

两种离子的势能大小. 因此, 定义入射离子 DC 后的能量沉积与靶离子势能之比为碰撞体系的势能参数 Ω . Ω 表示为

$$\Omega = \frac{\Delta E_{2e}}{I_{\text{He}}^{(1)} + I_{\text{He}}^{(2)}} = \frac{I_A^{(q)} - (I_{\text{He}}^{(1)} + I_{\text{He}}^{(2)})}{I_{\text{He}}^{(1)} + I_{\text{He}}^{(2)}}. \quad (6)$$

本工作研究的等电荷序列 ($q = 4, 5, 6, 7$) 离子与 He 原子碰撞体系的 Ω 值如图 1 所示, 图中横坐标为入射离子的原子序数 Z . 由图 1 可见: Ω 值在 $q = 4, 5, 6, 7$ 的四个序列里, 在 Z 相同的情况下, q 越大 Ω 越大; 在 q 相同的情况下, Z 越大 Ω 的变化趋势越小. 这说明 Ω 可以反映等电荷序列碰撞体系的碰撞反应能力.

3.2. 势能参数坐标下的 DC 和 TI 相对截面变化

图 2 为势能参数坐标下四个等电荷序列 R_{TI} 和 R_{DC} 的实验结果比较, 图中标注了碰撞系统的入射离子种类, 其中 $\text{Ar}^{4+} + \text{He}, \text{Ne}^{5+} + \text{He}, \text{Ar}^{5+} + \text{He}, \text{Ar}^{6+} + \text{He}, \text{Ne}^{7+} + \text{He}, \text{Ar}^{7+} + \text{He}$ 和 $\text{Kr}^{7+} + \text{He}$ 碰撞系统的 R_{TI} 和 R_{DC} 取自文献 [16].

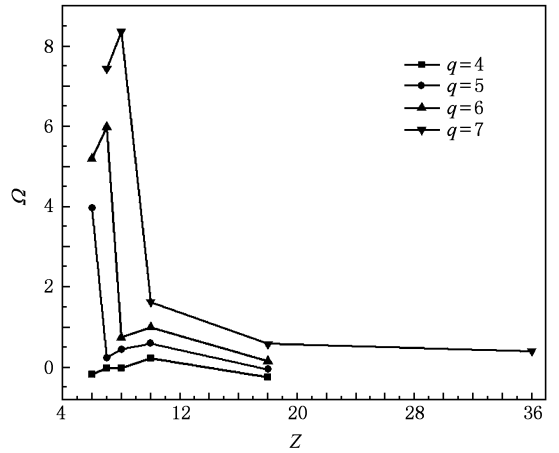


图 1 等电荷序列 ($q = 4, 5, 6, 7$) 离子与 He 原子碰撞体系的 Ω 与原子序数 Z 的关系

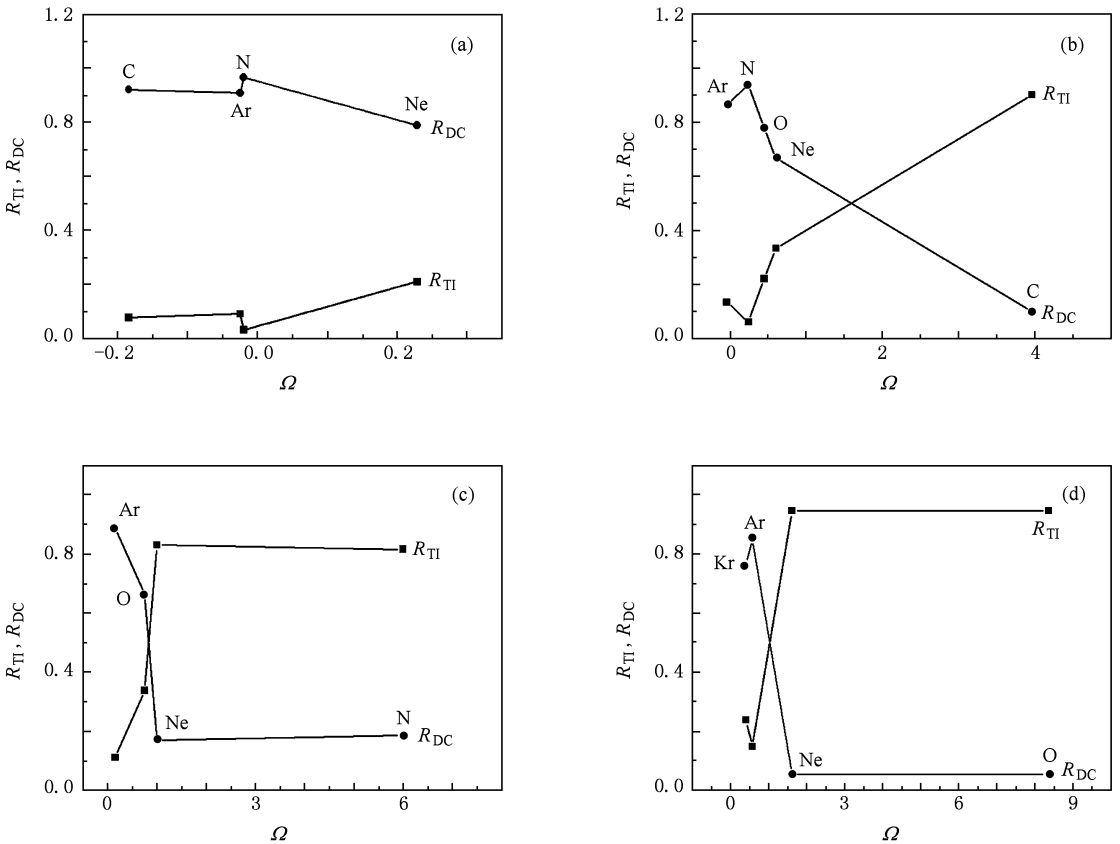


图 2 等电荷序列 ($q = 4, 5, 6, 7$) 离子与 He 原子碰撞体系的 R_{TI} 和 R_{DC} 在势能参数 Ω 下的变化 (a) $q = 4$, (b) $q = 5$, (c) $q = 6$, (d) $q = 7$

由图 2 可见,对于 $q = 4$ 序列,四个碰撞系统的 Ω 值都小于 1.0, $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, DC 占绝对优势. 随着 Ω 值的增大, R_{TI} 与 R_{DC} 逐渐接近. 对于 $q = 5$ 序列, $\text{Ar}^{5+} + \text{He}$, $\text{N}^{5+} + \text{He}$, $\text{O}^{5+} + \text{He}$ 和 $\text{Ne}^{5+} + \text{He}$ 碰撞系统与 $q = 4$ 序列的四个碰撞系统发生的现象相同, 而 $\text{C}^{5+} + \text{He}$ 碰撞系统出现截面比反转现象, 即 $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$. 对于 $q = 6$ 序列, $\text{Ar}^{6+} + \text{He}$ 和 $\text{O}^{6+} + \text{He}$ 碰撞系统的 $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, 而 $\text{Ne}^{6+} + \text{He}$ 和 $\text{N}^{6+} + \text{He}$ 的 $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$, 出现截面比反转的位置在 $\Omega = 1.0$ 处. 对于 $q = 7$ 序列, $\text{Kr}^{7+} + \text{He}$ 和 $\text{Ar}^{7+} + \text{He}$ 的 $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, 而 $\text{Ne}^{7+} + \text{He}$ 和 $\text{O}^{7+} + \text{He}$ 的 $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$.

从以上比较可以看出,在势能参数坐标下,等电荷序列 R_{TI} 和 R_{DC} 变化趋势基本一致, $\Omega < 1.0$ 时, $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, DC 占绝对优势, $\Omega \geq 1.0$ 时, 出现截面比反转现象, $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$, TI 占绝对优势. 图 2 结果显示, 截面比反转现象与电荷态大小的关系比较弱, R_{TI} 和 R_{DC} 的值主要由碰撞系统的势能参数 Ω 决定.

当不考虑入射离子电荷态的大小时,碰撞体系的截面比 R_{TI} 和 R_{DC} 随势能参数 Ω 的变化趋势如图 3 所示. 图 3 中的数据点全部来自图 2, 为了比较势能参数对碰撞系统截面比变化的总体效应, 图中不再标明每个数据点对应的碰撞体系. 由图 3 可见: 当 $\Omega < 1.0$ 时, $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, DC 占绝对优势; 当 $\Omega \geq 1.0$ 时, 即从 $\text{Ne}^{6+} + \text{He}$ 碰撞系统开始出现 $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$ 的截面比反转现象, 即 TI 占绝对优势. 由此可见, Ω 决定了高电荷态离子与 He 碰撞系统双电子转移反应道的选择过程. DC 后的高电荷态离子与 He^{2+} 两种离子对“蒸发”掉的双电子作用机会相同, 但是作用势能不同. 两者作用势能的不同决定了不同的反应道截面比, 如果 DC 后高电荷态离子的势能小于 He^{2+} 的势能, 即 $\Omega < 1.0$, 则能量沉积主要完成电子“蒸发”过程并形成稳定的 DC, 此时反应道选择表现为 $R_{\text{TI}} < R_{\text{DC}}$, DC 在双电子转移过程中占绝对优势. 反之, 当 $\Omega \geq 1.0$ 时, 能量沉积开始能够满足第二个过程的完成, 反应将持续到入射离子俘获后的自电离衰变, 此时反应道表现为 $R_{\text{TI}} > R_{\text{DC}}$, TI 在双电子转移

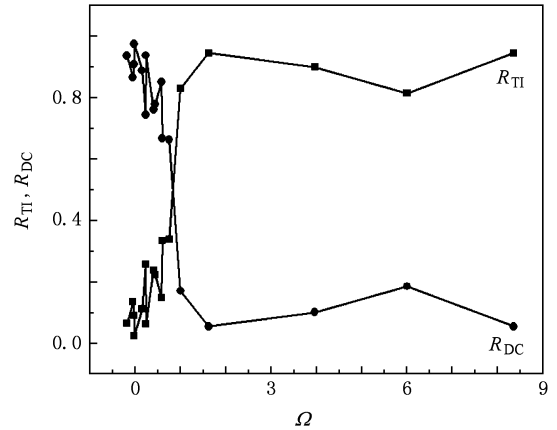


图 3 不考虑入射离子电荷态下的等电荷序列 ($q = 4, 5, 6, 7$) 离子与 He 原子碰撞体系的 R_{TI} 和 R_{DC} 在势能参数 Ω 下的变化

过程中占绝对优势.

4. 结 论

通过双电子转移的势能参数 Ω , 系统研究了低能高电荷态离子 ($q = 4, 5, 6, 7$) 与 He 碰撞的双电子转移反应道的选择规律. 结果表明, 在 Ω 坐标下, DC 反应道和 TI 反应道之间存在明显的竞争关系, 并且两个反应道的相对截面比在 $\Omega = 1.0$ 时出现反转效应, $\Omega < 1.0$ 时 DC 为主反应道, $\Omega \geq 1.0$ 时反应道的相对截面出现反转, TI 成为主反应道. 研究表明, TI 反应道是 DC 反应道的衰变过程, DC 完成后, 如果入射离子俘获双电子后剩余势能沉积大于 He^{2+} 的势能沉积, 其中一个电子将存在较大的二次电离概率, 否则 DC 就是一种稳定的反应道. 当然, 在更多电子参与的碰撞体系中 (如高电荷态离子与 Ar, Kr 或 Xe 等靶原子的碰撞体系), Ω 对反应道选择的影响有待进一步的实验研究和理论分析.

感谢中国科学院近代物理研究所蔡晓红教授和于得洋副研究员在实验方面给予的支持和帮助.

- [1] Rescigno T N, Baertschy M, Isaacs W A 1999 *Science* **286** 2474
 [2] McCurdy C W, Rescigno T N 2000 *Phys. Rev. A* **62** 32712
 [3] McGuire J H, Godunov A L, Tolmanov S G 2001 *Phys. Rev. A* **63** 052706
 [4] Cao S P, Ma X W, Dorn A, Dürr M, Ullrich J 2007 *Acta Phys.*

- Sin.* **56** 6386 (in Chinese) [曹士娉、马新文、Dorn A、Dürr M、Ullrich J 2007 物理学报 **56** 6386]
 [5] Andersson H, Astner G, Cederquist H 1988 *J. Phys. B* **21** L187
 [6] Iwai T, Kaneko Y, Kimura M 1984 *J. Phys. B* **17** L95
 [7] Tawara H, Iwai T, Kaneko Y 1985 *J. Phys. B* **18** 337

- [8] Mann R 1986 *Z. Phys.* D **3** 85
- [9] Selberg N, Biedermann C, Cederquist H 1997 *Phys. Rev. A* **56** 6
- [10] Flécharde X, Harel C, Jouin H 2001 *J. Phys.* B **34** 2759
- [11] Cai X H, Chen X M, Shen Z Y 1996 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **114** 208
- [12] Cai X H, Shen Z Y, Chen X M 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 6 (in Chinese) [蔡晓红、申自勇、陈熙萌 1997 物理学报 **46** 6]
- [13] Cao Z R, Cai X H, Yu D Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2943 (in Chinese) [曹柱荣、蔡晓红、于得洋 2004 物理学报 **53** 2943]
- [14] Müller A, Groh W, Salzborn E 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 107
- [15] Xu K Z 2000 *Advanced Atomic and Molecular Physics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [徐克尊 2000 高等原子分子物理学 (北京:科学出版社)]
- [16] Justiniano E, Cocke C L, Gray T J 1984 *Phys. Rev. A* **29** 1088

Cross section inversion between double electron capture and transfer ionisation in low energy collision of highly charged ion ($4 \leq q \leq 7$) with He*

Lü Ying^{1)†} Chen Xi-Meng¹⁾ Cao Zhu-Rong²⁾ Wu Wei-Dong²⁾

1) (School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

2) (Research Center of Laser Fusion, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 3 May 2009; revised manuscript received 23 December 2009)

Abstract

Based on the potential parameter Ω , which was defined as energy deposits ratio of incidence ion with target ion after double electron capture, the selection rule between double electron capture and transfer ionization of helium target induced by A^{q+} ($q=4,5,6,7$) ions was studied. It is found that there is a cross point for the cross-section ratio curve of double electron capture and transfer ionization at $\Omega=1.0$, and for $\Omega < 1.0$ the double electron capture is a key reaction channel of double electron transfer, for $\Omega \geq 1.0$ the transfer ionization is a key reaction channel of double electron transfer.

Keywords: ion-atom collision, potential parameter, double electron capture, transfer ionization

PACC: 3470, 3450H, 8230F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10134010, 10375080, 10304019).

† E-mail: lvy07@lzu.cn

扩展哈伯德模型中原子团簇的 结构和热力学性质研究*

郑晓军 张 俊 黄忠兵[†]

(湖北大学物理学与电子技术学院, 武汉 430062)

(2009 年 9 月 7 日收到; 2010 年 1 月 25 日收到修改稿)

采用数值精确对角化方法, 在加入了近邻电子库仑排斥作用的扩展哈伯德模型中对原子数 $N=5$ 和 $N=6$ 的原子团簇进行了研究. 首先得到了对应于不同强度的电子在位库仑作用能 U 、近邻排斥作用能 V , 以及不同电子填充数的团簇的优化结构和相应的总自旋 S . 研究表明, 电子的近邻排斥能 V 的引入会使团簇向成键数目减少的链状或星状结构改变. 然后结合团簇的能级特征, 分析了团簇的热容和磁化率等热力学特性, 其中热容曲线的峰值位置可由团簇的低能激发给出合理的解释.

关键词: 原子团簇, 扩展哈伯德模型, 近邻库仑排斥能

PACC: 3640, 7420M

1. 引 言

作为各种物质由原子和分子向大块物质转变的过渡状态, 团簇的研究对于理解各种宏观物质的物理性质有着很重要的意义^[1,2]. 对团簇进行深入的实验和理论研究不仅可以帮助理解从单个原子到固体材料其间结构和性质的演化过程, 而且为探索合成新的以原子团簇内禀性质为基础的纳米磁性材料提供了重要的思路和科学依据^[3-13].

在对团簇的研究中, 考察在不同的团簇规模以及不同的粒子间相互作用形式下团簇结构的变化情况, 以及随着结构的变化团簇的各种物理性质(如磁性、热容等)将发生怎样的变化是一个基础性而又具有挑战性的课题. 1994 年 Paster 等^[14-20]首次在哈伯德模型下, 采用 Lanczos 迭代方法得到了对应于不同的在位库仑排斥能和电子填充浓度的过渡金属原子团簇的基态优化结构, 以及对应于这些结构团簇的热容和磁化率等热力学性质.

然而, 在 Paster 等^[14-20]所采用的哈伯德模型中, 关于电子间的相互作用部分只考虑了当两个自旋相反的电子占据同一个原子轨道时所引起的库

仑排斥能 U . 而在很长的一段时间里, 近邻原子间的库仑排斥能 V 导致的物理效应已经引起了人们的广泛关注. 在对一维扩展哈伯德模型的研究中, Shibata 等^[21]通过计算得到了导致电荷密度波(CDW)出现的近邻相互作用能 V 的强度范围. 在对二维扩展哈伯德模型的研究中, Onari 等^[22]得到了对应于不同强度 V 和能带填充度 n 的系统的相图. 文献[22]的研究结果表明, 近邻相互作用的引入导致了电荷涨落的增强, 从而使超导配对形式发生变化, 并且在 $V=U/4$ 时导致了 CDW 的出现. 大量对于扩展哈伯德模型进行的研究^[23-29]都表明, 近邻原子间的电子相互作用对于系统的性质有着重要的影响.

为了进一步理解团簇的结构和热力学性质, 特别是近邻原子间库仑相互作用引起的物理效应, 本文基于扩展哈伯德模型对原子数 N 较小的团簇进行了研究. 得到了原子数 $N=5$ 和 $N=6$ 的团簇在引入不同强度的近邻库仑排斥能 V 后其基态的一系列优化结构, 同时还得到了对应的磁化率以及热容曲线.

2. 模型及计算结果

采用的扩展哈伯德模型形式如下:

* 湖北省教育厅青年基金(批准号: Q200610001)和国家自然科学基金(批准号: 10674043)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: huangzb@hubu.edu.cn

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}). \quad (1)$$

这里 $c_{i\sigma}^\dagger$ 和 $c_{j\sigma}$ 分别为原子 i 上自旋为 σ 的电子产生和湮没算符, $n_{i\sigma}$ 为原子 i 上的电子数算符, t 为最近邻原子间电子的跳跃能. 选取 t 为单位能量, 即 $t = 1$; U 为在位库仑排斥能, V 为近邻原子间电子的库仑排斥能. (1) 式中的 i, j 限于成键的两个原子.

本文采用数值精确对角化方法找到对应于不同几何结构的团簇的基态及各激发态的能量本征值和本征矢量, 并利用它们来计算得到团簇的热容和磁化率.

首先对应于不同的 $U/t, V/t$ 值以及不同的电子填充数 n_e , 得到了团簇的各个优化结构(基态能量最低的几何结构)以及总自旋 S , 结果如图 1 和图 2 所示, 其中图 1 对应于原子数 $N = 5$, 图 2 对应于原子数 $N = 6$.

首先看图 1 所示原子数 $N = 5$ 时所得到的团簇优化结构.

在 $V/t = 0$ 时, 得到的结果与文献[14]的结果完全一致. 在 n_e 较小时, 双占据的情况很少, 在位库仑排斥能 U 对团簇结构基本没有影响, 而由于载流子为电子, 原子间成键有利于动能的降低, 因此团簇结构较为紧凑. 在 n_e 较大时, 载流子以空穴为主, 减少原子间的成键反而有利于动能的降低, 因此团簇结构较为开放. 在电子填充浓度为半满附近, 在位库仑排斥能与动能之间的相互竞争最为微妙, 随着 U 的增大, 团簇的结构中一些较弱的键开始断开, 原来紧凑的结构变得较为开放. 当 U 增大到一定程度时 ($U/t \geq 5-6$), 新的键又开始产生, 这些新产生的键有利于能量的降低. 这是因为更高的配位数有利于强关联电子在运动中相互规避, 从而有利于动能的降低. 进一步, 更多键的产生使得团簇结构紧凑而具有很高的对称性, 这就使得电子在每个原子上的密度分布更加平均, 从而有效地降低了在位库仑排斥能^[14].

当近邻的电子相互作用能 V 被引入后, 团簇的结构发生了许多新的变化. 在 $V/t = 0.5$ 时, 首先发生变化的是对应于 $n_e = 4$ 的团簇结构, 原来紧凑的结构都消失了, 取而代之的是一个较开放的三角结构. 对应于 $n_e \geq N$ 的情况, 团簇结构受到 V 的影响更大, 新的开放结构开始显现, 甚至在 $n_e = 5, U/t \geq 2$ 和 $n_e = 7, U/t \geq 7$ 时出现了一维链的结构. 这些现

象表明团簇结构对于 V 的引入非常敏感, 只要有一个较小的 V 就会使团簇结构产生较大的改变.

在 V/t 继续增大到 1.0 时, 又有新的结构出现. 首先, $n_e = 3$ 时, 在 V 作用下团簇中的键就已经开始断开. 在 $n_e = 4, U/t \leq 0.5$ 时, 近邻排斥能 V 和电子跳跃项对于团簇结构的形成起主要作用, 表现为其中一个原子只有一个键与之连接(近似“孤立”原子)而另外 4 个原子之间以最大的键数相连接, 电子将尽可能地分布在这一“孤立”原子以及不与这一原子直接连接的另外 3 个原子上, 这样系统将在保持动能降低的同时最大限度地减小近邻电子库仑排斥能. 在 $n_e \geq 5$ 时, 原来在 $V/t = 0.5$ 时出现过的一维链结构消失, 取而代之的是星状结构的出现, 而星状结构的最大好处就是使电子集中于各个顶角上, 从而使电子间的近邻排斥作用对能量的贡献降到最低.

在 $N = 5$ 时, 除了当 $n_e = N + 1, U/t > 4, V/t = 0$ 时出现了非饱和的铁磁性 ($S = 1$) 外, 其他情况下的团簇结构都没有出现铁磁性.

如图 2 所示, 当原子数 $N = 6$ 时, 得到的结果与 $N = 5$ 相类似. 在 $V/t = 0.5$ 时, 团簇结构已经发生了很大的变化, V 继续增大后团簇中开始出现更多星状结构. $N = 6$ 时在本文计算涉及的参数范围内没有出现铁磁性.

从上述得到的优化结构的结果可知, 电子填充浓度为半填充附近团簇结构呈现出有趣的多样性. 接着我们将考察半填充时团簇的热力学性质. 固定 $U/t = 8$, 并将以上得到的 $T = 0$ 的团簇优化结构应用于 $T > 0$ 的情况. 图 3、图 4 分别给出了当 $V/t = 0.0, 0.5, 1.0$ 时, 团簇的热容和磁化率曲线.

首先看热容的变化情况. 由正则系综的能量平均值

$$\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_i [\exp(-\beta E_i) E_i]$$

和热容的表达式

$$C = \frac{dE}{dT},$$

可以得到热容的统计平均表达式为

$$C = k_B \beta^2 (\langle E_i^2 \rangle - \langle E_i \rangle^2) \quad (\beta = 1/T).$$

从图 3(a) 可以看到, 对应于 $V/t = 0.0$ 的曲线有两个峰, 一个低温峰和一个高温峰. 对应于 $V/t = 0.5$ 和 $V/t = 1.0$ 的曲线却只有一个高温峰. 对于这一现象可以由图 5 的能级分布图得到解释. 由图

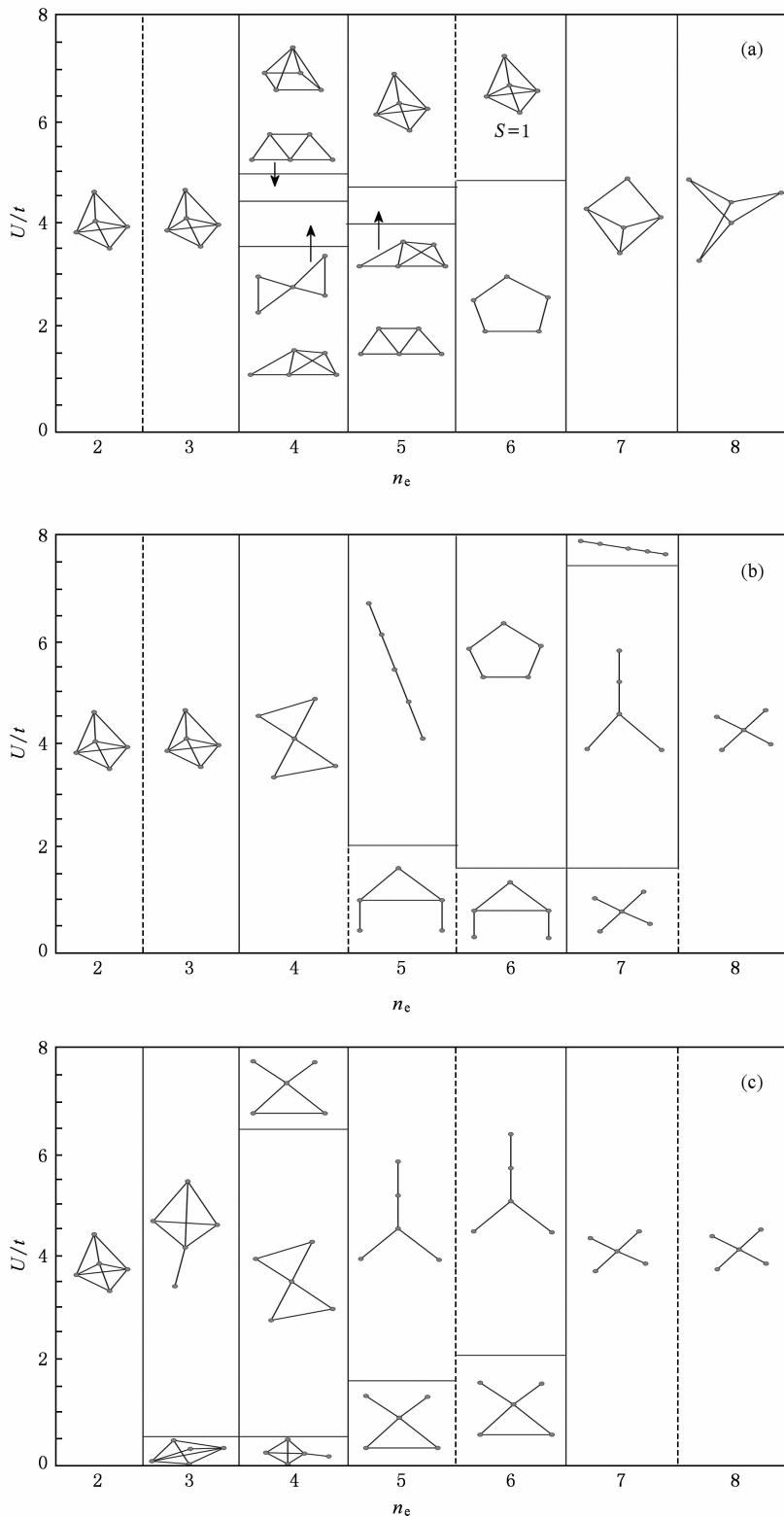


图1 原子数 $N=5$ 的团簇优化结构以及对应的总自旋 S 在没有标定的情况下 S 都为最小值 0 或 $1/2$. (a) $V/t=0.0$, (b) $V/t=0.5$, (c) $V/t=1.0$

5 可知, 在 $V/t=0.0$ 时, 最左边的第一、第二能级靠得很近, 低温峰对应着系统由第一能级向第二能级

的激发. 而第一、第二能级与第三能级之间却有着相当大的距离, 因此系统由第一、第二能级向第三

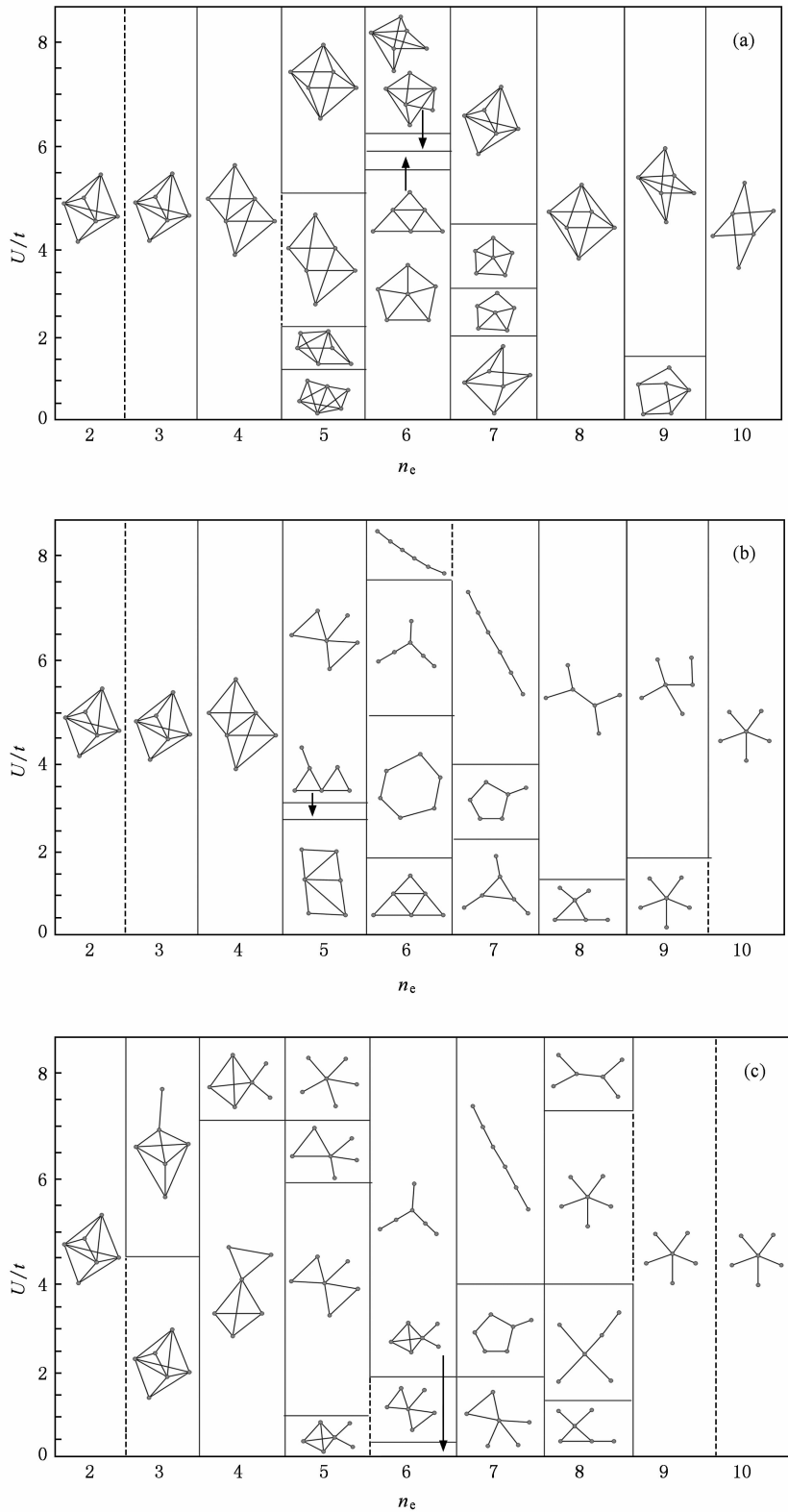


图2 原子数 $N=6$ 的团簇优化结构以及对应的总自旋 S 在没有标定的情况下 S 都为最小值 0 或 $1/2$. (a) $V/t=0.0$, (b) $V/t=0.5$, (c) $V/t=1.0$

能级激发时,热容曲线就出现了一个较高的高温峰.由于第一、第二、第三能级对应的系统的总自旋

S 都是 $1/2$,因此这两个峰都对应着系统由总自旋 $S=1/2$ 到 $S=1/2$ 的激发.在 $V/t=0.5$ 和 $V/t=1.0$

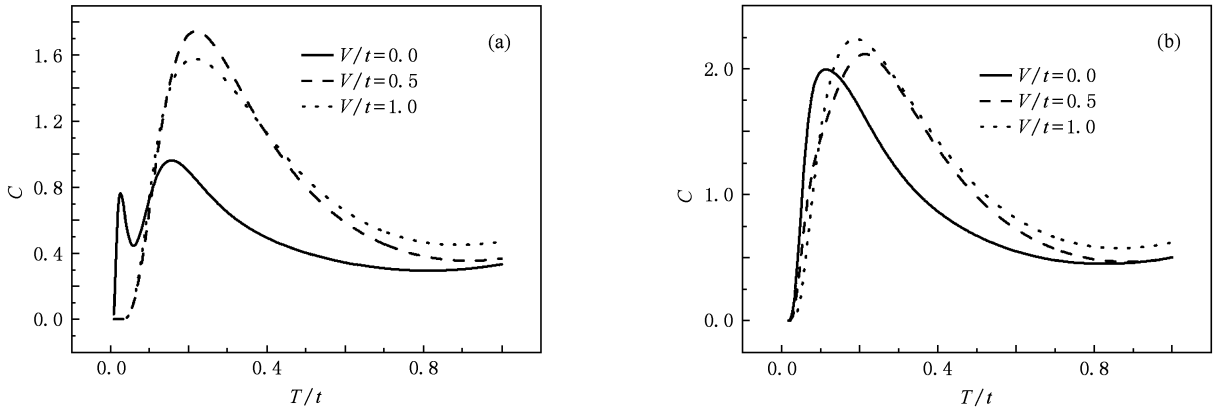


图3 团簇的热容随温度的变化 $U/t=8$. (a) $N=5$, (b) $N=6$

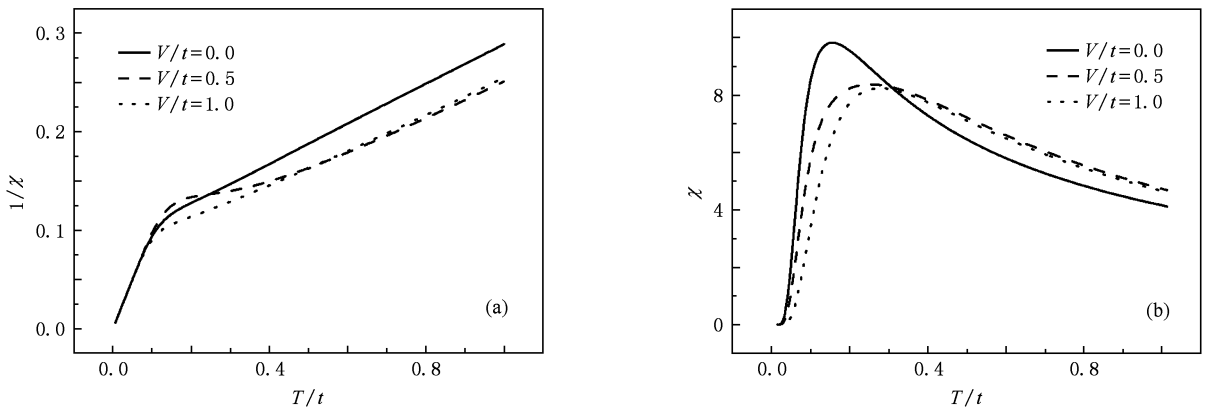


图4 团簇的磁化率随温度的变化 $U/t=8$. (a) $N=5$, 团簇的磁化率倒数曲线; (b) $N=6$, 团簇的磁化率曲线

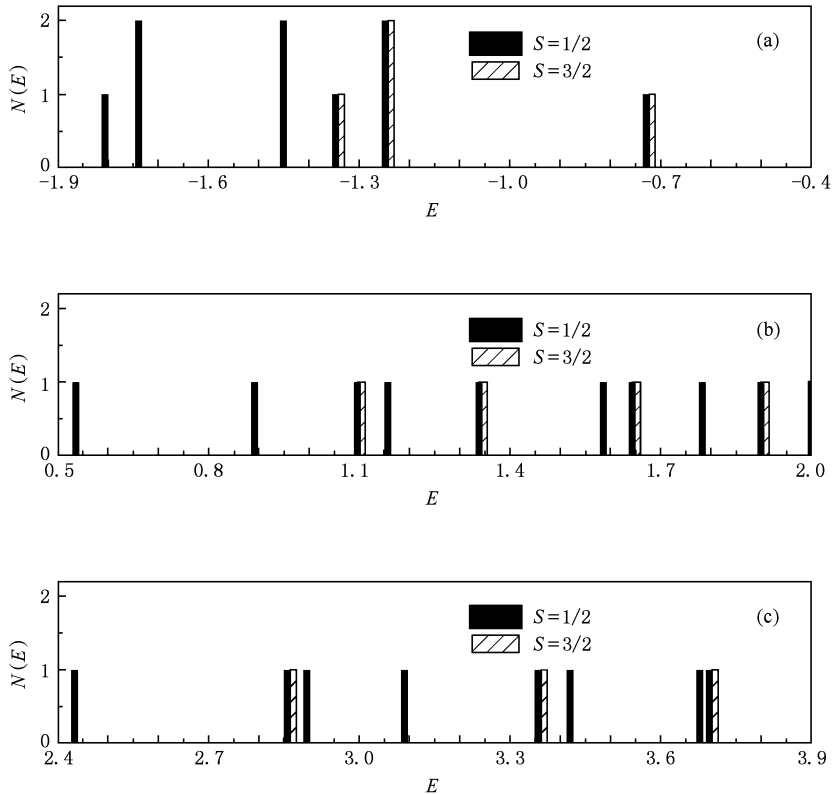


图5 $n_e = N = 5$ 团簇的能级分布 $U/t=8$, 图中实心柱与阴影柱紧邻的为简并能级. (a) $V/t=0.0$, (b) $V/t=0.5$, (c) $V/t=1.0$

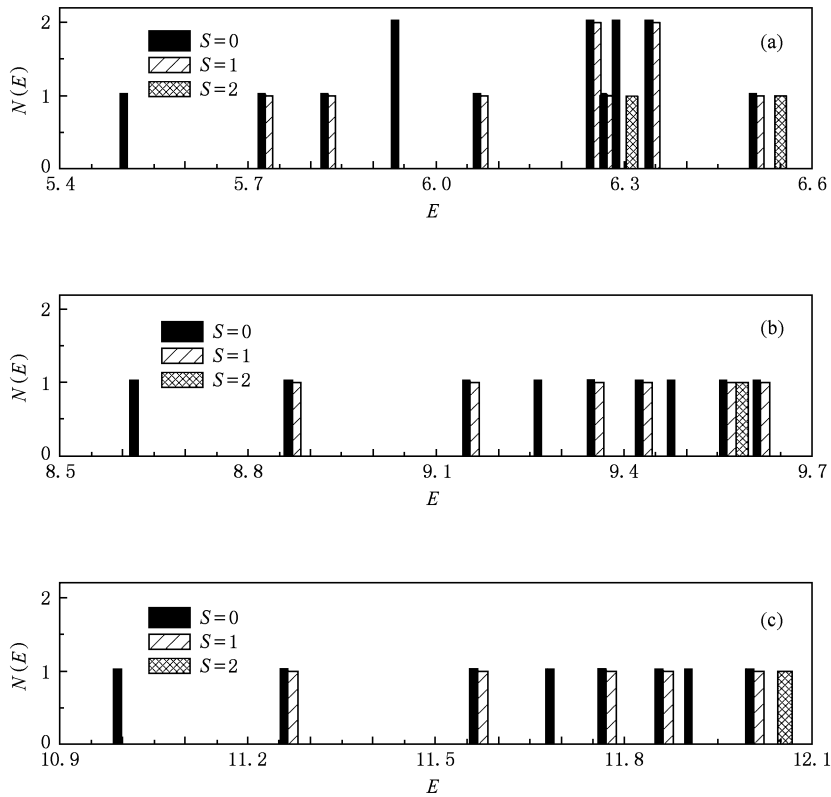


图6 $n_c = N = 6$ 团簇的能级分布 $U/t = 8$, 图中实心柱与阴影柱紧邻的为简并能级. (a) $V/t = 0.0$, (b) $V/t = 0.5$, (c) $V/t = 1.0$

时,第一、第二能级之间相距较远,因此对应的热容曲线都只有高温峰,其中 $V/t = 0.5$ 时的高温峰对应着系统由总自旋 $S = 1/2$ 到 $S = 1/2$ 的激发,而 $V/t = 1.0$ 时的高温峰包含着系统由总自旋 $S = 1/2$ 到 $S = 1/2$ 和 $S = 1/2$ 到 $S = 3/2$ 的混合激发.

从图3(b)可以看到,对于 $N = 6$ 的团簇,其3条热容曲线都只有一个高温峰.这也是因为它们对应的能级分布(图6)中第一能级与第二能级之间有较大的距离,热容曲线的峰就对应着系统由第一能级向第二能级的激发.由于第二能级为包含着 $S = 0$ 和 $S = 1$ 的简并能级,因此对应的激发中包含着总自旋 $S = 0$ 到 $S = 0$ 和 $S = 0$ 到 $S = 1$ 的混合激发.

其次看近邻库仑排斥能 V 对于磁化率的影响.由存在外磁场时的能量表达式 $E'_i = E_i - Bm_i$ 以及 $m_i = (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$,可以推导出外磁场为零时磁化率的统计平均表达式为

$$\chi = \langle m^2 \rangle / (kT).$$

从图4(a)可以看到,磁化率倒数曲线存在着一个拐点,而从图4(b)可以看到,磁化率曲线存在着一个

峰值.在拐点和峰值右边的高温区域,系统表现出高温顺磁行为,而在拐点和峰值对应的温度以下,系统由顺磁相转变为磁有序相.由图4可以观察到,对于 $N = 5$ 的团簇拐点温度受 V 的影响较小,但对于 $N = 6$ 的团簇峰值温度随着 V 的增强而明显增加.

3. 结 论

本文采用数值精确对角化方法并基于扩展的哈伯德模型计算得到了原子数 $N = 5$ 和 $N = 6$ 的团簇的基态优化结构.研究结果表明,近邻电子的库仑排斥作用对于团簇的结构有很大的影响.当近邻电子的库仑排斥能 V 取一个较小的值($V/t = 0.5$)时,团簇结构中较弱的键就已经开始断开, V 继续增大后,团簇结构变得越来越开放,最后会导致更多星状结构的出现.本文还给出了不同 V/t 值的团簇的热容和磁化率曲线.结合团簇能级的分布对热容曲线随温度的变化特征给出了合理的解释.

- [1] Wang G H 2003 *Cluster Physics* (Shanghai: Shanghai Science and Technology Press) pp1—9 (in Chinese) [王广厚 2003 团簇物理学(上海:上海科学技术出版社)第1—9页]
- [2] Björnsrholm S 1990 *Contem. Phys.* **31** 309
- [3] Billas I M L, Châtelain A, de Heer W A 1994 *Science* **265** 1682
- [4] Apsel S E, Emert J W, Deng J, Bloomfield L A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1441
- [5] Yamamoto Y, Miura T, Suzuki H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **93** 116801
- [6] Paster G M, Dorantes-Dávila J, Bennemann K H 1989 *Phys. Rev. B* **40** 7642
- [7] Felix-Medina R, Dorantes-Dacila H, Pastor G M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 094430
- [8] Yang Z, Yan Y L, Zhao W J, Lei X L, Ge G X, Luo Y H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2590 (in Chinese) [杨致、闫玉丽、赵文杰、雷雪玲、葛桂贤、罗有华 2007 物理学报 **56** 2590]
- [9] Ren F Z, Wang Y X, Tian F Y, Zhao W J, Lou Y H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2165 (in Chinese) [任凤竹、王渊旭、田付阳、赵文杰、罗有华 2008 物理学报 **57** 2165]
- [10] Li X B, Luo J S, Guo Y D, Wu W D, Wang H Y, Tang Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4857 (in Chinese) [李喜波、罗江山、郭云东、吴卫东、王红艳、唐永建 2008 物理学报 **57** 4857]
- [11] Xu Y, Wang X L, Zeng Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S72 (in Chinese) [徐勇、王贤龙、曾雉 2009 物理学报 **58** S72]
- [12] Chen X, Peng X, Deng K M, Xiao C Y, Hu F L, Tan W S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5370 (in Chinese) [陈宣、彭霞、邓开明、肖传云、胡凤兰、谭伟石 2009 物理学报 **58** 5370]
- [13] Li X B, Wang H Y, Luo J S, Wu W D, Tang Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6134 (in Chinese) [李喜波、王红艳、罗江山、吴卫东、唐永建 2009 物理学报 **58** 6134]
- [14] Paster G M, Hirsch R, Mühlischlegel B 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3879
- [15] Paster G M, Dorantes-Dávila J, Pick S, Dreyse H 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 326
- [16] Paster G M, Dorantes-Dávila J 1996 *Mater. Sci. Eng. A* **217—218** 286
- [17] Rodriguez-López J L, Dorantes-Dávila J, Paster G M 1998 *Phys. Rev. B* **57** 1040
- [18] López-Urias F, Paster G M, Bennemann K H 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 4909
- [19] López-Sandoval R, Paster G M 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** S2223
- [20] López-Urias F, Paster G M 2005 *J. Magn. Magn. Mater.* **294** 27
- [21] Shibata Y, Nishimoto S, Ohta Y 2001 *Phys. Rev. B* **64** 235107
- [22] Onari S, Arita R, Kuroki K, Aoki H 2004 *Phys. Rev. B* **70** 094523
- [23] Penc K, Mila F 1994 *Phys. Rev. B* **49** 9670
- [24] Clay R T, Sandvik A W, Campbell D K 1999 *Phys. Rev. B* **59** 4665
- [25] Nakamura M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 16377
- [26] Murakami M 2000 *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** 1113
- [27] Onozawa M, Fukumoto Y, Oguchi A, Mizuno Y 2000 *Phys. Rev. B* **62** 9648
- [28] Esirgen G, Schuttler H B, Bickers N E 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1217
- [29] Merino J, McKenzie R H 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 237002

Optimized structure and thermodynamic properties of atomic clusters in the framework of the extended Hubbard model*

Zheng Xiao-Jun Zhang Jun Huang Zhong-Bing[†]

(*Faculty of Physics and Electronic Technology, Hubei University, Wuhan 430062, China*)

(Received 7 September 2009; revised manuscript received 25 January 2010)

Abstract

By using a numerical exact diagonalization method, the properties of atomic clusters with atom number $N = 5$ and $N = 6$ are investigated in the framework of the extended Hubbard model. The optimized structure and the corresponding total spin S are obtained both as a function of Hubbard onsite interaction U , nearest-neighbor Coulomb repulsion V and filling number of electrons. Results show that with V increasing, the optimized structure of cluster turns into a chain or star-like structure with fewer bonds. The thermodynamic properties are also analyzed based on the distribution of energy levels of cluster with an optimized structure.

Keywords: atomic cluster, extended Hubbard model, nearest-neighbor Coulomb repulsion

PACC: 3640, 7420M

* Project supported by the Youth Foundation of the Education Bureau of Hubei Province, China (Grant No. Q200610001) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674043).

[†] Corresponding author. E-mail: huangzb@hubu.edu.cn