

УДК 539.9, 539.3

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ПОВЕРХНІ НА ГУСТИНУ ЙОНІВ У НАПВОБМЕЖЕНИХ МЕТАЛЕВИХ СИСТЕМАХ

Петро Костробій, Ірина Рижка

Національний університет «Львівська політехніка»

petro.p.kostrobii@lpnu.ua, iryna.a.ryzha@lpnu.ua

Досягнення в розвитку нанотехнологій зумовили різке зростання досліджень, спрямованих на побудову моделей, що адекватно описують багаточисельні експериментальні дослідження наносистем [1].

Так як сучасні, експериментально отримані наносистеми характеризуються розмірами порядку 10 нм, то їх фізичні властивості сильно залежать від розмірів (так званий «квантово-розмірний ефект») [2].

Однією з таких характеристик є густина ρ йонної підсистеми, яка може змінюватися біля поверхні поділу «метал–вакуум». Ця зміна зумовлена наявністю біля поверхні поділу (в області вакууму) приповерхневого електронного шару [2], товщина якого сягає порядку двох періодів ґратки. Це зі свого боку приводить до зміни дискретної ґраткової структури йонної підсистеми.

Для опису такої зміни використано запропонований квантово-статистичний підхід до моделювання металевих систем з поверхнею поділу «метал–вакуум» [2].

Використання такого підходу дозволило отримати ефективний гамільтоніан йонної підсистеми в наближенні парних взаємодій між йонами:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^N \Phi_1(\bar{R}_n) + \sum_{n,n'=1}^N \Phi_2(\bar{R}_n, \bar{R}_{n'}), \quad (1)$$

де $H_0 = \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2M}$ – гамільтоніан вільних йонів масою M та імпульсом \bar{P}_n

($P_n \cdot d \ll 1$, d – період ґратки); N – число йонів у ґратковій структурі; $\Phi_1(\bar{R}_n)$ та $\Phi_2(\bar{R}_n, \bar{R}_{n'})$ – відповідно одночастинковий потенціал (поява якого зумовлена електрон–йонною взаємодією) та потенціал парної ефективної взаємодії між йонами; \bar{R}_n – радіус-вектор, що описує положення йона у ґрат-

ковій структурі.

Поклавши в (1) $\vec{R}_n = \vec{R}_n^0 + \vec{\xi}_n$, де \vec{R}_n^0 – радіус-вектор йона у відсутність поверхні поділу, в квадратичному по $|\vec{\xi}_n|$ наближенні розраховано вільну енергію F моделі (1) і з умови

$$\vec{\nabla}_{\xi} F = 0 \quad (2)$$

отримано та розв’язано рівняння для зміщень $\vec{\xi}_n$, які мінімізують вільну енергію F .

Отримано вирази для діагональної складової тензора напружень σ_{ik} з урахуванням умов рівноваги на поверхні. Це дозволяє розрахувати зміну об’єму елементарної комірки приповерхневих йонних шарів, яка зі свого боку дозволить отримати зміну густини йонів у приповерхневій області металу.

1. *Нагірний Т.С., Червінка К.А.* Основи механіки локально неоднорідних пружних тіл. Основи наномеханіки II. – Львів: Растр-7, 2014. – 167 с.
2. *Ваврух М.В., Костробій П.П., Маркович Б.М.* Базисний підхід в теорії багатоелектронних систем. – Львів: Растр-7, 2017. – 510 с.

MODELING OF THE SURFACE INFLUENCE ON THE ION DENSITY IN SEMI-INFINITE METALLIC SYSTEMS

We propose and investigate a mathematical model for describing the displacement of near-surface ion layers and changes in ion density in the near-surface region in metallic systems with a "metal-vacuum" separation surface.