

Два масштаба квантовых эффектов в мезоскопической системе вырожденных электронов

С.Е. Куратов, Д.С. Шидловский, С.И. Блинников, С.Ю. Игашов

Продemonстрировано новое нетривиальное проявление квантовых эффектов в сферической мезоскопической системе вырожденных электронов (число электронов $N_e \lesssim 10^9$). В результате проведённого анализа показано, что функция распределения электронов обладает крупным пространственным масштабом порядка размера системы, который значительно больше другого пространственного масштаба — фермиевской длины электрона. Данный результат получен с помощью четырёх различных методических подходов: аналитического метода квазиклассических функций Грина, прямого численного суммирования точных решений для электронных волновых функций в бесконечной потенциальной яме, численного метода построения точной функции Грина с помощью двух линейно-независимых решений и методом функционала плотности. Результаты, полученные с помощью перечисленных методов, находятся в хорошем качественном и количественном согласии между собой. Природу явления авторы связывают с квантовыми оболочечными эффектами в сферической мезоскопической системе.

Ключевые слова: распределение электронов в сферическом потенциале, функции Грина, метод функционала плотности, модель желе

PACS numbers: 31.15.E-, 71.10.Ca, 71.15.Mb, **73.20.-r**

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.08.038817>

Содержание

1. Введение (882).
 2. Численные методы (883).
 - 2.1. Прямое суммирование волновых функций. 2.2. Численный метод нахождения концентрации с помощью точной функции Грина.
 3. Аналитический метод. Метод квазиклассических функций Грина (887).
 - 3.1. Общие соотношения. 3.2. Примеры расчётов диаграмм. 3.3. Крупномасштабная неоднородность пространственного распределения электронов.
 4. Неоднородное распределение электронов в сжатом газовом пузыре: расчёты методом функционала электронной плотности (892).
 - 4.1. Вычислительный метод. 4.2. Модель стабилизированного желе. 4.3. Результаты расчётов для однородного желе.
 5. Заключение (896).
 6. Приложение (897).
- Список литературы (898).

С.Е. Куратов^(1,*), Д.С. Шидловский^(1,2),
С.И. Блинников^(1,2), С.Ю. Игашов⁽¹⁾

⁽¹⁾ Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова,
Сушёвская ул. 22, 127055 Москва, Российская Федерация

⁽²⁾ Национальный исследовательский центр
"Курчатовский институт",
Институт теоретической и экспериментальной физики
им. А.И. Алиханова,
Большая Черёмушкинская 25, 117218 Москва,
Российская Федерация

E-mail: ^(*) ser.evg.kurатов@gmail.com

Статья поступила 8 июля 2020 г.

1. Введение

Статья посвящена нетривиальному проявлению квантовых эффектов в сферической мезоскопической системе вырожденных электронов. Речь идёт о появлении крупного масштаба в пространственном распределении электронов.

Неоднородность пространственного распределения электронов в атомах хорошо известна и изучена. В сферически-симметричном потенциале плотность электронного распределения демонстрирует осциллирующее поведение вдоль радиуса сферы. Пространственный масштаб неоднородности имеет порядок размера атома. Это является общей чертой распределения электронной плотности и проявляется в результатах расчётов, проведённых в рамках различных подходов: методов Хартри–Фока и Хартри–Фока–Дирака, приближения Томаса–Ферми [1–4] и теории функционала плотности (DFT) [5].

Осциллирующее поведение плотности характерно не только для системы электронов, но и для систем других частиц с более сложным взаимодействием, например, в ядерных задачах. Во всех таких системах число частиц сравнительно невелико ($N < 10^2$) и масштаб неоднородности порядка нескольких фермиевских длин.

В настоящей работе показано, что пространственное распределение мезоскопического числа ($N_e \lesssim 10^9$) вырожденных электронов также демонстрирует осциллирующее поведение, но с пространственным масштабом порядка размера системы. Этот масштаб может быть существенно больше фермиевской длины электронов λ_F .

Природу обсуждаемого явления авторы связывают с квантовыми оболочечными эффектами в сферической мезоскопической системе, которые аналогичны тако-

вым в металлических кластерах. Примером может служить осциллирующий характер поведения удельной энергии в зависимости от числа частиц.

В настоящей методической заметке мы анализируем данное явление с помощью четырёх различных подходов.

В разделе 2 изложены два метода, позволяющих численно рассчитать концентрацию большого (вплоть до $N_e \sim 10^9$) числа вырожденных электронов, находящихся в сферической яме с бесконечными стенками.

В разделе 2.1 представлена эффективная вычислительная техника, которая позволяет находить электронную плотность численным суммированием точных решений — волновых функций свободных электронов в потенциальной яме. В рамках такого подхода были проведены исследования для различных систем с числом электронов, приближающимся к $\sim 10^9$. Необходимость достижения такого большого числа электронов N_e в системе связана с обнаружением неожиданного отсутствия простого выхода на однородное распределение, что обычно всегда молчаливо предполагалось в пределе больших N_e . Полученные результаты демонстрируют эффект существования крупного масштаба неоднородности в распределении электронов.

В разделе 2.2 представлен численный метод построения точной функции Грина анализируемой задачи с помощью двух линейно-независимых решений. Используя вычисленную функцию Грина, мы рассчитываем концентрацию электронов в системе. Результаты совпадают с результатами, полученными при численном суммировании точных решений для волновых функций свободных электронов в разделе 2.1.

Аналитическое рассмотрение распределения свободных электронов в сферической потенциальной яме методом квазиклассических функций Грина, проведённое в разделе 3, позволяет понять, что является причиной появления неоднородности в системе. Анализ показывает, что пространственный масштаб неоднородности одного порядка с радиусом ямы и может на несколько порядков превышать расстояние между частицами.

В разделе 4 приведён численный анализ неоднородного пространственного распределения электронов в сильно сжатом газовом пузыре дейтерия субмикрометрового размера. Характерные значения термодинамических величин сжатого газа следующие: $\rho_{\text{gas}} \sim 10\text{--}30 \text{ г см}^{-3}$, $n_e \sim 10^{30\text{--}31} \text{ м}^{-3}$, $E_F \sim 20\text{--}100 \text{ эВ}$, $T_i \sim T_e \sim 0,1\text{--}1 \text{ эВ}$ (T_i , T_e — температура ионов и электронов соответственно, E_F — энергия Ферми, ρ_{gas} — плотность газа). Все электроны свободны (плазма полностью ионизована) и вырождены, а ионы образуют классический неидеальный газ. Численные расчёты распределения электронов были проведены с помощью метода DFT. Мы использовали модель желе для водородных и натриевых кластеров (в этой модели число атомов менялось от 8 до 400 тыс.). Полученные результаты подтверждают существование аналогичного эффекта и в сжатых водородных газовых пузырях.

2. Численные методы

2.1. Прямое суммирование волновых функций

2.1.1. Точные волновые функции. В качестве достаточно простой модели для плазменного пузыря с числом

электронов до $N_e = 10^9$ рассмотрим систему N_e электронов в основном состоянии в сферически-симметричной потенциальной яме радиуса R_0 с непроницаемыми (т.е. бесконечно высокими) стенками:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_0, \\ \infty, & r > R_0, \end{cases} \quad (1)$$

где $V(r)$ — электростатический потенциал, r — координата. Эта задача имеет точное аналитическое решение, она, по-видимому, была впервые исследована Гамовым [6] и давно вошла в учебники (см., например, книги Флюгге [7] и Мессиа [8]) уже без ссылок на первоисточник. Кратко изложим основные детали решения. Уравнение Шрёдингера вследствие сферической симметрии допускает разделение переменных, и его решения можно записать в виде

$$u(r, \theta, \varphi) = \frac{\chi(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2)$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция [9]. Радиальная волновая функция $\chi(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \chi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad r \leq R_0. \quad (3)$$

Граничное условие

$$\chi(0) = 0 \quad (4)$$

вытекает из ограниченности решения (2). Второе граничное условие

$$\chi(R_0) = 0 \quad (5)$$

связано с непроницаемостью стенок ямы. В качестве пары линейно-независимых решений уравнения (3) могут быть выбраны функции Риккати–Бесселя $z_1 j_l(z_1)$ и $z_1 y_l(z_1)$ (см. [10]), где $z_1 = kr$, а j_l и y_l — сферические функции Бесселя (см. приложение, формулы (П.7), (П.8)). Первое граничное условие (4) удовлетворяется автоматически выбором первого решения в виде

$$\chi(r) = (kr) j_l(kr). \quad (6)$$

Второе граничное условие (5) означает

$$j_l(kR_0) = 0, \quad (7)$$

что приводит к набору допустимых значений k

$$k_{n_r, l} = \frac{z_{n_r, l}}{R_0}, \quad (8)$$

где $z_{n_r, l}$ — корень сферической функции $j_l(z)$ с номером n_r в последовательной нумерации. Далее соответствующие решения и величины, к ним относящиеся, аналогично будут снабжаться индексами, например, энергетический спектр

$$E_{n_r, l} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{z_{n_r, l}}{R_0} \right)^2. \quad (9)$$

Для построения функции Грина с использованием спектрального разложения потребуются нормированные

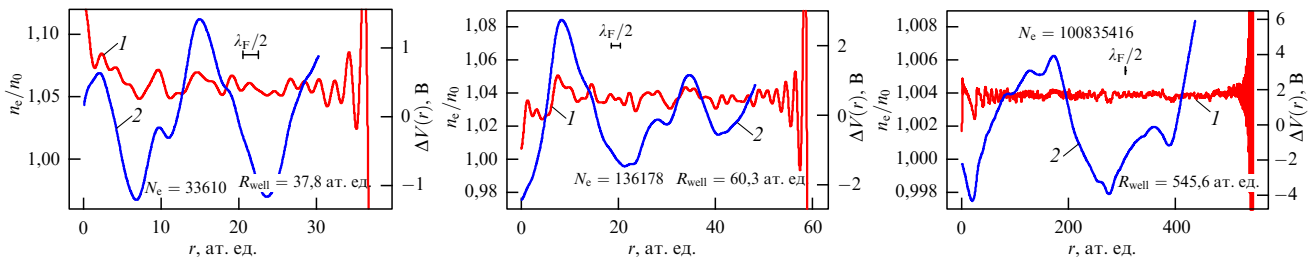


Рис. 1. (В цвете онлайн.) Осцилляции электронной плотности (красная линия 1) и электростатического потенциала (синяя линия 2) для трёх различных чисел электронов. Дополнительно указан масштаб половины фермиевской длины волны, который соответствует периоду быстрых осцилляций.

собственные функции

$$\chi_{n_r, l}(r) = C_{n_r, l} r j_l(k_{n_r, l} r), \quad (10)$$

$$u_{n_r, lm}(r, \theta, \varphi) = C_{n_r, l} j_l(k_{n_r, l} r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (11)$$

Нормировочную константу $C_{n_r, l}$ легко получить аналитически, воспользовавшись известным результатом (см., например, [11]) для неопределённого интеграла:

$$\begin{aligned} \int x J_v^2(ax) dx &= \\ &= \frac{x^2}{2} [J_v^2(ax) - J_{v-1}(ax) J_{v+1}(ax)] + \text{const}. \end{aligned} \quad (12)$$

С учётом того, что $z_{n_r, l}$ — корень сферической функции Бесселя (П.7), найдём (ср. приложение (П.28)):

$$C_{n_r, l}^{-2} = -\frac{R_0^3}{2} j_{l-1}(z_{n_r, l}) j_{l+1}(z_{n_r, l}), \quad l \geq 1. \quad (13)$$

В случае $l = 0$ нормировочный интеграл выглядит особенно просто, поскольку $j_0(x) = \sin(x)/x$.

2.1.2. Выражение для плотности. Плотность найдём суммированием квадратов модулей нормированных волновых функций занятых одночастичных состояний (11). Будем полагать, что все оболочки (индексируемые парой квантовых чисел n_r, l) являются заполненными. Это позволит провести аналитически суммирование по проекции орбитального момента, используя теорему Унзольда [9]:

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (14)$$

Сумма вкладов в плотность состояний

$$\rho_s(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{n_r, l} (2l+1) |\chi_{n_r, l}|^2. \quad (15)$$

При учёте спиновых состояний электрона результат следует ещё умножить на 2. Таким образом, получаем следующее выражение для плотности электронов n_e :

$$\begin{aligned} n_e(r) &= \frac{2}{4\pi R_0^3} \sum_{n_r, l: E_{n_r, l} \leq E_F} 2(2l+1) j_l^2\left(\frac{z_{n_r, l} r}{R_0}\right) \times \\ &\times [-j_{l-1}(z_{n_r, l}) j_{l+1}(z_{n_r, l})]^{-1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда, в частности, следует свойство автомодельности: при изменении радиуса полости R_0 плотность меняется автомодельно как $f(x)/R_0^3$, где $x = r/R_0$.

2.1.3. Крупный масштаб пространственного распределения электронов. Результаты прямого суммирования по состояниям. Результаты расчётов концентрации электронов при различных значениях их общего количества, выполненные с помощью выражения (16), представлены на рис. 1 (красная линия 1). Графические зависимости обнаруживают осциллирующее поведение с пространственным масштабом порядка фермиевской длины. Для наглядной демонстрации существования второго пространственного масштаба рассчитаем возникающий в системе электростатический потенциал:

$$V(r) = 4\pi \left[\frac{1}{r} \int_0^r \rho_c(\bar{r}) \bar{r}^2 d\bar{r} + \int_r^{R_0} \rho_c(\bar{r}) \bar{r} d\bar{r} \right]. \quad (17)$$

Здесь плотность заряда $\rho_c = |e|(n_i - n_e)$, элементарный заряд e , плотность электронов $n_e(r)$ бралась из вычисления по формуле (16), а для ионов применялось простейшее приближение — однородная плотность

$$n_i(r) = \text{const}. \quad (18)$$

При вычислении интегралов в (17) происходит сглаживание мелкомасштабных осцилляций и явное проявление крупного масштаба. Таким образом, процедура вычисления электростатического потенциала играет роль фильтра по отношению к мелкомасштабным осцилляциям.

Надо отметить следующее обстоятельство. В анализируемой модельной задаче не учитывается электростатическое взаимодействие между электронами и ионами, а электроны из-за граничного условия "выдавлены" из области вблизи стенки сферической ямы к центру. Это приводит к существенному превышению средней концентрации электронов над средней концентрацией ионов и соответственно к появлению в основной области избыточного отрицательного заряда. Для того чтобы исключить возникающий в данном случае потенциал параболического профиля, мы повышаем среднюю плотность ионов до средней плотности электронов. Именно такое значение и используется в (18). Технически это означает, что константа в (18) выбиралась из условия минимизации разности потенциалов внутри сферы с радиусом R_0 .

Результаты расчётов электростатического потенциала показаны на рис. 1 (а также далее на рис. 10). Эти результаты демонстрируют существование неоднородности в системе и появление пространственного масштаба порядка размера системы, что намного больше длины Ферми. Поведение потенциала имеет один и тот же характер (несколько точек экстремума) независимо от числа электронов и величины фермиевской длины $\sim h/p_F$.

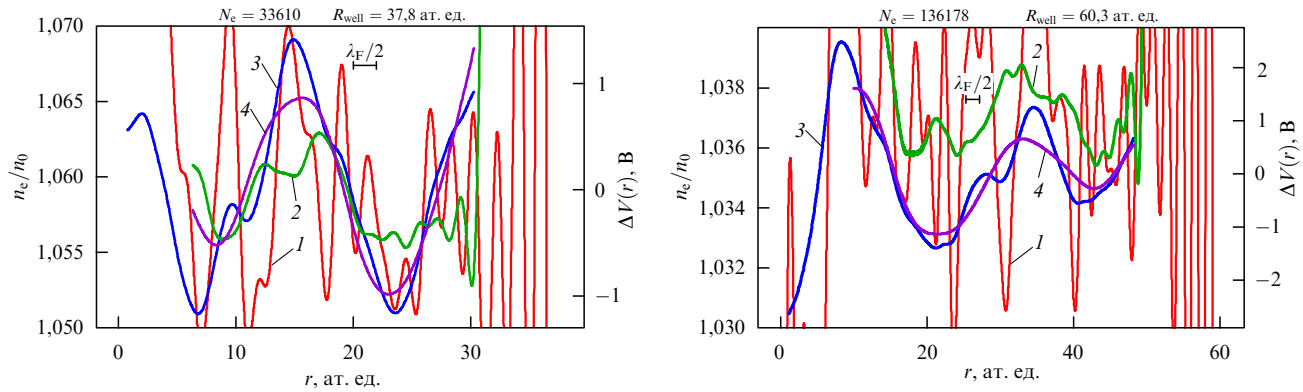


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Исходные осцилляции электронной плотности для двух первых вариантов с рис. 1 (тонкая красная линия 1), но в увеличенном масштабе, и сильно сглаженные осцилляции плотности (жирная зелёная линия 2). Исходный электростатический потенциал показан без изменения масштаба синей линией 3, а сглаженный электростатический потенциал — фиолетовой линией 4.

В результате применения процедур усреднения и сглаживания было рассчитано усреднённое по масштабу больше фермиевской длины пространственное распределение электронов, приведённое на рис. 2. Эти результаты также демонстрируют существование неоднородности в системе и появление пространственного масштаба порядка размера системы, что намного больше длины Ферми. Характер зависимости плотности от радиуса имеет сходное поведение с потенциалом: обнаруживается несколько точек экстремума.

Принципиальным для эффекта является сферическая симметрия системы или близость к ней. Это можно продемонстрировать на примере простейшей задачи одномерного электронного газа в яме с бесконечно высокими стенками. Волновые функции электронов имеют вид

$$\Psi_k = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi k x}{L}, \quad E_k = \frac{\pi^2 \hbar^2 k^2}{2m_e L^2}. \quad (19)$$

Соответственно концентрация n_e определяется выражением

$$\begin{aligned} n_e &= \sum_1^{N_0} \Psi_k^2 = \sum_{k=1}^{N_0} \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi k x}{L} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{N_0} \left(1 - \cos \frac{2\pi k x}{L} \right) = \\ &= n_0 \left(1 + \frac{1}{N_0} - \frac{1}{N_0} \operatorname{cosec} \frac{\pi x}{L} \sin \frac{(N_0+1)\pi x}{L} \cos \frac{N_0 \pi x}{L} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Конечное выражение для концентрации $n_e \equiv N_0/L$ имеет два пространственных масштаба. Первый масштаб — это расстояние между частицами L/N_0 (множитель $\sin((N_0+1)\pi x/L) \cos(N_0\pi x/L)$), по существу это фермиевская длина $\sim \hbar/p_F$. Вторым масштабом порядка размера системы L (множитель $\operatorname{cosec}(\pi x/L)$).

Характер поведения концентрации электронов, определяемый крупным масштабом L , следующий. В небольшой области вблизи границы концентрация возрастает от нуля до величины $n_e = n_0(1 + 1/N_0)$ и в основной области остаётся постоянной. Вблизи этого среднего значения концентрация электронов осциллирует с пространственным масштабом порядка фермиевской длины электрона (множитель $\sin((N_0+1)\pi x/L) \cos(N_0\pi x/L)$).

Как показано выше, в сферически-симметричной системе характер поведения усреднённой по мелкому масштабу концентрации электронов качественно отличается от плоского случая. Вблизи границы наблюдается сходное поведение: возрастание от нулевого значения до некоторого среднего значения порядка $n_e = n_0$. Но величина среднего значения концентрации в основной области не постоянна, а носит осциллирующий характер с пространственным масштабом порядка размера системы (см. рис. 2).

2.2. Численный метод нахождения концентрации с помощью точной функции Грина

2.2.1. Построение функции Грина с помощью двух линейно-независимых решений. Функция Грина уравнения Шрёдингера определяется как решение неоднородного уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) - E \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (21)$$

удовлетворяющее граничным условиям рассматриваемой квантово-механической задачи. В случае сферически-симметричного потенциала $V(r)$ функцию Грина удобно представить в виде парциального разложения [12]:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{g_l(r, r', E)}{rr'} Y_{lm}^*(\mathbf{n}_r') Y_{lm}(\mathbf{n}_r). \quad (22)$$

Общий множитель в (22) выбран из соображения удобства. Подстановка этого разложения в (21) приводит к следующему уравнению:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - v(r) + k^2 \right] g_l(r, r', k) = \delta(r - r'), \quad (23)$$

$$v(r) = \frac{2mV(r)}{\hbar^2},$$

для парциальных функций Грина $g_l(r, r', k)$, которое имеет вид неоднородного радиального уравнения Шрёдингера. Связь k и E определена выше в (3). Знание всех функций $g_l(r, r', k)$ эквивалентно построению полной функции $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$. В большинстве случаев в квантово-механических задачах возникают ограничения по вовле-

чёмным в них орбитальным моментам, поэтому в сумме в разложении (22) оказывается действующим конечное число слагаемых.

В настоящей работе используется модельный потенциал бесконечно глубокой сферической потенциальной ямы (1). Требование ограниченности решения уравнения (21) приводит к нулевому граничному условию в нуле для решения радиального уравнения (23). Другое, тоже нулевое, граничное условие формулируется на стенке ямы.

Искомую функцию Грина $g_l(r, r', k)$ можно выразить через два (линейно-независимых) решения $\varphi_{1,2}(r)$ одно-родного уравнения (3), которые удовлетворяют граничным условиям (4) и (5) соответственно:

$$\varphi_1(0) = 0, \quad (24)$$

$$\varphi_2(R_0) = 0. \quad (25)$$

Решения $\varphi_1(r)$, $\varphi_2(r)$ выражаются через уже упоминавшиеся выше функции Риккати – Бесселя

$$\varphi_1(r) = kr j_l(kr), \quad (26)$$

$$\varphi_2(r) = \alpha kr j_l(kr) + \beta kr y_l(kr). \quad (27)$$

Решение $\varphi_1(r)$, очевидно, удовлетворяет условию (24), что касается второго $\varphi_2(r)$, то для того чтобы оно удовлетворяло условию (25), требуется выполнение соотношения

$$\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{y_l(kR_0)}{j_l(kR_0)}. \quad (28)$$

Следуя [12], представим $g_l(r, r', k)$ в виде

$$g_l(r, r', k) = \frac{\varphi_1(r_<) \varphi_2(r_>)}{W_r[\varphi_1; \varphi_2]}, \quad (29)$$

где $r_< = \min(r, r')$, $r_> = \max(r, r')$, а $W_r[\varphi_1; \varphi_2]$ — вронскиан решений $\varphi_{1,2}(r)$:

$$W_r[\varphi_1; \varphi_2] = \varphi_1(r) \frac{d\varphi_2(r)}{dr} - \varphi_2(r) \frac{d\varphi_1(r)}{dr} = k\beta. \quad (30)$$

Соотношения (26)–(30) позволяют найти явное выражение для $g_l(r, r', k)$:

$$g_l(r, r', k) = \frac{1}{k} \left[-\frac{y_l(kR_0)}{j_l(kR_0)} (kr) j_l(kr) (kr') j_l(kr') + (kr_<) j_l(kr_<) (kr_>) y_l(kr_>) \right]. \quad (31)$$

Далее выражение (31) будет использовано для численных расчётов.

2.2.2. Выражение для плотности через функцию Грина. В одночастичной задаче при плотном (без пропусков) заполнении фермионами всех состояний до E_F можно достаточно просто вычислить плотность пространственного распределения частиц, используя функцию Грина. Наиболее простая ситуация реализуется в случае задачи с чисто дискретным спектром. Как видно из спектрального разложения функции Грина,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = -\sum_j \frac{u_j^*(\mathbf{r}') u_j(\mathbf{r})}{E - E_j}, \quad (32)$$

интеграл от $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E)$ в комплексной плоскости энергии E по замкнутому контуру, охватывающему все полюсы,

отвечающие заполненным состояниям, равен

$$-2\pi i \sum_{j: E_j < E_F} |u_j(\mathbf{r})|^2. \quad (33)$$

Здесь мультииндекс j включает в себя весь набор квантовых чисел, нумерующих состояния (11). Таким образом, численные расчёты плотности могут базироваться на интегрировании по контуру. В методическом плане интересно отметить, что рассмотренное выше представление функции Грина (22), (29) также позволяет прийти к этому выводу. Собственные функции удовлетворяют сразу двум граничным условиям (24), (25), что означает совпадение решений $\varphi_1(r)$ и $\varphi_2(r)$ и соответственно зануление вронскиана в знаменателе в (29), отвечающее полюсу $g_l(r, r', k)$ в комплексной плоскости k . Исследуем более детально полюсную особенность функции Грина применительно к рассматриваемому в данной работе примеру, когда функция Грина $g_l(r, r', k)$ имеет достаточно простой вид (31). Имея в виду задачу вычисления пространственной плотности посредством интегрирования в комплексной плоскости по контуру, охватывающему некоторое количество полюсов, достаточно уделить внимание полюсному слагаемому

$$g_l^{(\text{pol})}(r, r', k) = -\frac{1}{k} \frac{y_l(kR_0)}{j_l(kR_0)} (kr) j_l(kr) (kr') j_l(kr'), \quad (34)$$

которое и будет давать вклад. Другое слагаемое не содержит особенностей в конечной области комплексной плоскости энергии и не даёт вклада при вычислении контурного интеграла. Полюсы в (34) связаны с корнями $z_{n,l}$ сферической функции Бесселя $j_l(z)$. В окрестности какого-либо корня $z_{n,l}$, ограничиваясь линейным слагаемым, запишем

$$j_l(z) \approx j'_l(z_{n,l})(z - z_{n,l}), \quad (35)$$

что позволяет записать приближённое выражение для (28) в виде

$$\frac{\alpha}{\beta} = -\frac{y_l(k_{n,l}R_0)}{j'_l(k_{n,l}R_0)(kR_0 - k_{n,l}R_0)}, \quad k_{n,l}R_0 \equiv z_{n,l}. \quad (36)$$

Для дальнейшего рассмотрения выражение (36) целесообразно преобразовать следующим образом. Прежде всего, избавимся от числителя $y_l(k_{n,l}R_0)$, выразив его через $j'_l(k_{n,l}R_0)$, используя известное значение вронскиана

$$W_z[j_l(z); y_l(z)] = j_l(z) y'_l(z) - j'_l(z) y_l(z) = \frac{1}{z^2} \quad (37)$$

и учитывая, что $z_{n,l}$ — корень функции $j_l(z)$. Возникший при этом в знаменателе в (36) квадрат производной $[j'_l(z_{n,l})]^2$ выразим через интеграл [11]:

$$2 \int_0^1 [x j_l(z_{n,l}x)]^2 dx = [j'_l(z_{n,l})]^2, \quad (38)$$

являющийся частным случаем более общего интеграла

$$\int_0^x \zeta J_v^2(\lambda \zeta) d\zeta = \frac{\lambda^2}{2} \left\{ [J'_v(\lambda x)]^2 + \left(1 - \frac{v^2}{(\lambda x)^2}\right) [J_v(\lambda x)]^2 \right\} \quad (39)$$

ломмелевского типа. В результате этих преобразований получаем представление для $g_l^{(\text{pol})}(r, r', k)$ вблизи полюса:

$$g_l^{(\text{pol})}(r, r', k) \sim \frac{(k_{n,l} r) j_l(k_{n,l} r) (k_{n,l} r') j_l(k_{n,l} r')}{\int_0^{R_0} [(k_{n,l} \tilde{r}) j_l(k_{n,l} \tilde{r})]^2 d\tilde{r}} \frac{1}{2k(k - k_{n,l})}. \quad (40)$$

В выражении (40) первый сомножитель представляет собой произведение нормированных собственных волновых функций задачи. Знаменатель второго $2k(k - k_{n,l}) \approx (k + k_{n,l})(k - k_{n,l}) = k^2 - k_{n,l}^2$ при k , лежащем в близкой окрестности $k_{n,l}$. Как и следовало ожидать, характеристики полюса (его положение и вычет в нём) совпадают с таковыми для соответствующего слагаемого в спектральном разложении.

Целью этого рассмотрения является не только методический аспект, позволивший наглядно проследить на конкретном примере взаимосвязь спектрального разложения функции Грина и её представления с использованием двух линейно-независимых решений, но и практический рецепт вычисления пространственной плотности. Обратим ещё раз внимание на то, что при вычислении контурного интеграла достаточно учесть только одно — полюсное слагаемое (34) в функции Грина. Обсудим кратко некоторые моменты, касающиеся вычислительной методики, реализованной в данной работе. От интегрирования в комплексной плоскости энергии можно перейти к интегрированию в комплексной плоскости переменной k , что оказывается более удобным при проведении численных расчётов.

На рисунке 3 представлен один из возможных вариантов выбора контура интегрирования. Этот контур, выбранный в виде прямоугольника ABCD, охватывает набор полюсов, лежащих левее k_F . При вычислении интеграла достаточно произвести вычисление только его мнимой части. Если выбрать отрезки AB и CD достаточно короткими, то вкладом в интеграл от них можно пренебречь. Для дальнейшего упрощения заметим, что значения функции Грина, отвечающие комплексно-сопряжённым значениям k , также являются комплексно-сопряжёнными. С учётом этого замечания становится ясно, что мнимые части интегралов по отрезкам BC и DA одинаковы. Таким образом, можно вообще ограничиться интегрированием мнимой части функции Грина по отрезку DA при условии его расположения достаточно близко к вещественной оси. Эти замечания значительно сокращают объём вычислений. Обсуждая вопросы вычислений интегралов от функции Грина (34), кратко упомянем методики нахождения численных значений функций Бесселя, входящих в (34), имея в виду наличие небольшой мнимой добавки в аргументе. Вычисления функции Бесселя $y_l(z)$ обычно не вызывают затруднений. Рекуррентные соотношения оказываются достаточно эффективными и демонстрируют хорошую устойчивость при расчёте в сторону увеличения l . Таким образом, стартуя со значений, найденных из явных выражений [10] при $l = 0$ и $l = 1$, можно вычислить все необходимые значения при больших l .

Что касается функции $j_l(z)$, то в этом случае вычисления следует проводить в обратном направлении. В качестве стартовых значений при этом могут выступать асимптотические значения $j_l(z)$ при очень больших l . Весьма удобным оказывается также применение цепных дробей. Можно произвести корректировку найденных величин, сопоставляя, например, вычисленные по такой

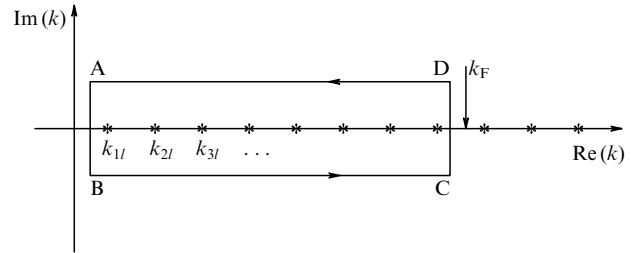


Рис. 3. Контур интегрирования.

методике значения $j_0(z)$ с вычисленными непосредственно из явного выражения. В целом, эти вычислительные методики позволяют достаточно эффективно организовать вычисление функций Грина в рассматриваемой задаче. Подробности алгоритмов вычислений бесселевых функций см. в [13, 14].

2.2.3. Результаты расчётов. Сравнение подходов. Представленное в разделе 2.2.2 рассмотрение позволяет сформулировать достаточно удобный рецепт для численных расчётов. Сумма квадратов нормированных радиальных волновых функций (10), отвечающих состояниям с энергией, не превосходящей E_F , может быть найдена следующим образом:

$$\begin{aligned} s_l(r) &\equiv \sum_{n_r: E_{n_r, l} \leq E_F} (\chi_{n_r, l}(r))^2 = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \oint_{C_F} g_l^{(\text{pol})}(r, r, k) 2k dk = \\ &= \frac{-1}{\pi R_0} \text{Im} \oint_{C_F} \frac{y_l(z)}{j_l(z)} [z \zeta j_l(z \zeta)]^2 dz = \\ &= \frac{2}{\pi R_0} \text{Im} \int_{0+i\delta}^{z_F+i\delta} \frac{y_l(z)}{j_l(z)} [z \zeta j_l(z \zeta)]^2 dz, \end{aligned} \quad (41)$$

где $z = kR_0$, $z_F = k_F R_0$, $\zeta = r/R_0$. Пространственная плотность состояний находится суммированием парциальных вкладов (см. (15)):

$$\rho_s(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_l (2l+1) s_l(r) = \sum_l (2l+1) \rho_l(r), \quad (42)$$

где

$$\rho_l(r) = \frac{1}{2\pi^2 R_0^3} \text{Im} \int_{0+i\delta}^{z_F+i\delta} \frac{y_l(z)}{j_l(z)} [z j_l(z \zeta)]^2 dz. \quad (43)$$

Применяя теорию вычетов к интегралу (43), легко проверить, что он приводит к выражению для плотности (16), полученному прямым суммированием волновых функций, ничего не зная о том, что этот интеграл был получен из функции Грина рассматриваемой системы.

С помощью изложенной методики были проведены расчёты плотности состояний электронов для двух систем, результаты которых представлены на рис. 4. На рисунке 4 также показаны аналогичные расчёты, выполненные прямым суммированием волновых функций (см. раздел 2.1). Результаты практически совпадают. Это свидетельствует о хорошей точности разработанных численных методик расчёта концентрации электронов.

3. Аналитический метод.

Метод квазиклассических функций Грина

С помощью метода функций Грина мы анализируем распределение свободных вырожденных электронов в

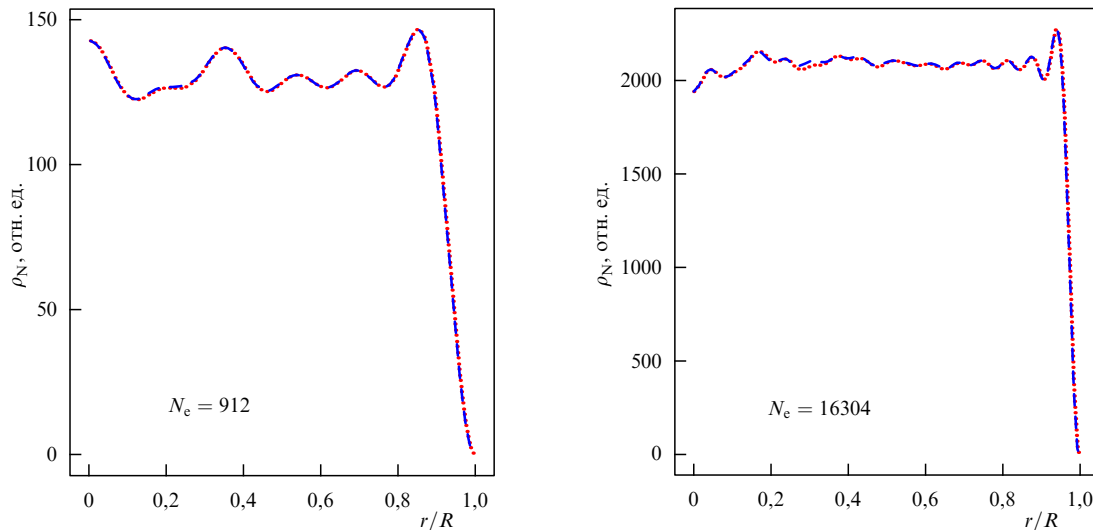


Рис. 4. (В цвете онлайн.) Распределения плотности состояний электронов, полученные двумя численными методами: красные — формулы из раздела 2.1.2, синие — из раздела 2.2.2.

сферической яме с бесконечно высокими стенками. Состояния электронов характеризуются значительными орбитальными моментами импульса и, таким образом, ведут себя квазиклассически. Это позволяет использовать квазиклассическое приближение при теоретическом анализе. Решение этой задачи даёт возможность понять, что является причиной появления неоднородности в системе, и получить аналитические зависимости распределения электронов от параметров системы. Квазиклассический подход широко применяется для анализа металлических кластеров [2], для расчёта энергетического спектра ядер [15], для расчётов осцилляций электронной концентрации в атоме [4].

3.1. Общие соотношения

Для того чтобы определить электронную концентрацию, мы применяем представление функции Грина $G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E)$ для электронов в квазиклассическом приближении [15–19], где \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' — начальная и конечная точки траектории соответственно, а E — энергия:

$$G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) = G_0 - \frac{1}{(2\pi\hbar^5)^{1/2}} \times \sum_{\alpha} \left\{ p_{\alpha} D^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{\alpha}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) - \frac{i\pi}{4} \right) \right\}_{\alpha}, \quad (44)$$

S_{α} — классический интеграл действия:

$$S_{\alpha} = \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}''} p_{\alpha} d\mathbf{l}_{\alpha}, \quad (45)$$

$$G_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'|} \exp \left(\frac{i}{\hbar} |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'| p(\mathbf{r}) \right), \quad (46)$$

$$\mathbf{r} = \frac{\mathbf{r}' + \mathbf{r}''}{2}, \quad \mathbf{p}' = \frac{dS_{\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', E)}{d\mathbf{r}'}, \quad \mathbf{p}'' = \frac{dS_{\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', E)}{d\mathbf{r}''}. \quad (47)$$

Для того чтобы вычислить $G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E)$, удобнее использовать цилиндрическую систему координат (ρ, z, φ) , где ось z направлена вдоль направления $(0, \mathbf{r})$, точка \mathbf{r} — центр. Компоненты импульса p_{ρ} , p_z и угол φ выражаются как $p_{\rho} = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$, $p_z, \varphi = \arctan(p_y/p_x)$:

$$D = \det \begin{bmatrix} \frac{dp'_{\rho}}{dp''} & \frac{dp'_{\rho}}{dz''} & \frac{dp'_{\rho}}{dE''} \\ \frac{dp'_z}{dp''} & \frac{dp'_z}{dz''} & \frac{dp'_z}{dE''} \\ \frac{dt_z}{dp''} & \frac{dt_z}{dz''} & 0 \end{bmatrix}, \quad (48)$$

$$t_z(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') = \frac{dS_z(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', E)}{dE} = \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}''} \frac{1}{|\dot{\mathbf{r}}|} d\mathbf{l}_z. \quad (49)$$

В (44) суммирование производится по всем реальным классическим траекториям α , которые соединяют точки с координатами \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' , t_z — время движения вдоль траектории α .

Электронная концентрация определяется из следующего выражения, которое включает в себя мнимую часть функции Грина:

$$n_e(r) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} \{ G(r, r, E) \} dE. \quad (50)$$

В нашем случае вычисление электронной плотности (50) сводится к учёту множества орбит, у которых начальные и конечные координаты совпадают.

Все замкнутые электронные орбиты, начинающиеся и заканчивающиеся в точке \mathbf{r} , состоят из двух типов: замкнутых периодических и замкнутых неперидических. Классификация всех таких замкнутых (периодических и неперидических) орбит, которую мы используем, основывается на хорошо известной классификации замкнутых периодических орбит (n, m) , где n — число точек поворота, m — число оборотов вокруг центра. Замкнутые неперидические орбиты формируются из периодических в результате единственного преобразования — сдвига одной из вершин в точку \mathbf{r} , т.е. посредством деформации периодической орбиты (n, m) . Поэтому мы называем такие орбиты $\text{def}(n, m)$. Замкнутые периодические орбиты — просто известные периодические орбиты (n, m) , но проходящие через точку \mathbf{r} . В зависимости от значения \mathbf{r} орбита может быть по-разному ориентирована в плоскости рисунка. С изменением значения \mathbf{r} пери-

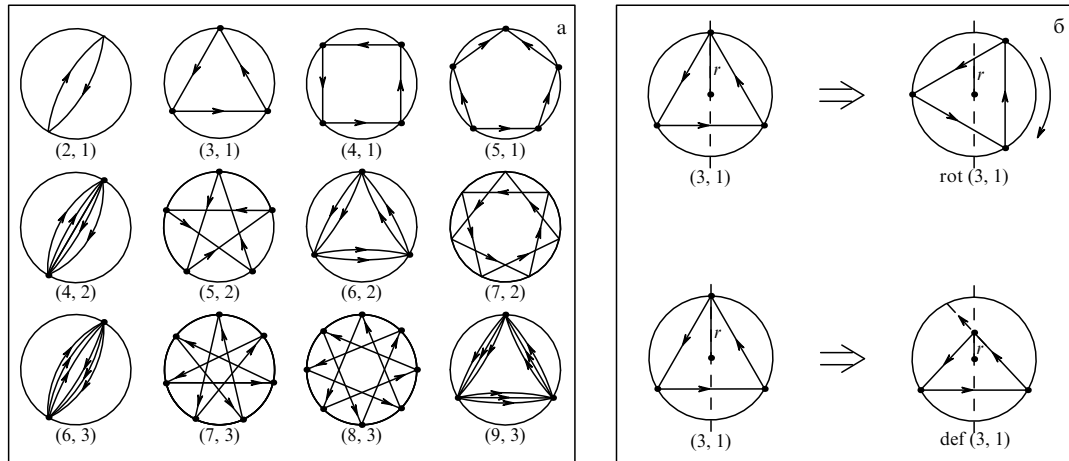


Рис. 5. (а) Периодические траектории электрона. (б) Пути формирования двух типов траекторий.

одическая орбита (n, m) будет вращаться в плоскости рисунка, поэтому мы обозначим такие орбиты $\text{rot}(n, m)$.

Примеры траекторий обоих типов представлены на рис. 5. Эти траектории, как отмечено выше, формируются из известных периодических орбит (рис. 5а) двумя путями: вращением или деформацией (рис. 5б).

В литературе чаще встречаются замкнутые периодические траектории, так как только они используются при вычислении энергетического спектра системы. Наше же исследование посвящено расчётам пространственного распределения электронов. Для этого в расчётах необходимо использовать оба типа траекторий, как это указано, например, в [18, с. 1797]: "...Спектр, следовательно, определяется только периодическими орбитами, несмотря на то что волновые функции состоят из **обоих типов** траекторий..."

Общее выражение для вклада каждой траектории в значение концентрации n (50) имеет вид

$$S_\alpha \sim p R_0 L_\alpha \left(\frac{\mathbf{r}'}{R_0}, \frac{\mathbf{r}''}{R_0} \right) = p R_0 L_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}''), \quad (51)$$

где L_α — безразмерная длина траектории α , R_0 — радиус ямы. Здесь и далее для краткости мы обозначим $\mathbf{x} = \mathbf{r}/R_0$. Определим безразмерную функцию F_α следующим образом:

$$p_\rho D_\alpha^{1/2} = \frac{m\sqrt{p}}{\sqrt{R_0}} F_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}''). \quad (52)$$

Второе слагаемое в правой части выражения (44) для функции Грина представим в виде

$$\Delta G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) = \frac{1}{h^{5/2} p} \left(\frac{m^2}{R_0 p} \right)^{1/2} \times \\ \times F_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \exp \left(\frac{i}{h} p R_0 L_\alpha(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \right). \quad (53)$$

Мнимая часть величины $\Delta G(\dots)$ определяет отличие концентрации $n(r)$ от n_0 :

$$n(r) - n_0 = \Delta n(r) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} \text{Im} \{ \Delta G(r, r, E) \} dE. \quad (54)$$

Поскольку плотность электронов выражается через функцию Грина при $\mathbf{r}' = \mathbf{r}''$ и в сферически-симметричном случае она зависит только от $r = |\mathbf{r}|$, в списке аргументов функции G в (50) и (54) используется r , в отличие от \mathbf{r} . Соответственно и в функциях F_α и L_α ниже задействовано обозначение $x = |\mathbf{r}|/R_0$, а не \mathbf{x} .

Для вычисления интеграла в (54) мы будем иметь в виду большое значение ($\sim 10^3$) абсолютной величины экспоненты в (53). В результате получаем следующее выражение:

$$\frac{\Delta n(r)}{n_0} = \sum_\alpha \frac{F_\alpha(x, x)}{L_\alpha(x, x)} \left(\frac{8}{N} \right)^{1/2} \sin \left[\frac{1}{h} p_F R_0 L_\alpha(x, x) \right]. \quad (55)$$

Вклад каждой траектории в (55) учитывается аддитивно. Из выражения (55) вытекает несколько следствий.

Зависимость относительного отклонения концентрации от числа частиц имеет вид

$$\left(\frac{\Delta n}{n_0} \right)_{\text{sphere}} \sim \sqrt{\frac{8}{N}}. \quad (56)$$

Выражение (55) содержит два пространственных масштаба. Первый из них — длина Ферми $\sim h/p_F$, второй масштаб — размер потенциальной ямы R_0 . Для двух типов траекторий $\text{rot}(n, m)$ и $\text{def}(n, m)$ пространственная зависимость в (55) имеет качественно разный характер.

Для траекторий $\text{rot}(n, m)$ пространственная зависимость каждого члена в (55) определяется только фактором F_α , так как L_α не зависит от x . Следовательно, полный вклад в (55) от этого типа траекторий формирует функцию, имеющую только масштаб пространственной неоднородности порядка R_0 . Для траекторий $\text{def}(n, m)$ каждый член суммы — это произведение быстро осциллирующей функции $\sin [p_F R_0 L_\alpha(x, x)/h]$ с пространственным масштабом неоднородности $\sim h/p_F$ и медленно меняющейся функции $F_\alpha(x, x)/L_\alpha(x, x)$ с пространственным масштабом $\sim R_0$. Следовательно, пространственная зависимость относительного отклонения концентрации состоит из быстро осциллирующей (масштаб — фермиевская длина) и медленно осциллирующей (масштаб — размер системы) части:

$$\left(\frac{\Delta n}{n_0} \right)_{\text{sphere}} = \left(\frac{\Delta n}{n_0} \right)_{\text{FOscil}} + \left(\frac{\Delta n}{n_0} \right)_{\text{SOscil}}. \quad (57)$$

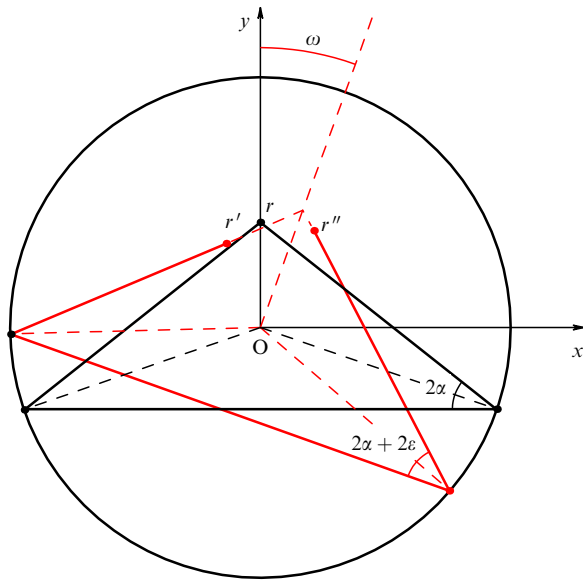


Рис. 6. Траектории электрона def(3, 1).

Первая часть определяется суммой (55) вдоль траекторий типа def(n, m), вторая часть определяется суммой (55) вдоль траекторий типа rot(n, m).

Каждый член суммы (55) пропорционален $1/L_\alpha$ и уменьшается с увеличением m , так как $L_\alpha \sim m$. Следовательно, сумма определяется членами с малыми m , т.е. траекториями def($n, 1$), rot($n, 1$).

3.2. Примеры расчётов диаграмм

Как показано в разделе 3.1, выражение для концентрации электронов определяется замкнутыми траекториями и имеет вид (55).

В настоящем разделе мы продемонстрируем основные свойства функций $F_\alpha(x, x)$ и $L_\alpha(x, x)$ на примере траекторий def(3, 1), def(4, 1) и rot(3, 1), rot(4, 1), для которых возможно получить конечные аналитические выражения. Эти результаты позволяют сделать общие выводы о структуре функций F_α и характере пространственного распределения электронов. Кроме того, указанные траектории дают основной вклад в суммы (76) и (75) соответственно (см. далее раздел 3.3), поскольку характеризуются малыми значениями m . Нахождение $F_\alpha(x, x)$ сводится к вычислению детерминанта при $\mathbf{r}' = \mathbf{r}''$. Близость \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' облегчает вычисления.

Приведём детальное изложение вычислений для траектории def(3, 1). На рисунке 6 изображена замкнутая неперiodическая траектория def(3, 1), а также близкая к ней незамкнутая траектория (выделена красным цветом), у которой начальное \mathbf{r}' и конечное \mathbf{r}'' положения близки, но различны. В декартовой системе координат (x, y) обозначим компоненты этих векторов ($\rho'z'$) и ($\rho''z''$).

Имеют место следующие соотношения:

$$\frac{\sin \alpha}{r} = \frac{\cos 2\alpha}{R_0}, \quad \frac{\sin(\alpha + \varepsilon)}{r + \Delta} = \frac{\cos(2\alpha + 2\varepsilon)}{R_0}. \quad (58)$$

В силу близости \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' значения параметров ε и Δ малы, поэтому

$$\varepsilon \left(\frac{\cos \alpha}{r} + \frac{2 \sin 2\alpha}{R_0} \right) = \frac{\Delta \sin \alpha}{r^2}, \quad (59)$$

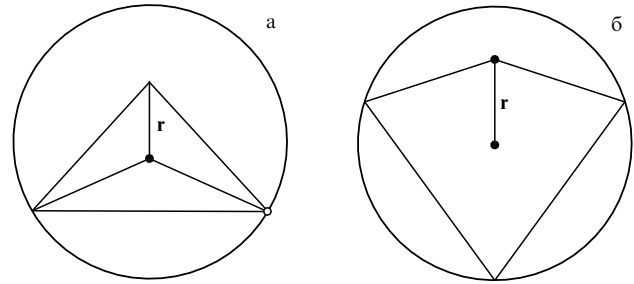


Рис. 7. Траектории электрона def(3, 1) (а) и def(4, 1) (б).

$$\Delta = \frac{1}{2r(R_0 \sin \alpha + r)} \left[\left(-\frac{r^2 \sec \alpha}{R_0} - r \tan \alpha \right) (-R_0 \rho' \sin \alpha - R_0 \rho'' \sin \alpha + R_0 z' \cos \alpha - R_0 z'' \cos \alpha - r \rho' - r \rho'') \right] - \frac{r \rho' \sec \alpha + R_0 \rho' \tan \alpha - R_0 z'}{R_0}, \quad (60)$$

$$\omega = \frac{1}{2r(R_0 \sin \alpha + r)} \left(-R_0 \rho' \sin \alpha - R_0 \rho'' \sin \alpha + R_0 z' \cos \alpha - R_0 z'' \cos \alpha - r \rho' - r \rho'' \right), \quad (61)$$

$$p_\rho = p(2\varepsilon \sin 2\alpha - 2\omega \sin 2\alpha - \cos 2\alpha), \quad (62)$$

$$p_z = p(-2\varepsilon \cos 2\alpha + 2\omega \cos 2\alpha - \sin 2\alpha). \quad (63)$$

Подставляя полученные выражения в (48), а также устремляя \mathbf{r}' и \mathbf{r}'' к \mathbf{r} , найдём:

$$F_{\text{def}(3,1)}(x, x) = \frac{-1 + \sqrt{8x^2 + 1}}{4x^2} \times \sqrt{\frac{8x^3(4x^2 + 5 + 3\sqrt{8x^2 + 1})}{\sqrt{8x^2 + 1}(4x^2 - 1 + \sqrt{8x^2 + 1})^{5/2} \sqrt{4x^2 + 1} \sqrt{8x^2 + 1}}} \quad \text{при } x \geq 0, \quad (64)$$

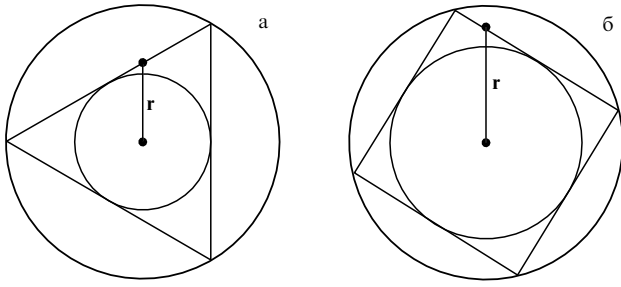
$$L_{\text{def}(3,1)}(x, x) = 4 \frac{\cos^3 \alpha}{\cos 2\alpha}, \quad \sin \alpha = \frac{-1/2 + \sqrt{1/4 + 2x^2}}{2x}, \quad 0 < x < 1. \quad (65)$$

Проводя аналогичные вычисления, можно получить замкнутые аналитические выражения для траекторий def(4, 1) (рис. 7):

$$F_{\text{def}(4,1)}(x, x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\sqrt{x/[(1-2x)^2(1+x)]}}{(3x-1)}} \sin \left[3 \arccos \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{1}{x}} \right] & \text{при } x \geq \frac{1}{3}, \\ 0 & \text{при } x < \frac{1}{3}, \end{cases} \quad (66)$$

$$L_{\text{def}(4,1)}(x, x) = 2 \sin 2\alpha \left(\frac{1}{\sin 3\alpha} + \frac{1}{\sin \alpha} \right), \quad (67)$$

$$x = \frac{\sin \alpha}{\sin 3\alpha}, \quad 0 < x < 1.$$

Рис. 8. Траектории электрона $\text{rot}(3, 1)$ (а) и $\text{rot}(4, 1)$ (б).

Для траекторий типа rot (рис. 8) мы имеем

$$F_{\text{rot}(3,1)}(x, x) = \begin{cases} -\frac{1}{2x} \sqrt{\frac{1}{\sqrt{3}(4x^2 - 1)}} & \text{при } x \geq \frac{1}{2}, \\ 0 & \text{при } x < \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (68)$$

$$L_{\text{rot}(3,1)}(x, x) = 3\sqrt{3}, \quad (69)$$

$$F_{\text{rot}(4,1)}(x, x) = \begin{cases} \frac{1}{4\sqrt{2}(2x^2 - 1)} & \text{при } x \geq \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ 0 & \text{при } x < \frac{\sqrt{2}}{2}, \end{cases} \quad (70)$$

$$L_{\text{rot}(4,1)}(x, x) = 4\sqrt{2}. \quad (71)$$

Отсюда видно, что неосциллирующая часть суммы (55) связана со слагаемыми, в которых L_α — константа. Соответственно осциллирующая часть — это часть (55), где L_α — переменная.

Из полученных выражений следует несколько важных свойств.

1. Функция F_α ненулевая для $r > s_\alpha$:

$$(a) \quad s_{\text{rot}(n,1)} = R_0 \sin \frac{(n-2)\pi}{2n};$$

$$(б) \quad s_{\text{def}(n,1)} \cong s_{\text{rot}(n-1,1)}.$$

2. Функция F_α имеет точки сингулярности d_α :

$$(a) \quad d_{\text{rot}(n,1)} = s_{\text{rot}(n,1)};$$

$$(б) \quad d_{\text{def}(n,1)} = s_{\text{rot}(n-1,1)}.$$

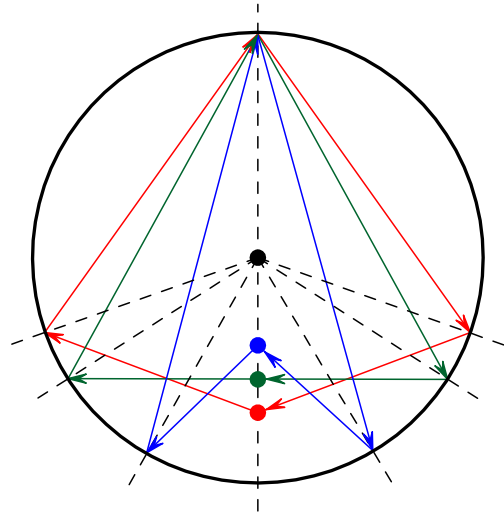
Таким образом, F_α может быть представлена в виде

$$F_\alpha(x, x) = \Theta(r - s_\alpha) G_\alpha\left(x, \frac{r}{s_\alpha}\right), \quad (72)$$

где Θ — ступенчатая функция Хевисайда, s_α — точка сингулярности функции F_α .

3.3. Крупномасштабная неоднородность пространственного распределения электронов

Из-за отклонения электронной концентрации от среднего значения в системе появляется электрическое поле. Обозначим радиальную компоненту этого поля как \mathcal{E} . Мы вычисляем \mathcal{E} для осциллирующей и неосциллирующей

Рис. 9. Траектории электрона $\text{def}(4, 1)$. Треугольная траектория имеет минимальную длину.

шей частей Δn с помощью выражения

$$\mathcal{E}(r) = \frac{4\pi e}{r^2} \int_0^r \Delta n(r) r^2 dr. \quad (73)$$

Сначала мы рассчитаем вклад быстро осциллирующей части в (55). Воспользуемся методом стационарной фазы. Возможны две ситуации. В первой из них функция L_α не имеет стационарных точек на интервале интегрирования, поэтому поле \mathcal{E} проявляет очевидное осциллирующее поведение. Следовательно, пространственное распределение электронов имеет тот же масштаб неоднородности. Этот масштаб — длина Ферми \hbar/p_F .

Во втором случае функция L_α имеет стационарные точки. Все траектории типа $\text{def}(n, m)$ обладают этим свойством. Пример такой траектории $\text{def}(4, 1)$ представлен на рис. 9. Для того чтобы вычислить поле \mathcal{E} , воспользуемся приближенным выражением метода стационарной фазы

$$\int_a^b f(x) \exp(i\lambda s(x)) dx \cong f(x_0) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda s''(x_0)}} \exp(i\lambda s(x_0)), \quad (74)$$

x_0 — точка экстремума, где $s'(x_0) = 0$.

Мы получили следующие выражения для компонент поля, связанных с $\Delta n_{F, \text{oscil}}$ и $\Delta n_{S, \text{oscil}}$:

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{E}_{F, \text{oscil}} &= \left(\frac{18}{\pi^2}\right)^{1/3} \frac{4\pi e N^{1/3}}{r^2} \sum_\alpha \frac{F_\alpha(d_\alpha/R_0, d_\alpha/R_0)}{L_\alpha(d_\alpha/R_0, d_\alpha/R_0)} \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{L_\alpha''(d_\alpha/R_0, d_\alpha/R_0)}} \frac{s_\alpha^2}{R_0^2} \times \\ &\times \sin \left[\frac{1}{\hbar} p_F R_0 L_\alpha \left(\frac{d_\alpha}{R_0}, \frac{d_\alpha}{R_0} \right) \right] \Theta(r - d_\alpha), \end{aligned} \quad (75)$$

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{E}_{S, \text{oscil}} &= 3\sqrt{8} \frac{e\sqrt{N}}{r^2} \sum_\alpha \frac{\int_{s_\alpha/R_0}^{r/R_0} F_\alpha(x, x) x^2 dx}{L_\alpha} \times \\ &\times \sin \left(\frac{1}{\hbar} p_F R_0 L_\alpha \right). \end{aligned} \quad (76)$$

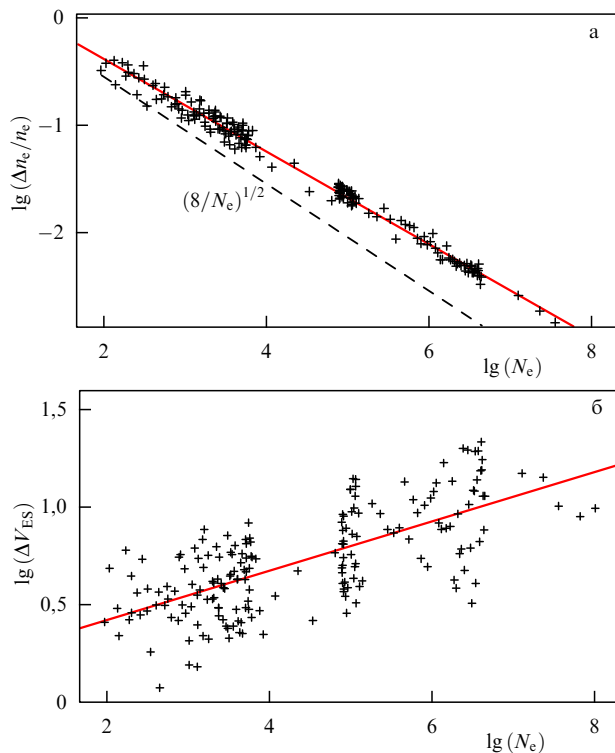


Рис. 10. Величины осцилляций электронной плотности (а) и осцилляции потенциала (б) в зависимости от числа электронов N_e при одинаковой плотности 10^{30} м^{-3} ; фитирующие линии для плотности и потенциала соответствуют $\Delta n_e/n_e \propto N_e^{-0,437 \pm 0,005}$ и $\Delta V_{ES} \propto n^{1/3} N_e^{0,142 \pm 0,015}$ соответственно.

В (75), равно как и в (76), суммирование проводится по всем траекториям α , для которых $s_\alpha < r$.

Полученное выражение для $\mathcal{E}(r)$ имеет пространственный масштаб неоднородности порядка размера сферической ямы. Для заметно больших N поле $\mathcal{E}(r)$ определяется выражением (76). Структура суммы в (76) такова, что поле $\mathcal{E}(r)$ имеет точки экстремума s_α . Для траекторий типа $\text{rot}(n, m)$ при малых n, m имеем $s_\alpha \cong \cong R_0/4, R_0/2, \sqrt{2}R_0/2$ (см. раздел 3.2). Интегрирование поля $\mathcal{E}(r)$ по радиусу для получения потенциала сохраняет выявленные периодичности, а также асимптотическое поведение при больших N .

Таким образом, результаты, полученные методом функций Грина (56) и (76), находятся в хорошем согласии с численными результатами для поведения потенциала, найденными другими методами, описанными выше (см. разделы 2.1, 2.2 и рис. 10).

4. Неоднородное распределение электронов в сжатом газовом пузыре: расчёты методом функционала электронной плотности

До настоящего момента рассматривалась система свободных электронов без взаимодействия и было продемонстрировано, что распределение создаваемого ими потенциала имеет неоднородность с пространственным масштабом порядка размера самой системы. В данном разделе будет показано, что этот эффект также имеет место в системе электронов с взаимодействием, такой как сжатый пузырь ионизованного газа.

Численные расчёты пространственного распределения электронов и потенциала были произведены с ис-

пользованием теории функционала плотности (DFT) для модели желе. Подобные расчёты на основе модели желе проводились ранее, например в [20], но для относительно небольшого числа электронов. В модели желе ионы представлены как непрерывное фиксированное распределение положительного заряда. Для проведения вычислений и анализа наиболее удобно сферически-симметричное распределение ионов и их потенциала, поскольку оно позволяет свести задачу к одномерной. Здесь мы также используем модификацию модели желе, которая называется моделью стабилизированного желе [21–23], с поправкой, учитывающей усреднённую разницу между желе и точечными ионами.

4.1. Вычислительный метод

Для сферически-симметричных задач в модели желе решаются одномерные уравнения Кона–Шэма [24]. Используя разложение одноэлектронной волновой функции (см. приложение, формула (П.1)), можно записать уравнение Кона–Шэма для радиальной волновой функции (чтобы упростить выражения, здесь используется атомная система единиц, где $\hbar = c = e = 1$):

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V_{KS}(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] \chi_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} \chi_{nl}(r), \quad (77)$$

$$V_{KS}(r) = V_{ion}(r) + V_H(n_e, r) + V_{xc}(n_e, r) + \langle \delta v \rangle_{WS}(n_{ion}(r)), \quad (78)$$

где V_{KS} — эффективный потенциал Кона–Шэма, V_H и V_{ion} — электростатические потенциалы электронов (потенциал Хартри) и ионного желе соответственно, умноженные на заряд электрона $-e$, т.е. $V_H = -e\varphi_e = -\varphi_e$ и $V_{ion} = -e\varphi_{ion} = -\varphi_{ion}$. Далее, V_{xc} — обменно-корреляционный потенциал, $\langle \delta v \rangle_{WS}$ — поправка стабилизированного желе. Электронная плотность определяется выражением

$$n_e(r) = 2 \sum_{n,l} (2l+1) \Theta_{nl} \frac{\chi_{nl}^2(r)}{4\pi r^2}, \quad (79)$$

где $\Theta_{nl} = \Theta(E_F - \varepsilon_{nl})$ — ступенчатая функция. Более подробно потенциалы и модель стабилизированного желе рассматриваются далее в разделе 4.2. Ниже под электростатическим потенциалом в модели желе будет подразумеваться сумма

$$V_{ES} = V_{ion} + V_H + \langle \delta v \rangle_{WS}. \quad (80)$$

Уравнения (77) решаются самосогласованно методом простых итераций со смешиванием. На каждой итерации решается уравнение (77) с потенциалом (78). Новое значение электронной плотности для следующей итерации строится в виде комбинации той, что использовалась на данном шаге, и вычисляемой согласно (79). Иными словами, на каждом шаге итерационной процедуры согласования к плотности подмешивается добавка, вычисляемая по формуле (79). Итерации продолжают, пока электронная плотность не станет самосогласованной. Для вычисления V_{xc} в DFT-модели мы во всех расчётах использовали обменно-корреляционный потенциал PZ (Perdew, Zunger) [25] в приближении локальной плотности (LDA) для спин-неполяризованного случая.

В случае сферически-симметричного распределения заряда уравнение Пуассона $\Delta\varphi = 4\pi n(r)$ может быть

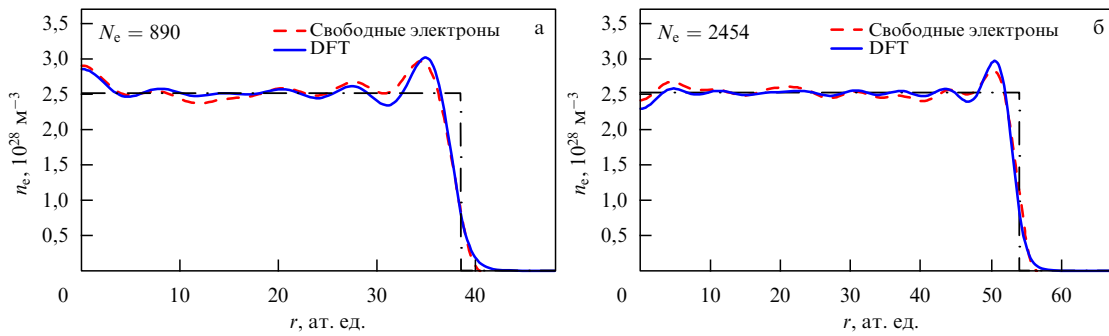


Рис. 11. Электронная плотность в случае свободных электронов (штриховая линия) и результаты DFT-расчётов (сплошная линия) для 890 (а) и 2454 (б) электронов при средней плотности $2,5 \times 10^{28} \text{ м}^{-3}$.

просто проинтегрировано, и для электростатического потенциала электронов V_H получаем, так же как в (17),

$$V_H(r) = \frac{1}{r} \int_0^r 4\pi \bar{r}^2 n_e(\bar{r}) d\bar{r} + \int_r^{+\infty} 4\pi \bar{r} n_e(\bar{r}) d\bar{r}. \quad (81)$$

Потенциал, создаваемый однородным распределением ионов V_{ion} , является не чем иным, как потенциалом однородно заряженного шара.

4.2. Модель стабилизированного желе

В модели стабилизированного желе имеется поправка к эффективному потенциалу Кона–Шэма $\langle \delta v \rangle_{\text{WS}}$, которая представляет собой усреднённую по объёму Z/n_{ion} , приходящуюся на один ион, разницу между потенциалом $V(r)$ однородно заряженного шара с зарядом иона Z и модельным псевдопотенциалом [21–23]:

$$\langle \delta v \rangle_{\text{WS}} = \frac{3}{4\pi r_0^3} \int_0^{r_0} dr 4\pi r^2 [\omega(r) + V(r)], \quad (82)$$

$$r_0 = Z^{1/3} r_S = Z^{1/3} \left(\frac{3}{4\pi n_{\text{ion}}} \right)^{1/3}, \quad (83)$$

где Z — заряд иона, r_S — радиус Вигнера–Зейтца, n_{ion} — плотность ионного желе, $V(r)$ — потенциал однородно заряженного шара, $\omega(r)$ — модельный псевдопотенциал взаимодействия между электроном и ионом с зарядом Z :

$$\omega(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{r}, & r > r_c, \\ 0, & r < r_c, \end{cases} \quad (84)$$

где r_c — характерный радиус "пустого" ядра, который задаётся моделью. Некоторые сравнения модели стабилизированного желе с трёхмерными расчётами представлены в [26].

4.3. Результаты расчётов для однородного желе

На основе модели желе в настоящей работе было проведено большое число расчётов для пузырей водорода с различными размерами и плотностью ионов. В этом разделе рассматривается только случай однородной плотности ионов, когда плотность положительного заряда равна средней плотности внутри сферы, $\bar{n}_e = N_e/(3/4\pi R_0^3)$, и равна нулю снаружи.

Для начала покажем, как соотносятся между собой распределения свободных электронов в сферической яме с бесконечно высокими стенками и в DFT-расчёте. Сравнение результатов для относительно небольшого числа

электронов показано на рис. 11, при этом для лучшего наложения графиков использовался радиус ямы со стенками, чуть больший, чем радиус ионного желе. Распределение свободных электронов автомодельно, поэтому его можно просто масштабировать по радиусу. Как видно из рисунков, профили плотности близки друг к другу, в том числе хорошо согласуются положения максимумов и минимумов.

Плотности ионного желе в проведённой серии расчётов лежали в диапазоне $10^{28} - 10^{32} \text{ м}^{-3}$, число электронов (равное числу ионов) варьировалось вплоть до 4×10^5 . На рисунке 12 представлен пример пространственного распределения электронной плотности для пузыря радиусом 1 нм при плотности желе 10^{30} м^{-3} , а также показаны профили электростатического потенциала вместе с обменно-корреляционным и эффективным потенциалом Кона–Шэма.

Далее мы детально обсудим осцилляции электронной плотности и электростатического потенциала. Поскольку плотность ионного желе n_{ion} однородна и примерно равна средней электронной плотности n_e , в качестве величины, характеризующей осцилляции электронной плотности, удобно использовать разность $n_e - n_{\text{ion}}$. За величину осцилляций электронной плотности Δn возьмём половину разности между максимальным и минимальным значениями $n_e - n_{\text{ion}}$ в промежуточной области, исключая окрестность границы и центральную часть пузыря, так как осцилляции всегда очень велики в центре. Осцилляции в пузыре радиусом 1 нм при трёх различных значениях плотности ионного желе представлены на рис. 13. На рисунке прослеживается следующая закономерность: амплитуды осцилляций электронной плотности уменьшаются с ростом числа электронов, что вполне согласуется с оценкой (56).

Для того чтобы извлечь осцилляции электростатического потенциала ΔV_{ES} , можно, например, вычесть среднее значение V_{ES} , которое приближённо может быть выражено через энергию Ферми E_F :

$$\Delta V_{\text{ES}} = V_{\text{ES}} + V_{\text{xc}}(\bar{n}_e) + (E_F(\bar{n}_e) - \varepsilon_{nl}^{\text{max}}), \quad (85)$$

поскольку

$$V_{\text{ES}} + V_{\text{xc}} = V_{\text{KS}} \approx -E_F. \quad (86)$$

Здесь вычитается энергия последнего заполненного электронного уровня $\varepsilon_{nl}^{\text{max}}$, чтобы значения ΔV_{ES} были в окрестности нуля. Примеры осцилляций электростатического потенциала ΔV_{ES} , полученных для нескольких

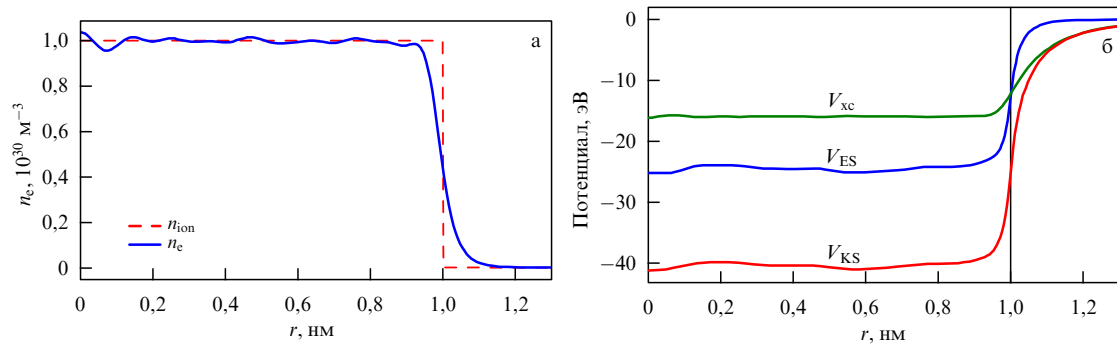


Рис. 12. Электронная плотность (а) и потенциалы (б) для пузыря радиусом 1 нм при средней плотности ионного желе 10^{30} м^{-3} и числе электронов $N_e = 4188$.

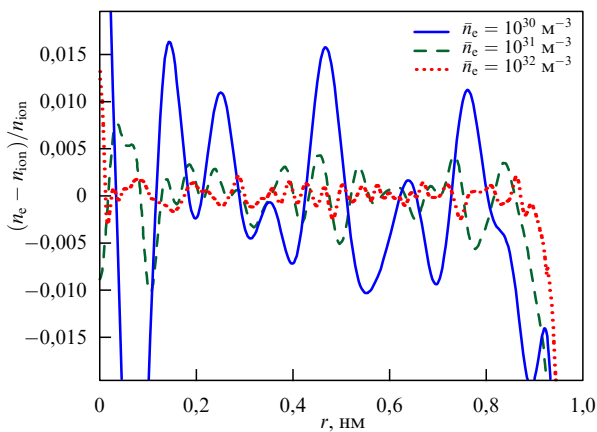


Рис. 13. Осцилляции электронной плотности в пузыре радиусом 1 нм при трёх различных значениях плотности желе: 10^{30} , 10^{31} и 10^{32} м^{-3} .

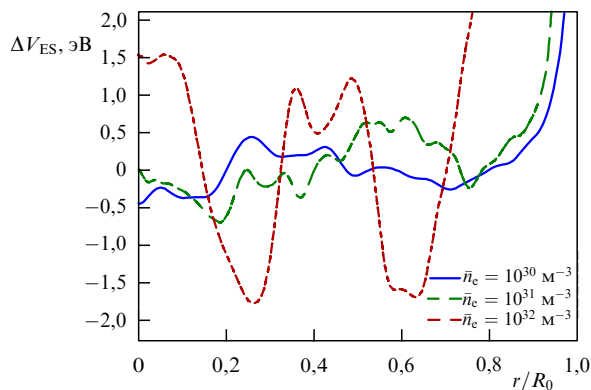


Рис. 14. Осцилляции электростатического потенциала в пузырях с плотностями 10^{30} , 10^{31} и 10^{32} м^{-3} и с радиусами 1,34, 1,5 и 0,5 нм соответственно.

пузырей с различными параметрами, представлены на рис. 14. В выражении (85) \bar{n}_e обозначает среднюю электронную плотность.

Осцилляции электронной плотности и потенциала, найденные в результате множества расчётов, представлены на рис. 15. Рисунок 15а демонстрирует величину осцилляций электронной плотности, зависящую от числа электронов, в логарифмическом масштабе. На нём также показана зависимость (56) и аппроксимация степенного закона, которая была получена методом наименьших

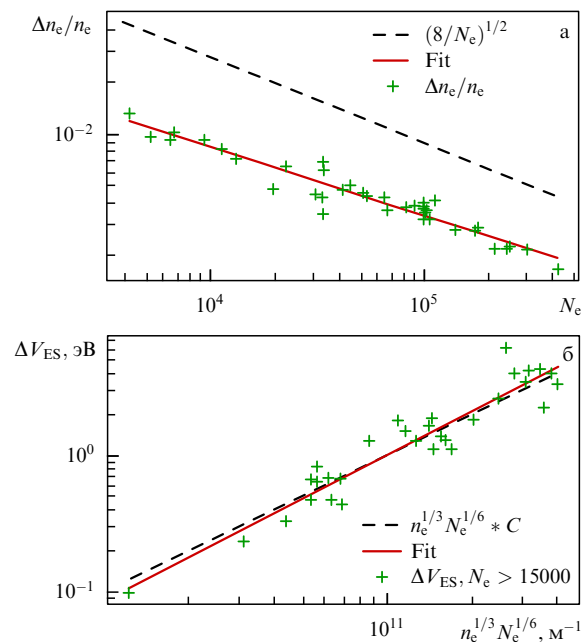


Рис. 15. Зависимость осцилляций электронной плотности от числа электронов N_e (а) и осцилляций потенциала от значения величины $\phi(r)$, определённой выражением (87) (б), в логарифмическом масштабе; аналитические зависимости (56) и (87), полученные в квазиклассике, показаны штриховыми линиями.

квадратов. Подгоночная кривая соответствует $\Delta n_e/n_e \propto N_e^{-0,4}$.

Из выражения (76) аналитической квазиклассической теории имеем

$$\phi(r) \propto \frac{\sqrt{N_e}}{R_0} \propto n_0^{1/3} N_e^{1/6}. \quad (87)$$

Величина осцилляций потенциала, зависящая от плотности, иллюстрирующая квазиклассическое поведение, изображена на рис. 15б вместе с зависимостью, определяемой выражением (87) и аппроксимацией степенного закона. При этом на рисунок не были нанесены результаты, полученные для $N_e < 15000$, поскольку для относительно небольшого числа электронов осцилляции потенциала не удовлетворяют (87), они оказываются в несколько раз больше, чем должны быть согласно степенному закону. Подгоночная кривая для осцилляций потенциала соответствует зависимости $\Delta V_{ES} \propto \phi^{1,07}$, где

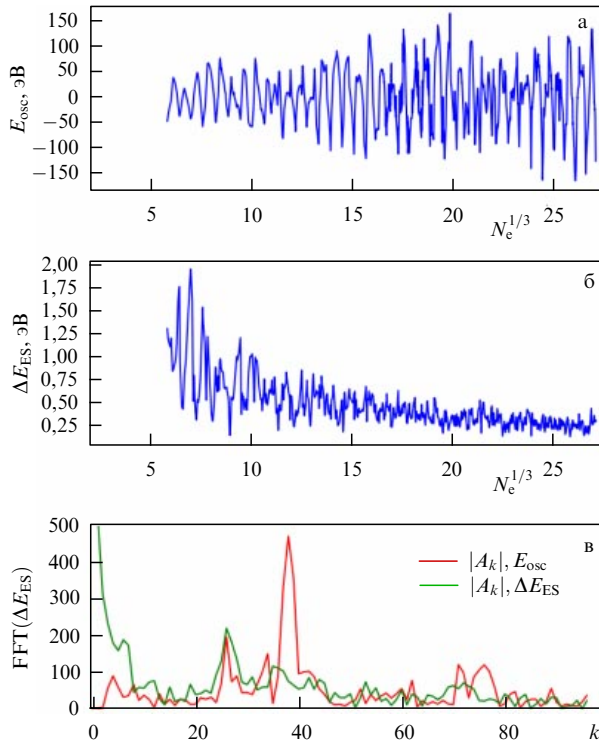


Рис. 16. Результаты расчётов осциллирующей части кинетической и электростатической энергии в модели DFT для различных чисел электронов вплоть до $N_e = 2 \times 10^4$ (а, б) (ср. с [20]) и быстрое фурье-преобразование (FFT) этих зависимостей (в).

φ берётся из (87). Это соответствие означает, что величина осцилляций потенциала находится в хорошем согласии с аналитическим результатом.

Отметим следующую особенность зависимости величины электростатического потенциала от числа частиц в системе. Из-за наличия множителя $\sin(p_F R_0 L_z / \hbar)$ в (76) эта зависимость носит осциллирующий характер. В частности, существуют такие значения N_e (магические числа), при которых амплитуда электростатического поля максимальна. Это обстоятельство наглядно отражает рис. 16, на котором изображены результаты расчётов зависимостей амплитуды электростатического потенциала ΔV_{ES} и осциллирующей части полной энергии ($E_{osc} = E - \bar{E}$) от числа электронов в системе. Расчёты проводились в рамках модели DFT при плотности $n_e = 10^{30} \text{ см}^{-3}$. Полученные результаты для осциллирующей части энергии схожи с результатами работы [20]. Зависимости носят осциллирующий характер с $\Delta N_e^{1/3} \approx 0,55$. С помощью преобразования Фурье можно определить характерные частоты такой периодической зависимости. Преобразование Фурье выполнялось по аргументу $N_e^{1/3}$ на отрезке от $N_1 = 200$ до $N_2 = 20000$; тогда амплитуды гармоник задаются выражением

$$A_k = \int_{N_1^{1/3}}^{N_2^{1/3}} \exp(-i\omega_k N_e^{1/3}) f(N_e^{1/3}) dN_e^{1/3}, \quad (88)$$

$$\omega_k = \frac{2\pi k}{N_2^{1/3} - N_1^{1/3}},$$

где $f(N_e^{1/3})$ — искомая функция, k — номер гармоники от 0 до количества точек, по которым производится дискретное преобразование Фурье.

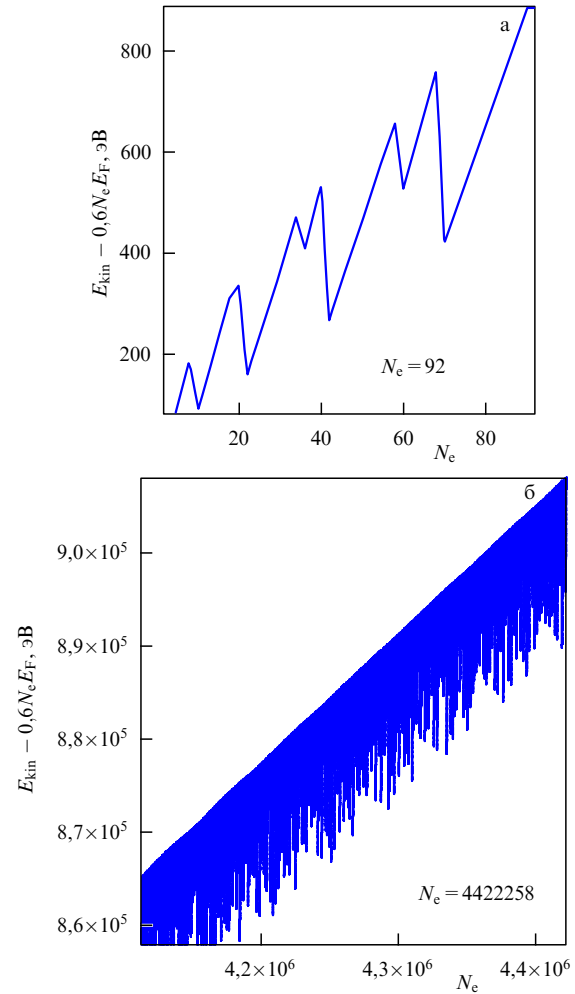


Рис. 17. Осцилляции кинетической энергии в простой модели для малого (а) и большого (б) числа электронов.

Так, на рис. 16в представлены полученные зависимости для осциллирующей части энергии E_{osc} и амплитуды колебаний потенциала ΔV_{ES} от номера частоты k . На частотной кривой для энергии видны несколько явных пиков, соответствующих замкнутым траекториям (см. рис. 5) (аналогичный анализ есть в [27]). Так, пик при $k = 26$ соответствует простейшей периодической траектории — движению по диаметру (см. рис. 5). Максимумы при $k = 34$ и 38 соответствуют следующим периодическим траекториям — равносторонний треугольник и квадрат. Максимумы при больших k отвечают повторяющимся периодическим траекториям. Аналогичные максимумы (не всегда явно выраженные) присутствуют и на частотной кривой для амплитуды электростатических колебаний.

Магические числа в простой модели сферической потенциальной ямы были получены ещё в работах Гамова [6] и Эльзассера [28]. Ими были рассмотрены только небольшие числа частиц (подобно рис. 17а). Простая модель позволяет проследить биения в различных интегральных характеристиках системы и при большом числе частиц (рис. 17б). Различия в значениях магических чисел относительно модели DFT объясняются разным поведением потенциала при стремлении r к стенке. В DFT-модели желе потенциальная яма имеет конечную глубину, а в простой модели — бесконечна. Поэтому уже

при N_e порядка сотни начинают проявляться различия в магических числах этих моделей. Так что полученная нами разница магических чисел в 20 % в простейшей модели и в DFT при N_e порядка десятка тысяч на удивление невелика. Важно отметить, что в простой модели качественный эффект биений прослеживается даже при очень больших N_e (рис. 176).

5. Заключение

С помощью нескольких методических подходов продемонстрировано новое нетривиальное проявление квантовых эффектов в мезоскопической системе вырожденных электронов в сферической потенциальной яме. Показано, что распределение электронной плотности имеет два пространственных масштаба. Первый из них — это хорошо известная фермиевская длина $\sim h/p_F$. Под новым проявлением квантовых эффектов авторы понимают существование второго пространственного масштаба, который имеет порядок размера самой системы. Наиболее ярко наличие второго масштаба проявляется в возникновении электрического поля, действующего на ионную систему. Потенциал имеет крупномасштабное осциллирующее поведение с несколькими точками экстремума.

Данный результат получен для двух физических систем: газа вырожденных невзаимодействующих электронов в сферической яме с бесконечно высокими стенками и для "холодного" сжатого газового пузыря субмикрометрового размера.

Анализ первой системы был проведен с помощью двух подходов: численным моделированием (прямое численное суммирование точных решений для электронных волновых функций, численный расчёт точной функции Грина) и аналитическим методом квазиклассических функций Грина. Полученные результаты находятся в хорошем согласии между собой. Численные результаты подтверждают основные аналитические зависимости, полученные методом квазиклассических функций Грина.

Крупномасштабное пространственное распределение концентрации электронов и возникающего электрического поля имеет несколько точек экстремума, а амплитуды отклонений от средних значений зависят от числа электронов в системе следующим образом:

$$\frac{\Delta n_e(r)}{n_e} \propto \left(\frac{8}{N_e} \right)^{1/2}, \quad (89)$$

$$\Delta \varphi \propto \frac{e N_e^{1/2}}{\varepsilon_0 R_0}. \quad (90)$$

Подобный эффект существует и для второй системы. Расчёты сжатого газового пузыря методом DFT демонстрируют аналогичное пространственное распределение концентрации электронов и электростатического потенциала. В отличие от системы свободных вырожденных электронов, в газовом пузыре электроны взаимодействуют с ионами и между собой. Это приводит к ослаблению эффекта, но функциональные зависимости амплитуды отклонения от среднего значения зависят от числа электронов аналогичным образом.

Принципиальным для эффекта является сферическая симметрия системы или близость к ней. Однако эффект сохраняется при больших деформациях и пере-

ходе сферы в эллипсоид, как показано, например, в работе [29]. Этот вопрос исследовался в квантовой теории эллиптических бильярдов. Только когда деформация достигает десятка процентов, картина распределения плотности электронов (при $N_e \sim 1000$) меняется качественно (см., например, статью [30] и ссылки там). Эффект отсутствует в плоской геометрии и значительно слабее проявляется в системах с цилиндрической геометрией [29].

Природа данного эффекта отлична от известных проявлений квантовых эффектов в мезоскопических системах, таких как размерное квантование, резонансные явления, мезоскопические флуктуации проводимости, когерентное обратное рассеяние.

Для проявления эффектов, связанных с размерным квантованием, необходимо, чтобы размеры системы имели порядок какой-либо характерной длины [31]. В частности, когда размеры кристаллического образца сравнимы с длиной свободного пробега электрона, появляется зависимость кинетических свойств, например электропроводности, от размера и формы кристалла [32]. В анализируемом эффекте присутствуют два масштаба: фермиевская длина электрона и размер области. Соотношение между величинами этих масштабов никак не влияет на наличие эффекта и его величину.

По этой же причине эффект нельзя отнести и к разряду квантовых резонансных эффектов, для манифестации которых необходимо, чтобы на размерах системы укладывалось целое число полуволн (или целое число четвертей волн), как это имеет место в резонансных туннельных диодах и транзисторах [33], а также в эффекте Рамзаура – Таунсенда [34].

Эффект также не имеет и интерференционной природы, которая характерна для таких явлений, как мезоскопические флуктуации проводимости и когерентное обратное рассеяние, проявляющихся в мезоскопических системах. Обратим внимание на то, что в одном из представленных в настоящей методической заметке подходов определение концентрации проводится суммированием квадратов модулей волновых функций электронов, что, очевидно, полностью исключает наличие каких-либо интерференционных эффектов.

Данный результат принципиально отличается и от других проявлений неоднородности в системах, имеющих квантовую природу: осцилляций Фриделя [35], коновских особенностей [36] распределения потенциала. В этих случаях размер области неоднородности порядка нескольких фермиевских длин вблизи границ и не связан с размером и геометрией системы, а в основной части системы пространственное распределение электронов однородно.

Природа изученного явления связана с квантовыми оболочечными эффектами в сферической системе. Это вытекает из проведённого теоретического и расчётного анализа, согласно которому колебательный характер зависимости амплитуды возникающего крупномасштабного электрического поля от числа электронов идентичен известной зависимости удельной энергии кластера и определяется заполненными электронными орбиталями. При этом характер пространственного распределения потенциала (наличие нескольких экстремальных точек) определяется первыми классическими периодическими траекториями электрона в сферически-симметричной потенциальной яме.

Благодарности

Авторы выражают благодарность Ю.Е. Лозовику и А.М. Сатанину за интерес к данной работе и очень полезные комментарии.

6. Приложение

Уравнение Шрёдингера в задаче с потенциалом (1) допускает разделение переменных, и его решение можно записать в виде

$$u(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_{n_r, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi), \quad (\text{П.1})$$

где $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция. Радиальная волновая функция удовлетворяет уравнению (3), повторим его здесь:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \chi_{n_r, l} = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{П.2})$$

в интервале $0 \leq r \leq R_0$ и равна нулю всюду вне его. Здесь мы сразу указываем, что функция $\chi(r)$ соответствует разным уровням энергии E в зависимости от орбитального момента l и радиального квантового числа n_r , поскольку k будет фиксировано граничными условиями. Это уравнение после введения новой переменной

$$x = kr \quad (\text{П.3})$$

и замены

$$\chi_{n_r, l} = x^{1/2} \varphi(x) \quad (\text{П.4})$$

можно привести к виду

$$\varphi'' + \frac{1}{x} \varphi' + \left[1 - \frac{(l+1/2)^2}{x^2} \right] \varphi = 0. \quad (\text{П.5})$$

Но это есть уравнение Бесселя. Таким образом, общее решение уравнения (П.2) можно записать в виде комбинации линейно-независимых решений

$$\chi_{n_r, l}(r) = \sqrt{\frac{\pi k r}{2}} [C_1 J_{l+1/2}(kr) + C_2 Y_{l+1/2}(kr)]. \quad (\text{П.6})$$

Обычно вводят в рассмотрение сферические функции Бесселя:

$$j_l(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x), \quad (\text{П.7})$$

$$y_l(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{l+1/2}(x). \quad (\text{П.8})$$

Для справки опишем рекуррентное вычисление $j_l(x)$.

Сферические функции Бесселя j_l выражаются через элементарные синусы и косинусы:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{j_0(x) - \cos x}{x}. \quad (\text{П.9})$$

Дальше можно использовать рекуррентное соотношение для общего случая бесселевых функций (см. [37, § 17.21]):

$$J_{v+1}(x) = \frac{2v J_v(x)}{x} - J_{v-1}(x). \quad (\text{П.10})$$

Детали вычислений функций Бесселя обсуждаются в разделе 2.2.2. Точность вычислений сверялась с новыми результатами из работы [14].

Для производной функции Бесселя имеем

$$J'_v(x) = \frac{1}{2} \{J_{v-1}(x) - J_{v+1}(x)\}. \quad (\text{П.11})$$

С помощью (П.11) можно избавиться от J_{v-1} в (П.10):

$$J_{v+1}(x) = \frac{v J_v(x)}{x} - J'_v(x), \quad (\text{П.12})$$

и получить рекуррентное соотношение для сферических функций Бесселя

$$j_{l+1}(x) = \frac{l j_l(x)}{x} - j'_l(x). \quad (\text{П.13})$$

Чтобы избежать сингулярности при $r = 0$, нужно положить $C_2 = 0$, тогда решение для $\chi_{n_r, l}(r)$ есть

$$\chi_{n_r, l}(r) = C_{n_r, l} r j_l(kr), \quad (\text{П.14})$$

где $C_{n_r, l}$ — нормировочная константа, вобравшая в себя C_1, k, π .

Из условия обнуления волновой функции на стенке при $r = R_0$ имеем $j_l(kR_0) = 0$ и находим значения уровней энергии, если найдём корни $x_{n_r, l}$ функции Бесселя $J_{l+1/2}(x)$:

$$J_{l+1/2}(x) = 0 \quad \text{при} \quad x = x_{n_r, l}. \quad (\text{П.15})$$

Здесь для каждого орбитального числа l через n_r обозначен порядковый номер корня функции $J_{l+1/2}(x)$. Тогда энергия уровня n_r, l выражается как

$$E_{n_r, l} = \frac{\hbar^2}{2mR_0^2} x_{n_r, l}^2. \quad (\text{П.16})$$

Таким образом, корень $x_{n_r, l}$ даёт безразмерную энергию уровня $x_{n_r, l}^2$, а волновое число

$$k_{n_r, l} = \frac{x_{n_r, l}}{R_0}. \quad (\text{П.17})$$

Сферическая функция $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ определена как

$$Y_{l, m}(\theta, \varphi) = N_{l, m} \exp(im\varphi) P_l^m(\cos \theta), \quad (\text{П.18})$$

где $P_l^m(\cos \theta)$ — присоединённая функция Лежандра, и нормирована условием

$$\oint |Y_{l, m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1, \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (\text{П.19})$$

Это условие выполняется, когда

$$N_{l, m} = (-1)^m \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2}. \quad (\text{П.20})$$

Тогда из нормировки полной волновой функции $\int |u|^2 dx = 1$ получаем

$$\int_0^{R_0} \left| \frac{1}{r} \chi_{n_r, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi) \right|^2 r^2 dr d\Omega = 1, \quad (\text{П.21})$$

откуда

$$\int_0^{R_0} |\chi_{n_r, l}(r)|^2 dr = 1, \quad (\text{П.22})$$

но $\chi_{n_r, l}(r) = C_{n_r, l} r j_l(kr)$, т.е.

$$C_{n_r, l}^2 \int_0^R r^2 |j_l(kr)|^2 dr = 1. \quad (\text{П.23})$$

Значит, для нормировки требуется взять интеграл

$$\int_0^{R_0} r^2 \frac{\pi}{2kr} |J_{l+1/2}(kr)|^2 dr = \frac{\pi}{2k} \int_0^{R_0} r |J_{l+1/2}(kr)|^2 dr, \quad (\text{П.24})$$

что должно равняться $1/C_{n,l}^2$. Пусть, как в (П.3), $x = kr$, тогда мы можем написать

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2k^3} \int_0^{R_0} kr |J_{l+1/2}(kr)|^2 d(kr) = \\ = \frac{\pi}{2k^3} \int_0^{kR_0} x |J_{l+1/2}(x)|^2 dx = \frac{1}{C_{n,l}^2}. \end{aligned} \quad (\text{П.25})$$

Входящий сюда интеграл берётся как неопределённый (Прудников и др. [11] 1.8.3.11):

$$\begin{aligned} \int x J_v^2(x) dx = \frac{x^2}{2} (J_v^2(x) - J_{v-1}(x) J_{v+1}(x)) = \\ = \frac{x^3}{\pi} (j_l^2(x) - j_{l-1}(x) j_{l+1}(x)) \quad \text{при } v = l + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (\text{П.26})$$

Это позволяет найти нормировку $C_{n,l}$ в аналитическом виде, так как интеграл в (П.24) берётся в пределах по r от 0 до R_0 , что соответствует по $x = kR_0$ пределам от 0 до $x_{n,l}$:

$$C_{n,l}^2 = 2k^3 \int_0^{x_{n,l}} [j_l^2(x_{n,l}) - j_{l-1}(x_{n,l}) j_{l+1}(x_{n,l})]^{-1} dx. \quad (\text{П.27})$$

Из (П.17) и условия $j_l(x_{n,l}) = 0$ следует

$$C_{n,l}^2 = \frac{2}{R_0^3} [-j_{l-1}(x_{n,l}) j_{l+1}(x_{n,l})]^{-1}. \quad (\text{П.28})$$

Случай $l = 0$ не описывается формулой (П.28), но тогда интеграл сводится к элементарному $\int \sin^2 x dx$.

Список литературы

1. Киржниц Д А, Лозовик Ю Е, Шпатаковская Г В *УФН* **117** 3 (1975); Kirzhnits D A, Lozovik Yu E, Shpatakovskaya G V *Sov. Phys. Usp.* **18** 649 (1975)
2. Шпатаковская Г В *УФН* **182** 457 (2012); Shpatakovskaya G V *Phys. Usp.* **55** 429 (2012)
3. Шпатаковская Г В *ЖЭТФ* **125** 518 (2004); Shpatakovskaya G V *J. Exp. Theor. Phys.* **98** 455 (2004)
4. Киржниц Д А, Шпатаковская Г В *ЖЭТФ* **62** 2082 (1972); Kirzhnits D A, Shpatakovskaya G V *Sov. Phys. JETP* **35** 1088 (1972)
5. Ekardt W *Phys. Rev. B* **29** 1558 (1984)
6. Gamow G *Nature* **131** 433 (1933)
7. Flügge S *Practical Quantum Mechanics* (New York: Springer-Verlag, 1974); Пер. на русск. яз.: Флюгге С *Задачи по квантовой механике* (М.: Наука, 1974)
8. Messiah A *Quantum Mechanics* Vol. 1 (Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1961); Пер. на русск. яз.: Мессиа А *Квантовая механика* Т. 1 (М.: Наука, 1979)
9. Варшавович Д А, Москалев А Н, Херсонский В К *Квантовая теория углового момента* (Л.: Наука, 1975); Пер. на англ. яз.: Varshalovich D A, Moskalev A N, Khersonskii V K *Quantum Theory of Angular Momentum* (Singapore: World Scientific Publ., 1988)
10. Abramowitz M, Stegun I A (Eds) *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (New York: Dover Publ., 1972); Пер. на русск. яз.: Абрамовиц М, Стиган И (Ред.) *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* (М.: Наука, 1979)
11. Прудников А П, Брычков Ю А, Маричев О И *Интегралы и ряды* Т. 2 *Специальные функции* (М.: Наука, 2003)
12. Базь А И, Зельдович Я Б, Переломов А П *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М.: Наука, 1971)
13. Amos D E *ACM Trans. Math. Software* **12** 265 (1986)
14. Bremer J, arXiv:1705.07820
15. Струтинский В М, Магнер А Г *ЭЧАЯ* **7** 356 (1976); Strutinskii V M, Magner A G *Sov. J. Part. Nucl.* **7** 138 (1976)
16. Gutzwiller M C *J. Math. Phys.* **8** 1979 (1967)
17. Gutzwiller M C *J. Math. Phys.* **10** 1004 (1969)
18. Gutzwiller M C *J. Math. Phys.* **11** 1791 (1970)
19. Reichl L E *The Transition to Chaos: Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations* (New York: Springer, 2004)
20. Koch E, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **54** 5168 (1996)
21. Perdew J P, Tran H Q, Smith E D *Phys. Rev. B* **42** 11627 (1990)
22. Perdew J P *Prog. Surf. Sci.* **48** 245 (1995)
23. Kiejna A *Prog. Surf. Sci.* **61** 85 (1999)
24. Kohn W, Sham L J *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965)
25. Perdew J P, Zunger A *Phys. Rev. B* **23** 5048 (1981)
26. Shidlovski D S, Mukhanov A E *J. Phys. Conf. Ser.* **1009** 012012 (2018)
27. Puska M, Ogando E, Zabala N *Phys. Rev. B* **64** 033401 (2001)
28. Elsasser W M *J. Phys. Radium* **4** 549 (1933)
29. Kuratov S E, Shidlovski D S, Blinnikov S I *Phys. Plasmas* **26** 022709 (2019)
30. Kim J-H et al. *Phys. Rev. E* **96** 042205 (2017)
31. Datta S *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995)
32. Li Y et al. *Nanoscale Res. Lett.* **10** 420 (2015)
33. Sun J P et al. *Proc. IEEE* **86** 641 (1998)
34. Capri A Z *Problems and Solutions in Nonrelativistic Quantum Mechanics* (River Edge, NJ: World Scientific, 2002)
35. Friedel J *Philos. Mag.* **43** 153 (1952)
36. Kohn W, Vosko S H *Phys. Rev.* **119** 912 (1960)
37. Whittaker E T, Watson G N *A Course of Modern Analysis* (Cambridge: The Univ. Press, 1927); Пер. на русск. яз.: Уиттекер Э Т, Ватсон Дж Н *Курс современного анализа* Ч. 1 *Основные операции анализа* (М.: Физматлит, 1962)

Two scales of quantum effects in a mesoscopic system of degenerate electrons

S.E. Kuratov^{(1,*), D.S. Shidlovski^{(1,2), S.I. Blinnikov^{(1,2), S.Yu. Igashov⁽¹⁾}}}

⁽¹⁾ Dukhov Automatics Research Institute, ul. Sushchevskaya 22, 127055 Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ National Research Center 'Kurchatov Institute', Alikhanov Institute for Theoretical and Experimental Physics, ul. Bol'shaya Cheremushkinskaya 25, 117218 Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(*) ser.evg.kuratov@gmail.com

A new nontrivial manifestation of quantum effects in a spherical mesoscopic system of degenerate electrons (with $N_e \lesssim 10^9$ electrons) is demonstrated. Analysis shows that the electron distribution function has a large spatial scale, of the order of the system size, which is much greater than the other spatial scale, the Fermi length of the electron. This result is obtained following four different strategies: an analytic method of semiclassical Green's functions, direct numerical summation of the exact solutions for electron wave functions in an infinite potential well, numerical construction of the exact Green's function using two linearly independent solutions, and the density functional method. The results obtained with these methods are in good qualitative and quantitative agreement with each other. We relate the nature of this phenomenon to quantum shell effects in a spherical mesoscopic system.

Keywords: electron distribution in a spherical potential, Green's function, density-functional theory, jellium model

PACS numbers: 31.15.E–, 71.10.Ca, 71.15.Mb, **73.20.–r**

Bibliography — 37 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **191** (8) 882–898 (2021)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.08.038817>

Received 8 July 2020

Physics – Uspekhi **64** (8) (2021)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.08.038817>