

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.19+539.2

ВЛИЯНИЕ АДОРБИРОВАННОГО ВОДОРОДА НА СТРУКТУРУ
ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛАО. С. Еркович, В. В. Комаров, А. М. Попова, О. Мельсхаймер, Х. Нейман
(НИИЯФ)

Рассматривается взаимодействие положительных ионов водорода с поверхностью металла методом анализа структуры электронного газа металла в присутствии протона. Расчеты проводились в рамках теории многочастичных функционалов плотности. Рассчитаны энергетические характеристики взаимодействия иона водорода с поверхностью и пространственное распределение электронного газа в системе «металл—адатом».

Целью настоящей работы было теоретическое исследование пространственной структуры электронного газа металла вблизи адсорбированного иона водорода, а также получение количественных характеристик взаимодействия протона с металлом. Традиционно используемые для решения этой задачи подходы требуют внесения в физическую модель рассматриваемого явления дополнительных предположений относительно влияния обмена и корреляции на ее свойства, что значительно затрудняет применение этих подходов для анализа систем, недостаточно изученных экспериментально [1, 2]. Теория многочастичных функционалов плотности [3—5] позволяет описывать обменно-корреляционные эффекты в системах взаимодействующих частиц, не заменяя точный гамильтониан системы модельным. В ее основу положено описание квантовых систем N частиц с помощью многочастичных функций плотности $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$, представляющих собой диагональные элементы нормированных на $C_N^m = \frac{N!}{m!(N-m)!}$ не зависящих от спина m -частичных матриц плотности. В соответствии с обобщенной теоремой Хоэнберга—Кона [3] полная энергия E_0 основного состояния ферми-системы представляет собой однозначный функционал $n_m(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_m)$, минимум которого реализуется на функции, соответствующей пространственному распределению частиц в основном состоянии системы. Сформулированный вариационный принцип был применен к анализу взаимодействия медленных ионов водорода с поверхностью металла. Система «металл—протон» рассматривалась в адиабатическом приближении. Полную энергию основного состояния электронного газа в этом случае целесообразно рассматривать как функционал двухчастичной функции плотности:

$$E_0 = E[n_2] = T[n_2] + \frac{1}{N-1} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 (V(\mathbf{r}_1) + \\ + V(\mathbf{r}_2)) n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) n_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

где $T[n_2]$ — функционал кинетической энергии, для которого использовалось выражение

$$T[n_2] = \frac{\pi}{2(N-1)} \int dr_1 dr_2 \left\{ \frac{3}{5} (18\pi^4)^{1/3} n_2^{4/3}(r_1, r_2) + \right. \\ \left. + \left[\frac{5}{576} ((\nabla_1 n_2(r_1, r_2))^2 + (\nabla_2 n_2(r_1, r_2))^2) n_2^{-1}(r_1, r_2) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{480} ((\Delta_1 + \Delta_2) n_2(r_1, r_2)) \right] + O((\nabla n_2(r_1, r_2))^4) \right\}. \quad (1)$$

Здесь $W(r_1, r_2) = |r_1 - r_2|^{-1}$ — потенциал взаимодействия электронов между собой; потенциал $V(r) = V_0(r) + V_1(r)$ описывает взаимодействие электронов с ионами кристаллической решетки и протоном. Потенциал кристаллической решетки $V_0(r)$ рассматривается в модели желе, предполагающей, что положительный заряд ионов остова равномерно распределен по объему металла с плотностью n ; $V_1(r) = \frac{1}{|r - R|}$, где R — радиус-вектор протона, рассматривался нами как возмущение.

Подставляя в уравнение Эйлера—Лагранжа

$$\frac{\delta}{\delta n_2(r_1, r_2)} (E[n_2] - \mu_2 \int dr_1 dr_2 n_2(r_1, r_2)) = 0$$

разложения $E[n_2]$, $n_2(r_1, r_2)$ и постоянной Лагранжа μ_2 в ряд теории возмущений и ограничиваясь двумя первыми членами разложения, можно получить уравнения

$$\frac{1}{N-1} (V_0(r_1) + V_0(r_2)) + W(r_1, r_2) + \frac{\delta T[n_2]}{\delta n_2(r_1, r_2)} \Big|_{n_2(r_1, r_2) = n_2^{(0)}(r_1, r_2)} = \mu_2^{(0)}, \\ \frac{1}{N-1} (V_1(r_1) + V_1(r_2)) + \\ + \frac{1}{2} \int dr'_1 dr'_2 n_2^{(1)}(r'_1, r'_2) \frac{\delta^2 T[n_2]}{\delta n_2(r_1, r_2) \delta n_2(r'_1, r'_2)} \Big|_{n_2(r_1, r_2) = n_2^{(0)}(r_1, r_2)} = \mu_2^{(1)}, \quad (2)$$

где $\mu_2^{(1)}$ и $n_2^{(1)}(r_1, r_2)$ представляют собой поправки первого порядка к постоянной Лагранжа $\mu_2^{(0)}$ и двухчастичной функции плотности $n_2^{(0)}(r_1, r_2)$ невозмущенной системы.

Численное решение уравнения (2) проводилось с учетом выражения (1) для функционала $T[n_2]$; для описания характеристик невозмущенной системы использовались результаты, полученные в вариационном подходе в работе [4].

В соответствии с теоремой Гелл-Манна—Фейнмана [1] энергия взаимодействия протона с поверхностью металла удовлетворяет соотношению

$$U(r) = - \left\{ V_0(r) + \frac{1}{N-1} \int dr_1 dr_2 n_2^{(0)}(r_1, r_2) \left(\frac{1}{|R - r_1|} + \frac{1}{|R - r_2|} \right) \right\} + \\ + \frac{1}{2(N-1)} \int dr_1 dr_2 n_2^{(1)}(r_1, r_2) \left(\frac{1}{|R - r_1|} + \frac{1}{|R - r_2|} \right).$$

Результаты численного расчета, описывающего взаимодействие протона с поверхностью вольфрама ($n = 56,2 \cdot 10^{-3}$ а.е.), представлены на рис. 1, где z — расстояние между протоном и поверхностью металла; видно, что при $z = 1,01$ а.е. $U(R)$ имеет минимум, соответствующий связанному состоянию протона на поверхности металла с энергией связи $E_b = 10,1$ эВ; на больших ($z > 4$ а.е.) расстояниях от поверхности

$U(R)$ ведет себя как классический потенциал изображения $U'(R)$, показанный на рисунке штриховой линией.

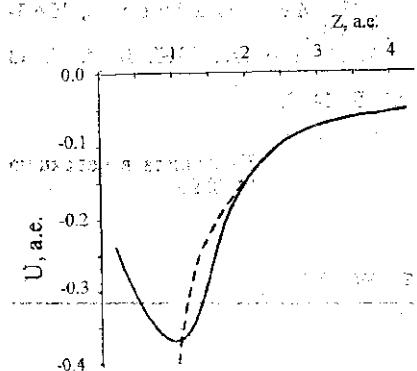


Рис. 1. Потенциальная энергия взаимодействия положительного иона водорода с поверхностью вольфрама

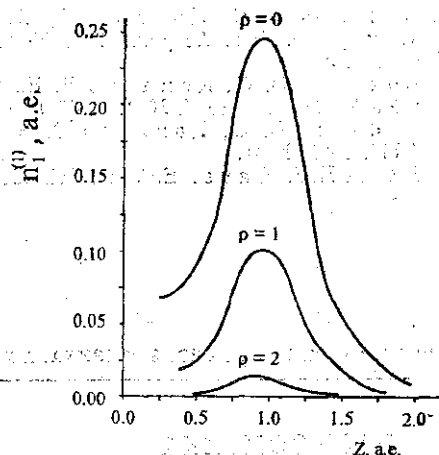


Рис. 2. Пространственное распределение индуцированного заряда вблизи протона, связанного на поверхности вольфрама

Расчет плотности индуцированного заряда

$$n_1^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{2}{N-1} \int d\mathbf{r}' n_2^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

выполнен для случая, когда протон находится в связанном состоянии вблизи поверхности вольфрама ($z=1,01$ а.е.) и представлен на рис. 2. При расчете использовалась цилиндрическая система координат с осью Oz , направленной в вакуум перпендикулярно поверхности металла и проходящей через точку, где находится протон; начало координат лежит в плоскости поверхности; $\rho = \sqrt{r^2 - z^2}$. В таблице представлены значения энергий связи ионов (E_p) и атомов (E_a) водорода с поверхностью вольфрама, а также энергии возбуждения колебательных уровней протона в поле поверхности металла (E_{vibr}) и положения равновесия протона (z_0). Сравнение полученных нами значений с данными эксперимента и результатами, полученными в рамках модели желе в традиционном одночастичном методе функционалов плотности, показывает, что метод многочастичных функционалов плотности, обеспечивая корректный учет обменнокорреляционных эффектов, обладает значительно большими возможностями по сравнению с одночастичным подходом.

Параметры	Теория (настоящая работа)	Эксперимент [6]	Теория [1]
E_p , мэВ	1,01	11,3 (W(100)) 10,3 (W(110))	9
E_a , мэВ	2,2	3,4 (W(100)) 3,0 (W(110))	0,7
$E_{\text{вибр}}$, мэВ	168	—	—
z_0 , а.е.	10,1	—	1,08

1. Ying S. C., Smith J. R., Kohn W. // Phys. Rev. 1975. B11, N 4. P. 1483.
2. Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density Functional Theory. Springer—Verlag, 1990.
3. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М., Борзилов В. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1994. № 2. С. 33 (Moscow University Phys. Bull. 1994. N 2. P. 31).
4. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М., Мельсхаймер О., Нейман Х. // Там же. 1995. № 4. С. 42 (Ibid. 1991. N 4. P. 39).
5. Еркович О. С., Комаров В. В., Попова А. М. // Там же. 1995. № 4. С. 33 (Ibid. 1995. N 4).
6. Herlt H.-J., Bauer E. // Surf. Sci. 1986. 175, N 21. P. 1483.

Поступила в редакцию
14.02.96

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1996. № 5

РАДИОФИЗИКА

УДК 621.3.09:621.373.1

ВОЗБУЖДЕНИЕ МЕДЛЕННЫХ СОЛИТОНОВ ПРИ НЕЛИНЕЙНОМ ТУННЕЛИРОВАНИИ СИГНАЛОВ

Ю. Н. Карамзин, С. В. Поляков, А. П. Сухоруков

(кафедра радиофизики)

Рассмотрен эффект распространения сигналов в волноводах, заполненных средой с кубической нелинейностью, на запредельной частоте. С помощью численного моделирования показано, что мощная волна сдвигает критическую частоту волновода. Вследствие этого наблюдается туннелирование одного или нескольких медленных солитонов, не совпадающих по частоте с возбуждающим сигналом.

1. Введение

Формирование солитонов огибающей является объектом исследований в различных областях физики. Возбуждение солитонов вдали от резонансных и критических частот описывается нелинейным уравнением типа Шрёдингера (НУШ) (см., напр., [1]). Однако в волноводах и периодических структурах (одномерных цепочках, фильтрах) существуют частотные области непропускания сигнала, в которых возбуждается отраженная волна и амплитуда падающей волны затухает с расстоянием. Если среда имеет нелинейность, то граничная частота за счёт эффектов самовоздействия сдвигается и спектр сигнала может попасть в полосу нелинейного пропускания. Таким образом, сигнал может распространяться там, где в линейном случае он экспоненциально затухает. Данный эффект получил название нелинейного туннелирования [2]. Следует ожидать, что входящий в среду импульс разбивается на ряд субимпульсов, принимающих форму медленных солитонов. Изучению механизма возбуждения медленных солитонов на основе численного решения краевой задачи для уравнения НУШ и посвящена настоящая работа.