

## Хемосорбция на размерно-квантованной нити

© Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова\*, Г.М. Мусаев\*, М.М. Гаджиалиев\*\*

Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук,  
367030 Махачкала, Россия

\* Дагестанский государственный университет,  
367025 Махачкала, Россия

\*\* Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук,  
367003 Махачкала, Россия

(Поступила в Редакцию 5 сентября 2003 г.)

Исследуются особенности хемосорбции на размерно-квантованной нити. Показано, что энергия электрона адатома, хемосорбированного на размерно-квантованной нити, скачком изменяется при изменении радиуса нити.

В связи с проявлением особого интереса к свойствам квантовых нитей представляется важным исследование хемосорбции на размерно-квантованной нити. Особенности хемосорбции атома определяются плотностью состояний электронной подсистемы подложки. В случае размерно-квантованной пленки было показано, что энергия электронной подсистемы хемосорбированного атома оказывается осциллирующей функцией толщины пленки и внешнего магнитного поля [1–5]. Это связано с тем, что плотность состояний электронов размерно-квантованной металлической пленки ступенчато зависит от толщины пленки и внешнего квантующего магнитного поля.

В настоящей работе исследуется случай, когда подложкой является размерно-квантованная нить.

Рассмотрение проводится в рамках модели Андерсона–Ньюнса [6–10], обобщенной на случай хемосорбции на низкоразмерных системах [1–5]. В рамках модели Андерсона–Ньюнса [6–10] энергия электрона адатома определяется выражением  $E_{a,s} = \varepsilon_a + U \langle n \rangle$ , где  $\varepsilon_a$  — энергия электрона изолированного атома,  $U$  — потенциал внутриатомного кулоновского отталкивания,  $\langle n \rangle$  — возмущение электронной плотности атома при взаимодействии с подложкой. Для  $\langle n \rangle$  имеет место соотношение

$$\langle n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \bar{g}(\omega),$$

где  $\bar{g}$  — корреляционная функция электрона адатома. Основные соотношения для равновесных корреляционных функций электрона адатома и подложки приведены в нашей предыдущей работе [5].

В рассматриваемом нами случае размерно-квантованной нити исходя из модели бесконечно глубокой двумерной потенциальной ямы для энергетического спектра электронов нити имеем [11]

$$E_{np} = \frac{\hbar^2 \alpha_n^2}{2mR^2} + \frac{p_x^2}{2m}. \quad (1)$$

Здесь  $R$  — радиус нити,  $\alpha_n$  — корни функции Бесселя  $J_1(\alpha_{kl}) = 0$  в порядке их возрастания,  $m$  — масса элек-

трона,  $p_x$  — импульс электрона вдоль нити. Для первых четырех корней, например, имеем  $\alpha_1 = \alpha_{10} = 2.42$ ,  $\alpha_2 = \alpha_{11} = 3.835$ ,  $\alpha_3 = \alpha_{21} = 5.14$ ,  $\alpha_4 = \alpha_{12} = 5.5$ .

Выражение для плотности электронных состояний квантовой нити принимает вид

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x dx}{2\pi\hbar} \frac{\Gamma_{np}}{(\omega - E_{np})^2 + \Gamma_{np}^2} \\ &= (\Gamma \rightarrow 0) = \frac{L_x \sqrt{2m}}{\pi\hbar} \sum_n \frac{\Theta(\omega - \varepsilon_n)}{\sqrt{\omega - \varepsilon_n}}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $L_x$  — линейный размер нити,  $\Theta(x)$  — единичная функция Хевисайда. Для концентрации электронов получим

$$N = \frac{\sqrt{2m}}{\pi^2 \hbar R^2} \sum_{n=1}^{n_F} \sqrt{\mu - \varepsilon_n}, \quad (3)$$

где  $n_F$  — число заполненных дискретных энергетических уровней квантовой нити. Соотношение (3) устанавливает связь между химическим потенциалом  $\mu$ , концентрацией электронов  $N$  и радиусом нити  $R$ :  $\mu = \mu(R, N)$ . Из (3) следует, что химический потенциал является осциллирующей функцией радиуса нити. Радиус нити, при котором заполняется очередной  $n + l$  энергетический уровень, определяется из условия  $\mu(R_n, N) = \varepsilon_{n+1}$ . Общего выражения для  $R_n$  не существует. Для  $R_1, R_2$ , например, имеем  $R_1 = R_0(\alpha_2^2 - \alpha_1^2)^{1/6}$ ,  $R_2 = R_0(2\alpha_3^2 - \alpha_1^2 - \alpha_2^2 + 2\sqrt{\alpha_3^4 + \alpha_1^2 \alpha_2^2 - \alpha_3^2(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)})^{1/6}$ . Здесь  $R_0 = (\pi^2 N)^{-1/3}$  — характерный масштаб. На рис. 1 приведен график зависимости  $\mu(R/R_0)$ , рассчитанной на основе выражения (3). Как видно, зависимость  $\mu(R/R_0)$  имеет осцилляционный характер.

При расчете энергии электрона адатома  $E_{a,s}$  исходим из выражения

$$\langle n \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \bar{g}(\omega). \quad (4)$$

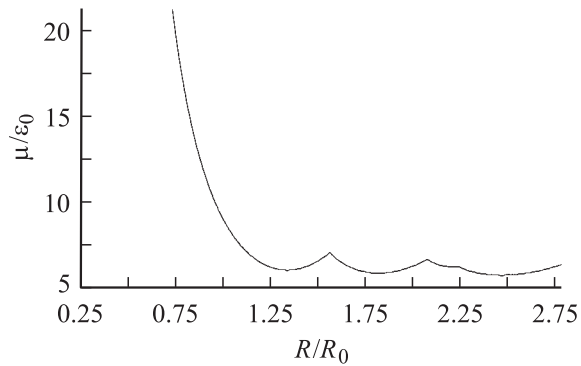


Рис. 1. Зависимость безразмерного химического потенциала  $\mu/\varepsilon_0$  от безразмерного радиуса нити  $R/R_0$ .

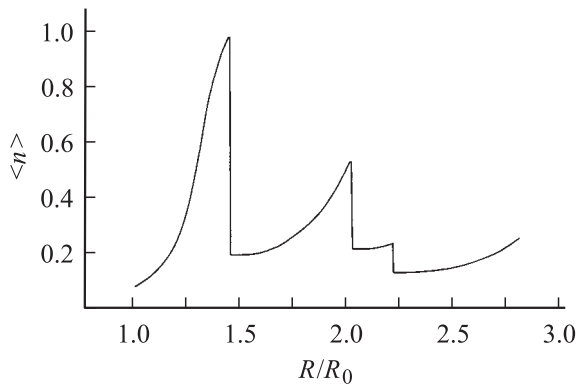


Рис. 2. Зависимость  $\langle n \rangle$  от безразмерного радиуса нити  $R/R_0$ .

Для корреляционной функции  $\tilde{g}(\omega)$  имеем [5]

$$\tilde{g}(\omega) = g^R(\omega)\tilde{\sigma}_a(\omega)g^A(\omega) = |V|^2 f(\omega)a(\omega). \quad (5)$$

Здесь  $f(\omega)$  — функция распределения Ферми–Дирака; спектральная функция адатома  $a(\omega)$  определяется соотношением

$$a(\omega) = \frac{\sum_{ip} A_{ip}(\omega)}{[\omega - \varepsilon_a - U\langle n \rangle]^2 + |V|^4 \left( \sum_{ip} A_{ip}(\omega) \right)^2}, \quad (6)$$

где в свою очередь спектральная функция электрона нити задается выражением

$$A_{ip}(\omega) = \frac{\Gamma_{ip}(\omega)}{(\omega - E_{ip})^2 + \Gamma_{ip}^2(\omega)}. \quad (7)$$

Исходя из выражений (4)–(7) и учитывая вид энергетического спектра электрона (1) квантовой нити, окончательно получим следующее выражение для возмущен-

ной плотности электронов адатома:

$$\langle n \rangle = \frac{\rho_0}{2\pi} \sum_{n=0}^{n_F} \int_{\varepsilon_n}^{\mu} d\omega \times \frac{\sqrt{(\omega - \varepsilon_n)}}{[\omega - \varepsilon_a - U\langle n \rangle]^2 + \left[ \rho_0 \sum_{n=1}^{n_F} \Theta(\omega - \varepsilon_n) \sqrt{\omega - \varepsilon_n} \right]^2}, \quad (8)$$

где  $\rho_0 = |V|^2 L_x \sqrt{2m}/\hbar$ . На рис. 2 приведен график зависимости  $\langle n \rangle(R/R_0)$ , рассчитанной по уравнению (8). Как показывают расчеты, возмущенная плотность электронов адатома зависит от толщины пленки, причем при заполнении очередного квантового уровня нити  $\langle n \rangle$  скачком увеличивается, что приводит к скачкообразному изменению и энергии хемосорбции адатома. Расчеты проведены для следующих значений параметров:  $\rho_0 = 5$ ,  $U/\varepsilon_0 = 7$ ,  $\varepsilon_a/\varepsilon_0 = 0.1$ . Здесь  $\varepsilon_0 = \hbar^2/2mR_0^2$  — характерная энергия.

Экспериментальное обнаружение рассмотренных эффектов позволит определить особенности энергетических характеристик адатома и электронной подсистемы нити. Эффект осцилляции энергии взаимодействия адатома с нитью представляет интерес и с точки зрения контролируемого изменения электронных свойств квантовых нитей. Условие возможности наблюдения осцилляций имеет вид  $\Delta\varepsilon_n \gg T$ ,  $\hbar/\tau$  ( $T$  — абсолютная температура,  $\tau$  — время релаксации).

## Список литературы

- [1] Р.П. Мейланов. ФТТ **31**, 7, 270 (1989).
- [2] Р.П. Мейланов. ФТТ **32**, 9, 2839 (1990).
- [3] Р.П. Мейланов. Поверхность **6**, 37 (1994).
- [4] Р.П. Мейланов. Поверхность **3**, 52 (1999).
- [5] Р.П. Мейланов, Б.А. Абрамова, М.М. Гаджиалиев, В.В. Джабраилов. ФТТ **44**, 11, 2097 (2002).
- [6] P.W. Anderson. Phys. Rev. **124**, 1 (1961).
- [7] D.M. Newns. Phys. Rev. **178**, 3 (1969).
- [8] Т. Эйнштейн, Дж. Герц, Дж. Шриффер. В сб.: Теория хемосорбции. Мир, М. (1983).
- [9] С.Ю. Давыдов. ФТТ **42**, 7, 1331 (2000).
- [10] С.Ю. Давыдов. ФТТ **41**, 9, 1543 (1999).
- [11] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. Задачи по квантовой механике. Наука, М. (1981).