

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АДАТОМОВ В СИСТЕМЕ АДСОРБАТ—РАЗМЕРНО КВАНТОВАННАЯ РК ПЛЕНКА—АДСОРБАТ

Р. П. Мейланов

Рассмотрим систему адсорбат—РК пленка—адсорбат. Область $|z| < L/2$ занята пленкой, а область $|z| > L/2$ адатомами. Ось OZ перпендикулярна поверхности пленки. В соответствии с обобщением [1] модели Андерсона—Ньюнса [2, 3] введем функции Грина (ФГ) g_{ij} ($i, j = 1, 0, -1$), где g_{11} , g_{-1-1} , g_{00} — соответственно ФГ электронов адатомов в областях $z > L/2$, $z < -L/2$ и пленки в области $|z| < L/2$. Остальные ФГ g_{ij} ($i \neq j$) описывают различные процессы обмена электронов между адатомами и пленкой.

Для ФГ адатома в области $|z| > L/2$ имеем

$$g_a(\omega) = [\omega - \epsilon_a - \sigma_a(\omega)]^{-1}, \quad (1)$$

ϵ_a — энергия адатома в отсутствие взаимодействия с подложкой (характеристики адатома, расположенного в области $z > L/2$, отмечаются индексом «а», а в области $z < -L/2$ индексом «b»). Выражение массового оператора σ_a в случае изолированных адатомов дается соотношением

$$\sigma_a(\omega) = \sum_{p,s} \frac{|V_{a;ps}|^2}{\omega - E_{ps}} + \frac{|V_{a,b}(\omega)|^2}{\omega - \epsilon_b}. \quad (2)$$

Здесь $E_{ps} = p^2/2m + \epsilon_s$ — энергетический спектр электрона в РК пленке (p — двумерный квазиимпульс в плоскости пленки; s — дискретное квантовое число, описывающее движение электрона поперек пленки); $V_{a;ps}$ — потенциал гибридизации затравочных энергетических уровней адатома и пленки; $V_{a,b}(\omega)$ — потенциал «косвенной гибридизации» затравочных энергетических уровней адатомов

$$V_{a,b}(\omega) = \sum_{p,s} \frac{V_{a;ps} V_{ps;b}}{\omega - E_{ps}}. \quad (3)$$

Полюс ФГ (1) определяет энергетический спектр адатома. Для энергии локализованных состояний, существующих вне зоны проводимости пленки, получим следующее выражение:

$$\tilde{E}_a = E_a + (\gamma/\beta)^2 [(E_a - \epsilon_a)^2 / (E_a - \epsilon_b)], \quad (4)$$

где $\beta^2 = |V_{a;ps}|^2$; $\gamma^2 = |V_{b;ps}|^2$, E_a — энергия адатома при отсутствии косвенного взаимодействия (3). В модели Андерсона—Ньюнса [2, 3] E_a параметризуется параметром внутриатомного кулоновского взаимодействия U : $E_a = \epsilon_a + U \langle n_a \rangle$, где $\langle n_a \rangle$ — возмущение электронной плотности адатома при хемосорбции. Используя (1), (2) получим следующее выражение для $\langle n_a \rangle$ [4]:

$$\langle n_a \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{n_F} \left[\arctg \left(\frac{\epsilon_{s+1} - \tilde{E}_a}{s\Gamma} \right) - \arctg \left(\frac{\epsilon_s - \tilde{E}_a}{s\Gamma} \right) \right]. \quad (5)$$

Здесь n_F — число заполненных дискретных состояний в РК пленке; $\epsilon_{n_F+1} = \epsilon_F$; ϵ_F — уровень Ферми; $\Gamma = \beta^2 m S / \hbar^2$; S — площадь поверхности пленки; m — масса электрона.

Самосогласованные решения уравнений (4), (5) определяют и энергию адатома \tilde{E}_a с учетом косвенного взаимодействия (3) между адатомами через электроны проводимости пленки. Результаты численного решения урав-

нений (4), (5) приведены на рис. 1, 2. Расчеты проведены для концентрации электронов проводимости пленки $N \sim 10^{27} \text{ м}^{-3}$ и при значениях параметров $U = 16 \text{ Дж} \cdot 10^{-19}$, $\Gamma = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$, $\epsilon_a = 0.8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ и $(\gamma/\beta) = 1$. Зависимость $\langle n_a \rangle$ от толщины L пленки показана на рис. 1. В отсутствие косвенного взаимодействия (3) эта зависимость носит осцилляционный характер (кривая (1) [4]). При учете взаимодействия (3) качественный ха-

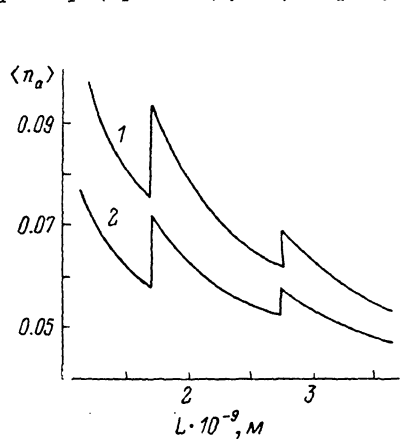


Рис. 1. Зависимость возмущения электронной плотности адатома от толщины L пленки.

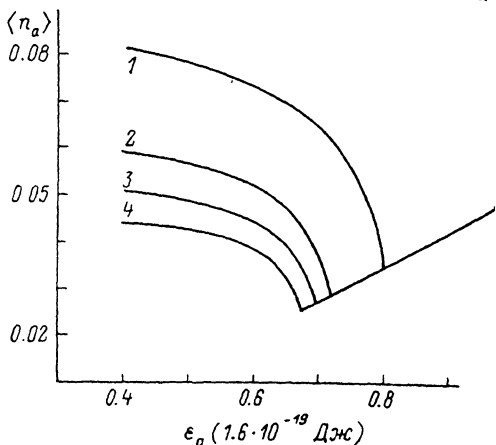


Рис. 2. Зависимость возмущения электронной плотности адатома от энергии адатома.

рактер зависимости степени переноса заряда при хемосорбции от толщины пленки L сохраняется (кривая 2, $\epsilon_a = \epsilon_b$). На рис. 2 показана зависимость $\langle n_a \rangle$ от значения энергии адатома при $n_F = 1, 2, 3, 4$ соответственно для кривых 1, 2, 3, 4. Как видно, эта зависимость носит пороговый характер.

Указанные особенности хемосорбции в системе адсорбат—РК пленка—адсорбат могут быть обнаружены в экспериментах по измерению энергии адатома. Особый интерес с практической точки зрения представляет наличие порогового характера в зависимости $\langle n_a \rangle$ от взаимного расположения энергетических уровней адатомов.

Автор выражает искреннюю благодарность Ю. М. Гальперину за полезное обсуждение и интерес к работе.

Список литературы

- [1] Джабраилов В. В., Мейланов Р. П. // Поверхность. 1989. Т. 3. С. 5—11.
- [2] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1961. V. 124. N 1. P. 41—53.
- [3] Newns D. M. // Phys. Rev. 1969. V. 178. N 3. P. 1123—1135.
- [4] Мейланов Р. П. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 7. С. 270—272.

Институт проблем геотермии
Дагестанский филиал АН СССР
Махачкала

Поступило в Редакцию
26 марта 1990 г.

УДК 539.12

© Физика твердого тела, том 32, № 9, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 9, 1990

СВЯЗАННОЕ СОСТОЯНИЕ НЕЙТРОНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ СВЕРХПРОВОДНИКОВ ВТОРОГО РОДА

В. А. Бордовицын

В работе [1] отмечается возможность существования связанного состояния нейтрона в поле магнитного вихря сверхпроводника второго рода. В известном приближении эта задача эквивалентна двумерной кулоновской