una pobre suposición para la zona de las capas superficiales de los materiales en general, aunque no es tan mala para densidades muy altas. Si comparamos la distribución de la carga inducida debida a una partícula externa, obtenida con ambos métodos, (gráficos 3) y 4)), se observa que no difieren mucho, sobre todo si se tiene en cuenta que la densidad obtenida por Hohenberg-Kohn, está tomada con respecto al plano centro de carga del sistema, exterior a la superficie del material. Para que la comparación fuese más directa, nosotros deberíamos tomar otro modelo de la superficie, y no el modelo semiclásico de barrera infinita. Como conclusión final, encontramos para el caso de una carga estática cerca de una superficie metálica, que el modelo de reflexión especular y la constante dieléctrica de Thomas-Fermi, reproducen en forma cualitativa las características salientes de los potenciales y

las densidades de carga inducida obtenidos con métodos y modelos más sofisticados.

REFERENCIAS

1. F. García-Molinder y F. Flores, Introduction to the theory of solid surfaces (Cambridge Univ. Press, 1979).
2. F. Sols, P. Miranzo y F. Flores, Surface Sci. 161 (1985).
3. P. Echenique y J. Pendry, J. Phys. C, 8, 2936 (1975).
4. T. Ferrel y R. Ritchie, Phys. Rev. A, 21, 1305 (1980)
5. B. Persson y N. Lang, Phys Rev. B, 26, 5409 (1982)
6. Lunsqvist y March, Theory of the inhomogeneous electro gas (Plenum Press, New York, 1983)