

На правах рукописи

ШЕСТАКОВ ДМИТРИЙ КОНСТАНТИНОВИЧ

Процессы электронного обмена при рассеянии отрицательного  
иона водорода на наносистемах

Специальность 01.04.04 – физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2008

Работа выполнена на физическом факультете  
Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Научные руководители:

доктор физико-математических наук,  
профессор

Александров Андрей Федорович

кандидат физико-математических наук

Гайнуллин Иван Камилевич

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
профессор

Рудый Александр Степанович

кандидат физико-математических наук,  
доцент

Буханов Владимир Михайлович

Ведущая организация: Московский инженерно-физический институт

Защита диссертации состоится 18 декабря 2008г. в 15-00 часов на заседании диссертационного совета Д 501.001.66 в МГУ по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, физический факультет, аудитория 5-19.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан 11 ноября 2008 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Ершов А.П.

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

## Актуальность работы

В настоящее время нанобъекты (фуллерены, нанотрубки, нанопленки, атомные кластеры, цепочки атомов и т.п.) и композитные наноструктурированные материалы являются объектом растущего интереса для фундаментальной и прикладной науки, поскольку при переходе к наноразмерам происходят существенные изменения свойств материалов. Кроме того, при переходе к наноразмерам число атомов на поверхности становится соизмеримо с количеством атомов в объеме, поэтому роль поверхности как более активной составляющей существенно возрастает [1]. Под терминами “поверхность” или “межфазная граница” обычно понимают слой вещества конечной толщины, разделяющий различные объемные фазы. Толщина слоя, как правило, составляет несколько атомных слоев вещества.

Благодаря развитию нанотехнологий особое внимание уделяется исследованию процессов, происходящих при взаимодействии атомных и молекулярных частиц с поверхностью твердого тела. Такое внимание объясняется широким применением упомянутых процессов для разработки новых нанoeлектронных устройств в информационных технологиях. При этом формирование зарядового состояния рассеянных или распыленных с поверхности частиц является предметом многих исследований. Это обусловлено тем, что зарядовое состояние отлетающей частицы содержит информацию как о составе и структуре, так и об электронных свойствах поверхности. Кроме того, процесс электронного обмена является определяющим для многих явлений, происходящих на поверхности при вторичной ионной эмиссии, рассеянии, десорбции, катализе, модификации поверхности [2-4].

При взаимодействии атомной частицы с металлической поверхностью важную роль играет резонансное туннелирование [5]. Если энергетические ограничения отсутствуют, то именно этот процесс доминирует в обмене зарядом, т. к. его вероятность велика по сравнению с нерезонансными переходами и Оже-процессами [6,7].

Для описания одноэлектронных процессов электронного обмена наиболее часто используется нестационарная модель Андерсона-Ньюнса [8], где задача определения зарядового состояния атомной частицы может быть решена аналитически в приближении широкой зоны; при этом предполагается, что плотность электронных состояний  $\rho(\varepsilon)$  и матричные элементы  $V_k$  в гамильтониане Андерсона-Ньюнса не зависят от энергии во

всем бесконечном интервале энергий. Однако непосредственное вычисление заселенности атомного уровня с использованием аналитической формулы затруднительно ввиду наличия интегралов, не берущихся в квадратурах. Поэтому развиваются численные методы решения задачи.

На данный момент в литературе описано несколько методов определения положения и ширины атомного уровня (ширина уровня определяет эффективность электронного перехода). Исторически первым был предложен метод, использующий теорию возмущений. Он может применяться, если возмущения, создаваемые в атоме из-за присутствия поверхности твердого тела, малы по сравнению с потенциалом ионизации атома. Но это приближение не оправдано при малых расстояниях между атомом и поверхностью металла. Впоследствии были развиты методы, не использующие теорию возмущений. Один из них – метод Распространения Волновых Пакетов [9]. Суть метода заключается в прямом решении на пространственно-временной сетке нестационарного уравнения Шредингера для активного электрона, находящегося в поле атомного остова и металлической поверхности. Также метод может быть использован для двух различных ситуаций: статический случай, когда частица находится на фиксированном расстоянии от поверхности; динамический случай, когда частица приближается к поверхности с постоянной скоростью по классической траектории. В статическом случае мы можем получить характеристики атомного уровня - его энергию и ширину, а в динамическом случае можно прямо исследовать динамику процесса обмена зарядом, прослеживая эволюцию волнового пакета при движении атома над поверхностью.

В настоящее время большой интерес представляет изучение процессов зарядового обмена атомных частиц с наносистемами, и, в частности, с островковыми пленками, которые широко используются в микро - и нано-электронике. На текущий момент хорошо изучен обмен зарядом между атомной частицей и полубесконечным металлическим образцом (полупространство, заполненное металлом) [5]. Туннелируя вдоль нормали к поверхности (именно это направление энергетически выгодно) электрон атома неограниченно распространяется в глубину металла. При этом возможность обратного перехода электрона на атом практически отсутствует. Если ограничить движение электрона перпендикулярное поверхности, то характер электронного перехода существенно изменится [10,11]. Примером поверхностей с ограниченным движением электрона являются грань {111} монокристалла меди, а также, наносистемы – тонкие металлические пленки, островковые пленки на поверхности (их модель – тонкий металлический диск), нанотрубки и кластеры атомов. Электронный обмен атомных частиц с системами пониженной размерности (наносистемами) демонстрирует квантово-

размерный эффект, который появляется, когда линейные размеры системы становятся сравнимыми с длиной волны Де Бройля. Квантово-размерный эффект проявляется в сильном немонотонном влиянии размеров и конфигурации системы на процесс электронного обмена.

Другой важной особенностью зарядового обмена атомной частицы с поверхностью твердого тела является перезарядка при скользящем рассеянии. Суть проблемы состоит в том, что в этом случае, вследствие наличия параллельной поверхности составляющей скорости атомной частицы  $v_{||}$  изменяется электронная структура твердого тела в системе координат, связанной с частицей. Эффект “параллельной скорости” проявился в экспериментах по нейтрализации щелочных ионов, а также по формированию фракции ионов  $H^-$  при их скользящем рассеянии на поверхности металла [12,13]. Влияние  $v_{||}$  при рассеянии на наносистемах отличается от случая полубесконечного металлического образца и заведомо представляет интерес для исследований.

### **Цель диссертационной работы**

Целью настоящей работы является численное моделирование процессов электронного обмена отрицательного иона водорода с некоторыми перспективными для наноэлектроники системами (тонкий диск и кластер атомов алюминия) и выяснению условий, необходимых для проявления квантово-размерного эффекта.

На защиту выносятся следующие основные положения, определяющие **научную новизну** полученных в диссертации результатов.

- Результаты численного исследования электронного обмена между отрицательным ионом водорода и кластером атомов алюминия. Численные исследования, проведенные с помощью метода Распространения Волновых Пакетов, позволяют определить, что переход электрона из отрицательного иона водорода в кластер атомов алюминия в статическом случае характеризуется формированием дискретного распределения плотности волновой функции, содержащей максимумы по координатам  $(r, \theta)$ .
- Квантово-размерный эффект при электронном обмене между отрицательным ионом  $H^-$  и кластером атомов  $Al$  выражается в немонотонном поведении эффективности электронного перехода при изменении радиуса кластера.
- В динамическом случае, в зависимости от скорости налетающей частицы при электронном обмене с атомной частицей, кластер атомов  $Al$  может вести себя как массивный образец или квантовая структура с дискретностью энергии по двум координатам.

- Эффект “параллельной скорости” при скользящем рассеянии отрицательного иона водорода на тонком диске и кластере атомов Al. Получена зависимость вероятности формирования отрицательных ионов от величины параллельной поверхности составляющей скорости. Вид рассчитанной зависимости имеет куполообразную форму, соответствующую экспериментальным данным для массивного образца. Абсолютная величина и положение максимума на кривой зависимости выхода ионов  $H^-$  определяется уровнем Ферми в рассматриваемой наносистеме.

### **Научная и практическая ценность**

В результате моделирования процессов электронного обмена были развиты численные методы, которые позволяют рассчитывать основные интегральные параметры, характеризующие процесс электронного обмена, от конфигурации и размеров наносистемы. Выявлены условия появления квантово-размерного эффекта. Также был исследован эффект “параллельной скорости” при скользящем рассеянии ионов водорода на островковой пленке и кластере атомов алюминия. Полученные результаты существенно расширяют представление о механизме электронного обмена с наносистемами и могут быть использованы для создания наноэлектронных приборов, имеющих в качестве активного элемента металлоорганическую гранулу сферической или дискообразной формы.

### **Апробация работы**

По теме диссертации опубликовано 5 печатных работ, 2 из которых – в центральных реферируемых журналах. Основные результаты диссертационных исследований были доложены на следующих конференциях:

- Международная конференции по атомным столкновениям в твердых телах “ICACS-2006” (Германия, Берлин, 2006).
- Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых “Ломоносов” (Россия, Москва, 2008).
- Международная конференции по атомным столкновениям в твердых телах “ICACS-2008” (Южная Африка, Фалаборва, 2008).

### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Работа содержит 100 страниц текста, включая 25 рисунков. Список литературы включает 105 наименований.

## **Личный вклад автора**

Определение цели работы и постановка задач осуществлены автором совместно с д.ф.-м.н., профессором Уразгильдиным И.Ф. Проведение конкретных расчетов, численное моделирование, анализ результатов и выводы сделаны автором самостоятельно. Ряд результатов, вошедших в диссертацию, получены в соавторстве с к.ф.-м.н., Гайнуллиным И.К. и Магуновым А.А., которым автор благодарен за плодотворное сотрудничество.

## **КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

### **Введение**

Во введении дана общая характеристика работы. Обоснована актуальность темы; сформулирована цель и определены задачи исследования; кратко изложена научная новизна и практическая ценность работы; описана структура и объем диссертации.

### **Глава 1**

Первая глава представляет собой литературный обзор по теме диссертации. В первой части главы рассматриваются основные процессы зарядового обмена между атомной частицей и поверхностью твердого тела. Приводятся основные характеристики этого процесса. Дается описание нестационарной модели Андерсона-Ньюнса, часто используемой при рассмотрении одноэлектронных процессов. Указывается способ задания матричных элементов и приводится аналитическое решение в приближении широкой зоны. При скользящем рассеянии атомной частицы на поверхности металла рассматривается влияние на процесс перезарядки наличия у частицы параллельной поверхности компоненты скорости.

Вторая часть главы посвящена описанию модели электронной структуры металла, отрицательного иона водорода, тонкого металлического диска и шарового кластера атомов алюминия.

### **Глава 2**

Вторая глава посвящена описанию применяемых численных методов для расчета основных характеристик процесса зарядового обмена с наносистемами.

Для исследования статического и динамического случая применяется метод Распространения Волновых пакетов (РВП). Предполагается, что эволюция волнового пакета происходит под действием потенциала, который является суперпозицией

потенциалов атомного остова  $V_{e-H}$  и поверхности наносистемы  $V_{e-Surf}$ . Зависящая от времени электронная волновая функция  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , является решением нестационарного уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [T + V_{e-H} + V_{e-Surf} + \Delta V_{Surf}] \cdot \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где  $V_{e-H}$  - потенциал взаимодействия электрона с атомным остовом,  $V_{e-Surf}$  - потенциал взаимодействия электрона с поверхностью наносистемы, а  $\Delta V_{Surf}$  - потенциал сил изображения;  $T$  - кинетическая энергия электрона. Начальная электронная волновая функция  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$  берется равной  $\Psi_a(\mathbf{r})$  - собственной функции потенциала атомного остова. При расчетах используется атомная система единиц ( $m_e = e = \hbar = 1$ ; 1 ат. ед. расстояния =  $5.292 \cdot 10^{-11}$  м, 1 ат. ед. времени =  $2.419 \cdot 10^{-17}$  с, 1 ат. ед. скорости =  $2.188 \cdot 10^6$  м/с). Процесс распространения волновой функции электрона с течением времени описывается посредством оператора эволюции  $U(\Delta t)$

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= U(\Delta t) \Psi(\mathbf{r}, t) \\ U(\Delta t) &= \exp(-i\tilde{H}\Delta t), \end{aligned} \quad (2)$$

здесь  $\tilde{H}$  - гамильтониан системы.

В статическом случае (фиксированное расстояние между ионом и поверхностью) гамильтониан не зависит от времени. В динамическом случае он становится зависимым от времени через временную зависимость потенциалов (рассматривается случай движения иона по классической траектории над поверхностью).

Таким образом, метод Распространения Волновых Пакетов позволяет наблюдать эволюцию волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Используя ее, можно получить электронную автокорреляционную функцию:

$$A(t) = \langle \Psi_a | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (3)$$

которая может быть использована для получения резонансных характеристик перезарядки: положение энергетического уровня  $E$  и его ширины  $\Gamma$ . Автокорреляционную функцию  $A(t)$  можно представить как суперпозицию экспоненциальных членов

$$A(t) = \sum_j a_j \exp \left\{ -i \left( E_j - \frac{\Gamma_j}{2} \right) t \right\} \quad (4)$$

Также для теоретического анализа процесса электронного обмена с наносистемами необходимо знание величины дискретных уровней энергии внутри рассматриваемой



системы, для нахождения которых необходимо решить стационарное уравнение Шредингера

$$\Delta\Psi(\mathbf{r}) + 2 \cdot [E - V_{e-Surf}] \cdot \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (5)$$

где  $E$  – энергия системы, которая играет роль собственного значения, подлежащего определению, а  $V_{e-Surf}$  – потенциал изучаемой наносистемы.

Для нахождения собственных функций уравнения (5) используем конечно-разностную аппроксимацию пространственной производной на равномерной сетке

$$\Psi'' = \frac{\psi_{j-1} - 2 \cdot \psi_j + \psi_{j+1}}{h^2}, \quad (6)$$

где  $h^2$  – шаг дискретизации, а  $j = 1 \dots N$ ;  $N$  – число узлов на равномерной сетке.

Подставляя (6) в (5), получаем уравнение в явном виде:

$$\psi_{j-1} + 2 \cdot (h^2 \cdot E_j - 1 - h^2 \cdot V_j) \cdot \psi_j + \psi_{j+1} = 0 \quad (7)$$

Для решения трехдиагонального уравнения (7) был применен метод прогонки (алгоритм Томаса). Результаты численного решения стационарного уравнения Шредингера (5) для шарового кластера атомов алюминия радиусом 50 ат. ед. представлены на рис. 1.

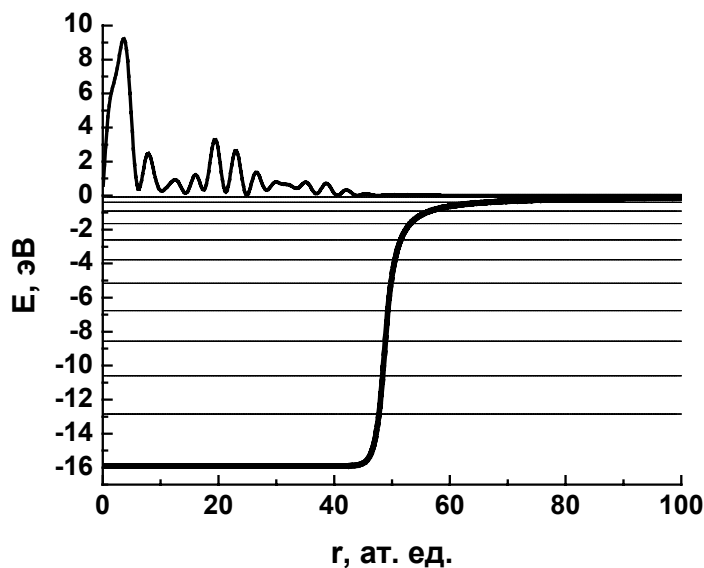


Рис. 1 Сплошной толстой линией обозначен потенциал кластера по радиальной координате, радиус кластера 50 ат. ед. Горизонтальные прямые – дискретные уровни энергии. Кривая в верхней области рисунка – квадрат волновой функции (в относительных единицах) для верхнего уровня.

### Глава 3

В третьей главе при помощи метода Распространения Волновых Пакетов исследуются процессы электронного обмена между атомной частицей и шаровым кластером атомов.

В первой части главы рассматривается статический случай, когда частица находится на фиксированном расстоянии от кластера атомов. При фиксированном расстоянии необходимо определить основные параметры перезарядки – энергетическое положение  $E$  и ширину атомного уровня  $\Gamma$ . Ширина уровня характеризует вероятность перехода электрона в единицу времени  $\Gamma \sim \frac{1}{\tau}$ , где  $\tau$  - время жизни электрона на атомном уровне. Энергетическое положение уровня иона  $H^-$  характеризует возможность электронного перехода. Электрон переходит с уровня иона только на тот дискретный уровень энергии внутри кластера, величина которого не превышает энергию ионного уровня. Для нахождения величины дискретных уровней энергии внутри кластера необходимо решить стационарное уравнение Шредингера (5), методы численного решения которого обсуждались во второй главе диссертации.

На рис. 2 показано развитие процесса электронного перехода для отрицательного иона водорода на расстоянии 10 ат. ед. от ближней границы кластера атомов алюминия радиусом 50 ат. ед.

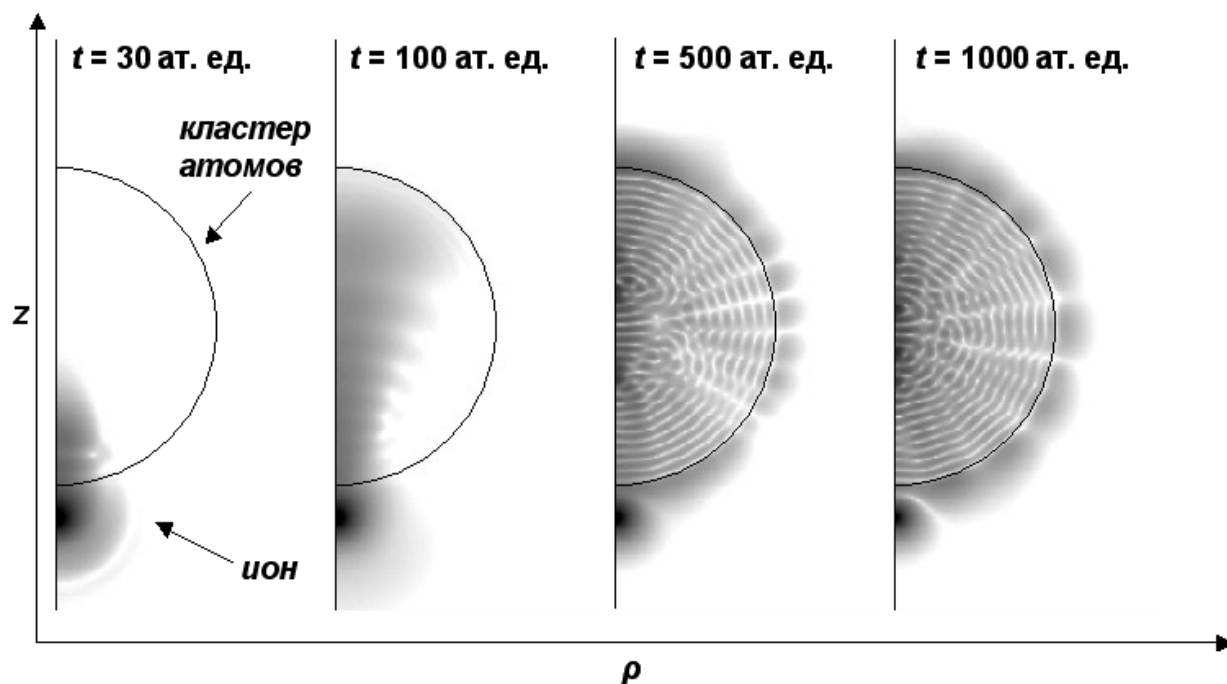
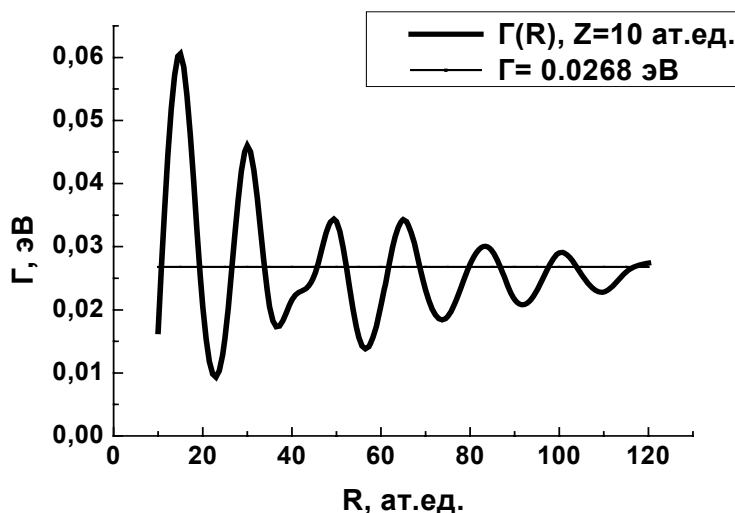


Рис. 2 Квадрат модуля волновой функции внешнего электрона иона  $H^-$ , находящегося на расстоянии 10 ат. ед. от кластера атомов радиусом 50 ат. ед. в различные моменты времени. Темные области соответствуют большей вероятности нахождения электрона.

Видно, что через время 30 ат. ед. после начала распространения происходит туннелирование электрона через потенциальный барьер, разделяющий ион и кластер атомов, но дискретная структура не проявляется, т.к. электрон, еще не успевает почувствовать конечные размеры кластера. Картина распределения волновой функции соответствует переходу электрона в полубесконечный металлический образец. После 100 ат. ед. времени уже проявляется дискретность энергии вдоль нормали к поверхности. На данном этапе, отразившись от дальней границы кластера, и продолжив распространение в обратном направлении электрон (волновой пакет) начинает интерферировать с волновым пакетом, идущим в прямом направлении. При этом распределение волнового пакета в кластере напоминает распределение в тонкой плёнке. На третьем этапе (от 500 ат. ед. времени) проявляется дискретность энергии вдоль радиальной координаты. Волновая функция электрона приобретает максимумы по обеим координатам  $r$ ,  $\theta$ . Распределение электронной плотности по каждой координате соответствует квадрату модуля волновой функции самого верхнего из доступных энергетических уровней кластера (рис. 1).

Также было изучено влияние размеров системы на процесс электронного обмена. Рис. 3 демонстрирует зависимость ширины уровня (т.е. эффективности электронного перехода) от радиуса кластера атомов, когда ион находится на фиксированном расстоянии 10 ат. ед. от поверхности кластера. Видно, что указанная зависимость ведет себя немонотонным образом при изменении радиуса кластера.



**Рис. 3** Зависимость ширины уровня иона от радиуса кластера, расстояние до кластера 10 ат. ед. Прямая линия – ширина уровня иона при перезарядке с массивным образцом  $\Gamma=0,0268$  эВ.

Качественное объяснение немонотонной зависимости ширины уровня иона от радиуса кластера атомов можно построить, опираясь на дискретность энергетических уровней электрона внутри кластера.

В рассматриваемой задаче, резонансное туннелирование доминирует, как основной механизм электронного перехода. Электрон переходит с уровня иона на ближайший дискретный уровень внутри кластера, энергия которого не превышает энергию атомного уровня. При этом эффективность туннелирования определяется разностью энергий этих уровней, что и объясняет немонотонную зависимость ширины уровня иона от радиуса кластера атомов.

Максимумы ширины уровня наблюдаются для тех значений радиуса кластера, при которых появляется новый доступный уровень энергии внутри кластера. В этот момент разность энергий между уровнем иона и ближайшим к нему уровнем кластера атомов минимальна. Следовательно, электронный переход осуществляется наиболее эффективно (наблюдается резонанс). Отметим, что результаты, представленные на рис. 3, явно демонстрирует квантово-размерный эффект при электронном обмене атомной частицы с кластером атомов.

На рис. 4 а, б показаны зависимости энергии и ширины атомного уровня от расстояния до поверхности кластера атомов.

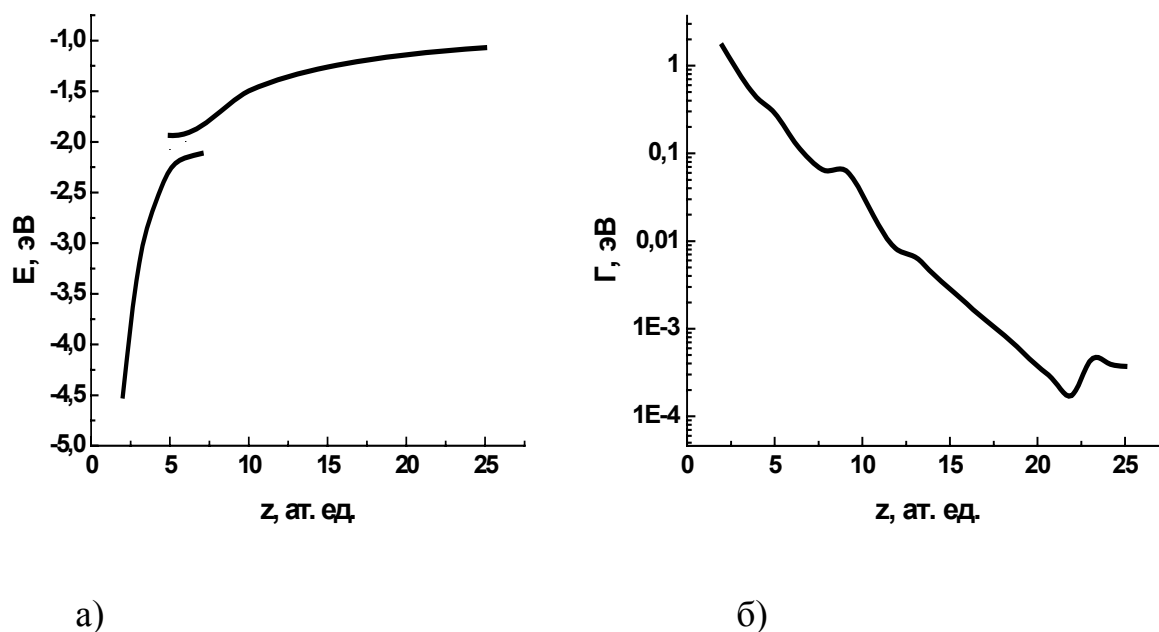


Рис. 4. а) Зависимость энергетического положения отрицательного иона водорода от расстояния до кластера атомов радиусом 50 ат. ед. б) Зависимость ширины уровня отрицательного иона водорода от расстояния до кластера атомов радиусом 50 ат. ед.

Из рис. 4 а, б можно заключить, что если следовать вдоль линий зависимости  $E(z)$  и  $\Gamma(z)$  в сторону меньших  $z$ , произойдет небольшой скачок энергии и изменение ширины в точке около 7 - 8 ат. ед. Эта точка соответствует пересечению ионного уровня с одним из дискретных уровней энергии внутри кластера атомов. Таким образом, энергетический уровень отрицательного иона водорода испытывает псевдопересечение с дискретными

уровнями энергии внутри кластера. Ширина уровня иона также испытывает резкий скачок при переходе через точку псевдопересечения.

Во второй части главы рассматривается динамический случай, когда ион  $H^-$  приближается к кластеру с постоянной, нормальной скоростью  $v$  по классической траектории вдоль линии, проходящей через центр кластера. Задачей было определить характер электронного перехода при столкновении иона  $H^-$  с кластером атомов.

Для рассматриваемых систем, в частности для полубесконечного массивного образца, справедливо приближение широкой зоны [14], в рамках которого можно показать, что динамика электронного обмена описывается кинетическим уравнением (КУ), где скорости электронных переходов задаются ширинами состояний частицы [15,16]:

$$dP_{KV}(t) = -\Gamma \cdot P_{KV}(t) \cdot dt, \quad (8)$$

где  $\Gamma$  – ширина атомного уровня, а  $P_{KV}(t)$  – вероятность выживания электрона на уровне атома.

С помощью метода РВП определяется автокорреляционная функция  $A(t)$  (формула (3)) и вероятность выживания  $P_{РВП}(t)$

$$P_{РВП}(t) = |A(t)|^2 \quad (9)$$

Сопоставляя результаты, полученные при помощи метода РВП с результатами расчета посредством КУ для кластера, мы исследуем влияние скорости налетающей частицы на характер электронного обмена и проявление квантово-размерного эффекта.

На рис. 5 представлена вероятность выживания иона ( $P_{РВП}(t)$ )  $H^-$  при его приближении к кластеру атомов как функция расстояния до поверхности  $z$  для различных скоростей соударения от 0.003 ат. ед. до 0.1 ат. ед.

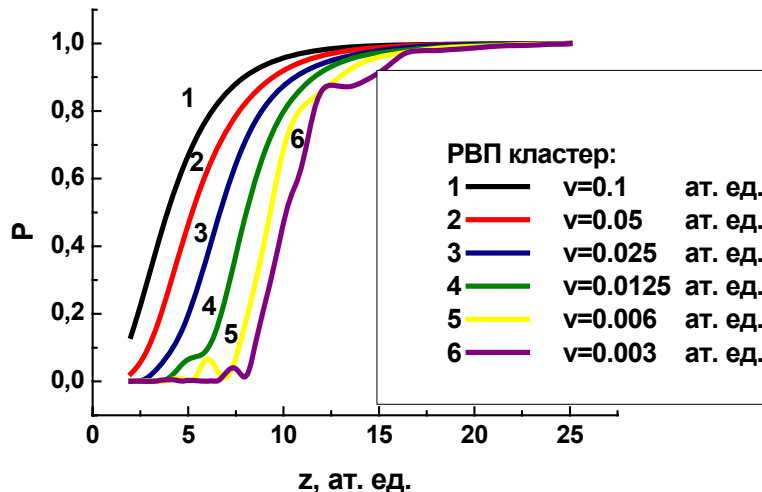


Рис. 5 Вероятность выживания иона  $H^-$  при его приближении к кластеру как функция расстояния до поверхности, радиус кластера 50 ат. ед.

Из рисунка видно, что скорость налетающей частицы существенно влияет на характер электронного обмена. Так, при больших скоростях налетающей частицы происходит экспоненциальный распад атомного состояния, а при малых – вероятность выживания иона испытывает осцилляции, т.е. кратковременный захват электрона движущимся атомом водорода.

На рис. 6 а, б показаны вероятности выживания иона  $H^-$  при его приближении к поверхности кластера при больших и малых скоростях соответственно. Сравниваются результаты расчетов метода РВП для кластера и результатов КУ для кластера и полубесконечного массивного образца.

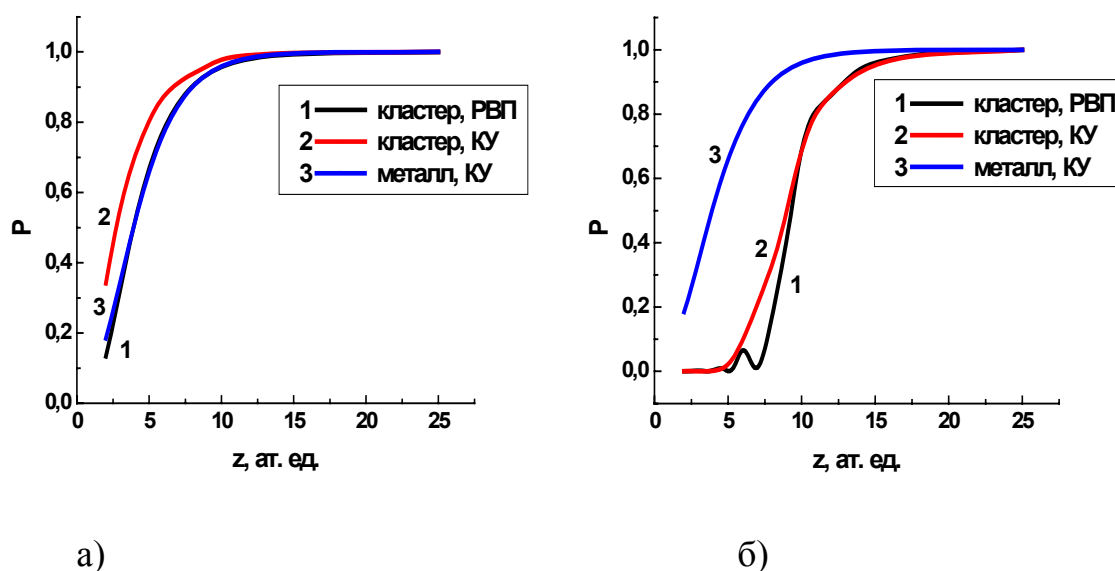


Рис. 6. а) Вероятность выживания иона  $H^-$  при его приближении к поверхности кластера. Сравнение результатов метода РВП и результатов кинетического уравнения (КУ) для кластера и массивного образца. Радиус кластера 50 ат. ед., скорость налетающей частицы 0.1 ат. ед. б) Вероятность выживания иона  $H^-$  при его приближении к поверхности кластера. Сравнение результатов метода РВП и результатов кинетического уравнения (КУ) для кластера и массивного образца. Радиус кластера 50 ат. ед., скорость налетающей частицы 0.006 ат. ед.

Из рис. 6 видно, что поведение динамической системы качественно отличается для различных диапазонов скоростей столкновения: характерные черты кластера атомов, обуславливающие проявление квантово-размерного эффекта, проявляются при малых скоростях столкновения; а при больших скоростях перезарядка с кластером атомов соответствует взаимодействию с поверхностью полубесконечного металлического образца.

## Глава 4

В четвертой главе при помощи метода Распространения Волновых Пакетов исследовалось влияние эффекта “параллельной скорости” на процесс электронного обмена при рассеянии отрицательного иона водорода на наносистемах (тонкий алюминиевый диск и кластер атомов).

В первой части главы изучалось влияние параллельной поверхности составляющей скорости отрицательного иона водорода  $v_{\parallel}$  при его скользящем рассеянии на островковой пленке. В качестве физической модели пленки был выбран тонкий алюминиевый диск. Были рассчитаны вероятности заселения различных состояний тонкого диска при медленном подлете к нему иона водорода с использованием метода РВП.

Волновая функция внешнего электрона, перешедшего в диск, дается выражением

$$\Psi_m(\rho, z, t) = \sum_n \int_0^{+\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} b(k_{\parallel}, k_{\perp}) \psi_{nk}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) J_0(k_{\parallel} \rho) e^{-iE(k_{\parallel}, k_{\perp})t}, \quad (10)$$

$$E(k_{\parallel}, k_{\perp}) = E_{nk} + \frac{k_{\parallel}^2}{2} \quad (11)$$

Здесь  $\psi_{nk}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  – собственные функции диска,  $E_{nk}$  – энергии уровней диска,  $J_0(k_{\parallel} \rho)$  – функция Бесселя,  $k_{\perp}$  и  $k_{\parallel}$  – компоненты волнового вектора электрона перпендикулярный и параллельный поверхности диска соответственно.

Представляет интерес вероятность перехода электрона на  $n$ -ый уровень тонкого диска, которая дается квадратом модуля коэффициента  $b(k_{\parallel}, k_{\perp})$  в уравнении (10). Поскольку внешний уровень иона водорода  $1s'$  обладает сферической симметрией, рассматривается только компонента с  $m=0$  ( $m$  – проекция электронного углового момента на ось симметрии). Метод РВП позволяет рассчитать эволюцию волновой функции электрона под действием потенциала атомного остова и потенциала диска. Используя этот метод, можно вычислить проекцию волновой функции электрона на волновую функцию тонкого диска на некотором, достаточно большом расстоянии  $\rho_0$  (таком, что влиянием потенциала атомного остова на этом расстоянии можно пренебречь, на практике  $\rho_0$  порядка 25 ат. ед.):

$$S_n(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{\infty} \rho d\rho \psi_{nk}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi(\rho_0, z, t), \quad (12)$$

Ее Фурье-образ имеет вид:

$$S_n(\omega) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} S_n(t) \quad (13)$$

Подставляя (10) в (12), а затем (12) в (13) и используя теорию вычетов, получаем:

$$|b(k_{\parallel}, k_{\perp})|^2 = \frac{k_{\perp}^2}{2\pi} |S_n(\omega)|^2, \quad (14)$$

где  $\frac{k_{\perp}^2}{2} = \omega - E_{nk}$ .

Волновая функция электрона описывается плоской волной. При наличии параллельной поверхности составляющей скорости иона водорода в системе отсчета, связанной с ионом, ее волновой вектор равен  $\vec{k} = (k_{\parallel}, k_{\perp})$ , а в системе отсчета, связанной с поверхностью -  $\vec{k} = (k_{\parallel} + v_{\parallel}, k_{\perp})$ . Используя теорему об обращении времени, можно получить вероятность образования отрицательных ионов водорода  $P^-$ :

$$P_{disk}^- = \frac{1}{2} \sum_n \int_0^{\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{|b(k_{\parallel}, k_{\perp})|^2}{2\pi} F(E_f - (E_{nk} + \frac{k^2}{2} + \frac{v_{\parallel}^2}{2} + kv_{\parallel} \cos \varphi)) \quad (15)$$

Здесь  $F$  – функция распределения Ферми, а  $E_f$  - энергия Ферми тонкого диска,  $\varphi$  - угол между волновым вектором  $\mathbf{k}$  и  $v_{\parallel}$ .

Во второй части главы исследовался эффект “параллельной скорости” при рассеянии иона  $H^-$  на шаровом кластере атомов алюминия.

С помощью метода РВП были вычислены вероятности перехода электрона на  $n$ -ый уровень кластера, которые определяются квадратом модуля коэффициента  $b(k_{\parallel}, k_{\perp})$ , при медленном подлете к нему отрицательного иона водорода. Также была рассчитана вероятность образования отрицательных ионов водорода при рассеянии ионов водорода на кластере атомов алюминия  $P^-$ :

$$P_{cluster}^- = \frac{1}{2} \sum_n \int_0^{\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \frac{|b(k_{\parallel}, k_{\perp})|^2}{2\pi} F(E_f - (E_{nl} + \frac{k^2}{2} + \frac{v_{\parallel}^2}{2} + kv_{\parallel} \cos \theta)) \quad (16)$$

Здесь  $F$  – функция распределения Ферми, а  $E_f$  - энергия Ферми кластера атомов,  $\theta$  - угол между волновым вектором  $\mathbf{k}$  и  $v_{\parallel}$ .

Таким образом, были получены зависимости вероятности формирования ионов  $H^-$  от величины параллельной поверхности составляющей скорости иона  $v_{\parallel}$  для тонкого диска и кластера атомов алюминия (рис. 7).



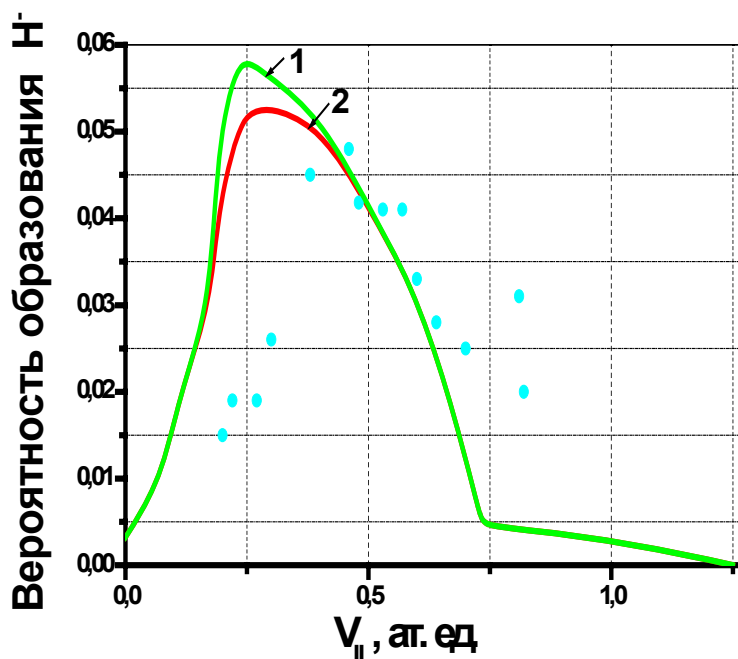


Рис. 7 Зависимость вероятности формирования ионов  $H^-$  от  $v_{||}$  при скользящем рассеянии.

Зависимость 1 – расчет в случае кластера, радиус кластера 50 ат. ед.; Зависимость 2 – расчет для тонкого диска, радиус диска 50 ат. ед., толщина диска 3 монослоя (ML), точки – экспериментальные данные (x20) для массивного образца Al [17].

Из рис. 7 видно, что с увеличением  $v_{||}$  вероятность формирования ионов  $H^-$  растет. Это можно объяснить тем, что, вследствие относительного движения атома и поверхности полубесконечного металлического образца, происходит смещение “сферы” Ферми (в случае тонкого диска и кластера “сфера” Ферми вырождается в набор “дисков” Ферми) и появляются возможности резонансного захвата электрона с уровней, которые не являлись резонансными в стационарном состоянии (рис. 8). При больших скоростях  $v_{||}$  фракция ионов  $H^-$  уменьшается, что связано с уменьшением числа резонансов. Рассчитанные для случая тонкого диска и кластера атомов зависимости вероятности формирования  $H^-$  от  $v_{||}$  по форме совпадают с экспериментальными данными для полубесконечного металлического образца. Однако они лежат несколько выше (расчет приводит к несколько большим значениям фракции), и наблюдается смещение максимума в сторону меньших скоростей  $v_{||}$ . Это объясняется тем, что энергия Ферми у наносистем больше, чем у полубесконечного металлического образца. Так энергия Ферми для диска радиусом 50 ат. ед., толщиной 3 ML равна 13.78 эВ (энергия отсчитывается от дна зоны), а энергия Ферми для кластера радиусом 50 ат. ед. равна 14.12 эВ. Для сравнения энергия Ферми для полубесконечного металлического образца Al – 11.65 эВ.

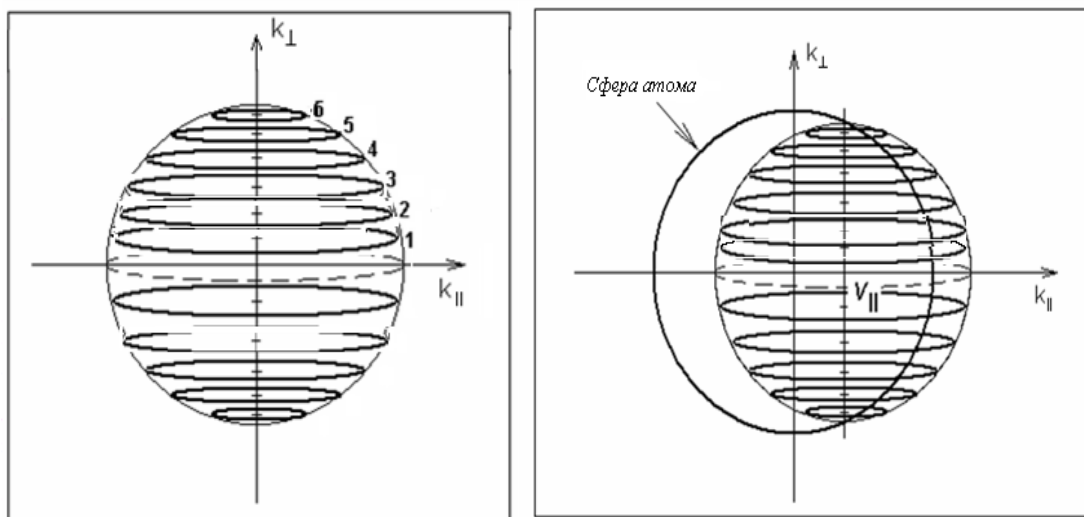


Рис. 8 Смещение набора “дисков” Ферми для тонкого диска в системе отсчета, связанной с атомной частицей, движущейся параллельно поверхности со скоростью  $v_{\parallel}$ . Радиус диска 50 ат. ед., толщина 3 МЛ.

В **заключении** представлены выводы из диссертационной работы.

- Показано что, что переход электрона с отрицательного иона водорода на кластер атомов алюминия в статическом случае характеризуется формированием дискретного распределения плотности волновой функции, содержащей максимумы по координатам  $(r, \theta)$ , что является следствием интерференции волновых пакетов.
- Продемонстрировано проявление квантово-размерного эффекта для электронного перехода между ионом и кластером атомов при изменении радиуса кластера.
- Установлено, что в динамическом случае при электронном обмене между отрицательным ионом водорода и кластером атомов алюминия в зависимости от скорости налетающей частицы кластер может вести себя как массивный образец или как квантовая структура с дискретностью энергии по двум координатам.
- Получена зависимость вероятности формирования отрицательных ионов водорода при скользящем рассеянии ионов на тонком диске и кластере атомов Al от величины параллельной поверхности составляющей скорости. Вид рассчитанной зависимости имеет куполообразную форму, соответствующую экспериментальным данным для массивного образца. Абсолютная величина и

положение максимума на кривой зависимости выхода  $H^-$  определяется уровнем Ферми в рассматриваемой наносистеме.

### **Список цитируемой литературы**

1. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел. // Под ред. Фирмэнса Л, Вэнника Дж., Декейсера В. – М.: Мир, 1981 – 286 с.
2. Hongxiao Shao, Langreth D.C. // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 49. – P. 13948.
3. Urazgil'din I.F., Gusev M.Yu., Klushin D.V. // Phys. Rev. B. – 1994. – Vol. 50. – P. 5582.
4. Guillemot L., Esaulov V.A. // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69. – P. 33306.
5. Nordlander P., Tully J.C. // Phys. Rev. Lett. – 1988. – Vol. 61. – P. 990.
6. Hecht T., Winter H., Borisov A.G., Gauyacq J.P. etc. // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 84. – P. 2517.
7. Borisov A.G., Winter H. // Z. Phys. D: At., Mol. Clusters. – 1996. – Vol. 37. – P. 253.
8. Anderson P.W. // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 124. – P. 41.
9. Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Rev. Lett. A. – 1996. – Vol. 218. – P. 99.
10. Gainullin I.K., Usman E.Yu., Urazgil'din I.F. // Nucl. Instrum. Meth. – 2005. – Vol. 232. – P. 22.
11. Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 59. – P. 10935.
12. Brako R., Newns D.M. // Rep. Prog. Phys. – 1989. – Vol. 52. – P. 655.
13. Анисимов С.И., Капелович Б.Л., Перельман Т.Л. // ЖЭТФ. – 1974. – Vol. 66. – С. 776.
14. Yu M.L., Lang N.D. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 50. – P. 127.
15. Уразгильдин И.Ф. // Изв. РАН, Сер. Физ. – 1996. – № 60. – С. 744.
16. Henriët A., Mashou-Seeuws F. // Chem. Phys. Lett. – 1983. – Vol. 101. – P. 535.
17. Winter H. etc // Nucl. Instr. Meth. B. – 1991. – Vol. 58. – P. 379.

### **Список публикаций по теме диссертации**

1. Сатарин К.К., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К., Уразгильдин И.Ф. Особенности электронного обмена между ионом и цепочкой атомов водорода // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2007. – № 7. – С. 98 - 102.

2. Магунов А.А., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К., Уразгильдин И.Ф. Квантово-размерный эффект при электронном обмене между отрицательным ионом водорода и кластером атомов алюминия // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2008. – № 9. – С. 63 - 68.
3. Gainullin I.K., Satarin K.K., Shestakov D.K. and Urazgildin I.F. Quantum size effect during collision between ion and thin metal disk // Proceedings of the 22-th International Conference on Atomic Collisions in Solids. – Berlin, Germany, 21-26 July – 2006 – P. 46.
4. Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К. Особенности электронного обмена при скользящем рассеянии ионов водорода  $H^-$  на тонком металлическом диске алюминия // Тезисы докладов 15-й Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых “Ломоносов – 2008”. – Москва: Апрель 8 -11 2008., секция “Физика”, подсекция “Твердотельная наноэлектроника”. – Т.1 – С. 27 - 28.
5. Shestakov D.K., Magunov A.A, Gainullin I.K., Urazgildin I.F. Electron exchange between an  $H^-$  ion and a spherical cluster of aluminum atoms // Proceedings of the 23-th International Conference on Atomic Collisions in Solids. – Hans Merensky Estate, Phalaborwa, South Africa, 17-22 August – 2008 – P. 50.