
Трёхмерное моделирование электронного обмена атомной частицы с поверхностью, покрытой адсорбатами

Научный руководитель

к.ф.-м.н., доцент

Гайнуллин Иван Камилевич

Студентка

Мелкозерова Юлия Алексеевна



План выступления

- Актуальность и текущее состояние
- Постановка и метод решения задачи
 - Основные подходы к моделированию электронного обмена
 - Метод РВП
- Результаты
 - Зависимости $E(z)$ и $\Gamma(z)$
 - Вывод



- С помощью анализа спектров, рассеянных или распыленных ионов, производится диагностика поверхности.
- Процессы нейтрализации или ионизации влияют на зарегистрированные спектры, поэтому расчеты электронного обмена важны

Влияние адсорбатов:

- 1) Нелокальный эффект (изменение работы выхода поверхности твердого тела)
- 2) Локальный эффект (локальное изменение электронных потенциалов вокруг адсорбата)

Основные подходы к моделированию электронного обмена

- Квантово-механическое описание основывается на решении уравнения Шредингера с гамильтонианом Андерсона—Ньюнса, использующее адиабатическое приближение
- Адиабатическое приближение: эффективность электронного перехода не зависит от скорости и текущей заселенности уровня иона/атома.
- Изменение заселенности уровня иона/атома и вероятность электронного перехода получают, интегрируя полуклассическое кинетическое уравнение
- При наличии адсорбатов данный подход не дает совпадения с экспериментом

Метод РВП



Нестационарное трехмерное уравнение Шредингера

$$i \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \left(-\frac{\Delta}{2} + V_{atom}(r, t) + V_{surface}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t)$$

$$A(t) = \langle \psi_g(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle ; \quad P(t) = |A(t)|^2$$

$$A(t) = \langle \psi_g(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle \approx \exp(-iEt) \exp(-\Gamma t)$$

Зависимости $E(z)$

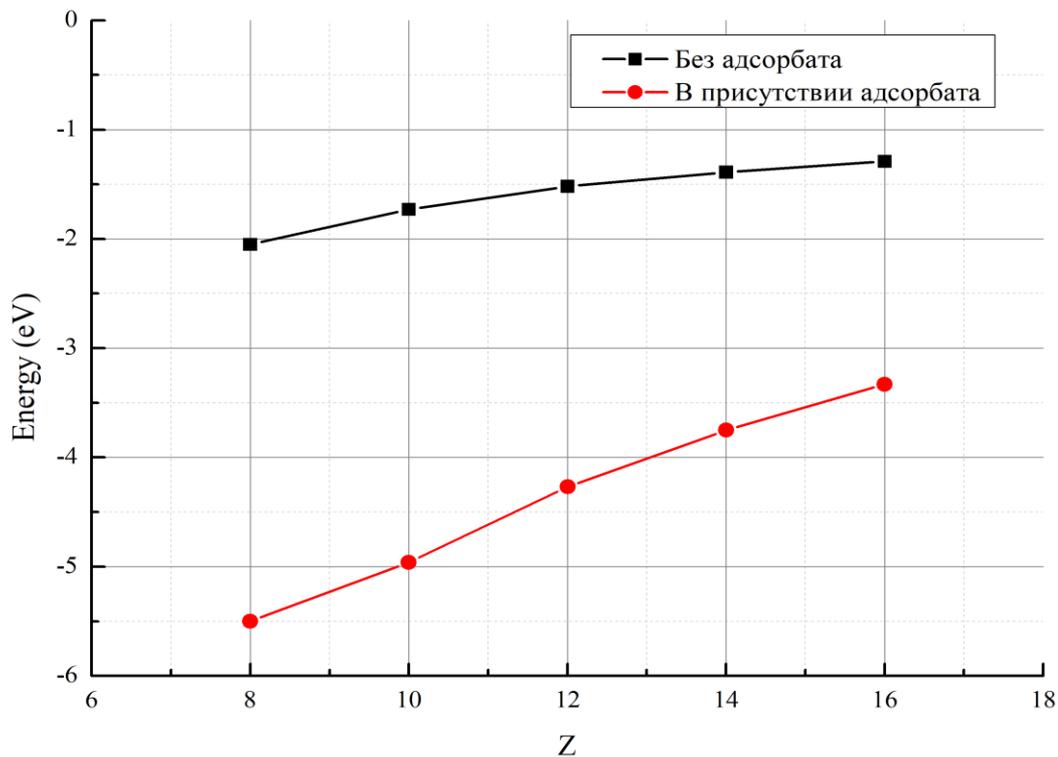


Рис. 1 Зависимость энергетического уровня от расстояния до поверхности в присутствии адсорбата и без него.

Зависимости $\Gamma(z)$

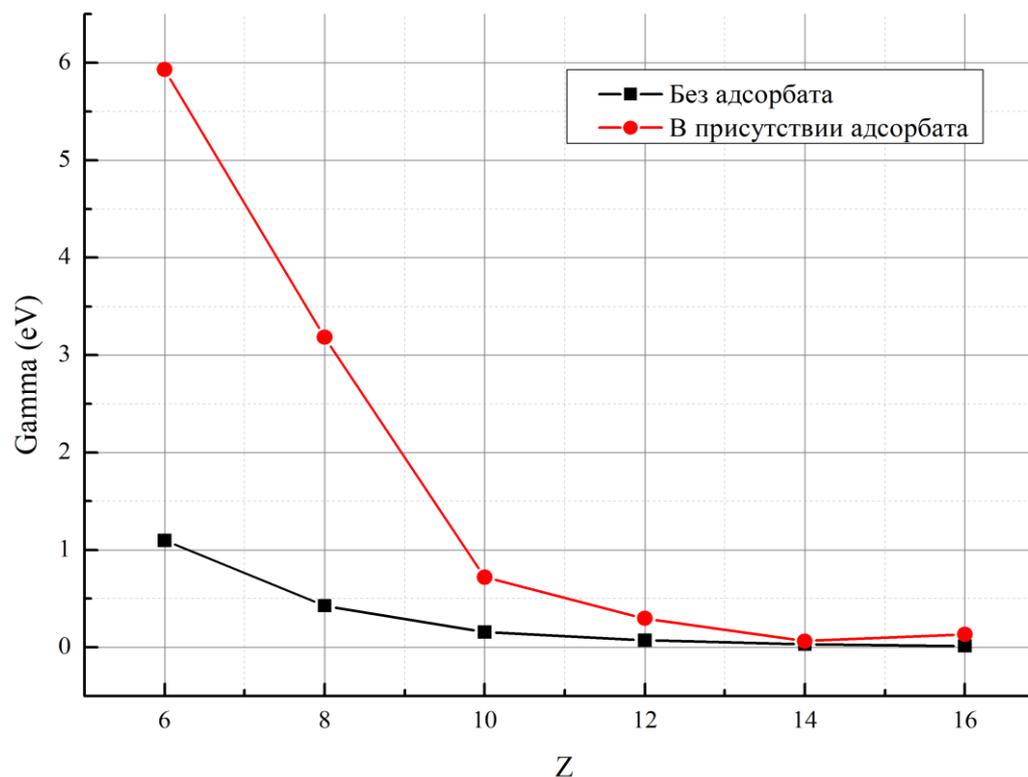


Рис. 2 Зависимость ширины уровня от расстояния до поверхности в присутствии адсорбата и без него.



Выводы

- В присутствии адсорбата энергетический уровень смещается
- Увеличение ширины уровня в присутствии адсорбата, с увеличением расстояния влияние адсорбата ослабевает
- Сильное влияние адсорбата на эффективность электронного обмена



Спасибо за внимание