Вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. № 4. – 1999

МОДЕЛЬНІ ГАМІЛЬТОНІАНИ СИСТЕМИ "МЕТАЛ - АТОМ, ЩО РУХАЄТЬСЯ"

В.Г. Дробнич

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, Волошина, 54

Простежено зв'язок гамільтоніанів андерсонівського типу, що використовуються в сучасних квантово-механічних моделях емісії іонів і збуджених атомів при іонному опроміненні поверхні металу, з точним гамільтоніаном системи "метал - атом, який рухається". В результаті усунуто довільність в тлумаченні матричних елементів, що фігурують в модельних гамільтоніанах, і продемонстрована непереконливість одного такого загальноприйнятого тлумачення.

Досягнутий прогрес в моделюванні емісії заряджених і збуджених частинок при іонному бомбардуванні поверхні металу багато в чому зумовлений застосуванням для опису еволюції багатоелектронної системи "метал - атом, що емітується" модельних гамільтоніанов андерсонівського типу [1,2]. В рамках даного підходу побудова тієї чи іншої емісійної моделі починається з вибору модельного гамільтоніану. Як правило, ця процедура супроводжується рядом апріорних припущень. У даній роботі простежено зв'язок гамільтоніану моделі [3,4] з вихідним електронним гамільтоніаном системи "метал - частинка, що рухається", в результаті чого вдалося усунути довільність в тлумаченні матричних елементів, що входять в модельний гамільтоніан, і пересвідчитись в непереконливості одного такого загальноприйнятого тлумачення.

Розглянемо систему, яка складається з N іонних остовів (будемо вважати їх класичними частинками) і N електронів. Нехай остови утворюють кристалічну гратку і один з них рухається поза граткою зі швидкістю **v**. Обмежуючись розглядом лише кулонівської взаємодії в системі "метал - частинка, що рухається", маємо наступний електронний гамільтоніан

$$\hat{H}(t) = \sum_{j=1}^{N} [\hat{T}_j + \hat{U}_j^A(t) + \hat{U}_j^G] + \hat{W}_\Sigma , \qquad (1)$$

де $\hat{T}_j$ - оператор кінетичної енергії j-го електрону, $\hat{U}_j^A$ (t) оператор потенціальної енергії взаємодії j-го електрону з іонним остовом, що рухається, $\hat{U}_j^G$ - потенціал взаємодії електрону з вузлами кристалічної гратки, $\hat{W}_\Sigma$ - оператор міжелектронної взаємодії.

Приведемо $\hat{H}$ до вигляду, зручного для побудови гамільтоніанів андерсонівського типу. Нехай $\hat{U}_j^S$ - одноелектронний потенціал в деякій вибраній зонній моделі металу ($\hat{U}_j^S$ є сумою $\hat{U}_j^G$ і певної частини взаємодії $\hat{W}_\Sigma$, в тому числі і взаємодії електрону з власним електричним зображенням в металі), $\hat{U}_j^I$ - потенціал взаємодії j-го електрону з електричним зображенням іонного остову, що рухається. Тоді замість (1) можемо записати

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j + \hat{J}_\Sigma , \qquad (2а)$$

де

$$\hat{h}_j = \hat{T}_j + \hat{U}_j^A(t) + \hat{U}_j^S + \hat{U}_j^I(t) , \qquad (2б)$$

а $\hat{J}_\Sigma$ - оператор, який описує невраховану в $\sum_j \hat{U}_j^S$ і $\sum_j \hat{U}_j^I$ частину міжелектронної взаємодії. Розглянемо члени, що входять в одноелектронний гамільтоніан $\hat{h}_j$. Оператор

$$\hat{h}_j^A = \hat{T}_j + \hat{U}_j^A(t) \qquad (3)$$

є гамільтоніаном атому, що рухається. Нехай E_a - енергія одного з атомних рівнів, а $|E_a\rangle\exp[-i/\hbar\, E_a\, t]$ - вектор, який характеризує відповідний стаціонарний стан нерухомого атому. Тоді в лабораторній системі відліку, відносно якої емітована частинка рухається зі швидкістю $\mathbf{v}$, цьому стану відповідає вектор

$$|\psi_a(t)\rangle = \hat{G}(\mathbf{v},t)|E_a\rangle\exp[-i/\hbar\, E_a\, t], \qquad (4)$$

де $\hat{G}(\mathbf{v},t)$ - оператор перетворення Галілея. Ясно, що $|\psi_a(t)\rangle$ задовольняє рівнянню Шредингера з гамільтоніаном (3). Визначимо вектори

$$a(t)\rangle = \hat{G}(\mathbf{v},t)\,|E_a\rangle, \qquad (5а)$$

що описують, як і $|\psi_a(t)\rangle$, основний (a=0) та збуджені (a=1, 2,...) стани атому, що рухається. В силу властивостей перетворення Галилея система векторів $|a(t)\rangle$ ортонормована і

$$i\hbar\frac{\partial|a\rangle}{\partial t} = \hat{g}(\mathbf{v})\,|a\rangle, \qquad (5б)$$

$$\hat{g}(\mathbf{v}) = \hat{\mathbf{p}}\,\mathbf{v} - m_e\mathbf{v}^2/2, \qquad (5в)$$

де $\hat{\mathbf{p}}$ і m_e - відповідно оператор імпульсу і маса електрону.

Об'єднуючи в (2б) оператори $\hat{T}_j$ і $\hat{U}_j^S$ одержуємо одноелектронний гамільтоніан металу

$$\hat{h}_j^S = \hat{T}_j + \hat{U}_j^S\,. \qquad (6)$$

Рівняння

$$\hat{h}_j^S|k\rangle = \varepsilon_k|k\rangle \qquad (7)$$

визначає енергетичні рівні ε_k і стаціонарні стани $|k\rangle$ електронів металу.

Для побудови гамільтоніанов андерсонівського типу вектори $|a(t)\rangle$ і $|k\rangle$ об'єднують в єдиний базис $\{|a(t)\rangle, |k\rangle\}$. При цьому вважають для простоти, що вектори $|a(t)\rangle$ ортогональні векторам $|k\rangle$. Умову повноти записують наступним чином

$$\sum_a |a(t)\rangle\langle a(t)| + \sum_k |k\rangle\langle k| = 1. \qquad (8)$$

Враховуючи зазначені властивості базисних векторів можемо записати, нарешті, вихідний гамільтоніан (2а) системи "метал - частинка, що рухається" в термінах операторів народження і знищення цих векторів, тобто у вигляді гамільтоніану андерсонівського типу:

$$\hat{H}_{Анд} = \sum_a E_a\,\hat{n}_a(t) + \sum_{a,a'} \hat{g}_{aa'}(\mathbf{v})\,\hat{c}_a^{+}(t)\hat{c}_{a'}(t) + \sum_k \varepsilon_k\,\hat{n}_k + \sum_{a,a'} \hat{X}_{aa'}(t)\,\hat{c}_a^{+}(t)\hat{c}_{a'}(t) +$$
$$+ \sum_{a,k}\{\hat{h}_{ak}(t)\,\hat{c}_a^{+}(t)\hat{c}_k + h.c.\} + \sum_{k,k'} \hat{Y}_{kk'}(t)\,\hat{c}_k^{+}\hat{c}_{k'} + ¼\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ \gamma,\delta}} \hat{J}_{\alpha\beta,\gamma\delta}\,\hat{c}_\alpha^{+}\hat{c}_\beta^{+}\hat{c}_\delta\hat{c}_\gamma\,, \qquad (9)$$

де $\hat{c}_a^{+}(t)$, $\hat{c}_a(t)$ і $\hat{c}_k^{+}$, $\hat{c}_k$ - оператори народження і знищення електрону в станах $|a(t)\rangle$ і $|k\rangle$; $\hat{n}_a(t)$ і $\hat{n}_k$ - оператори чисел заповнення цих станів; $\hat{X} = \hat{U}^S + \hat{U}^I$ і $\hat{Y} = \hat{U}^A + \hat{U}^I$. В (9) використані стандартні позначення для матричних елементів операторів і опущено індекс j, який є зайвим в представленні чисел заповнення. Два перших члени складають гамільтоніан вільного атому, що рухається зі швидкістю $\mathbf{v}$; третій член є гамільтоніаном металу, не взаємодіючого з атомом, що рухається; наступні три члени описують збурення, відповідальне за одноелектронні переходи між базисними станами $|a(t)>$ і $|a'(t)>$, $|a(t)>$ і $|k>$, $|k>$ і $|k'>$. Останній член в (9) - це оператор $\hat{J}_\Sigma$, відповідальний за двохелектронні переходи між базисними станами і записаний в представленні чисел заповнення.

Різниця між $\hat{H}_{Анд}$ і вихідним гамільтоніаном $\hat{H}$ невелика і пов'язана лише з фіксацією специфічного базису $\{|a(t)>, |k>\}$. Тому опис системи "метал - частинка, що рухається" на основі гамільтоніану (9) є надзвичайно складною задачею. Для досягнення компромісу між точністю і простотою опису використовують модельні гамільтоніани. Вони відрізняються від $\hat{H}_{Анд}$ відсутністю (чи більш простим виглядом) тих або інших членів і, отже, не враховують (або враховують лише приблизно) ті електронні процеси, що відповідають цим членам. Модель [3.4] грунтується на наступному гамільтоніані:

$$\hat{H}_{Мод} = \sum_{a=0,1} \tilde{E}_a(t)\ \hat{n}_a(t) + \sum_{\substack{a=0,1\\ a'=0,1}} \hat{g}_{aa'}(\mathbf{v})\ \hat{c}_a^+(t)\hat{c}_{a'}(t) + \sum_k \varepsilon_k\ \hat{n}_k +$$
$$\{\hat{X}_{01}(t)\ \hat{c}_0^+(t)\hat{c}_1(t)+h.c.\} + \sum_{\substack{a=0,1\\ k}} \{\hat{h}_{ak}(t)\ \hat{c}_a^+(t)\hat{c}_k+h.c.\} + J_{01,01}\ \hat{n}_0(t)\hat{n}_1(t), \qquad (10)$$

де

$$\tilde{E}_a(t)=E_a+\hat{X}_{aa}(t). \qquad (11)$$

Модельний гамільтоніан (10) відрізняється від "майже точного" гамільтоніану (9) наступним:

атомні стани $|a(t)>$ представлені в базисі $\{|a(t)>, |k>\}$ гамільтоніану $\hat{H}_{Мод}$ тільки двома векторами, що відповідають основному (a=0) і вибраному збудженому стану атому (a=1);

в $\hat{H}_{Мод}$ відстуній передостанній член гамільтоніану $\hat{H}_{Анд}$, який описує одноелектронні переходи між базисними станами $|k>$, $|k'>$;

Оператор $\hat{J}_\Sigma$ представлений в (10) тільки одним членом, що описує кулоновське відштовхування електронів, захоплених в стани $|0>$ і $|1>$.

На наш погляд $\hat{H}_{Мод}$ дозволяє достатньо коректно моделювати еволюцію електронної оболонки частинки, що емітується, як результат сукупності резонансних і нерезонансних переходів $|k> \leftrightarrow |a(t)>$ і $|a(t)> \leftrightarrow |a'(t)>$. Відзначимо, що його останній член необхідний для врахування часткового блокування переходів $|k> \rightarrow |a>$ у випадку, коли інший атомний стан вже зайнятий.

Для розрахунку за допомогою $\hat{H}_{Мод}$ імовірностей збудження і іонізації частинок, що емітуються, в роботах [3,4] використане відоме наближення нескінченно широкої зони [5]. В даному наближенні матричні елементи $\hat{h}_{ak}(t)$ виражаються через феноменологічний параметр $\Delta(t)$, що має сенс напівширини квазістаціонарних рівнів атому, що емітується (або уявної частини енергії цих рівнів). Що стосується інших фігуруючих в $\hat{H}_{Мод}$ матричних елементів ($\hat{X}_{aa}(t)$, $\hat{X}_{01}(t)$ і $J_{01,01}$), то вони потребують розрахунку Задача їхнього обчислення вирішена в роботах [3,4]. При цьому необхідно відзначити наступне.

Нехай ε_a (t) - дійсні частини енергії квазістаціонарних рівнів атому, що взаємодіє з металом. Згідно (10), (11) в $\hat{H}_{Мод}$ входять не самі енергії ε_a (t), а їх значення $\tilde{E}_a$ (t), одержані в першому порядку теорії збурень. В той же час в інших моделях іонізації і збудження атомів, що емітуються, замість величин $\tilde{E}_a$ (t) фігурують енергії ε_a (t), для обчислення яких часом застосовуються досить складні методи. Причому енергії ε_a (t) вводяться в ці моделі "вручну" при виписуванні (апріорному виборі) модельних гамільтоніанів. На наш погляд в зазначених гамільтоніанах замість ε_a (t) слід використовувати $\tilde{E}_a$ (t). Дійсно, ці гамільтоніани, як і гамільтоніан $\hat{H}_{Мод}$, можуть являти собою лише спрощені версії гамільтоніана $\hat{H}_{Анд}$ (9). Але якщо в $\hat{H}_{Анд}$ привести подібні члени, то перед оператором числа заповнення $\hat{n}_a = \hat{c}_a^+\hat{c}_a$ отримаємо (з точністю до матричного елементу $\hat{g}_{aa}$ (**v**), що враховує рух частинки) суму $E_a + \hat{X}_{aa}(s) = \tilde{E}_a$ (t). Додатковим підтвердженням необхідності використання енергії $\tilde{E}_a$ (t) замість ε_a (t) в модельних гамільтоніанах є узгодженість розрахованих на підставі (10) і виміряних імовірностей збудження і іонізації вторинних атомів n_1(**v**) і n_+(**v**) [4].

1. P.W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
2. D.M. Newns, Phys. Rev. **178**, 1123 (1969).
3. V.G. Drobnich, S.Yu. Medvedev, Nucl. Instr. and Meth. **B78**, 148 (1993).
4. V.G. Drobnich, Proc. Int. Conf. "The Centenary of Electron", Uzhgorod: Karpaty Publishers, 202 (1997).
5. A. Blandin, A. Nourtier, D.W. Hone, J. Phys. **37**, 369 (1976).

THE MODEL HAMILTONIANS OF "METAL -MOVING ATOM" SYSTEM

V.G. Drobnich

Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshina str., 54

The relation of Anderson type Hamiltonians used in modern quantum-mechanical models of emission of ions and exited atoms under ion bombardment of a metal surface with exact Hamiltonian of "metal - moving atom" system is found. As a result an arbitrariness of treatment of matrix elements which are included in model Hamiltonians is eliminated and the weakness of one such standard treatment is shown.