



Трехмерное теоретическое исследование резонансного электронного обмена между ионом H^- и поверхностью $Cu(111)$, покрытой адсорбатом Na^+



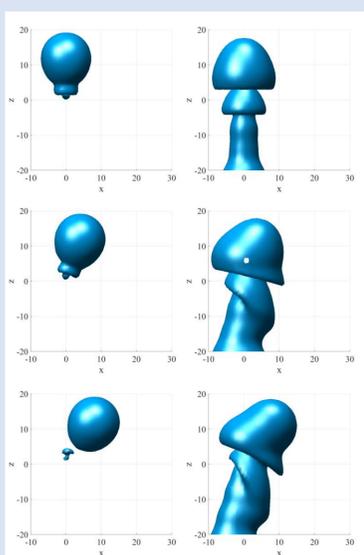
Ю.А. Мелкозерова¹⁾, С.С. Москаленко¹⁾, И.К. Гайнуллин¹⁾

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

Аннотация

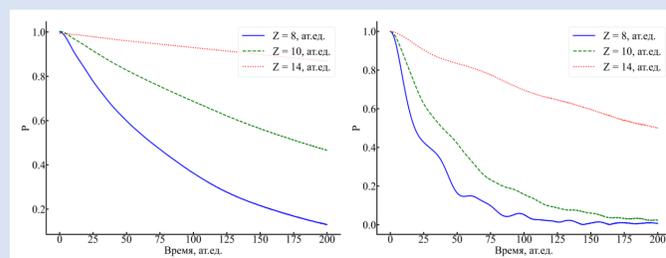
Рассеяние низкоэнергетических ионов является перспективным методом благодаря его наилучшей поверхностной чувствительности среди методов спектроскопии. Однако, качество количественных оценок в данном методе связано с учетом процессов электронного обмена. Мы представляем теоретическое исследование резонансного электронного обмена между ионом H^- и поверхностью металла, покрытой адсорбатом с помощью метода распространения волновых пакетов. Было обнаружено, что поверхностный адсорбат вызывает осцилляции электронной плотности. По этой причине средняя скорость электронного обмена, определяющая вероятность электронного перехода для ионов низких энергий, зависит немонотонно как от расстояния между ионом H^- и поверхностью, так и от латерального положения иона. Более того, эффективная скорость электронного обмена зависит от скорости ионов. При малых скоростях ионов время взаимодействия больше. Таким образом, немонотонный характер зависимости средней скорости электронного обмена от расстояния между ионом и адсорбатом усиливается с уменьшением скорости иона.

Динамика электронного обмена



На рисунке представлена динамика электронной плотности для чистой и покрытой адсорбатом поверхности $Ag(110)$. Сначала электроны туннелируют в направлении ион-адсорбат. На втором этапе электроны туннелируют от адсорбата к поверхности. Следует отметить, что электрон не распространяется строго по нормали к поверхности, как в случае чистой поверхности, а сохраняет приобретенную составляющую скорости в направлении ион-адсорбат.

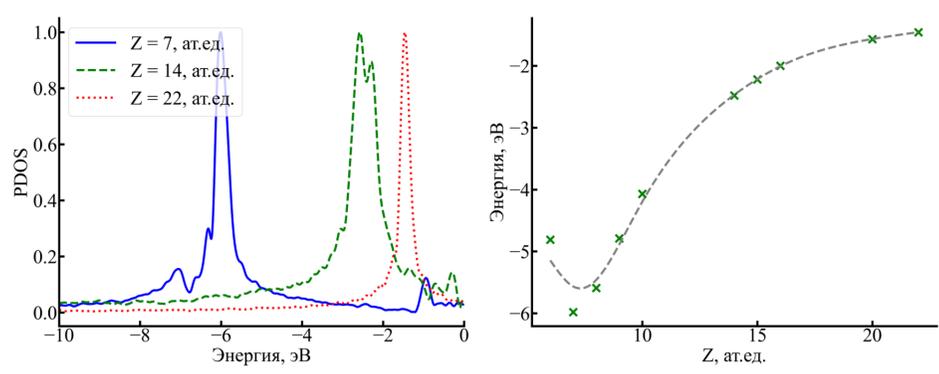
Зависимость функции заселенности от времени



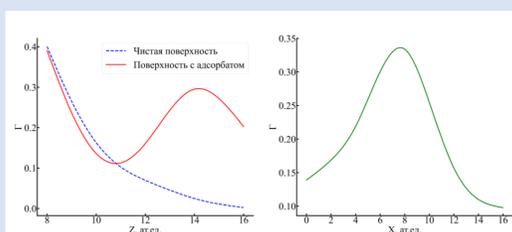
На рисунке показана зависимость функции заселенности P иона H^- в зависимости от времени. В случае чистой поверхности происходит известный экспоненциальный спад, типичный для поверхностей свободных электронов [29,54]. Однако в случае поверхности, покрытой адсорбатом, наблюдаются осцилляции заселенности, что в большей степени проявляется при малых расстояниях. Данные осцилляции связаны с характером динамики электронного обмена: после промежуточного заполнения атома адсорбата электрон туннелирует как в металл, так и обратно к иону.

Анализ спектров плотности состояний

На рисунке показаны спектры плотности состояний исследуемой системы и энергии уровней, участвующих в резонансном электронном обмене. На больших расстояниях от поверхности (Z больше 20 а.е.), единственный видимый пик в спектре соответствует иону H^- . Для расстояний меньше $Z = 14$ а.е. наблюдаются отдельные пики, соответствующие иону H^- и адсорбату Na^+ на поверхности $Cu(111)$. При расстояниях 14-16 а.е. пик, соответствующий адсорбату, располагается вблизи пика иона H^- . Состояние Na^+ сильно отличается от состояния свободного адсорбата, что интерпретируется как результат явления квазипересечения.

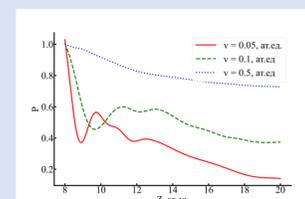


Зависимость эффективности электронного обмена от расстояния



Ширина уровня Γ иона H^- , определяющая эффективность электронного обмена, в случае чистой поверхности уменьшается экспоненциально с увеличением расстояния. Однако для поверхности с адсорбатом эффективность Γ является немонотонной функцией расстояния. Немонотонность объясняется двумя факторами: 1) Чем ближе ион к поверхности, тем меньше туннельный барьер 2) Чем ближе ион к поверхности, тем больше осцилляции функции заселенности $P(t)$. Немонотонный характер сохраняется и для зависимости Γ от латерального положения иона относительно адсорбата.

Влияние скорости иона на электронный обмен



На рисунке показана зависимость заселенности P от расстояния для различных скоростей иона H^- . При малых скоростях время взаимодействия существенно. Следовательно, электронные осцилляции между ионом и адсорбатом приводят к немонотонной зависимости $P(z)$. Для больших скоростей время взаимодействия слишком мало для проявления колебаний.

Контактная информация

Мелкозерова Юлия Алексеевна
e-mail: melkozerova.ia16@physics.msu.ru



Литература

- Gainullin I.K., Melkozerova J.A. et al. //Physical Review A.,2022, 105, №. 4, 042807.
- Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.P.// Physical review letters, 1992, 68, №. 18, 2842.
- Bahrim B. et al. //Surface science, 2009, 603, №. 4, 703-708.