

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

19 - 23 сентября 2016 г.

Томск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И АДАТОМОВ НА ФОНОННУЮ СТРУКТУРУ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

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

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,

²Томский государственный университет, Томск, Россия
rusina@ispms.tsc.ru

Исследованию фононов и электрон-фоонных взаимодействий на поверхности металлов уделяется значительное внимание, как экспериментаторов, так и теоретиков [1,2]. Одним из наиболее эффективных экспериментальных методов является IETS (inelastic electron tunneling spectroscopy). Этот метод позволяет получать информацию о низкочастотных локальных фоонных возбуждениях на поверхности, что важно при исследовании поверхностной проводимости и реактивности. Диапазон используемых теоретических методов для изучения поверхностных фононов широк: от *ab initio* подходов до модельных полуэмпирических методов. Для исследования локальных изменений в фоонном спектре поверхности Ag(100), в присутствии адатома Cu и вакансий, использовались IETS и теоретический метод МПА. Рассмотрены два варианта размещения адатомов на поверхности: по типу замещения и в дырке, образованной группой вакансий.

Для анализа влияния точечных дефектов и адатомов на фоонный спектр подложки рассчитывалась разностная LDOS, определяемая как разница между LDOS системы с дефектами и LDOS идеальной поверхности. На рисунке приведены теоретические и экспериментальный спектры diff LDOS.

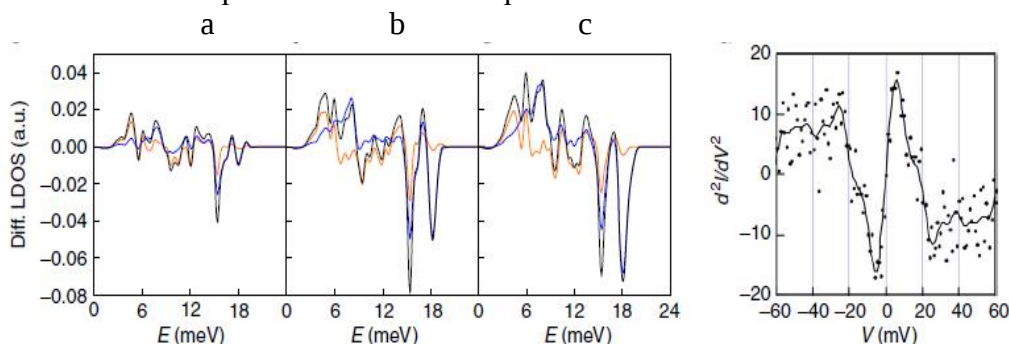


Рис. Абсолютные значения diff LDOS. На левой панели расчетные данные для (а) одной вакансии, (b) 4 -х атомной вакансии и (с) 9 -ти атомной вакансии на поверхности Ag(100). На правой панели соответствующий экспериментальный IETS спектр.

Как видно из рисунка наблюдается хорошее согласие между расчетным и экспериментальным распределением локальной плотности фоонных состояний. Показано, что наибольший вклад вносят адатомы меди, замещающие атом подложки. Наблюдается появление локальных возмущений в низкочастотной области на фоне общей делокализации фоонного спектра. Также в низкочастотной области фиксируются дополнительные локальные пики вблизи уровня Ферми. При помещении адатома в дырку, образованную 9 вакансиями, LDOS соответствует распределению плотности колебательных состояний адатома, находящегося на поверхности, но не внедренного в поверхностный слой подложки. Локальные изменения в фоонный спектр поверхности Ag(100) вносят и островки вакансий.

Литература:

1. G. G. Rusina, E. V. Chulkov. Phonons on the Clean Metal Surfaces and in Adsorption Structures, Russian Chem. Rev., 82, p. 483, 2013.
2. H. Gawronski, K. Mongenstern. Imaging phonon excitation with atomic resolution. Science 319, 930–933 (2008)

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 15-02-02717-а.