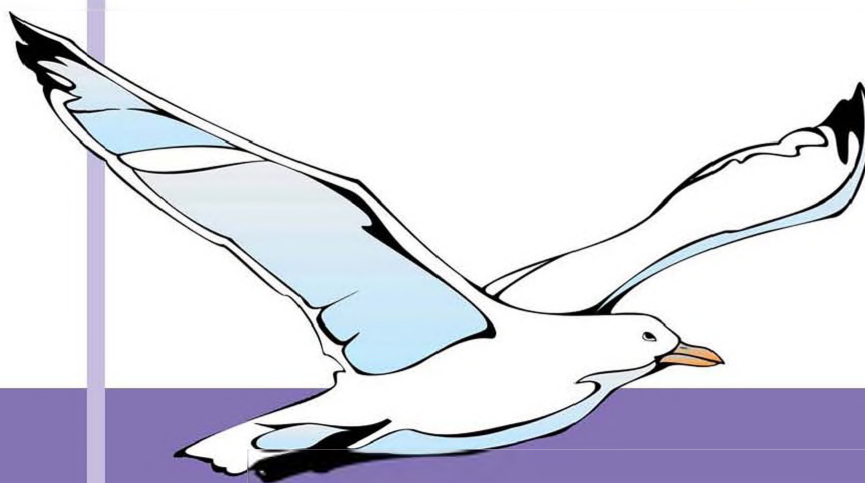


ТУАПСЕ 2015

Современная химическая физика

XXVII Симпозиум



сборник
тезисов

20 сентября – 1 октября, 2015 года
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

Вибрационные свойства поверхностных наноструктур

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

¹ ИФПМ СО РАН, Томск

² ТГУ, Томск

Упорядоченные структуры, формирующиеся при субмонослойной адсорбции на поверхность подложки, вызывают значительный научный интерес в связи с их особыми электронными и атомными свойствами. В частности они, как правило, имеют собственный период решётки, отличный от значения в объёмном образце, а структура может существенно зависеть от величины несоответствия их периодов решётки с периодом подложки. В то же время, структурная релаксация поверхности может существенно влиять на динамические характеристики как подложки (диффузия и рост островков, механизм самоорганизации при эпитаксиальном росте тонких пленок), так и адсорбционных структур и кластеров.

В работе, с использованием межатомных потенциалов (построенных в модели погруженного атома) и стандартного метода молекулярной динамики, проведено теоретическое исследование релаксации и вибрационных характеристик алюминиевой подложки при субмонослойной адсорбции натрия. Показано что процесс формирования адсорбционных структур сопровождается релаксационными эффектами, которые приводят к модификации структуры подложки и оказывают значительное влияние на её вибрационные свойства. В колебательном спектре подложки появляются новые моды, инициированные адсорбатом и не характерные для чистой поверхности подложки. Для адсорбционных структур характерно формирование фононной подсистемы, характеризующейся специфическими колебательными модами, определяющими их миграционную и десорбционную устойчивость. Эти моды, хотя преимущественно и локализованы на адатомах, отличаются сильной гибридизацией с колебаниями атомов поверхностного слоя подложки. Существование этих мод не зависит ни от степени адсорбции, ни от структуры поверхности подложки, ни от типа материала подложки и адсорбата.

Работа проведена в рамках научного проекта (№8.1.05.2015), выполненного при поддержке Программы «Научный фонд Томского госуниверситета им. Д.И. Менделеева» в 2015 г. и при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ 15-02-02717-а.