ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ОБМЕНА С ПОВЕРХНОСТЯМИ, СОДЕРЖАЩИМИ ДЕФЕКТЫ

Н.Е. Климов1), И.К. Гайнуллин1,\*)

1) Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

\*) e-mail: [Ivan.Gainullin@physics.msu.ru](mailto:Ivan.Gainullin@physics.msu.ru)

Был изучен электронный обмен с поверхностями, содержащими дефекты (на примере атомных ступеней). Для начала рассматривался статический случай, когда ион H- фиксирован над поверхностью Al(001). Атомная ступень высотой 7 ат. ед. располагалась вдоль оси Y для координаты x=0. Для отрицательных значений X граница поверхности соответствовала z = 7 ад. ед., для положительных z = 0 ад. ед. Изучались следующие характеристики резонансного электронного обмена: эволюция электронной плотности, ширина уровня Г, а также зависимость заселенности P от времени. Во-первых, наблюдается экспоненциальное уменьшение заселенности атома со временем. Во-вторых, крутизна экспоненты увеличивается в зависимости от расстояния ион-поверхность. Ширина уровня уменьшается при увеличении расстояния между ионом и поверхностью, что свидетельствует об уменьшении эффективности обмена с увеличением расстояния. Также для x = -4 ат. ед., т.е. когда ион расположен над «высокой» областью поверхности, значение ширины уровня значительно выше, чем при x = -4 ат. ед., т.е. когда ион расположен над «низкой» областью поверхности. Таким образом, при теоретико-расчетном изучении электронного обмена с дефектными поверхностями, важно учитывать траекторию рассеяния иона, и латеральное положение точки соударения с поверхностью относительно поверхностного дефекта. Напомним, что для однородных поверхностей вероятность электронного перехода зависит от энергии и угла рассеяния атомной частицы, но не зависит от латерального положения точки соударения с поверхностью.