ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/124

**СУБМОНОСЛОЙНАЯ АДсорбция ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ
НА ПОВЕРХНОСТЬ Cu(001)**

^{1,2}Русина Г.Г., ^{1,2}Борисова С.Д.

¹ИФПМ СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

Щелочные металлы (АМ) образуют много различных упорядоченных адсорбционных структур на металлической поверхности, что приводит к определенной перестройке атомов подложки и к появлению новых адсорбат-индуцированных свойств поверхности. В настоящей работе, с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, генерируемых в рамках метода погруженного атома, изучена равновесная кристаллическая структура и колебательные свойства упорядоченных структур Cu(001)-c(2 × 2)-Na, Li and Cu(001)-c(4 × 2)-K, образующихся при субмонослойной адсорбции атомов Li, Na и K на поверхности Cu (001).

Проведен анализ поверхностной релаксации, фононных спектров для всех направлений высокой симметрии зоны Бриллюэна, а также рассчитаны локальные плотности колебательных состояний (LDOS), как для адсорбированных слоев, так и субстрата. Обнаружено, что адсорбция щелочных металлов приводит к небольшой модификации поверхностной атомной структуры Cu(001). Во всех адсорбированных структурах наблюдается смещение внешнего атомного слоя меди в направлении адслоя. Это смещение наибольшее для Na (0.026Å) и наименьшее для K (0.006Å). В результате адсорбции щелочных металлов локализованные фононные моды поверхности Cu(001) модифицируются, более выраженные изменения происходят при адсорбции натрия и лития. Наряду с этим возникают моды преимущественно локализованные на адсорбатах. Для структуры Cu(001)-c(2 × 2)- Li немного выше объемного спектра меди появляется дипольно-активная колебательная мода, отражающая характер взаимодействия адсорбата с подложкой.

Расчетная энергия этой моды, равная ~38 мэВ, находится в хорошем согласии с HAS измерениями [1]. Для более тяжелых адсорбатов Na и K наблюдается широкий резонанс в объемном фононном спектре меди. Это приводит к широкому пику в локальной плотности состояний с максимумом при 18 мэВ и 12 мэВ для Na и K. Полученные значения этих мод хорошо согласуются с данными эксперимента HREELS [2].

1. Senet P., Toennies J., Witte G. Low-frequency vibrations of alkali atoms on Cu(001) // Chem. Phys. Let. 1999. V. 299. P. 389-394.
2. Rudolf P., Astaldi C., Cautero G., Modesti S. Study of alkali metal adsorption on reconstructed and unreconstructed Cu surfaces by HREELS // Surf. Sci. 1991. V. 251/252. P. 127-131.