

Переход электрона вдоль атомной цепочки¹

Сатарин Кирилл Константинович²

студент

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: satarin@ph-elec.phys.msu.ru

Введение

Электронный обмен является одним из важнейших процессов, происходящих при взаимодействии атомной частицы с поверхностью твердого тела [3,4,5,6]. Он определяет зарядовое состояние рассеянных или распыленных с поверхности частиц, которое содержит информацию как о составе и структуре, так и об электронных свойствах поверхности. Кроме того, процесс перезарядки оказывает существенное влияние на многие явления, происходящие на поверхности при вторичной ионной эмиссии, рассеянии, десорбции, катализе, модификации поверхности.

При электронном обмене важную роль играет резонансное туннелирование [7]. 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 [8,9]. В данной работе изучается туннелирование электрона вдоль цепочки атомов водорода. В частности, выясняется характер распространения электрона, влияние межатомного расстояния на эффективность электронного перехода и производится сравнение с переходом электрона в массивный образец (полубесконечный металл). Выясняется различие в переходе электрона вдоль цепочек разных атомов – производится сравнение электронного транспорта вдоль цепочки атомов водорода и алюминия. Исследуется влияние неоднородности цепочки на характер электронного транспорта.

Постановка задачи и методика решения

Изучалась система, представляющая собой линейную цепочку атомов водорода и алюминия. В начальный момент времени электрон находился на первом атоме цепочки. Для упрощения вычислений был рассмотрен цилиндрически симметричный случай с нулевой проекцией углового момента внешнего электрона \hbar на ось симметрии. Исследование проводилось численно с использованием метода распространения волновых пакетов, не использующим теорию возмущений. Метод распространения волновых пакетов позволяет вычислять зависимость волновой функции частицы от времени. Зная зависимость волновой функции от времени можно вычислить величины, характеризующие электронный транспорт в квантовой системе.

Результаты

По результатам проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- при небольших межатомных расстояниях осуществляется интенсивный переход электрона на цепочку атомов. При этом распределение электрона по атомам цепочки носит дискретный характер, но усредненная координата нахождения электрона изменяется монотонно и непрерывно.
- эффективность электронного транспорта вдоль эквидистантной цепочки атомов определяется расстоянием между соседними атомами цепочки и экспоненциально убывает с ростом периода цепочки.

¹ Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 06-02-16802, 05-02-17870, 05-02-17227), INTAS (грант 04-5607) и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых (МК-10142.2006.2).

² Автор выражает признательность профессору, д.ф.м.н. Уразгильдину И.Ф. за помощь в подготовке тезисов.

- при смещении атомов цепочки или замене одного атома инородным атомом, электронный переход блокируется в месте возникновения неоднородности, вследствие нарушения резонансных условий.
- переход электрона вдоль цепочки атомов алюминия осуществляется на полпорядка эффективнее, чем переход электрона вдоль цепочки атомов водорода.

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 06-02-16802, 05-02-17870, 05-02-17227), INTAS (грант 04-5607) и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых (МК-10142.2006.2).

Литература

1. Goldberg, A., Schey, H.M., and Schwartz, J.L., American Journal of Physics, vol. **35**, (1967) pp. 177–186.
2. Galbraith I., Ching Y.S. and Abraham E., American Journal of Physics, vol. **52**, (1984), pp. 60–68.
3. L. Guillemot and V. A. Esaulov, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 4552.
4. L. Guillemot and V. A. Esaulov, Phys. Rev. B **69** (2004) 33306.
5. Hongxiao Shao and David C. Langreth, Phys. Rev. B **49** (1994) 13948.
6. F. Urazgil'din, M. Yu. Gusev, and D. V. Klushin, Phys. Rev. B **50**, (1994) 5582.
7. P. Nordlander, J.C. Tully Phys. Rev. Lett. **61**. (1988) 990.
8. T. Hecht, H. Winter, A.G. Borisov, J.P. Gauyacq etc. Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2517.
9. A.G. Borisov, H. Winter Z. Phys. D: At., Mol. Clusters **37** (1996) 253.
10. V.A. Ermoshin, A.K. Kazansky Phys. Lett. A **218** (1996) 99.
11. V.A. Ermoshin and A.K. Kazansky Phys. Lett. **59** (1999) 10935.
12. Sergey V. Faleev, Francois Leonard, Derek A. Stewart and Mark van Schilfgaarde, Phys Rev B **71** (2005) 195422.
13. Zhongqin Yang, Alan Tackett, and Massimiliano Di Ventra, Phys. Rev. B **66** (2002) 41405.
14. W. Z. Shangguan, T. C. Au Yeung, Y. B. Yu, and C. H. Kam, Phys. Rev. B **63** (2001) 235323.
15. W. Z. Shangguan, T. C. Au Yeung, Y. B. Yu, and C. H. Kam, Phys. Rev B **69** (2004) 153303.
16. Stephen B. Haley and Paul Erdos, Phys. Rev. B **45** (1992) 8572.
17. R. T. Senger, S. Tongay, E. Durgun, and S. Ciraci, Phys. Rev. B **72** (2005) 75419.
18. A. Calzolari, N. Marzari, I. Souza, and Marco Buongiorno Nardelli, Phys Rev B **69**, (2004), 35108.