01

Об определении эффективной фрактальной размерности нанопокрытий с помощью магнитного поля

© С.Н. Григорьев, А.М. Мандель, В.Б. Ошурко, Г.И. Соломахо

Московский государственный технический университет „СТАНКИН“
E-mail: vbo08@yandex.ru

Поступило в Редакцию 4 июля 2011 г.

Метод короткодействующего потенциала, изначально построенный для трехмерного случая, обобщен на евклидовы пространства произвольной (в том числе нецелевой) размерности. На основе данного метода выводится трансцендентное уравнение для энергии связи электрона в суперпозиции поля n-мерной δ-ямы и внешнего магнитного поля. Осуждается возможность экспериментального определения фрактальной размерности нанопокрытия по характеру зависимости работы выхода поверхностного электрона от напряженности магнитного поля с помощью современных атомно-силовых микроскопов.

Фрактальный характер свободной поверхности твердого тела и различные методы его описания обсуждаются в связи с задачами трибологии и контактной механики уже достаточно давно (см., например, монографии [1,2] и цитируемые там многочисленные первоисточники). Ясно, что и к нанопокрытиям, т.е. тончайшим (от одного до нескольких атомных размеров) слоям одного вещества, покрывающим поверхность другого, это относится в полной мере. Подобные покрытия, обладая целым рядом замечательных свойств, к сожалению, недолговечны. Как правило, физические свойства материала покрытия резко контрастируют со свойствами подложки. Разумеется, прочность и износостойкость нанопокрытия в значительной мере обусловлены связностью частиц и образуемых ими кластерных структур. Последние факторы, в свою очередь, характеризует эффективная фрактальная размерность среды (при всей неоднозначности этого понятия [3]).

Представляет интерес, как эта величина „чувствуется“ на уровне частиц. Можно ли ее определить, изучая поведение отдельных электронов поверхностного слоя в управляемых внешних полях? Насколько нами известно, ранее так вопрос еще никем не ставился. Разумеется, реальный электрон движется в реальном трехмерном пространстве. Однако, как известно, эффективная масса электрона в твердом теле может быть на один-два порядка меньше массы реального электрона [4], и соответственно дебройлевская длина во столько же раз больше. В такой ситуации „глобальная структура“ приповерхностной области вполне может влиять и на поведение отдельного электрона.

Рассмотрим связанный электрон, входящий в состав материала нанопокрытия. Точное определение волновой функции такого электрона — довольно серьезная проблема, далекая пока от окончательного решения. Поэтому связывающий электрон потенциал будем моделировать наиболее простым способом — короткодействующим полем n-мерной δ-ямы. Это, видимо, не лучший способ описания валентного электрона в твердом теле (см., например, [5]), но влияние внешнего поля на энергию связи передает вполне адекватно [6,7]. Именно величина n моделирует окружение электрона и связана с фрактальной размерностью. Точный характер этой связи нас в данной постановке даже не интересует; важны лишь достаточно простой для практического определения способ измерения этого параметра и установление его корреляционной связи с износостойкостью нанопокрытия. δ-яма — известный способ аппроксимации потенциала многоэлектронного атома (особенно отрицательного) иона, широко распространенный в квантовой физике [8].

В методе потенциала нулевого радиуса [9] притягивающий δ-потенциал не вводится непосредственно в уравнение Шредингера, а учитывается граничным условием в нуле. В трехмерном случае, для которого изначально и развивался этот метод, упомянутое условие имеет вид

$$\psi^{(3)} \approx_{R\to 0} A(R^{-1} - a^{-1}), \tag{1}$$

где A — несущественная для нас постоянная, R — радиальная переменная, a — длина рассеивания $a = \hbar(-2mW_0)^{-1/2}$, $W_0 < 0$ — энергия связи электрона в отсутствие внешнего поля, m — его масса, $\hbar$ — постоянная Планка. Асимптотика (1) представляет собой два первых члена разложения функции Грина в нуле.

В магнитном поле соответствующая асимптотика функции Грина в нуле для рассматриваемого пока трехмерного случая построена в работе [10], но для бесспиновой частицы. В [11] учтено взаимодействие спина электрона с внешним магнитным полем. В основном состоянии спин направлен против поля ($s = -1/2$). Строго говоря, здесь речь идет о пространственной части функции Грина; есть еще и спиновая часть, являющаяся решением уравнения Паули. Подчеркнем, что нецелая размерность относится только к характеру движения электрона. Магнитное поле и спин определены в обычном трехмерном евклидовом пространстве — геометрии, соответствующей обычной нерелятивистской квантовой механике.

Основная идея описываемого метода состоит в том, что внешнее поле не меняет асимптотику (1). Именно из этого условия получают зависимость энергии связи W от внешнего поля. Сопоставляя (1) с приведенной в [11] асимптотикой, получаем трансцендентное уравнение для энергии связанного уровня во внешнем магнитном поле:

$$1 = \sqrt{\widetilde{w}} - \frac{h}{2\pi^{1/2}} \int\limits_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\tau}} \left\{ \left[1 - \exp(-h\tau)\right]^{-1} - \frac{1}{h\tau} \right\} \exp(-\widetilde{w}\tau). \qquad (2)$$

В (2) использованы „естественные единицы“. Расстояние удобно нормировать на длину рассеивания (2) (или, другими словами, на дебройлевскую длину): $r = R/a$. Энергию уровня можно выражать в единицах $|W_0|$: $w = W/|W_0|$. Интенсивность магнитного поля целесообразно характеризовать, соотнося энергию циклотронного кванта с энергией невозмущенного уровня $h = \hbar e \mu_0 H/m|W_0| = \hbar\omega_H/|W_0|$; e — заряд электрона, H — напряженность магнитного поля, μ_0 — магнитная постоянная, $s = \mp 1/2$ — спиновая переменная. Кроме того, заметим,что $(s + 1/2)\hbar\omega_H$ — энергия вакуума в магнитном поле, т. е. граница сплошного спектра для электрона [10]. В экспериментах по ионизации проявляется именно разность энергии вакуума и энергии связи W, так как электрон переходит из связанного состояния в сплошной спектр в магнитном поле. В нормированных единицах энергия ионизации $\widetilde{w} = (s + 1/2)h - w$.

Изложенная программа допускает обобщение на пространство произвольной размерности, в котором движутся электроны. Ограничимся (с запасом) случаем $n \leqslant 4$. Граничное условие в отсутствие магнитного поля, соответствующее (1), —

$$\psi^{(n)} \approx_{r\to 0} A\left[r^{2-n} + 2^{2-n}\Gamma\left(1-\frac{n}{2}\right)\Gamma^{-1}\left(\frac{n}{2}-1\right)\right], \tag{3}$$

где Γ — гамма-функция Эйлера. Видим, что особенность имеет место только при $n < 2$; в противном случае первый член можно отбросить. Если $n = 2$, особенность функции Грина имеет логарифмический характер

$$\psi^{(2)} \approx_{r\to 0} A\big[\ln(r) - \ln 2 + \gamma\big], \tag{4}$$

где γ — постоянная Эйлера.

При наличии магнитного поля асимптотика функции Грина в нуле может быть представлена таким образом ($n \neq 2$):

$$\psi^{(n)} \approx_{r\to 0} A\Bigg\{r^{2-n} + 2^{2-n}\Gamma\left(1-\frac{n}{2}\right)\Gamma^{-1}\left(\frac{n}{2}-1\right)\widetilde{w}^{n/2-1}$$
$$+ 2^{2-n}\left(\frac{n}{2}-1\right)\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)$$
$$\times \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right)\frac{h}{\pi}\int\limits_0^\infty d\tau\,\tau^{1-n/2}\left[\big(1-\exp(-h\tau)\big)^{-1} - (h\tau)^{-1}\right]\exp(-\widetilde{w}\tau)\Bigg\}. \tag{5}$$

Сравнивая (3) и (5), получаем после простых преобразований обобщение трансцендентного уравнения (3) на пространства произвольной размерности

$$\xi\left(2-\frac{n}{2}, \frac{\widetilde{w}}{h}\right) + \frac{h^{1-n/2}}{n/2-1} = 0, \tag{6}$$

где $\xi(s, v)$ — обобщенная дзета-функция Римана (например, [12]).

Численное решение уравнения (6) представлено на рис. 1, 2. На рис. 1 показана зависимость h в логарифмическом масштабе от аргумента дзета-функции $x = \widetilde{w}/h$. Рис. 2 иллюстрирует зависимость величины $\widetilde{w} - 1 - h/2$ (отклонения энергии связанного уровня от линейной функции h) в том же логарифмическом масштабе от x

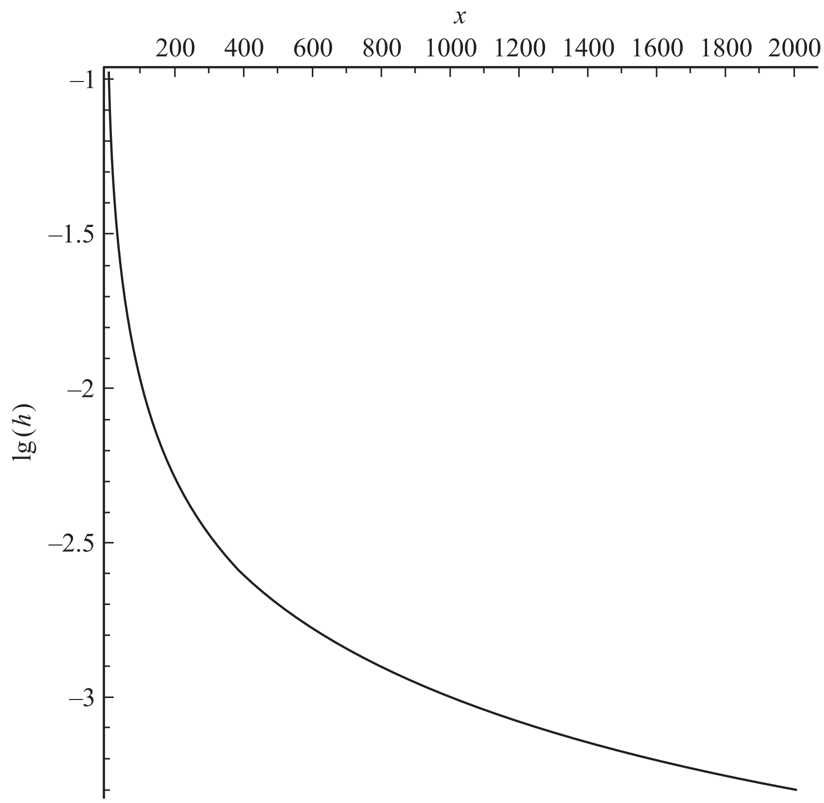

Рис. 1. Зависимость отношения энергии циклотронного кванта к энергии связанного уровня в логарифмическом масштабе от аргумента дзета-функции x в формуле (6).

при различных значениях фрактальной размерности n. Видим, что фрактальная размерность, в принципе, определяется по характеру отклонения $\widetilde{w}(h)$ от линейной зависимости в магнитном поле. Саму энергию связанного уровня можно измерить, например определяя работу выхода поверхностных электронов в ходе фотоэффекта. Такую возможность, в принципе, предоставляют современные методы атомно-силовой микроскопии (АСМ) (например, [13]). С учетом того, что

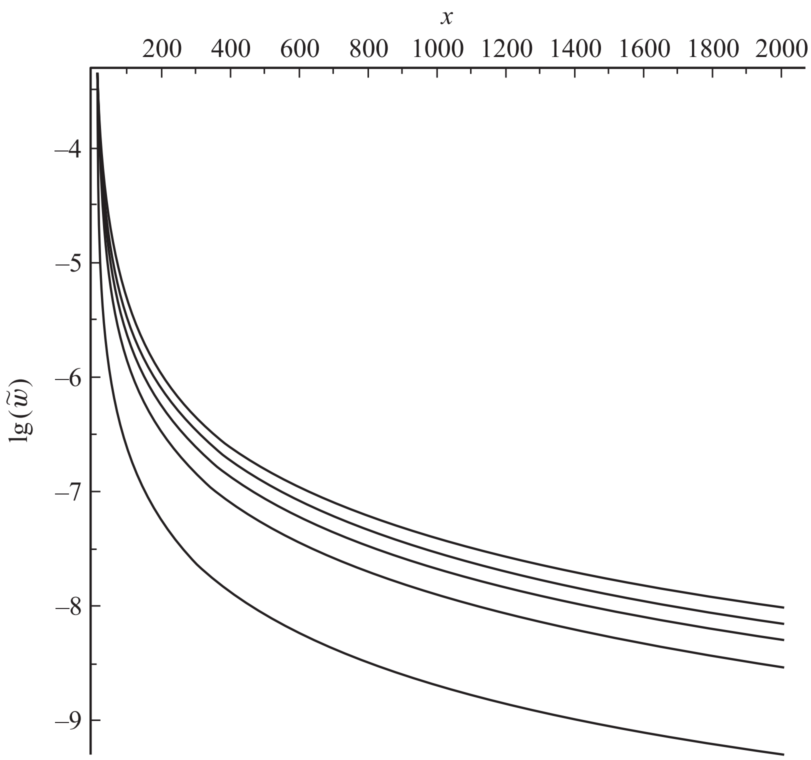

Рис. 2. Зависимость десятичного логарифма энергии связи электрона от аргумента дзета-функции x в формуле (6) при различных значениях эффективной фрактальной размерности n. Последовательно сверху вниз $n = 3.9$, 3.4, 3, 2.6, 2.1.

магнитное поле в современных АСМ достигает значений $B \sim 1$ T [13], а эффективная масса электрона в некоторых полупроводниках с простой зонной структурой $m^* \sim 10^{-2} - 10^{-1} m_e \sim 10^{-32} - 10^{-31}$ kg, значение h можно довести до $\sim 0.01 - 0.1$. Из графиков на рис. 1, 2 можно оценить точность определения энергии связи, необходимую для измерения эффективной фрактальной размерности материала нанопокрытия.

Список литературы

[1] *Popov V.L.* Contact Mechanics and Friction. Physical principles and Applications. Berlin: Springer-Verlag, 2010. 362 p.
[2] *Bharat Bhushan*. Nanotribology and Nanomechanics. An introductions. 2^{nd} ed. Berlin: Springer-Verlag, 2008. 1529 p.
[3] *Васильева Л.Ю., Уварова Л.А., Романова Е.Ю.* Моделирование мезо- и нанообъектов в различных средах и полях.Тверь, 2010. 215 с.
[4] *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 616 с.
[5] *Шабад А.Е.* // Труды ФИАН. 1988. Т. 192. С. 153–203.
[6] *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // ДАН. 2002. Т. 386. № 6. С. 753–755.
[7] *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 78. В. 4. С. 253–257.
[8] *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966. 332 с.
[9] *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л.: ЛГУ, 1975. 348 с.
[10] *Демков Ю.Н., Друкарев Г.Н.* // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. В. 1(7). С. 257–264.
[11] *Родионов В.Н., Мандель А.М., Кравцова Г.А.* // ТМФ. 2005. Т. 145. № 2. С. 198–211.
[12] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1973. 295 с.
[13] *Миронов Л.В.* Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород: Изд-во Института физики микроструктур РАН, 2004. 114 с.