

О неоднородном распределении электронной плотности в слое, адсорбированном на металле

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 5 февраля 1999 г.)

В рамках гамильтониана Андерсона–Ньюнса и простой модели плотности состояний подложки проанализирована возможность перехода, вызванного диполь-дипольным отталкиванием адатомов, от однородного зарядового распределения (ОЗР) в адсорбированном слое к неоднородному (НЗР). Рассмотрены два предельных случая: бесконечно широкая и узкая зоны разрешенных состояний субстрата. Получены критерии перехода ОЗР → НЗР. Проанализированы экспериментальные данные по реконструкции чистых граней металлов.

Распределение электронной плотности в моноатомном адсорбированном слое может быть однородным, когда каждый атом слоя содержит одно и то же число электронов n (и, следовательно, один и тот же заряд $Z = 1 - n$), и неоднородным, когда n тем или иным образом меняется при переходе от атома к атому. Возможность неоднородного упорядочения, вызванного кулоновским взаимодействием атомов, адсорбированных на металлической поверхности, была впервые продемонстрирована в работе [1] и в дальнейшем подробно проанализирована в [2]. При этом использовались модельные гамильтонианы, являющиеся модификациями гамильтониана Андерсона–Ньюнса [3,4].

Причину возникновения неоднородного зарядового распределения (НЗР) легко понять на следующем примере. Рассмотрим два одинаковых иона с зарядами Z , расположенных на расстоянии a друг от друга на поверхности металлической подложки. Пусть радиусы атомов равны r и поверхность металла можно рассматривать как плоскость изображения. Тогда энергия взаимодействия этих атомов с учетом сил изображения определяется выражением $W = 2Z^2e^2[a^{-1} - (a^2 + r^2)^{-1/2}]$, где e — заряд позитрона. Пусть теперь произошел переход электронов с одного иона на другой, в результате которого заряды ионов стали равными $Z_{\pm} = Z(1 \pm c)$, где c — число. Легко видеть, что энергия взаимодействия $W = 2Z^2e^2(1 - c)^2[a^{-1} - (a^2 + r^2)^{-1/2}]$ уменьшилась по сравнению со случаем однородного зарядового распределения (ОЗР). Далее можно показать, что ионная составляющая энергии адсорбции $E_{\text{ион}}$ в случае ОЗР равна $E_{\text{ион}} = -Z^2e^2/2r$, тогда как в случае НЗР $E_{\text{ион}} = -Z^2e^2(1 + c^2)/2r$. Таким образом, при переходе системы к неоднородному распределению электронной плотности в адсорбированном слое энергия отталкивания ионов понижается, а энергия их ионной связи с подложкой возрастает. Есть, однако, два фактора, затрудняющих переход ОЗР → НЗР. Такому переходу препятствуют, во-первых, внутриатомное кулоновское отталкивание электронов с разными спинами U и, во-вторых, повышение кинетической энергии электронного газа [2]. Последнее утверждение легко понять исходя из соотношения неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$,

где \hbar — приведенная постоянная Планка. Локализуя электрон на каком-либо центре, мы тем самым понижаем неопределенность его координаты Δx , увеличивая при этом неопределенность в импульсе Δp , что и приводит к увеличению кинетической энергии. Переход ОЗР → НЗР происходит лишь при условии превышения энергии отталкивания адатомов некоторого критического значения. Количественное рассмотрение этих вопросов приведено в работе [2].

В работах [1,2] в рамках единого подхода рассматривались слои на поверхности металла и чистые металлические грани, так как последние в силу специфики их геометрического расположения, также могут рассматриваться как адсорбированные монослои. Переход в состояние НЗР может приводить к реконструкции металлической поверхности, если, например, учесть электрон-фононное взаимодействие [2,5–7]. Этот же подход впоследствии применялся к исследованию реконструкции полупроводниковых граней [8–11].

При описании системы в рамках гамильтониана Андерсона–Ньюнса следует различать случаи широкой и узкой поверхностных зон [3,4,12,13]. Если в случае бесконечно широкой зоны существует лишь один уширенный квазиуровень адатома (предполагается, что на адсорбцию работает лишь одна атомная орбиталь), перекрывающийся с этой зоной, то при узкой полосе сплошного спектра появляются не только резонансные, но и локальные состояния, лежащие вне зоны. Такое различие в электронной структуре поверхностного слоя должно приводить к изменению критерия возникновения НЗР. Именно исследованию этого обстоятельства и посвящена настоящая работа.

1. Приближение широкой поверхностной зоны

Будем описывать адсорбцию одиночного атома гамильтонианом вида

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k + \varepsilon_a a^+ a + V \sum_k (c_k^+ a + h.c.). \quad (1)$$

Здесь ε_k — энергия электрона субстрата в состоянии $|k\rangle$; ε_a — энергия атомного электрона в состоянии $|a\rangle$;

$c_k^+(c_k)$ — оператор рождения (уничтожения) электрона в состоянии $|k\rangle$; $a^+(a)$ — аналогичные операторы для электрона в состоянии $|a\rangle$; V — матричный элемент гибридизации состояний $|k\rangle$ и $|a\rangle$. Зададим плотность состояний подложки $\rho_s(\omega)$ в виде

$$\rho_s(\omega) = 1/D, \quad |\omega| \leq D; \quad \rho_s(\omega) = 0, \quad |\omega| > D, \quad (2)$$

где $2D$ — ширина зоны проводимости субстрата, ω — энергетическая переменная (начало отсчета энергии совпадает с серединой зоны). Легко показать, что функция Грина адатома G , соответствующая гамильтониану (1), есть

$$G^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) - i\Gamma(\omega), \quad (3)$$

где функции гибридизационного сдвига квазиуровня адатома Λ и его полуширины Γ с учетом (2) даются соответственно следующими выражениями:

$$\Gamma = \pi V^2/D, \quad |\omega| \leq D; \quad \Gamma = 0, \quad |\omega| > D; \quad (4)$$

$$\Lambda = \frac{V^2}{D} \ln \left| \frac{D + \omega}{D - \omega} \right|.$$

Переход к приближению бесконечно широкой зоны ($D \rightarrow \infty$) приводит к обращению в нуль сдвига Λ , тогда как полуширину квазиуровня Γ по-прежнему считают конечной и постоянной [3]. Тогда легко показать, что плотность состояний на адатоме ρ и число заполнения орбитали этого адатома n есть

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \varepsilon_a)^2 + \Gamma^2}, \quad n = \frac{1}{n} \text{arccctg} \frac{\varepsilon_a - E_F}{\Gamma}, \quad (5)$$

где E_F — энергия Ферми субстрата.

Теперь рассмотрим решетку адатомов, между которыми имеет место дипольное отталкивание. В отличие от процедуры, использованной в работе [2], мы не будем обрезать диполь-дипольное отталкивание на ближайших соседях и учтем дальное действие методом, развитым в [14,15], где показано, что в состоянии ОЗР поле поверхностных диполей смещает энергетический уровень адатома ε_a в положение ε'_a

$$\varepsilon'_a(\Theta) = \varepsilon_a - \xi \Theta^{3/2} Z(\Theta), \quad Z(\Theta) = [1 - n(\Theta)], \quad (6)$$

$$\xi = 2e^2 \lambda^2 N_{ML}^{3/2} A,$$

где Θ — степень покрытия поверхности адатомами, определяемая как отношение числа адатомов в слое N к их числу в монослойном покрытии N_{ML} ; 2λ — плечо поверхностного диполя, образованного адсорбированным ионом и его изображением в металле; A — безразмерный коэффициент, зависящий от геометрии решетки адатомов. При подстановке выражений (6) в формулу (5) получаем самосогласованное уравнение для определения заселенности орбитали адатома n .

Рассмотрим для простоты одномерную цепочку адатомов на металлической поверхности. Такие структуры действительно наблюдаются при адсорбции на бороздчатых гранях, например (112) [16,17]. Будем считать, что

цепочка состоит из одинаково направленных диполей, обладающих чередующимися зарядами $Z_{\pm} = \tilde{Z}(1 \pm c)$ и отстоящими друг от друга на расстоянии a ("ферритмагнитная" цепочка). Тогда можно показать (см. Приложение), что для определения зарядов будем иметь систему уравнений вида

$$\tilde{Z}(1 \pm c) = 0.5 + (1/\pi) \text{arctg} \{ [\varepsilon_a - \xi \Theta^{3/2} \tilde{Z}(1 \mp \nu c)] / \Gamma \}. \quad (7)$$

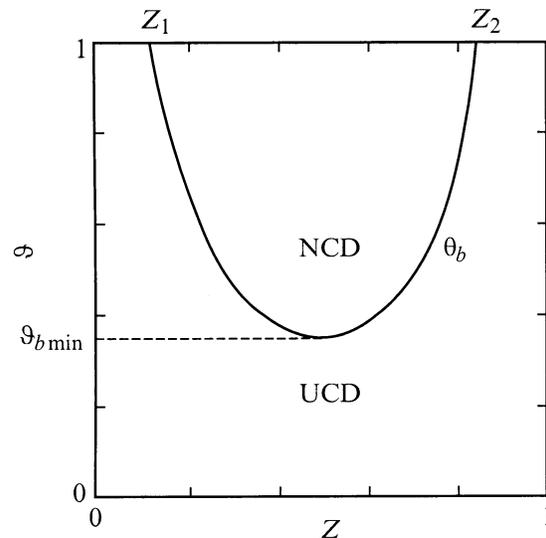
Здесь и далее в этом разделе энергия Ферми E_F принята за начало отсчета энергии; коэффициент A , входящий в выражение для ξ , равен 2.40 и $\nu = 0.75$ (см. Приложение). Отметим, что заряд \tilde{Z} является функцией параметра порядка c , что следует из уравнений (7), и переходит в Z из уравнения (6) при $c = 0$. Из уравнений (7) следует, что переход ОЗР \rightarrow НЗР осуществляется при условии

$$\Theta^{3/2} \frac{\xi \Gamma}{(\varepsilon'_a)^2 + \Gamma^2} \geq \frac{\pi}{2\nu}, \quad (8)$$

где ε'_a дается выражением (6). Неравенство (8) с помощью выражений (5) и (6) может быть переписано в другой форме

$$\Theta^{3/2} \sin^2[\pi Z(\Theta)] \geq \pi/2\nu K, \quad K = \xi/\Gamma, \quad (9)$$

где, как и выше, $Z = \tilde{Z}$ при $c = 0$. При выводе неравенств (8) и (9) учтено, что $(\partial \tilde{Z} / \partial c)_{c=0} = 0$, что можно показать, исходя из уравнения (7). Граничная степень покрытия Θ_b , при превышении которой происходит переход в состояние НЗР, определяется выражениями (8) и (9) при $\Theta = \Theta_b$. На рисунке представлена фазовая диаграмма адсорбционной системы. (Для иллюстрации K принято равным 10, что, по-видимому, близко к нижней



Фазовая диаграмма адсорбционной системы в приближении бесконечно широкой зоны. Граничное значение покрытия Θ_b отвечает переходу ОЗР(UCD) \rightarrow НЗР(NCD) при $\Theta \geq \Theta_b$. Z — заряд адатома в ОЗР слое. $K = \xi/\Gamma = 10$.

границе значений этого параметра). Состояние НЗР реализуется внутри области (при $\Theta \geq \Theta_b$), ограниченной кривой $\Theta_b(Z)$. Характерные точки кривой определяются следующими соотношениями:

$$Z_1 = (1/\pi) \arcsin \sqrt{\pi/2\nu K}, \quad Z_2 = 1 - Z_1, \\ \Theta_{\min} = (\pi/2\nu K)^{2/3}. \quad (10)$$

Показать, что переход ОЗР \rightarrow НЗР энергетически выгоден, можно точно также, как это проделано в работе [2]. Изменение ионной энергии системы при таком переходе ΔE_i (при расчете на одну двухатомную поверхностную ячейку) равно $(-Z^2 e^2/2\lambda)$. Изменение металлической составляющей энергии адсорбционной системы ΔE_m имеет вид

$$\Delta E_m \sim -2c\nu\xi\Theta^{3/2}\tilde{Z} + \frac{\Gamma}{\pi} \left[\ln \frac{(\varepsilon'_a + c\nu\xi\Theta^{3/2}\tilde{Z})^2 + \Gamma^2}{\varepsilon'^2_a + \Gamma^2} + \ln \frac{(\varepsilon'_a - c\nu\xi\Theta^{3/2}\tilde{Z})^2 + \Gamma^2}{\varepsilon'^2_a + \Gamma^2} \right]. \quad (11)$$

Первый член в выражении для ΔE_m отвечает изменению потенциальной энергии адатома вследствие сдвига и изменения заселенности его квазиуровня, тогда как второй член описывает изменение кинетической энергии адсорбционной системы. В предположении, что $2c\nu\xi\Theta^{3/2}\tilde{Z}/(\varepsilon'^2_a + \Gamma^2) \ll 1$ и $c^2 \ll c$ легко показать, что в выражении (10) для ΔE_m остается лишь первый отрицательный член. Следовательно, переход ОЗР \rightarrow НЗР является энергетически выгодным. Поэтому как только появляется возможность перехода к неоднородному распределению электронной плотности, т.е. выполняются неравенства (8) и (9), этот переход происходит. Ясно, что переход ОЗР \rightarrow НЗР является фазовым переходом второго рода [2].

2. Приближение узкой зоны

Проблема узкой зоны проявляется, когда в плотности состояний вблизи уровня Ферми существует заметный пик, что, например, имеет место для чистых граней (100) вольфрама, молибдена и хрома [10]. В принципе поверхностный слой металла может рассматриваться как монослой адатомов, так как электронное заполнение поверхностного атома отличается от заполнения атома, лежащего в глубине металла, и где параметры A и ν , входящие в выражения (6) и (7), имеют другие значения.

Подробно задача об адсорбции атомов на субстрате с конечной зоной проводимости рассмотрена в работе [13]. Энергии локальных и резонансного уровней адатома определяются полюсами функции Грина (3)

$$\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega) = 0, \quad (12)$$

где функция сдвига Λ дается выражением (4). Рассматривая узкую зону, логично считать, что $2V^2/D^2 > 1$,

когда в системе возникают два локальных уровня ω_1 и ω_2 ниже и выше зоны соответственно и один резонансный уровень ω^* (см. рис. 1 в [13]). Более того, в последующих оценках мы будем полагать $(V/D)^2 \gg 1$, т.е. рассматривать ситуацию, диаметрально противоположную приближению бесконечно широкой зоны.

В [13] показано, что величину числа заполнения n_b резонансного уровня ω^* для случая $2V^2/D^2 > 1$ можно приближенно вычислить по формуле

$$n_b = \frac{1}{\pi} \left[\arctg \frac{D(\omega^* + D)}{\pi V^2} - \arctg \frac{D(\omega^* + D - F)}{\pi V^2} \right], \quad (13)$$

где F — энергия Ферми, отсчитываемая от дна зоны. В первом приближении по малому параметру $(D/V)^2$ получим

$$n_b \cong DF/(\pi V)^2. \quad (14)$$

В этом приближении величина n_b не зависит от энергии резонансного состояния ω^* . Первая отличная от нуля зависящая от ω^* поправка к n_b имеет вид $[1 - O(D^4/V^4)]$, где $O(\dots)$ означает малую величину, порядок которой определяется аргументом. Число заполнения локального состояния ω_1 равно [13]

$$n_l = \left[1 + \frac{2V^2}{\omega_1^2 - D^2} \right]^{-1}. \quad (15)$$

Верхнее локальное состояние ω_2 не заполнено и в дальнейшем не рассматривается.

При наличии диполь-дипольного взаимодействия и неоднородного распределения заряда в решетке адатомов состояние ε'_a переходит в два расщепленных состояния вида $\varepsilon_a^\pm = \varepsilon'_a \pm c\nu\Theta^{3/2}Z\xi$, где ε'_a имеет тот же вид, что и в уравнении (6). Заряд Z по-прежнему равен $1 - n$, где $n = n_b + n_l$. В результате расщепления уровней адатома: $(\omega_{1,2} \rightarrow \omega_{1,2}^\pm, \omega^* \rightarrow (\omega^*)^\pm)$ "расщепляются" и числа заполнения n_b и n_l . В дальнейшем будем для простоты предполагать, что все числа заполнения расщепляются одинаково, т.е. $Z_p^\pm = Z_p(1 \pm c)$, где индекс p соответствует индексам l и b .

Из сравнения выражений (7) и (13) следует, что условие перехода ОЗР \rightarrow НЗР для зонных состояний ω^* , т.е. перехода $Z_b \rightarrow Z_b^\pm$, в случае узкой зоны не отличается принципиально от аналогичного перехода в пределе бесконечно широкой зоны. (Напомним, что полуширина квазиуровня Γ , входящего в выражение (7), равна $\pi V^2/D$ (см. (4)). Остановимся поэтому на переходе ОЗР \rightarrow НЗР для локального состояния ω_1 , еще раз подчеркнув, что главное отличие модели узкой полосы от бесконечно широкой зоны состоит именно в появлении локальных состояний.

Рассмотрим ряд характерных предельных случаев. Пусть $\varepsilon_a^\pm/D \gg 1$ и $\varepsilon_a^\pm D/V^2 \gg 1$. Тогда, воспользовавшись результатами работ [13], можно по аналогии записать

$$\omega_1^\pm \cong -D[1 + 2 \exp(-\varepsilon_a^\pm D/V^2)], \\ n_l^\pm \cong 2(D/V)^2 \exp(-\varepsilon_a^\pm D/V^2). \quad (16)$$

Анализ чисел заполнения приводит к выводу, что условие перехода ОЗР → НЗР есть $\Theta \geq \Theta_b$, где

$$\Theta_b \cong \left[V^4 \exp(\varepsilon'_a D / V^2) / 2\nu \xi D^3 \right]^{2/3}. \quad (17)$$

В случае бесконечно широкой зоны при аналогичном условии $(\varepsilon'_a / \Gamma)^2 \gg 1$ получим из уравнения (8)

$$\Theta_b \cong (\pi \varepsilon'^2_a / 2\nu \xi \Gamma)^{2/3}. \quad (18)$$

При всем внешнем различии соотношений (17) и (18) в них много общего. Во-первых, в числителях выражений, стоящих в скобках, находятся большие величины. Во-вторых, в обе формулы параметры ξ и ν , описывающие соответственно дипольное поле в состоянии ОЗР и его изменение в состоянии НЗР, входят одинаковым образом. Типичные значения параметров задачи таковы: для металла полуширина квазиуровня Γ составляет от десятых долей до 1 eV, мы примем здесь $\Gamma = 0.5$ eV. Положив $\xi = 3$ eV (что типично для адсорбции щелочных металлов [18] с учетом пересчета ξ от квадратной решетки адатомов с $A = 9$ [14] к цепочке с $A = 2.4$ (см. Приложение)) и приняв для оценки $\varepsilon'_a = 2$ eV, получим в обоих случаях Θ_b больше 1, что свидетельствует о невозможности перехода в состояние НЗР. Таким образом, в случае заряда адатома, близкого к 1 (малое заполнение орбитали адатома), состояние НЗР, по-видимому, исключено.

Теперь рассмотрим для узкой зоны случай, когда $(\varepsilon'_a)^2 \ll D^2$, а для бесконечно широкой — $(\varepsilon'_a)^2 \ll \Gamma^2$, что приблизительно соответствует половинному заполнению орбиталей адатомов ($n \cong 0.5$). Вновь воспользовавшись результатами [13], найдем для узкой зоны

$$\omega_1^\pm \cong \varepsilon_a^\pm - \sqrt{2}V, \quad n_1^\pm \cong (1 - \varepsilon_a^\pm / 2\sqrt{2}V) / 2. \quad (19)$$

Проанализировав выражения (19) и (8), найдем границы перехода ОЗР → НЗР соответственно для узкой и широкой зон

$$\Theta_b \cong (2\sqrt{2}V / \nu \xi)^{2/3}, \quad \Theta_b \cong (\pi \Gamma / 2\nu \xi)^{2/3}. \quad (20)$$

Для узкой зоны это дает $\Theta_b = 0.60$, для широкой — $\Theta_b = 0.53$.

Теперь рассмотрим низколежащие квазиуровни $\varepsilon_a^\pm < 0$, удовлетворяющие неравенствам $|\varepsilon_a^\pm| \gg D$, V (узкая зона) и $(\varepsilon_a^\pm / \Gamma)^2 \gg 1$ (широкая зона). При этом орбиталь адатома почти заполнена. Опять воспользовавшись [13], найдем для узкой зоны

$$\omega_1^\pm \cong \varepsilon_a^\pm, \quad n_1^\pm \cong [1 - 2V^2 / (\varepsilon_a^\pm)^2]. \quad (21)$$

Для узкой и широкой зон получим соответственно

$$\Theta_b \cong (|\varepsilon_a'|^3 / 4\nu \xi V^2)^{2/3}, \quad \Theta_b \cong (\pi \varepsilon'^2_a / 2\nu \xi \Gamma)^{2/3}. \quad (22)$$

Вновь в обоих случаях получаем $\Theta_b > 1$.

Таким образом, несмотря на весьма существенные различия моделей узкой и широкой зоны, несмотря на наличие локализованных состояний в первой из них и отсутствие таковых во второй условия перехода однородного электронного распределения в поверхностном слое в неоднородное сходны.

3. Обсуждение результатов

Насколько известно автору, в металлических пленках, адсорбированных на тугоплавких металлах, НЗР не наблюдается [16]. Понять причину этого можно, преобразовав выражение (8) к виду

$$\Theta \geq \Theta_b = [2\nu \xi \rho_F(\varepsilon'_a)]^{-2/3}, \quad \rho_F(\varepsilon'_a) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\varepsilon'^2_a + \Gamma^2}, \quad (23)$$

где $\rho_F(\varepsilon'_a)$ — плотность состояний адатома на уровне Ферми, от которого отсчитывается энергия. Сделаем некоторые оценки для грани (112) вольфрама, работа выхода которой $\phi = 4.80$ eV [19], где щелочные, щелочно- и редкоземельные металлы могут образовывать цепочки [16]. (Аналогичная картина наблюдается для Mo(112) и Re(10 $\bar{1}$ 0)). Рассмотрим адсорбцию лития и натрия, так как калий и цезий не образуют цепочечных структур вследствие больших дипольных моментов. Дипольные моменты $p = eZ\lambda$ для Li и Na при $\Theta \rightarrow 0$ равны соответственно 0.67 и 0.75 а.е. Отсюда, воспользовавшись результатами работы [18], можно найти значения заряда $Z = 0.31$ и 0.29 и плотности состояний $\rho_F = 0.10$ и 0.13 (eV) $^{-1}$ для Li и Na соответственно. Тогда, принимая параметр дипольного взаимодействия ξ равным 3.21 (Li) и 2.72 (Na) eV (что можно получить из [18], учитывая, что отношения коэффициентов A для цепочки и квадратной решетки составляют величину 0.27), получим $\Theta_b > 1$. Следовательно, при малых покрытиях переход ОЗР → НЗР невозможен. С ростом покрытия величина заряда адатома и его дипольного момента уменьшается вследствие деполаризации, что, как легко показать, приводит к росту ρ_F , увеличению Θ_b и понижению вероятности перехода ОЗР → НЗР.

Рассмотрим теперь реконструкцию чистых металлических граней [10,16]. Хорошо известно, что среди переходных и благородных металлов наиболее часто подвергается реконструкции грань (100) иридия, платины и золота, структура которой приобретает симметрию, близкую к гексагональной, и становится слегка гофрированной. Бороздчатые грани (110) Ir, Pt и Au вследствие реконструкции приобретают структуру $p(1 \times 2)$. В ОЦК-металлах — вольфраме, молибдене и хrome — реконструируется грань (100), где при низких температурах развивается структура $c(2 \times 2)$, т.е. период решетки удваивается (у Mo возникает несоизмеримая структура). Во всех этих структурах узкая d -зона пересекается с уровнем Ферми [10,16].

Поверхностный слой металла может рассматриваться как монослой адатомов, так как, например, электронное заполнение поверхностного атома отличается от заполнения атома, лежащего в глубине металла (см., например, [17]). Хотя выше мы рассматривали цепочку адатомов, полученные результаты могут быть использованы и для интерпретации переходов ОЗР → НЗР на чистой грани, полагая $\Theta = 1$. При этом параметры A и ν , входящие в выражение (6) и (7), имеют другие

значения. Для различных двумерных решеток $A \cong 10$ [20] и ξ имеет порядок 10 eV [15]. Поскольку у вышеперечисленных металлов узкая поверхностная d -зона лежит вблизи уровня Ферми [10,16], мы можем воспользоваться оценкой (20) (вторая формула), в которой под значением Γ следует понимать полуширину поверхностной зоны (порядка $1\text{--}2 \text{ eV}$). Таким образом, Θ_b имеет порядок $\Gamma/\xi < 1$ и состояние НЗР реализуется. Если предположить, как в [2,5–7], что электронный переход сопровождается структурным, можно понять природу реконструкции. Необходимо отметить следующее. Узкая d -зона переходных металлов, обладающая большой плотностью состояний ρ_d , перекрывается с широкой sp -полосой, имеющей малую плотность состояний ρ_{sp} . Поэтому состояние ω_1 не является локальным. Его ширина, пропорциональная ρ_{sp} , гораздо меньше ширины d -зоны и для сделанных оценок ей можно пренебречь.

Работа выполнена в рамках Федеральной программы "Поверхностные атомные структуры".

Приложение

Для расчета полей дипольных сил, действующих на точечные диполи с зарядами $Z_{\pm} = Z(1 \pm c)$, нужно вычислить суммы $S_{0,1}$ вида

$$S_0 = \sum_{m=1}^{\infty} m^{-3}, \quad S_1 = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m+1} m^{-3}.$$

Их значения равны соответственно $\zeta(3)$ и $3\zeta(3)/4$, где ζ — дзета-функция Вейерштрасса [21]. Следовательно, $S_{0,1} = 1.2, 0.9$. Поле, действующее на дипольный момент Z_{\pm} , пропорционально величине $A(1 \mp \nu c)$, где $A = 2S_0$ и $\nu = S_1/S_0$, т.е. $A = 2.40$ и $\nu = 0.75$.

Список литературы

- [1] Л.А. Большов, А.П. Напартович. ЖЭТФ **64**, 4, 1404 (1973).
- [2] С.Ю. Давыдов. ФТТ **21**, 8, 2283 (1979).
- [3] P.W. Anderson. Phys. Rev. **124**, 1, 41 (1961).
- [4] D.M. Newns. Phys. Rev. **178**, 3, 1123 (1969).
- [5] В.Е. Кравцов, А.Г. Мальшуков. ЖЭТФ **75**, 2, 691 (1978).
- [6] В.Е. Кравцов, А.Г. Мальшуков. ЖЭТФ **77**, 1, 180 (1979).
- [7] С.Ю. Давыдов, А.Д. Чесноков. ФТТ **24**, 1, 305 (1982).
- [8] А.И. Волокитин. ФТП **15**, 11, 2136 (1981).
- [9] Л.А. Большов, М.С. Вещунов. ЖЭТФ **90**, 2, 569 (1986).
- [10] Л.А. Большов, М.С. Вещунов. Поверхность **7**, 5 (1989).
- [11] S. Pick. Surf. Sci. Rep. **12**, 3, 99 (1990).
- [12] Т. Эйштейн, Дж. Герц, Дж. Шриффер. Проблемы теории хемосорбции. В сб.: Теория хемосорбции. Мир, М. (1983).
- [13] С.Ю. Давыдов. ЖТФ **68**, 4, 15 (1998).
- [14] J.P. Muscat, D.M. Newns. J. Phys. **C7**, 15, 2630 (1974).
- [15] С.Ю. Давыдов. ФТТ **19**, 11, 3376 (1977).
- [16] О.М. Браун, В.К. Медведев. УФН **157**, 4, 631 (1989).
- [17] Л.А. Большов, А.П. Напартович, А.Г. Наумовец, А.Г. Федорус. УФН **122**, 125 (1977).
- [18] С.Ю. Давыдов. ЖТФ **69**, 5, 116 (1999).
- [19] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991).
- [20] C.E. Carrol, J.W. May. Surf. Sci. **29**, 1, 60 (1972).
- [21] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Наука, М. (1971).