

Фадель Хайдер Кассим Фадель

**ЭЛЕКТРОННЫЕ И СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С
АДСОРБИРОВАННЫМИ АТОМАМИ ПРИ НАЛИЧИИ
ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И МАГНИТНОГО ПОЛЕЙ**

Специальности:

01.04.02 – теоретическая физика

01.04.04 – физическая электроника

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Махачкала 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования
"Дагестанский Государственный Университет"

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Мусаев Гапиз Мусаевич

Официальные оппоненты: **Поляков Петр Александрович;** доктор физико-математических наук, профессор, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Гаджиев Синдибад Магомедович; доктор физико-математических наук, профессор, Дагестанский государственный университет.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт общей физики им А.М. Прохорова Российской академии наук»

Защита диссертации состоится «27» декабря 2013 года в 14⁰⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.053.02 при ФГБОУ ВПО «Дагестанский государственный университет» по адресу: 367025, г. Махачкала, ул. Дзержинского 12, актовый зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВПО «Дагестанский государственный университет».

Автореферат разослан « 26 » ноября 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Курбанисмаилов В.С.

Общая характеристика работы

Актуальность темы: Исследования низкоразмерных систем и наноструктур являются одними из важнейших в физике конденсированного состояния, в том числе и физической электроники, что связано с широким применением таких систем в современной нанотехнологии. В наноструктуре особенно активно исследуются макроскопические квантовые явления, такие, как макроскопическая квантовая когерентность и макроскопическое квантовое туннелирование.

Существенный прогресс в понимании свойств основного состояния и термодинамики одно- и двумерных систем был достигнут благодаря применению численных методов, но эти методы не могут заменить аналитических подходов, позволяющих описать термодинамические свойства таких систем в широком интервале температур и являющихся полезными как для теоретического понимания физических свойств, не очевидных из результатов численного расчета, так и для практических целей описания реальных структур [1].

Физика поверхностных явлений в настоящее время является одним из наиболее развивающихся разделов физической науки. Именно на фундаментальных исследованиях в области физики поверхности твердого тела основаны успехи современной микро и наноэлектроники, гетерогенного катализа, космических технологий. Поэтому исследование электронных, атомных и молекулярных процессов, происходящих на поверхности твердых тел, остается актуальной задачей.

Отметим, что взаимодействие магнитных атомов на поверхности немагнитного материала является проблемой физики конденсированного состояния, которая обычно решается в рамках модели Андерсона или Кондо.

Известно, что поверхностная энергия [2] становится существенной, особенно когда мы рассматриваем магнитные свойства низкоразмерных систем. Но до сих пор не построена строгая и последовательная теория поверхностного магнетизма, которая учитывая бы не только спин - спиновые но и псевдоспин - фононное и псевдоспин - псевдоспиновое взаимодействия.

Немаловажное значение при исследовании особенностей свойств поверхности играют процессы адсорбции, которые показывают, что силы межмолекулярного взаимодействия на границе раздела не скомпенсированы и пограничный слой обладает избыточной энергией. Но до сих пор не создана единая теория, которая описывала бы любые процессы адсорбции, а

существующие частные разработки основываются на различных моделях. В связи с этим достаточно интересным, на наш взгляд, является теоретическое исследование явления адсорбции на поверхности металлов при наличии электрического и магнитного полей. Отметим также, что одним из интересных материалов в вопросе исследования поверхности является графен, который состоит из атомов углерода, образующих плотную двумерную кристаллическую структуру [3,4]. Открытие его интересных и уникальных свойств привлекали внимание многих исследователей. В частности, в рамках модели Андерсона построена теория адсорбции атомов на поверхности монослоя графена, а также теория электронных состояний адсорбированных на поверхности графена. Особый интерес представляет исследование влияния магнитного поля на плотность состояний и переходящий заряд для адсорбции атомов на металле и графене.

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование спиновых и электронных состояний низкоразмерных систем при наличии внешних электрического и магнитного полей.

Для достижения поставленной цели ставились и решались следующие задачи:

1. Получение выражения для поверхностного гейзенберговского гамильтониана в представлении вторичного квантования.
2. Определение спектра спин – фононного и псевдоспин – фононного взаимодействий.
3. Исследование влияния электрического поля на зарядовое состояние и потенциальную энергию поверхности магнитного материала.
4. Исследование зависимости плотности состояний от расстояния между адатомами и поверхностью металла.
5. Используя обобщенную модель Андерсона – Ньюнса, определить на поверхности металла плотность состояний адатома и переходящий заряд при наличии внешнего магнитного поля.
6. Исследование изменения плотности состояний и переходящего заряда на графене, связанные с адсорбцией в квантующем магнитном поле.

Научная новизна полученных автором результатов:

1. Рассмотрен вопрос влияния поверхностной энергии на гейзенберговский спиновый гамильтониан и получено выражение для поверхностного члена. Определены спектры спин - фононного и псевдоспин - фононного взаимодействия.

2. Используя в качестве объекта изучения систему $Na/Ni(110)$, рассчитаны плотности состояний адатома и их зависимости от приложенного электрического поля и расстояния от адатома до поверхности.
3. Рассмотрена зависимость плотности состояний от расстояния между адатомом и поверхностью в случаях «магнитного» и «немагнитного» решений.
4. Развита теория адсорбции атомов на поверхности металла при наличии сильного магнитного поля.
5. Обобщена модель Андерсона – Ньюнса адсорбции атомов на графене при наличии квантующего магнитного поля.
6. Исследованы изменения плотности состояний и переходящего заряда адатомов как на поверхности ферромагнетика, так и графена при наличии магнитного поля.

Теоретическая и практическая значимость: Полученные в диссертационной работе результаты расширяют физические представления о магнетизме низкоразмерных систем и наноструктур, которые могут быть использованы при создании новых технологий микро и наноэлектроники. Эти результаты могут быть полезными при создании современной квантовой теории конденсированного состояния и в частности магнетизма.

Можно отметить, что большинство эффектов, которые используются в современной микроэлектронике, основано на явлениях, происходящих на поверхности, и поэтому практически очень важным является исследование явлений, определяющих механизмы и характер протекания поверхностных процессов.

На основе полученных результатов по исследованию адсорбции на поверхности никеля можно сделать вывод о том, что адсорбция на поверхности других переходных металлов может быть аналогичной. Эти результаты могут быть использованы для создания низкоразмерных магнитных систем с управляемыми параметрами.

Кроме того, для создания низкоразмерных структур с управляемыми параметрами и создания на их основе современных технических и технологических процессов представляет большую ценность теоретическое рассмотрение в настоящей работе низкоразмерной системы адатом – графен – подложка. Теоретическое рассмотрение адсорбции атомов на поверхности металла и графена при наличии сильного магнитного поля может быть использовано при экспериментальном изучении размерных структур.

В данной работе использованы представления вторичного квантования, а также метод функций Грина квантовой статистики, которые бесспорно

являются наиболее успешными при теоретическом исследовании систем, состояниях из многих частиц.

Положения, выносимые на защиту:

1. Поверхностная энергия спиновой системы играет важную роль при построении гамильтониана Гейзенберга для обычных структур. Рассмотренный в работе поверхностный гамильтониан представлен в представлении вторичного квантования.
2. Исходя из введенных представлений «псевдоатом», «псевдоспин» рассмотрен энергетический спектр псевдоспин – фононного взаимодействия.
3. Аналитические выражения для эффективных зарядов и энергии хемосорбции в рамках модели Андерсона – Ньюнса.
4. Обобщение модели Андерсона – Ньюнса на случай адсорбции атомов на поверхности переходных металлов при наличии сильного магнитного поля.
5. Развитие теории адсорбции атомов на поверхности графена при наличии квантующего магнитного поля.
6. Плотность состояний и переходящий заряд адатомов на поверхности металла и графена при наличии квантующего магнитного поля.

Личный вклад автора: Диссертация представляет собой результат самостоятельной исследовательской работы автора, обобщающей полученные им результаты. В работах, выполненных в соавторстве, научный вклад автора является решающим. Все математически выводы, численные расчеты, сравнения с экспериментальными результатами и анализ полученных данных проведены автором лично.

Достоверность результатов: Полученные в диссертационной работе результаты проверены и доказаны с помощью достоверных аналитических методов квантовой статистики. Достоверность результатов определена корректным применением методов исследования. Кроме того, некоторые результаты расчета были сравнены с экспериментальными данными и имеют хорошее совпадение.

Апробация работы: Основные результаты исследований, изложенные в диссертации, были представлены на ежегодных итоговых конференциях профессорско-преподавательского состава Дагестанского государственного университета; Международной конференции молодых ученых, студентов и

аспирантов «Ломоносов-2012г» (Москва); XVIII Всероссийской научной конференции студентов - физиков и молодых ученых ВНКСФ-18 (г.Красноярск, 2012г); VII Всероссийской конференции ФЭ-2012г (г.Махачкала, 2012г); XIX Всероссийской научной конференции студентов - физиков и молодых ученых ВНКСФ-19 (г.Архангельск, 2013г); VI Всероссийской научно-практической конференции «Научная инициатива иностранных студентов и аспирантов российских вузов» (г.Томск, 2013г); Всероссийской конференции «Современные проблемы физики плазмы» (г.Махачкала, 2013г).

Публикации: По материалам диссертации опубликовано 11 печатных работ. Из них 4-статьи в научных журналах, рекомендованных ВАК МО и Н РФ. А остальные 7-тезисы, опубликованные в сборниках трудов Международных, Всероссийских и региональных конференций.

Структура и объем диссертации: Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, в котором сформулированы основные результаты и выводы. Общий объем работы: 101 страница, включая 12 рисунков, 2 таблицы и список литературы из 108 наименований.

Краткое содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, формулируются цель и задачи, научная новизна, практическая значимость, положения, выносимые на защиту. Представляется также апробация работы и перечень опубликованных работ по теме диссертации.

В первой главе дается краткий литературный обзор и основные представления различных магнитных модельных систем. Рассмотрен спиновой гамильтониан Гейзенберга в представлении чисел заполнения. Определена поверхностная энергия спин-спинового взаимодействия ферромагнетика и вид поверхностного гамильтониана модели Гейзенберга.

Рассмотрены спин - фононное и псевдоспин - фононное взаимодействия и сделаны сравнительные оценки этих взаимодействий. Показано, что оценочные величины спин – фононного и псевдоспин – фононного взаимодействия играют заметную роль особенно при низких температурах.

$$\varepsilon_{S.Vib} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_o}} \frac{J}{\Delta a}, \quad \varepsilon_{PS.Vib} \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_V N_V \omega_{orV}}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_S N_S \omega_{oS}}} \frac{F}{\Delta a_V \Delta a_S}.$$

где J и F - обменные интегралы для ближайших соседей, ω_o - дебаевская частота (для V или S - подсистем), Δa - амплитуда колебаний атомов из положения равновесия.

В более общем виде оценки $\varepsilon_{S.Vib}$ и $\varepsilon_{PS.Vib}$ могут быть записаны в виде:

$$\varepsilon_{S.Vib} \approx 0.25 \times 10^{-11} \frac{J}{\Delta a}, \quad \varepsilon_{PS.Vib} \approx 0.12 \times 10^{-12} \frac{F}{(\Delta a)^2}$$

Из этих выражений следует, что с ростом температуры (Δa возрастает) энергия псевдоспин – фононного взаимодействия уменьшается, что означает энергия $\varepsilon_{PS.Vib}$ играет заметную роль особенно при низких температурах.

Во второй главе рассматривается явление адсорбции атомов и ионов, используя квантовомеханический подход. Проведено исследование влияния электрического поля на зарядовое состояние и потенциальную энергию поверхности переходных металлов. Определена модель расчета, в которой используется формализм функций Грина.

Полная энергия хемосорбции определяется по формуле:

$$E_{CH}(S) = E_M(S) + E_I(S),$$

где первый член в первой части представляет собой энергия магнитного (атомного) состояния, а второй – энергия немагнитного состояния вблизи поверхности.

Внешнее электрическое или магнитное поле, в частности, может повлиять на состояние поверхности с адсорбированными атомами. Это может быть выражено в изменении уровней поверхностной энергии [5,6], которые могут быть сдвинуты на определенную величину.

В таком случае, энергия хемосорбции немагнитного состояния в зависимости от расстояния S и приложенного электрического поля F будет:

$$E_{CH}(S, F) = E_M(S, F) + E_I(S, F) + E_{IF}(S, F) - \frac{1}{2} \alpha_i F^2.$$

Третий член этого выражения представляет собой энергию, связанную с наличием эффективного заряда $|e|Z_{eff}(S, F)$ на расстоянии S от поверхности. Эта энергия может быть определена по формуле:

$$E_{IF}(S, F) = eF \int_{S+S_0}^0 Z_{eff}(S', F) dS'.$$

Четвертый член выражения E_{CH} представляет собой энергию ионной поляризации, где α_i - коэффициент поляризации электрического диполя иона.

Для системы $Na/Ni(110)$ рассчитанное число заполнения $n_a^{\pm\sigma}$ соответствующих уровней энергии $E_a^{\pm\sigma}$ и плотность состояний при $S=0$ и

$S=30 \text{ \AA}^\circ$ для различных значений приложенного электрического поля показывает резко выраженные пики (рисунки 2.1, 2.2).

Кроме того, если при $S=0$ плотность состояний адатомов на поверхности не зависит от того, приложено поле или нет, то в случае $S=30 \text{ \AA}^\circ$ плотность состояний адатомов зависит от наличия поля (рисунок 2.2).

На рисунке 2.3 показана энергия хемосорбции магнитного (пунктирная линия) и немагнитного (сплошная линия) решений в зависимости от расстояния до поверхности. Эти кривые пересекаются в точке S_C .

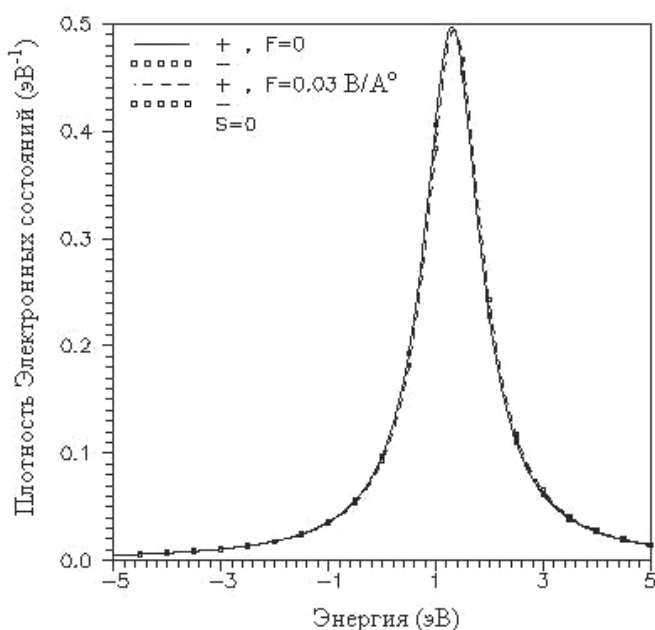


Рисунок 2.1: Плотность состояний адатомов на поверхности ($S=0$).

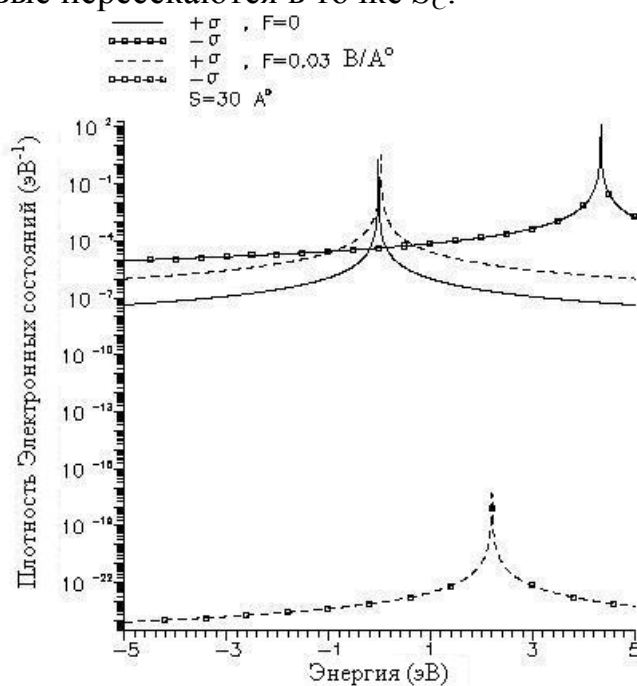


Рисунок 2.2: Плотность состояний адатомов на расстоянии ($S=30 \text{ \AA}^\circ$) до поверхности.

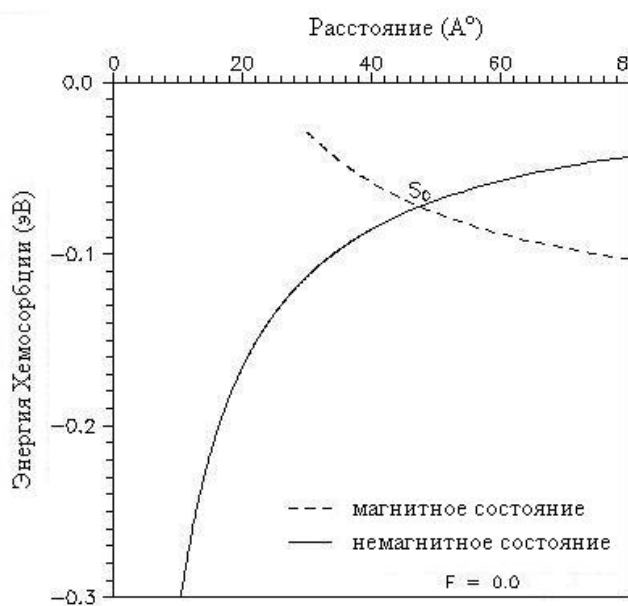


Рисунок 2.3: Энергия хемосорбции для системы $\text{Na/Ni}(110)$.

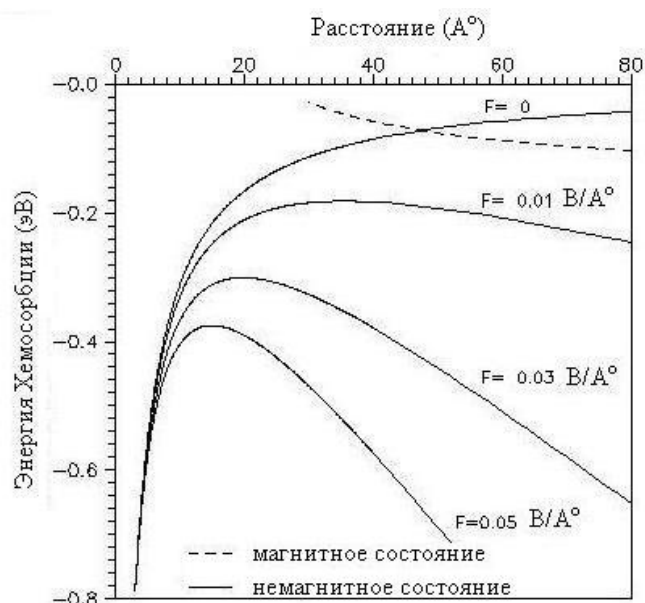


Рисунок 2.4: Энергия хемосорбции для системы $\text{Na/Ni}(110)$ с приложением электрического поля.

Рисунок 2.4 показывает механизм процесса десорбции, в котором адатом десорбирует как положительный ион через основное состояние системы, которое является ионным состоянием без пересечения с кривой магнитного состояния, то есть точка пересечения S_C исчезает.

Третья глава посвящена адсорбции атомов на поверхности металла при наличии внешнего магнитного поля. Адатомы и кластеры могут быть рассмотрены как предшественники тонких пленок, как продукты магнитных моно- и мультислоев. Такого рода системы привлекают внимание с тех пор, как они занимают место между классическим и квантовым магнетизмом.

При приложении магнитного поля происходит изменение характеристики подложки, адатома, а также процессов обмена между подложкой и адатомом. Здесь мы рассматриваем модель Андерсона – Ньюнса, в которой металлическая подложка представляется в виде двухмерного электронного газа с квадратичным спектром энергии. Для плотности состояний при наличии магнитного поля имеем:

$$\rho(\omega) = \frac{\rho_0 \hbar \omega_c}{\pi} \sum_{n=0, v=\pm 1}^{\infty} \frac{\Gamma}{(\omega - E_{n,v})^2 + \Gamma^2}. \quad (3.1)$$

На рисунке 3.1 показана зависимость плотности состояний от напряженности магнитного поля, из которого видно, что плотность состояний представляет собой контуры Лоренца, ширина которых определяется величиной Γ .

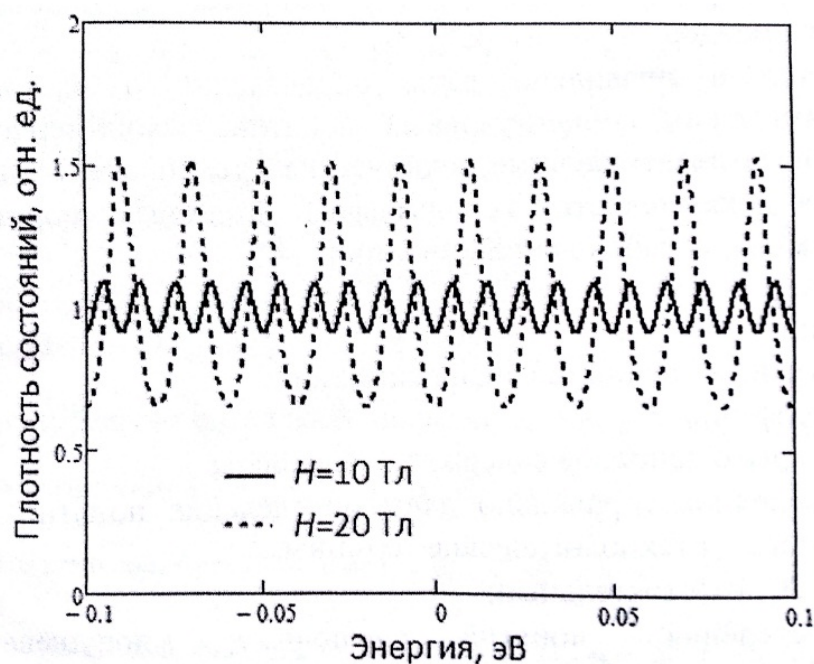


Рисунок 3.1: Поверхностная плотность состояний электронов поверхностного слоя металла во внешнем магнитном поле.

Сплошная линия соответствует $H = 10T$, пунктирная $H = 20T$.

Получено выражение для функции сдвига:

$$\Lambda(\omega) = \rho_o \hbar \omega_c |V|^2 \sum_{n=0, \nu=\pm 1}^{\infty} \frac{(\omega - E_{n, \nu})}{(\omega - E_{n, \nu})^2 + \Gamma^2}. \quad (3.2)$$

Зависимость приведенной функции сдвига $\Lambda(\omega)/\rho_o |V|^2$ от энергетической переменной показана на рисунке 3.2, из которого видно, что функция сдвига носит сильно осциллирующий характер. Последнее связано с наличием магнитного поля, а также с тем, что в обычных металлах расстояние между уровнями очень маленькое. При $H \rightarrow 0$ получаем $\rho(\omega) \rightarrow \rho_o$ и $\Lambda(\omega) \rightarrow 0$, то есть приходим к модели бесконечно широкой зоны.

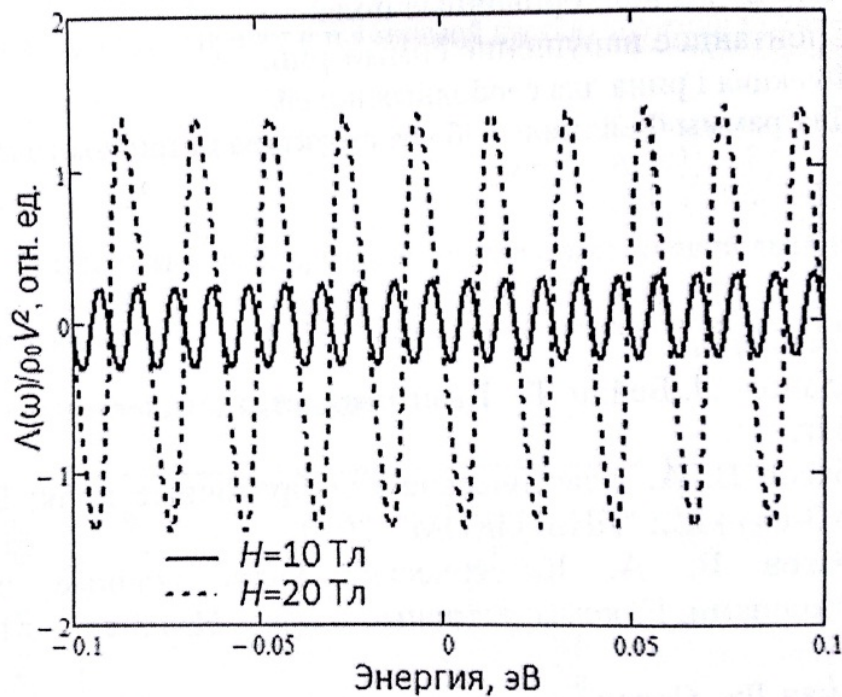


Рисунок 3.2: Функция сдвига квазиуровня адатома во внешнем магнитном поле.

Плотность состояний определяется мнимой частью функции Грина и будет иметь вид:

$$\rho_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_c}{(\omega - \varepsilon_a - \Lambda(\omega))^2 + \Gamma_c^2} \quad (3.3)$$

Используя выражения (3.1), (3.2) и (3.3) мы получили выражение для плотности состояний адатомов с положительной энергией квазиуровня при различных значениях напряженности магнитного поля и различных значениях потенциала гибридизации.

Эта плотность состояний показана на рисунке 3.3. Плотность состояний адатома существенно отличается от нуля при энергиях близких к ε_a . Это очевидно, так как рассматриваемый атом содержит один электрон с энергией

ε_a . При увеличении магнитного поля, уширение квазиуровня уменьшается, а высота пика при ε_a возрастает. Это свидетельствует о том, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению взаимодействия между адатомом и подложкой.

С увеличением магнитного поля происходит увеличение расстояния между соседними уровнями Ландау, что приводит к уменьшению числа уровней Ландау под уровнем Ферми. А, это означает уменьшение числа электронов, за счет которых и осуществляется связь между адатомом и подложкой.

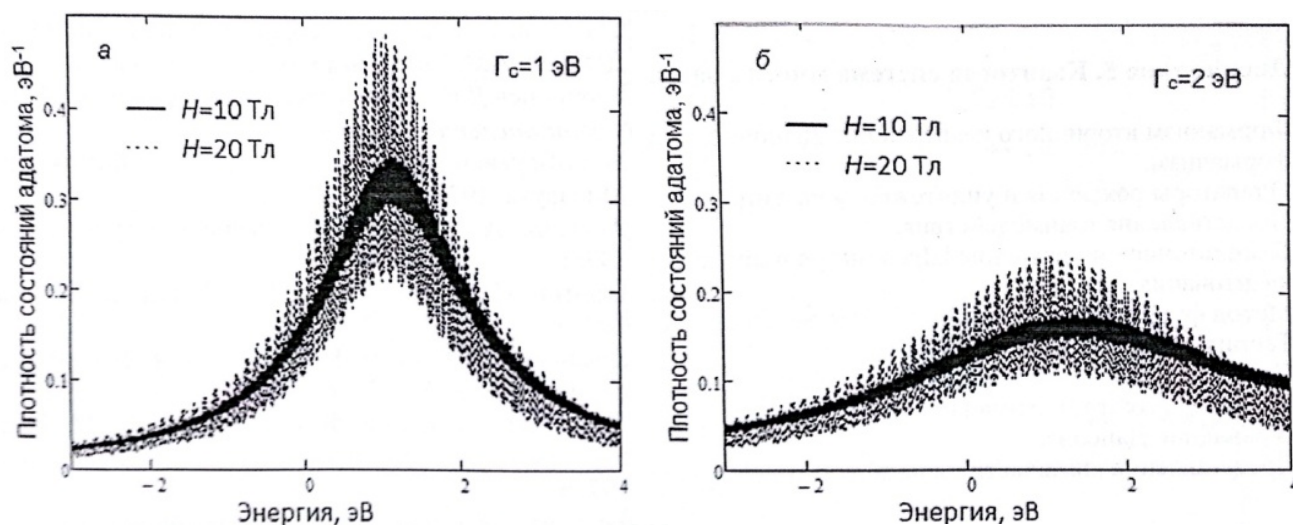


Рисунок 3.3: Плотность состояний адатома с положительной энергией квазиуровня $\varepsilon_a = 1$ эВ при различных значениях напряженности магнитного поля и потенциала гибридизации.

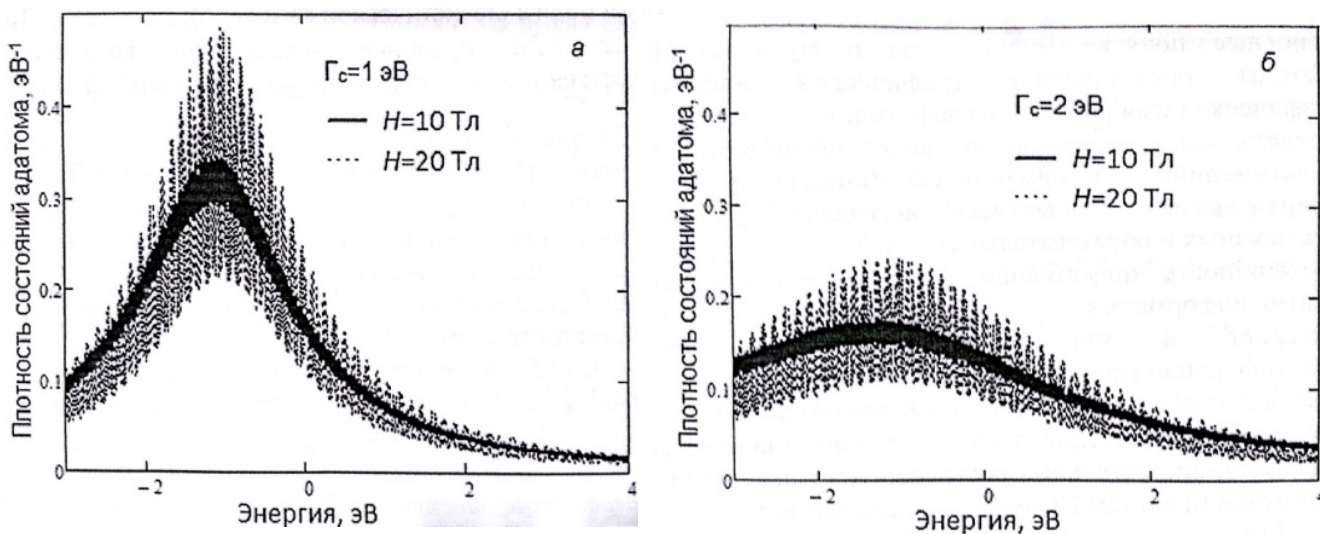


Рисунок 3.4: Плотность состояний адатома с отрицательной энергией квазиуровня $\varepsilon_a = -1$ эВ при различных значениях напряженности магнитного поля и потенциала гибридизации.

На рисунке 3.4 изображена плотность состояний адатома с отрицательной энергией квазиуровня $\varepsilon_a = -1$ эВ, при различных значениях напряженности магнитного поля и потенциала гибридизации.

Пренебрегая возможными взаимодействиями между адатомами (прямой и косвенный обмен электронами, дипольное взаимодействие и так далее), мы произвели расчет заряда адатома. Энергия квазиуровня определена аналогично работе [7] с помощью соотношения:

$$\varepsilon_a = \Phi - I + \frac{e^2}{4\lambda},$$

где Φ – работа выхода подложки, I – потенциал ионизации адатома, λ – среднее расстояние между адатомом и поверхностью подложки, $\frac{e^2}{4\lambda}$ –

внутриатомное кулоновское отталкивание. Потенциал гибридизации можно определить с помощью метода связывающего орбиталей Харрисона [8]. Здесь мы рассматриваем общие законы изменения заряда адатома при варьировании таких величин, как потенциал гибридизации, энергия квазиуровня адатома. Наиболее важной величиной, определяющей природу адсорбции, является переходящий заряд, равный индуцированному заряду адатома и определенному, как $\Delta q = (1 - n_a)e$, где e – заряд электрона.

Из рисунка 3.5 можно сделать вывод о том, что при $\varepsilon < E_F$ переходящий заряд мал, а при $\varepsilon \geq E_F$ его величина приближается к единице.

Это объясняется тем, что все уровни, лежащие ниже уровня Ферми, заняты электронами. Электрон с адатома не может перейти на эти уровни, а для энергий $\varepsilon \geq E_F$ наблюдается обратная картина. Можно отметить также, что при больших константах взаимодействия переходящий заряд почти линейно зависит от энергии квазиуровня адатома (рисунок 3.5 в).

В четвертой главе рассматривается адсорбция атомов на графене при наличии квантующего магнитного поля. Графен и другие углеродные структуры привлекают внимание ученых в связи с широким их применением в различных областях создания современных нанотехнологий. Он обладает линейным бесщелевым спектром квазичастиц. Спин - орбитальное взаимодействие в графене очень слабое. Адсорбция на монослое и бислое графена в модели Андерсона - Ньюнса изучалась многими авторами и в частности в работах [7, 9, 10].

Нами сделана попытка применить развиваемую в работе общую теорию для исследования адсорбции на поверхности графена в магнитном поле.

Получены выражения для плотности состояний и функции сдвига, аналогичные тем, которые рассматривались в главе III.

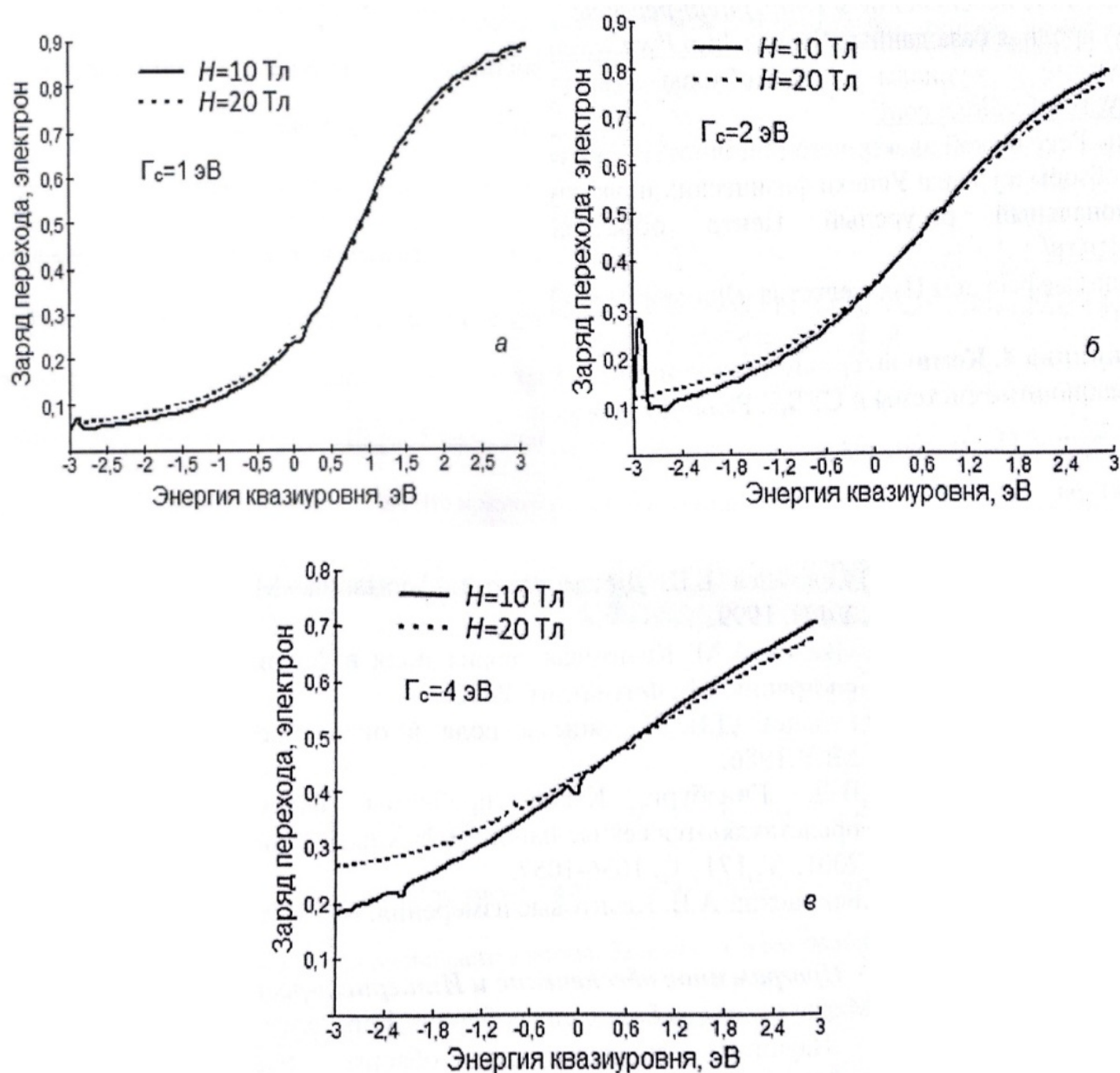


Рисунок 3.5: Зависимость переходящего заряда от энергии квазиуровня адатома при различных значениях константы взаимодействия и напряженности магнитного поля.

В данном случае выражения для плотности состояний возмущенного адсорбцией графена содержит концентрацию адатомов, тогда как в случае адсорбции одиночного адатома [11] надо положить $\eta \rightarrow 0$, что дает $\tilde{\rho}(\omega) = \rho(\omega)$. Совершенно другой результат мы будем иметь, если рассматривать не только полную плотность состояний, но и локальную, то есть плотность состояний непосредственно под адатомом. В этом случае необходимо положить $\eta = 1$, что и сделано в работе [11]. Случай $\eta = 1$ соответствует монослою. Но для больших концентраций адатомов искажение плотности состояний существенно, что вполне логично, поскольку адсорбция деформирует $2p_z$ -орбитали атомов углерода, за счет которой и формируется

зона Бриллюэна графена. Плотность состояний графена в поперечном магнитном поле при различных значениях приложенного магнитного поля показана на рисунке 4.1. Также как для адсорбции на поверхности металла, здесь имеет место осциллирующий характер зависимости функции сдвига в магнитном поле от энергетической переменной (см. рисунок 4.2). Зарядовый обмен между графеном и адсорбатом может изменить концентрацию носителей в графене, что и приводит к смещению уровня Ферми.

На рисунке 4.3 показана зависимость величины переходящего заряда от энергии квазиуровня адатома при двух значениях магнитного поля: $H = 10$ и 20 Тл. Из полученных результатов и показанных на рисунке 4.3 можно сделать вывод о том, что при $(\varepsilon_a < E_F)$ переходящий заряд мал по сравнению со случаем, когда $(\varepsilon_a > E_F)$. Это может быть объяснено тем, что все уровни, лежащие ниже уровня Ферми, заняты электронами.

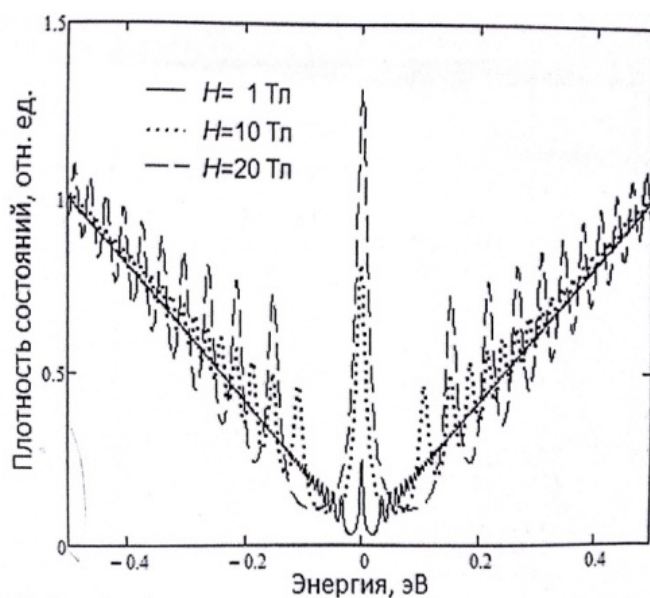


Рисунок 4.1: Плотность состояний графена.

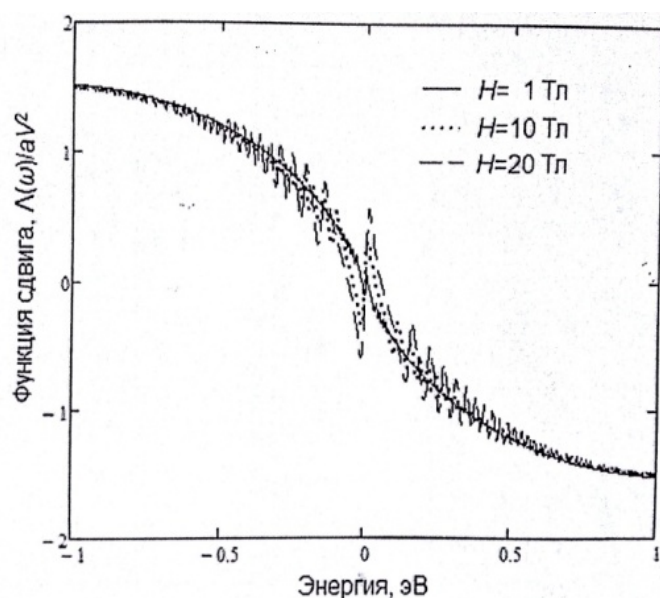


Рисунок 4.2: Функция сдвига квазиуровня графена.

Получено также то, что при энергии квазиуровня больше нуля эВ кривые для переходящего заряда практически не зависят от потенциала гибридизации. Из рисунков (4.3 а, б, в) видно, что когда энергия квазиуровня приближается к нулю, происходит резкий скачок переходящего заряда.

Другой важный вывод, который следует из рисунка 4.3, состоит в том, что вблизи уровня Ферми у графена наблюдается резкое изменение знака переходящего заряда. Во всем диапазоне энергий, заряд переходит с адатома на графен. То есть является положительной величиной, точнее, величина переходящего с адатома на графен заряда больше, чем величина заряда обратного перехода.

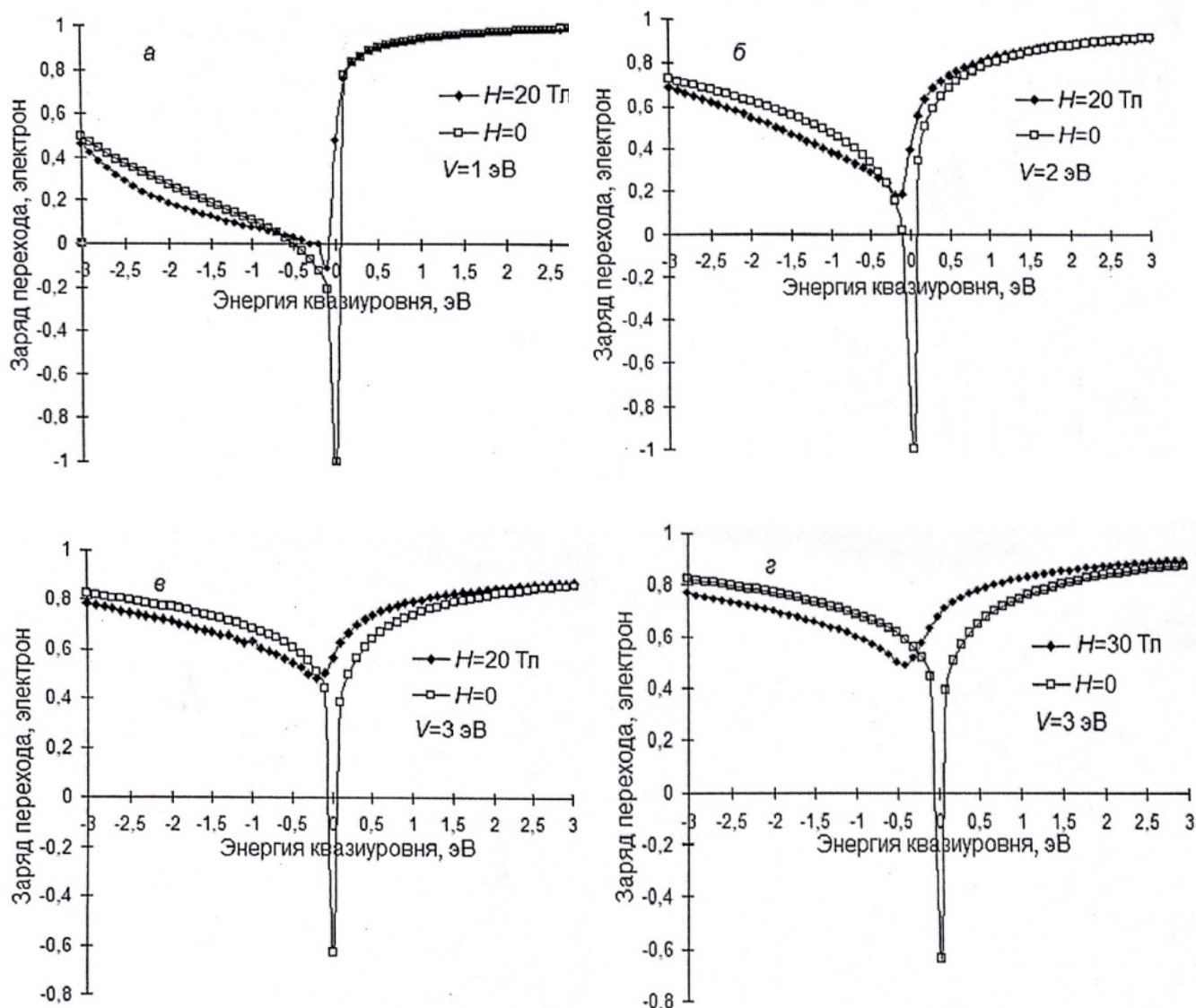


Рисунок 4.3: Переходящий заряд на графен в поперечном магнитном поле при различных значениях напряженности последнего.

Однако в непосредственной близости к уровню Ферми заряд переходит с графена на адатом (т.е. $\Delta q \approx -e$). Это связано с тем, что вблизи уровня Ферми электроны могут переходить на вышележащие уровни, так как те не заняты другими электронами.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе, а также рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы.

Основные результаты и выводы:

1. Получено выражение для гамильтониана Гейзенберга в представлении вторичного квантования с учетом "поверхности энергии".

2. Произведен расчет энергии спин – фононного и псевдаспин – фононного взаимодействий в приближении малого числа возбуждений, которые играют важную роль особенно при низких температурах.
3. Методом функцией Грина рассчитаны выражения для плотности состояний и числа заполнений для системы $Na/Ni(110)$. Показано, что плотность состояний адатомов на расстоянии $S=0$ не зависит от приложенного электрического поля, тогда как на расстояние $S=30 A^o$ до поверхности зависит от поля.
4. Произведено обобщение модели Андерсона – Ньюнса для адсорбции на поверхности металла на случай наличия внешнего магнитного поля, которое показывает изменение плотности состояний подложки и расщепление квазиуровня энергии адатомов.
5. Рассмотрена зависимость поверхностной плотности состояний электронов металла, а также зависимость функции сдвига во внешнем магнитном поле от энергетической переменной, которая показывает, что функция сдвига носит сильно осциллирующий характер.
6. Показано, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению взаимодействия между адатомом и подложкой.
7. Показано, что вблизи уровня Ферми у графена наблюдается резкое изменение знака переходящего заряда. В квантующем же магнитном поле это не происходит. Это может быть объяснено тем, что в квантующем магнитном поле электрон вблизи уровня Ферми перестает быть квазисвободным.

Цитируемая литература

1. Катанин А., Ирхин В.Ю. // УФН. 2007. Том 177. Вып. 6. С.639.
2. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Казбеков К.К.// Вестник МГУ. Серия3.Физика. Астрономия. 2011. № 5. С321.
3. Alanko G.A., Thurber A., Hanna C. B., and Punnoose A.// J.Appl.Phys. 2012. Vol. 111. Pp. 07.
4. Esquinazi P., Nahne R., Setzer A. *et. al.*// Journal of magnetism and magnetic materials. 2007. Vol. 317. Pp. 53-60.
5. Tsong T.T. // Rep.Progr.Phys. 1988. Vol. 51. №6. Pp. 759.
6. Gerlach R.L. and Rhodin T.N. // Surf.Sci. 1970. Vol. 19. №2. Pp. 403-426.
7. Давыдов С.Ю., Сабирова Г.И. // ФТТ. 2011. Том 53. Вып. 3. С. 608.
8. Harrison W.A. // Phys.Rev. B. 1983. Vol. 27. №6. С. 3592-3604.

9. Алисултанов З.З., Мейланов Р.П., Нухов А.К. // Письма в ЖТФ. 2013. Том 39. Вып. 3. С. 63-71.
10. Алисултанов З.З. // ФТТ. 2013. Том 55. Вып. 6. С. 1211-1220.
11. Давыдов С.Ю.// ФТТ. 2011. Том 53. Вып. 12. С. 2412-2423.

Основные публикации автора по теме диссертации

Статьи в научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Фадель Х.К., Нухов А.К., Мусаев Г.М. Взаимодействие атом-поверхность: влияние электрического поля на зарядовое состояние и потенциальную энергию поверхности.// Вестник Дагестанского государственного университета. 2012. Вып.6. С. 54-60.
2. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Алисултанов З.З., Фадель Х.К. Релаксационные и термодинамические параметры теории спин-волнового затухания в низкоразмерных магнетиках.// Поверхность: Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 7. С. 1-5 ; 2013. № 8, С. 19-23.
3. Фадель Х.К., Нухов А.К., Мусаев Г.М., Казбеков К.К. Учет поверхностной энергии в спиновом гамильтониане Гейзенберга.// Вестник Российского Университета Дружбы Народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. 2013. № 3. С. 118-128.
4. Алисултанов З.З., Мирзегасанова Н.А., Мусаев Г.М., Фадель Х.К. К теории адсорбции атомов на графене при наличии внешнего квантующего магнитного поля.// Инженерная Физика. 2013. № 11. С. 21-29.

В других изданиях:

5. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Казбеков К.К., Фадель Х.К. Некоторые особенности спин - волнового затухания в низкоразмерных магнетиках.// в сб.: Материалы XVIII Всероссийской конференции студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-18, Красноярск, 2012. С.71.
6. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Фадель Х.К. Оценка релаксационных параметров спинового спектра ферромагнетика.// в сб.: Материалы VII Всероссийской научной конференции по физической электронике. Махачкала, 2012. С.221-223.
7. Алисултанов З.З., Фадель Х.К., Нухов А.К. Перенормировка скорости Ферми электронов упорядоченного эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла или полупроводника.// в сб.: Материалы Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-19, Архангельск, 2013. С.53-54.

8. Фадель Х.К., Алисултанов З.З., Нухов А.К. Влияние квантующего магнитного поля на адсорбцию атомов на поверхности двумерных систем с дираковским спектром: Графена, топологического изолятора.// в сб.: Материалы Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-19, Архангельск, 2013. С.74-75.
9. Фадель Х.К. Отклик редкоземельных соединений в сильных магнитных полях.// в сб.: VI Всероссийская научно-практическая конференция «научная инициатива иностранных студентов и аспирантов российских вузов», г. Томск, 2013. С.396-398.
10. Фадель Х.К., Мусаев Г.М., Нухов А.К., Халилова А.Х. Влияние электрического поля на зарядовое состояние и потенциальную энергию поверхности.// в сб.: Материалы Всероссийской конференции «Современные проблемы физики плазмы». г. Махачкала, 2013.
11. Нухов А.К., Мусаев Г.М., Казбеков К.К., Фадель Х.К. Некоторые особенности в теории спин – волнового затухания в низкоразмерных магнетиках.//Труды 46-ой школы ФГБУ «ПИЯФ» по физике конденсированного состояния, Санкт – Петербург, 2012.