

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ  
КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

**«Теоретическое изучение электронного обмена между металлической  
поверхностью и трехмерными атомными состояниями»**

Выполнил студент  
423 группы  
Москаленко Сергей Сергеевич

Научный руководитель:  
к.ф.-м.н., доцент Гайнуллин Иван Камилевич

Москва 2021

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В процессе взаимодействия атомной частицы (атома или иона) с поверхностью твердого тела могут происходить различные неупругие процессы, например, возбуждение электронной подсистемы атома или молекулы, возбуждение электронной подсистемы твердого тела, обмен зарядом и т.д. Благодаря этим процессам, связанным с изменением свойств физических объектов на атомном уровне, взаимодействие ионных пучков с поверхностью представляет фундаментальное значение для диагностики поверхности материалов.

Среди неупругих процессов, происходящих при взаимодействии иона с поверхностью, мы рассматриваем зарядовый (или электронный) обмен. Данный процесс играет важную роль при диагностике поверхности твердых тел с помощью ионных пучков [1], поскольку он определяет зарядовое состояние рассеянных и распыленных частиц [2,3,4].

Помимо экспериментального изучения зарядового обмена, немаловажно его численное моделирование, так как не все закономерности и физические величины могут быть непосредственно измерены в ходе эксперимента (например, распределение электронной плотности).

На текущий момент относительно хорошо изучены закономерности электронного обмена с атомными электронными состояниями, обладающими сферической симметрией (s-состояния). Поэтому актуально построение расчетно-теоретических моделей электронного обмена и численных методик, которые будут учитывать электронные состояния, не обладающие сферической симметрией.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

### 2.1 Метод РВП

В данной работе используется трехмерная реализация метода распространения волновых пакетов [5], суть которого заключается в нахождении эволюции волнового пакета туннелирующего электрона  $\psi(\mathbf{r},t)$  путем численного решения нестационарного трехмерного уравнения Шредингера.

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

Движущаяся атомная частица и неподвижная металлическая поверхность

описываются независимыми псевдопотенциалами ( $V_{atom}$  и  $V_{surface}$  соответственно). Псевдопотенциал атомной частицы обычно моделируется с помощью аналитического псевдопотенциала (например, Дженнингса или Чулкова), в то время как псевдопотенциал металлической поверхности находится с помощью теории функциональной плотности. Для удобства была использована атомная система единиц ( $m_e = \hbar = e = 1$ ).

Численное решение уравнения Шредингера дает зависимость волновой функции туннелирующего электрона от координат и времени. Проецируя волновую функцию на основное состояние электрона в атоме, мы получим автокорреляционную функцию системы.

$$A(t) = \langle \psi_g(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle$$

Квадрат модуля данной функции дает вероятность нахождения на атоме/ионе электрона в основном состоянии (заселенность атома/иона).

$$P(t) = |A(t)|^2$$

Помимо этого, важной характеристикой электронного обмена является ширина уровня ( $\Gamma$ ) атома. Ширина уровня характеризует эффективность перехода электрона с атома на поверхность, т.е. скорость распада основного состояния, и она обратно пропорциональна времени жизни электрона в основном состоянии.

Ширина уровня находится из приближения:

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

Из данного выражения можно сделать вывод, что ширина уровня представляет собой показатель затухания автокорреляционной функции.

## 2.2 Постановка задачи

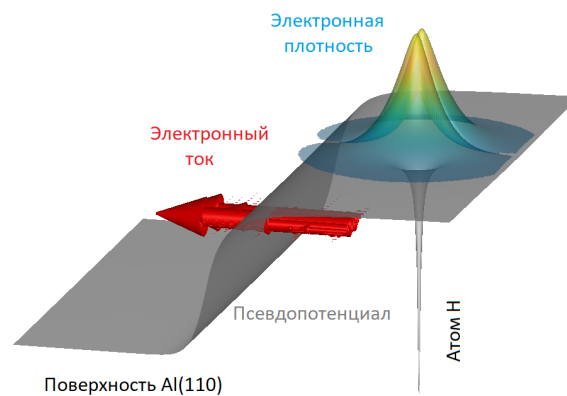


Рисунок 1. Иллюстрация задачи электронного обмена между поверхностью металла и атомом.

Модельная система представляет собой атом H в возбужденном P-состоянии, приближающийся к металлической поверхности Al (110). На рисунке 1 представлена иллюстрация рассматриваемой системы. Координата атома X и Y измеряется параллельно поверхности, а координата Z - это расстояние от налетающей частицы до металлической поверхности, измеренное вдоль ее нормали. Мы изучаем электронный обмен для разных ориентаций P-орбитали атома водорода, расстояний между атомом и поверхностью и направлений скорости движения атома параллельно поверхности.

### 3. Результаты и обсуждение

На рис.2 представлены иллюстрации электронного обмена возбужденного атома водорода с металлической поверхностью в случае, когда p-орбиталь ориентирована вдоль осей X и Z. Поверхность металла ориентирована в плоскости (X, Y).

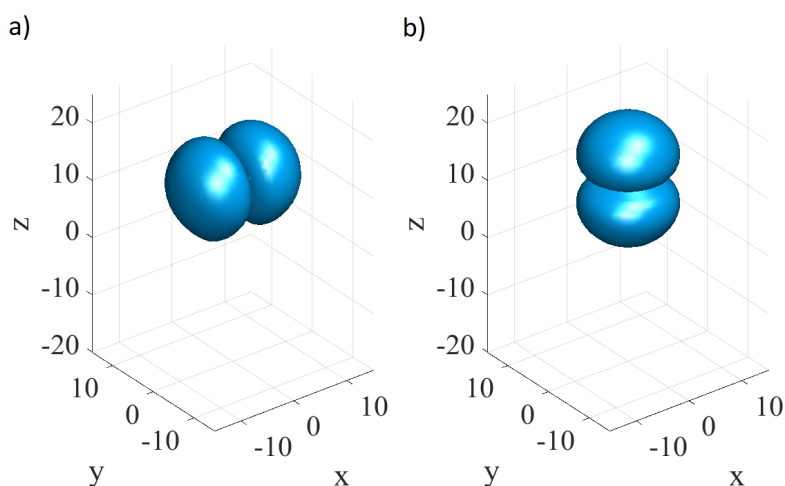


Рисунок 2: Исоповерхности электронной плотности для P-орбитали, ориентированной вдоль: а) оси X, б) оси Z.

На Рис.3 изображена зависимость заселенности атома от времени для разных расстояний между H и поверхностью. Мы видим, что электронный обмен более эффективен, если ось P-орбитали направлена перпендикулярно к поверхности (рис. 3b), нежели параллельно (рис. 3a). Это объясняется тем, что распределение электронной плотности локализовано ближе к поверхности при нормальной ориентации атомной орбитали, поэтому меньше потенциальный барьер и туннелирование происходит более эффективно.

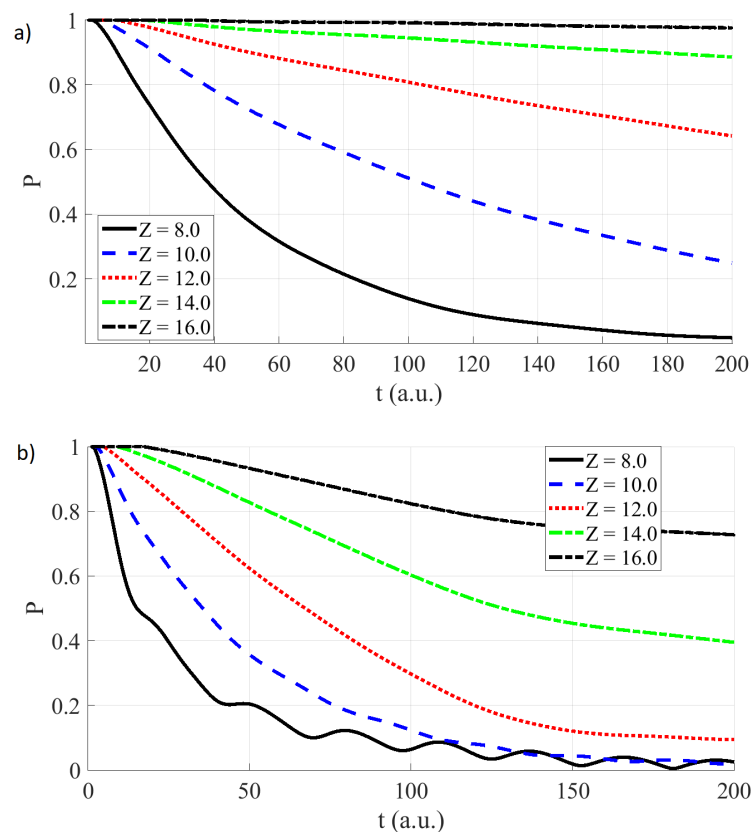


Рисунок 3: Зависимость заселенности атома от времени для: а) параллельной ориентации Р-орбитали, б) перпендикулярной ориентации Р-орбитали.

Видны несколько общих закономерностей, справедливых для обеих ориентаций Р-орбитали. Во-первых, экспоненциальное уменьшение заселенности атома со временем. Во-вторых, крутизна экспоненты увеличивается в зависимости от расстояния между поверхностью и Н. Чем ближе атом к поверхности, тем круче график.

Также при ориентации РZ (перпендикулярно поверхности) на малых расстояниях (менее 10 ат.ед.) наблюдаются осцилляции заселенности атома, которые происходят вследствие циклического перехода электрона с атома на поверхность и в обратном направлении. На рис. 4 показана ширина атомного уровня, характеризующая эффективность электронного обмена, в зависимости от расстояния между атомом и поверхностью.

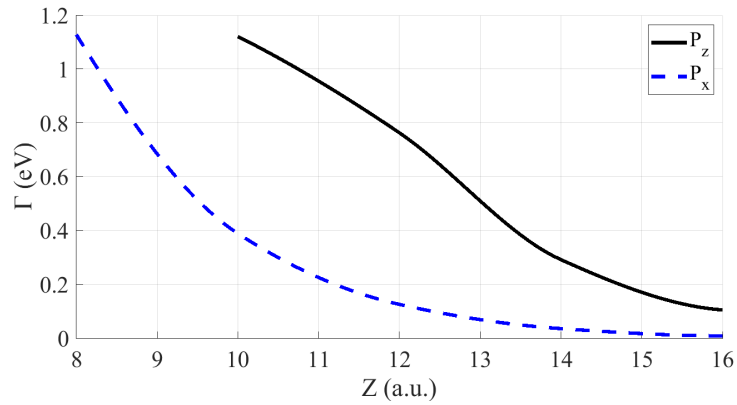


Рисунок 4: Зависимость ширины атомного уровня от расстояния между атомом и поверхностью для различных ориентаций P-орбиталей.

Также мы проанализировали эффективность электронного обмена для атома водорода, движущегося параллельно плоскости поверхности. Из рис. 5 видно, что для движущегося атома нет разницы между направлением движения вдоль поверхности в двух перпендикулярных друг к другу направлениях X и Y. На рис. 6 изображены изоповерхности электронной плотности для движущегося атома водорода с P-орбиталью, ориентированной вдоль осей X и Y.

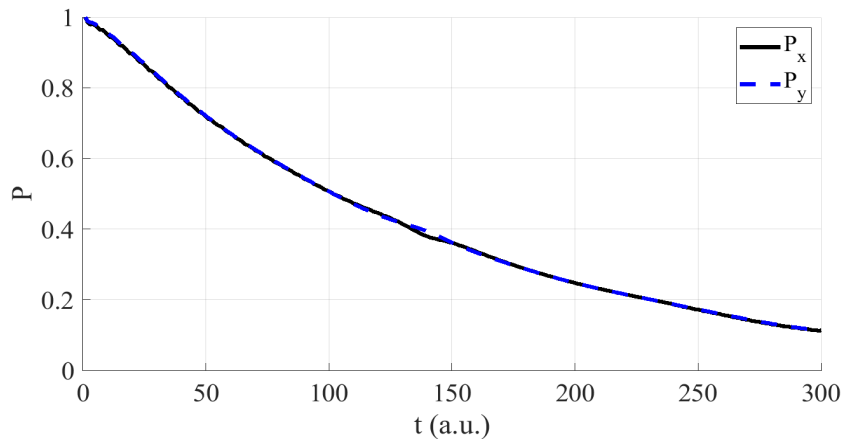


Рисунок 5: Зависимость заселенности движущегося атома H от времени для скорости 0,2 ат.ед.

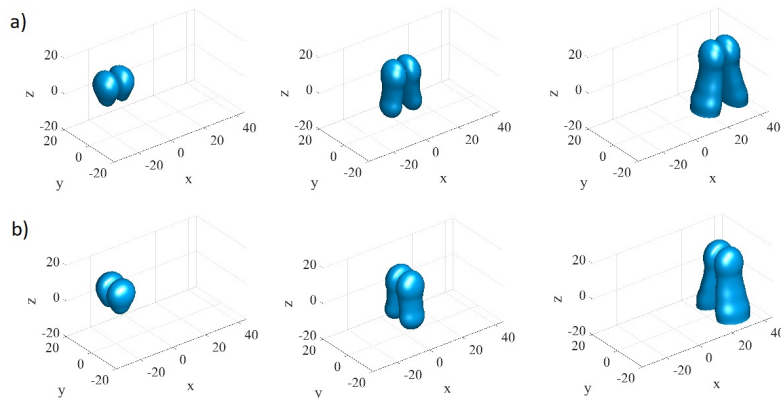


Рисунок 6: Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена для движущегося атома водорода при ориентации P-орбитали вдоль: а) оси X, б) оси Y.

## 4. Выводы

Проведено компьютерное моделирование резонансного электронного туннелирования между атомом водорода и металлической поверхностью. Рассматривался атом водорода в возбужденном Р-состоянии и изучалось влияние ориентации Р-орбитали относительно поверхности на электронный обмен.

Из полученных данных можно сделать выводы:

1. Электронный обмен более эффективен при ориентации Р-орбитали вдоль оси, перпендикулярной к поверхности.
2. Зависимость заселенности атома от времени имеет экспоненциальный спад.
3. Электронный обмен не зависит от направления движения атома вдоль плоскости, параллельной плоскости поверхности металла.

## Литература

- [1] Chakraborty H. S., Niederhausen T., Thumm U. On the effect of image states on resonant neutralization of hydrogen anions near metal surfaces //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2005. – Т. 241. – №. 1. – С. 43-47.
- [2] Brako R., Newns D. M. Theory of electronic processes in atom scattering from surfaces //Reports on Progress in Physics. – 1989. – Т. 52. – №. 6. – С. 655.
- [3] Shao H., Langreth D. C., Nordlander P. Theoretical description of quasiresonant charge exchange in atom-surface collisions //Physical Review B. – 1994. – Т. 49. – №. 19. – С. 13948.
- [4] Hecht T. et al. Role of the 2D surface state continuum and projected band gap in charge transfer in front of a Cu (111) surface //Physical review letters. – 2000. – Т. 84. – №. 11. – С. 2517.
- [5] Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Lett. A. 1996. – V.218. - P. 99.