

Существование электростатического поля у поверхности субмикронных кластеров в форме полусферы за счёт макроскопических квантовых оболочечных эффектов

С. Е. Куратов, С. Ю. Игашов, И. С. Гальцов, С. А. Дьячков

Известно, что металлические кластеры из тысяч атомов проявляют макроскопическую оболочечную структуру, что наблюдается в различных экспериментах по определению их потенциалов ионизации, поляризуемости, оптических и других свойств [1]. Это обусловлено тем, что валентные электроны заполняют потенциальную яму в рамках целого кластера самосогласованным образом, что можно успешно описать с помощью модели желе для ионов и модели Хартри-Фока или теории функционала плотности для электронов [2]. Последние, подчиняясь принципу запрета Паули, заполняют конечную область пространства с дискретным энергетическим спектром, что приводит к формированию характерных осцилляций в радиальном распределении электронной плотности связанных электронов. При этом, добавление атома в такой кластер может существенно изменить распределение электронной плотности, самосогласованное поле и энергию связи частиц, что приводит к пилообразной зависимости от числа частиц.

В данной работе мы обсуждаем проявление макроскопической оболочечной структуры в незаряженных изолированных кластерах полусферической формы в виде существования электростатического поля вблизи плоской поверхности. Качественно этот эффект может быть обнаружен с помощью метода квазиклассических функций Грина [3,4,5] следующим образом. Замкнутые периодические классические траектории в полусфере получаются путем отражения аналогичных траекторий в сфере относительно её плоского сечения, проходящего через центр. Таким образом, существование оболочечной структуры, предсказанной для сферы, может быть обобщено и на случай полусферы. Другими словами, вблизи плоской поверхности полусферы имеется неоднородное распределение заряда, что приводит к формированию электростатического поля. Представлены количественные оценки поля, полученные с помощью кода GPAW [6] для нанометровых кластеров полусферической формы.

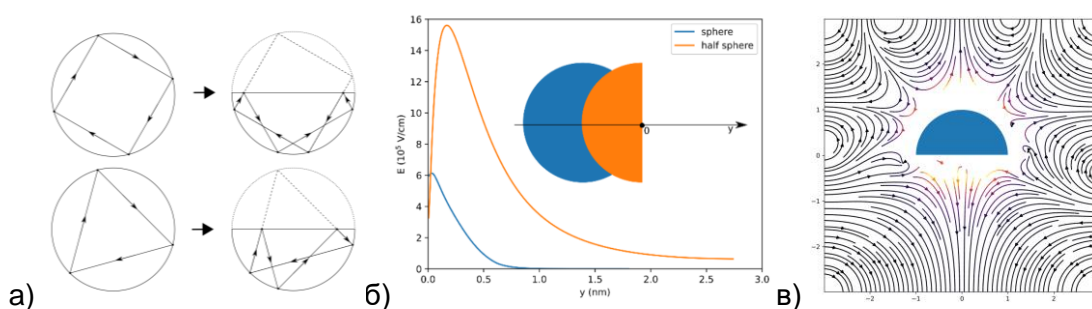


Рисунок: а) Пример отражения квазиклассических траекторий в полусфере. б) Амплитуда электрического поля вблизи поверхности сферы и полусферы, полученная в расчетах GPAW для кластера из алюминия радиуса 1 нм. в) Векторное электрическое поле в окрестности полусферы, полученное в расчетах GPAW для кластера из алюминия радиуса 1 нм.

- [1] W. A. De Heer, Rev. Mod. Phys. 65, 611 (1993)
- [2] M. Brack, Rev. Mod. Phys. 65, 677 (1993)
- [3] M. C. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics, Springer, New York (1990)
- [4] S. E. Kuratov, D. S. Shidlovski, and S. I. Blinnikov, Physics of Plasmas 26, 022709 (2019)
- [5] S. E. Kuratov, D. S. Shidlovski, S. I. Blinnikov, and S. Y. Igashov, Phys. Usp. 64, 836 (2021)
- [6] J. Enkovaara et al., Journal of Physics: Condensed Matter 22, 253202 (2010)