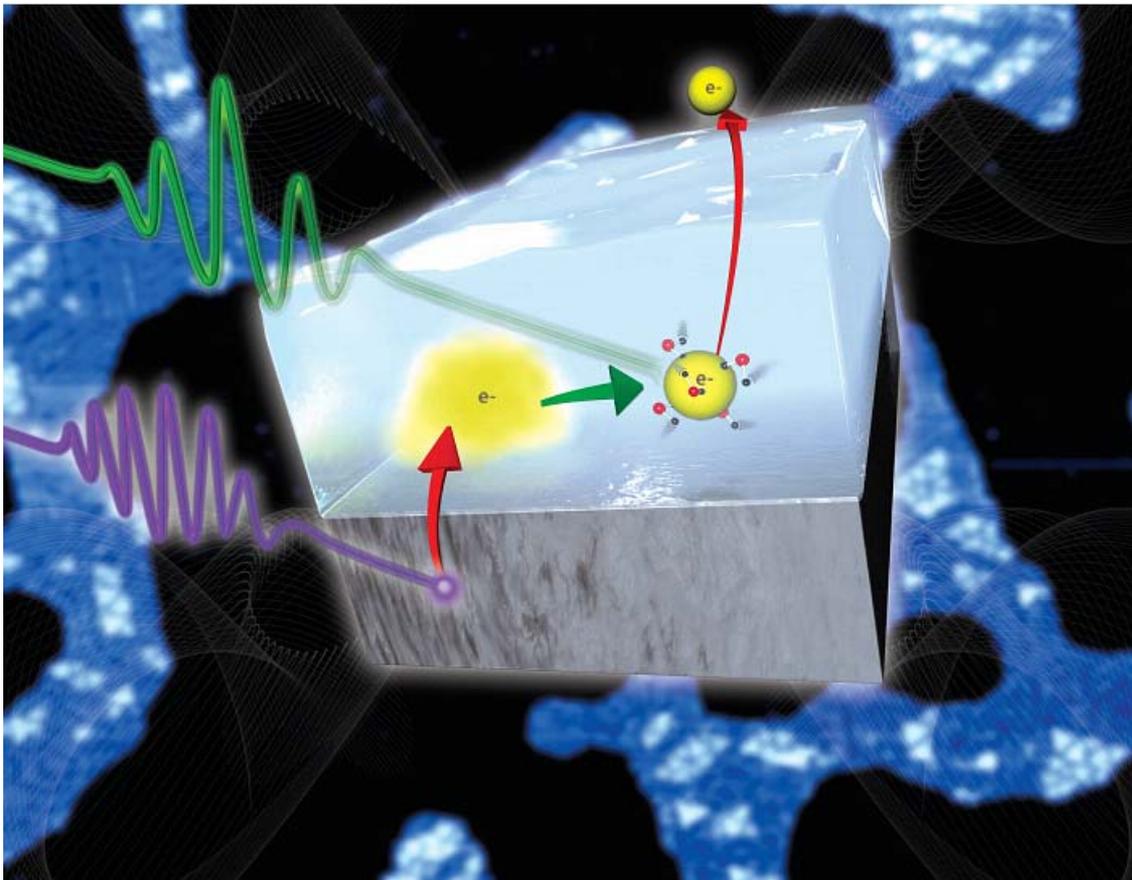
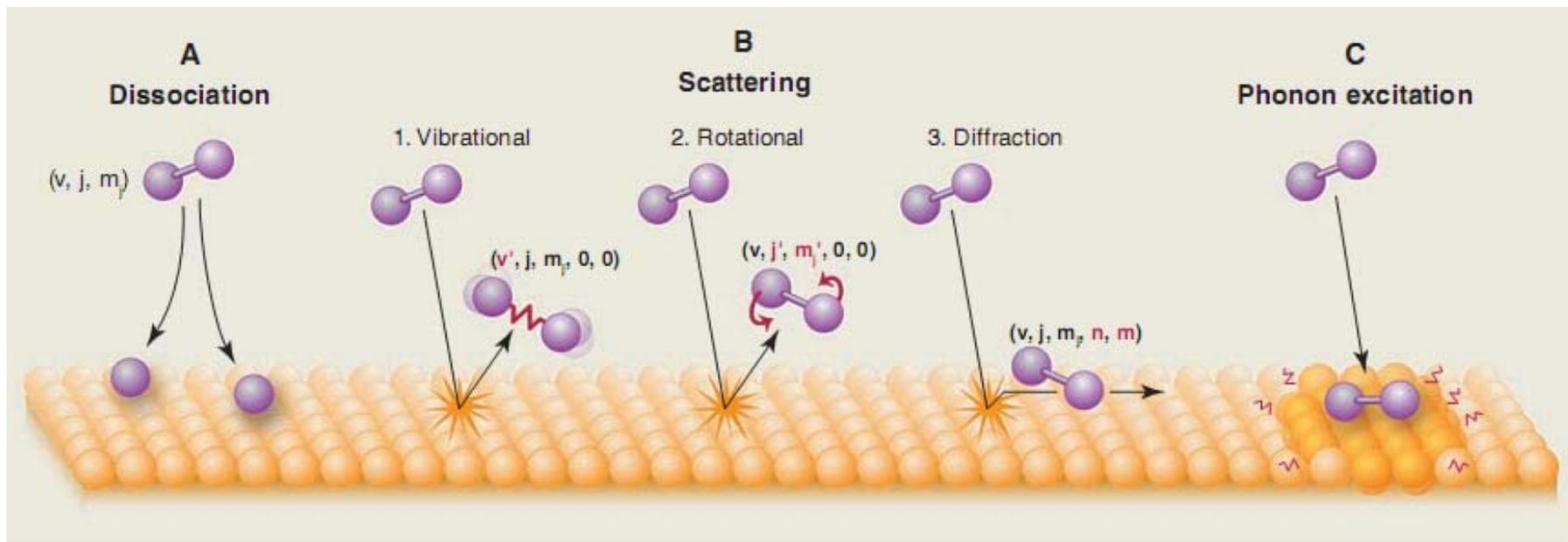


ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

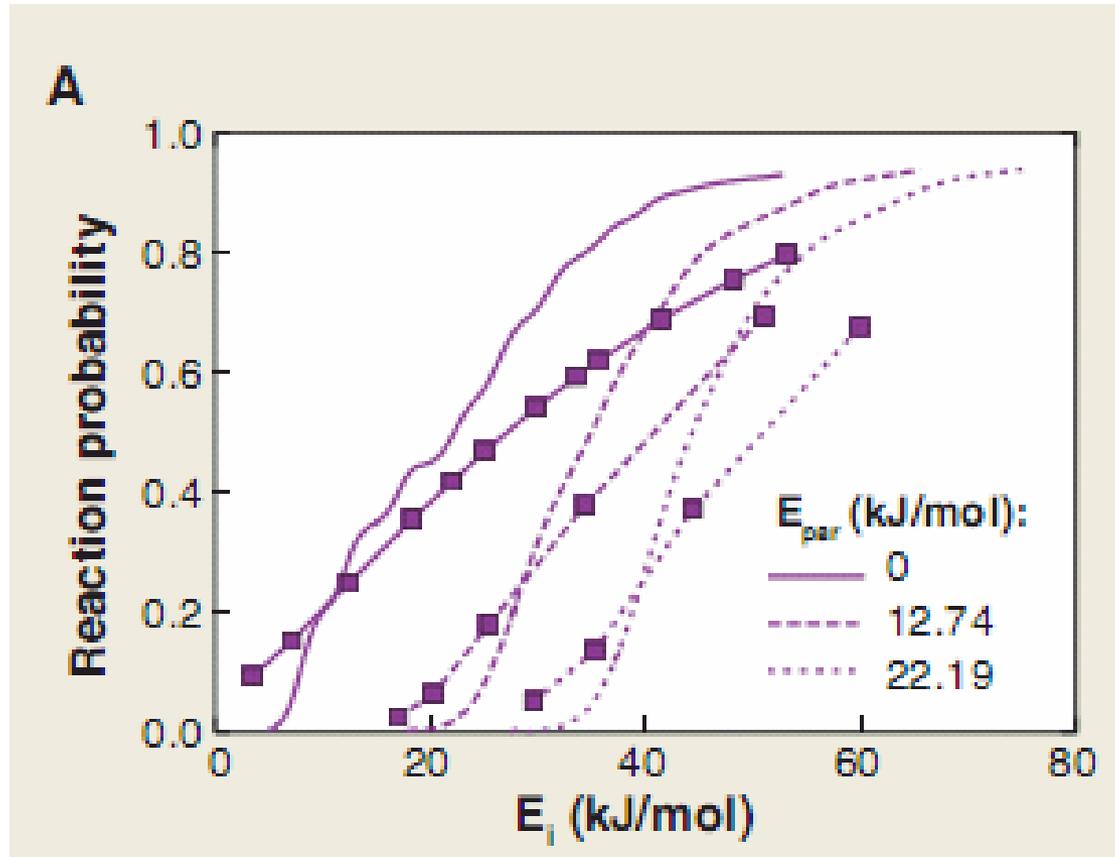
С ПОВЕРХНОСТЬЮ

И НА ПОВЕРХНОСТИ



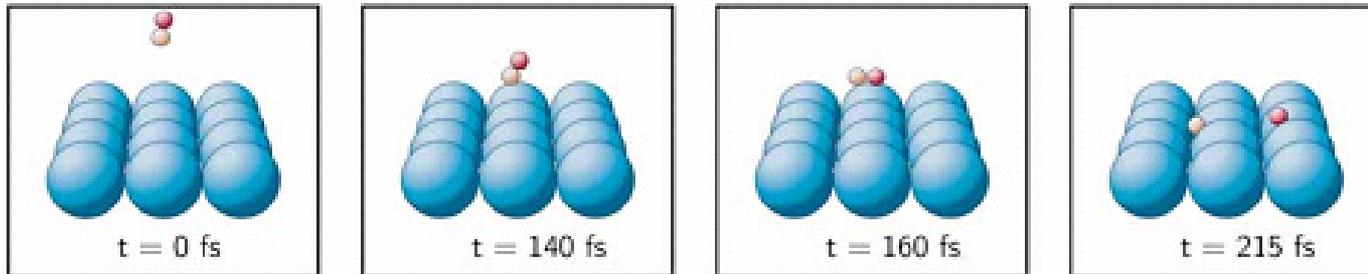


ПРИМЕР: $\text{H}_2 / \text{Pt}(111)$

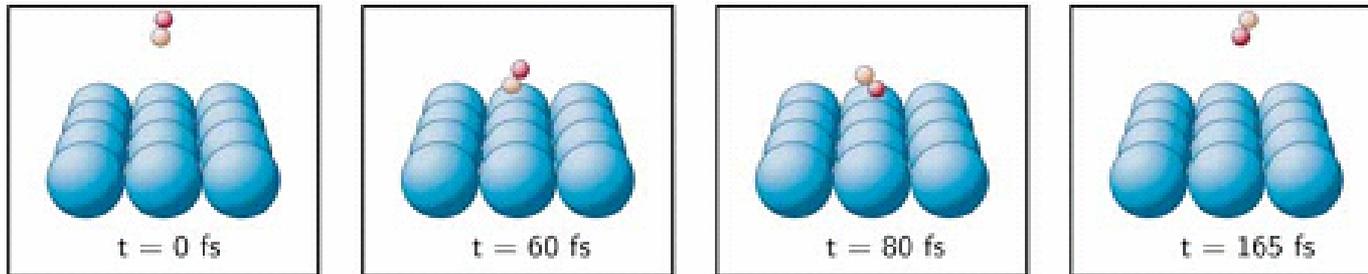


ПРИМЕР: ДИССОЦИАТИВНАЯ ХЕМОСОРБЦИЯ ВОДОРОДА

a) $E_i = 0.01$ eV



b) $E_i = 0.12$ eV



$H_2/Pd(001)$

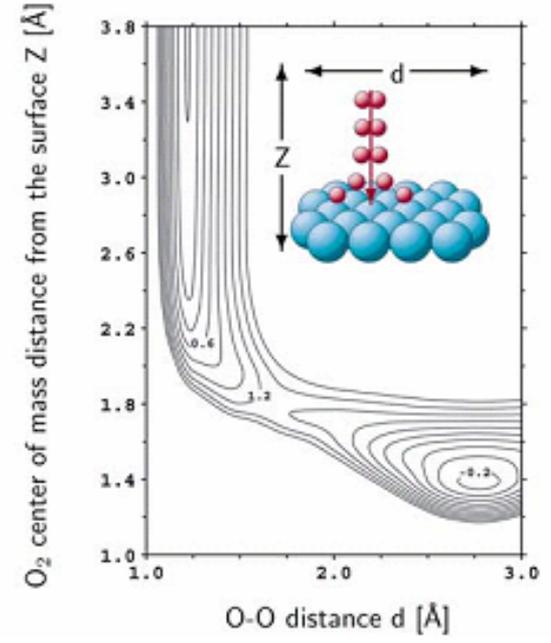
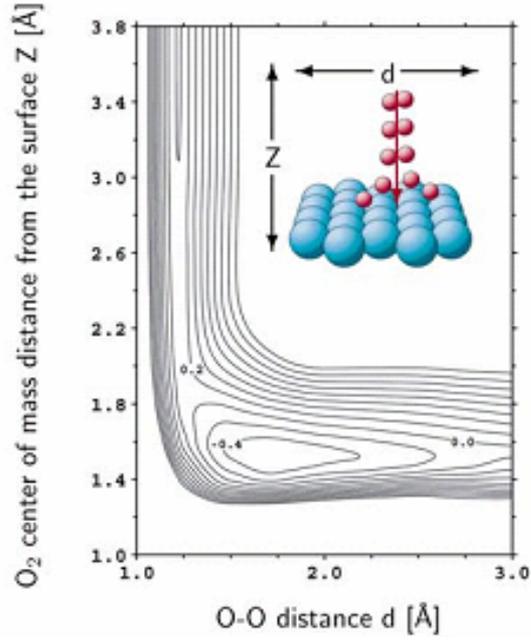
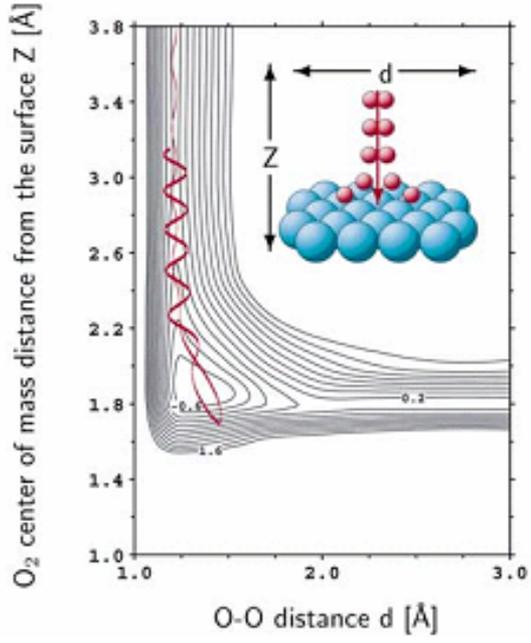
ППЭ: DFT-рсчет, 6 степеней свободы

Траекторные расчеты: классическая динамика

Изначально молекула не вращается

Траектории отличаются только начальной кинетической энергией

ПРИМЕР: ДИССОЦИАТИВНАЯ ХЕМОСОРБЦИЯ КИСЛОРОДА



O₂/Pt(111)

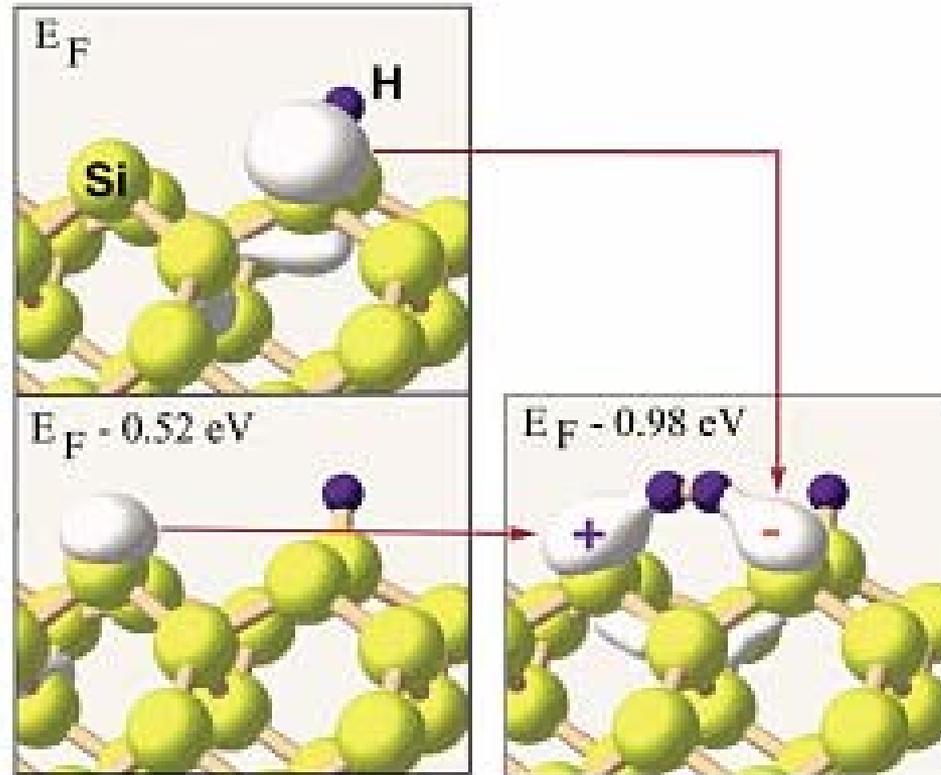
Три различные ориентации центра масс молекулы: над ямкой между тремя атомами, между двумя атомами, над атомом.

Энергия: эВ/молекулу O₂

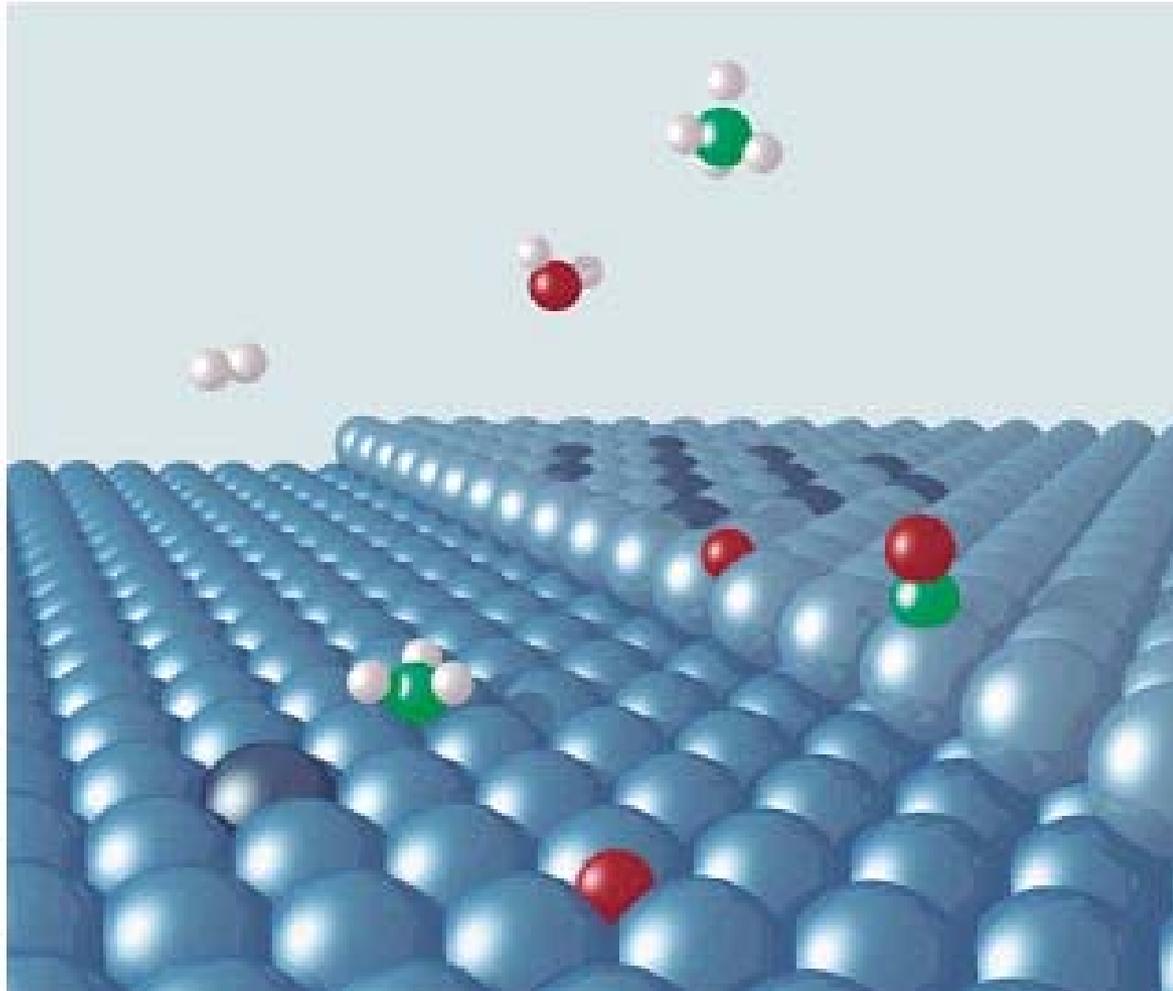
Контур с шагом 0.2 эВ

Результаты DFT расчетов

ПРИМЕР: ХЕМОСОРБЦИЯ H_2 НА $Si(100)$

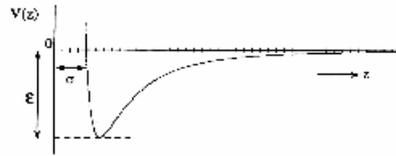


Простой пример несовершенной поверхности



ТИПЫ АДСОРБЦИИ

ФИЗИЧЕСКАЯ АДСОРБЦИЯ

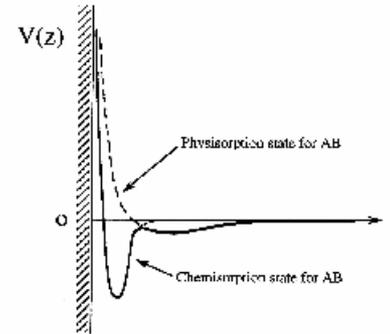


$$V(z) = 4\pi N_A \sigma^3 \left[\frac{1}{45} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^9 - \frac{1}{6} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^3 \right]$$

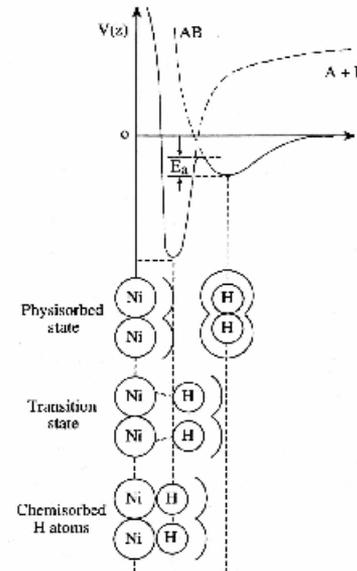
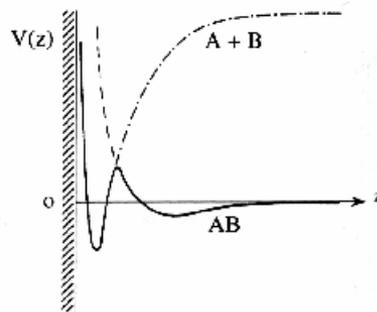
Ленард-Джонс:

$$v(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

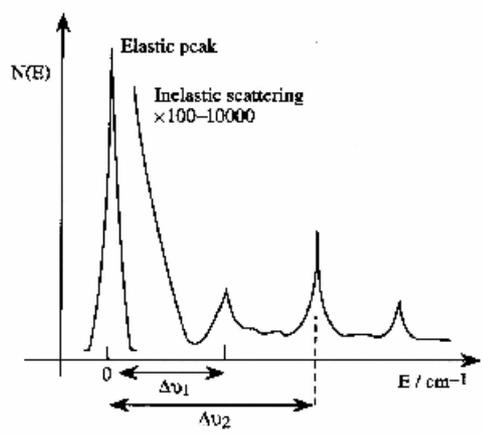
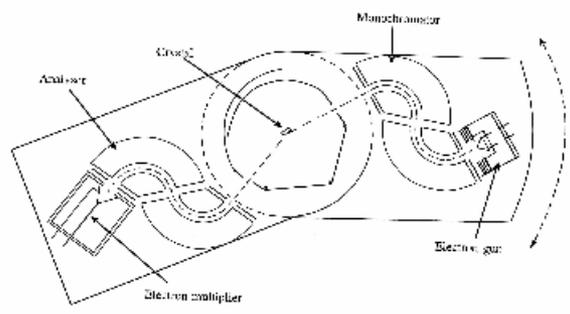
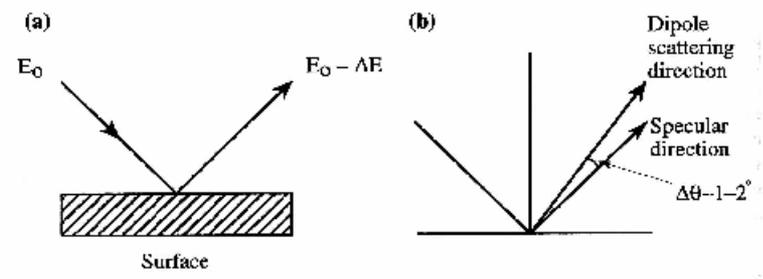
НЕДИССОЦИИРОВАННАЯ ХЕМОСОРБЦИЯ



ДИССОЦИИРОВАННАЯ ХЕМОСОРБЦИЯ АКТИВИРОВАННАЯ НЕАКТИВИРОВАННАЯ

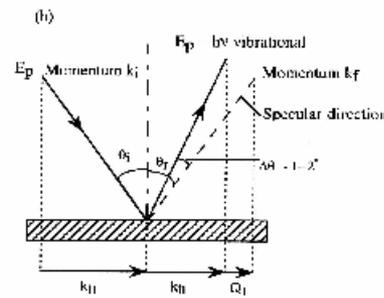
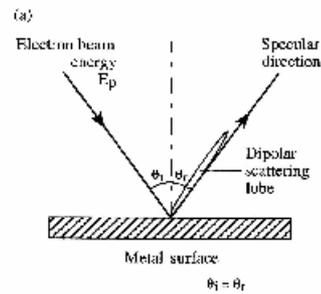
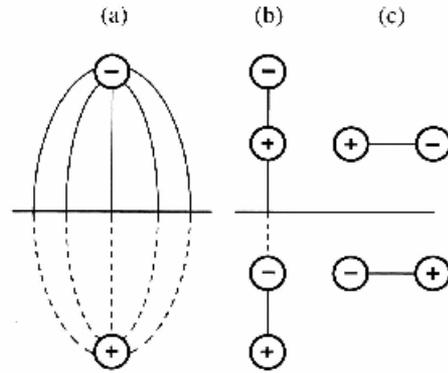


СПЕКТРОСКОПИЯ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНАМИ
ELECTRON ENERGY LOSS SPECTROSCOPY

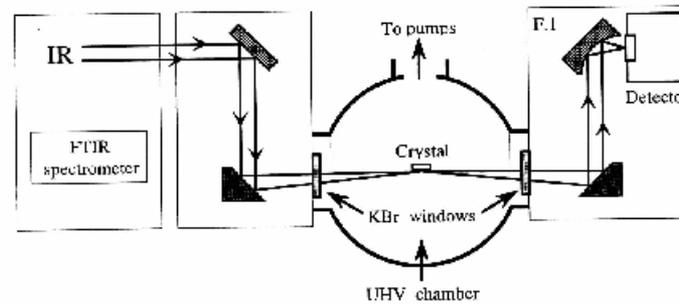


**СПЕКТРОСКОПИЯ
ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ
ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНАМИ**

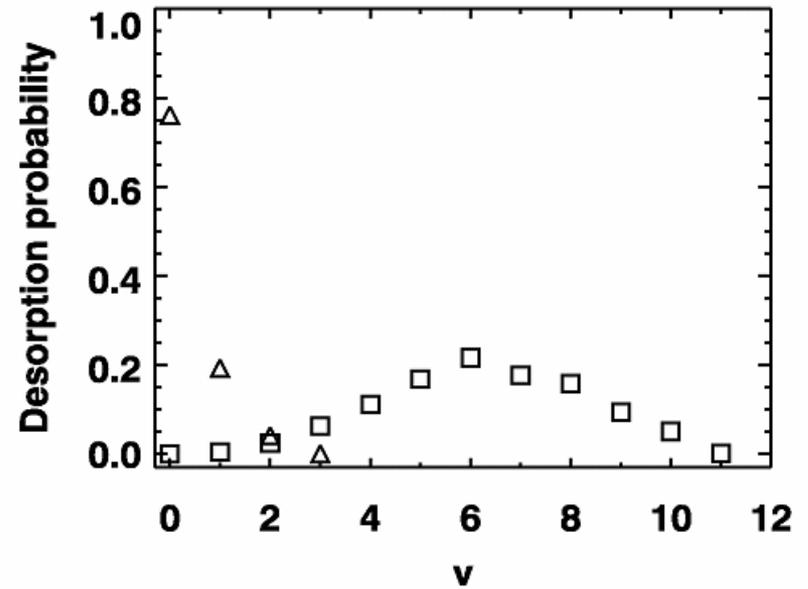
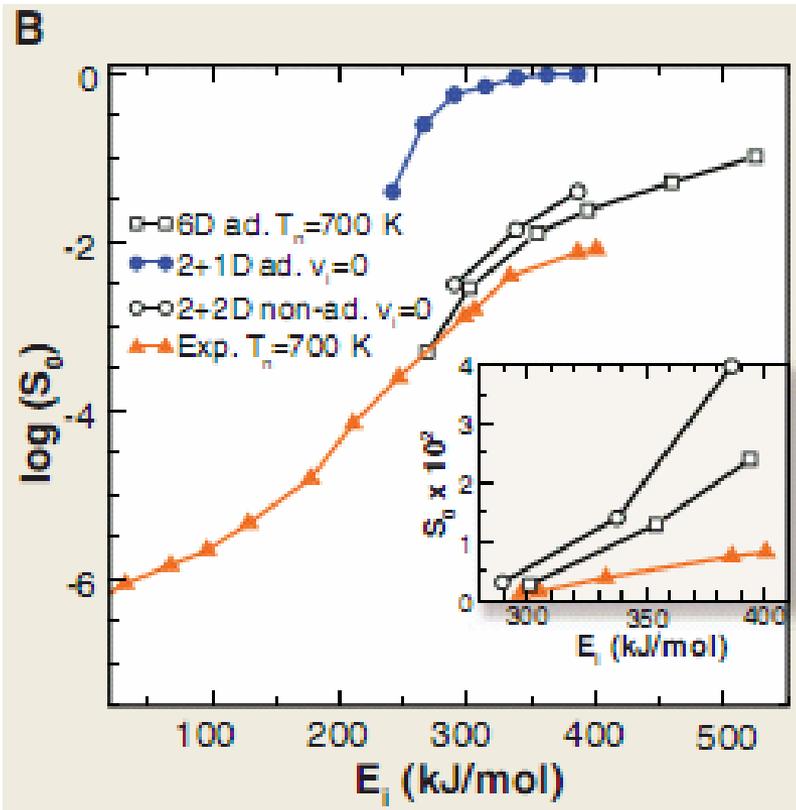
**ELECTRON ENERGY LOSS
SPECTROSCOPY**



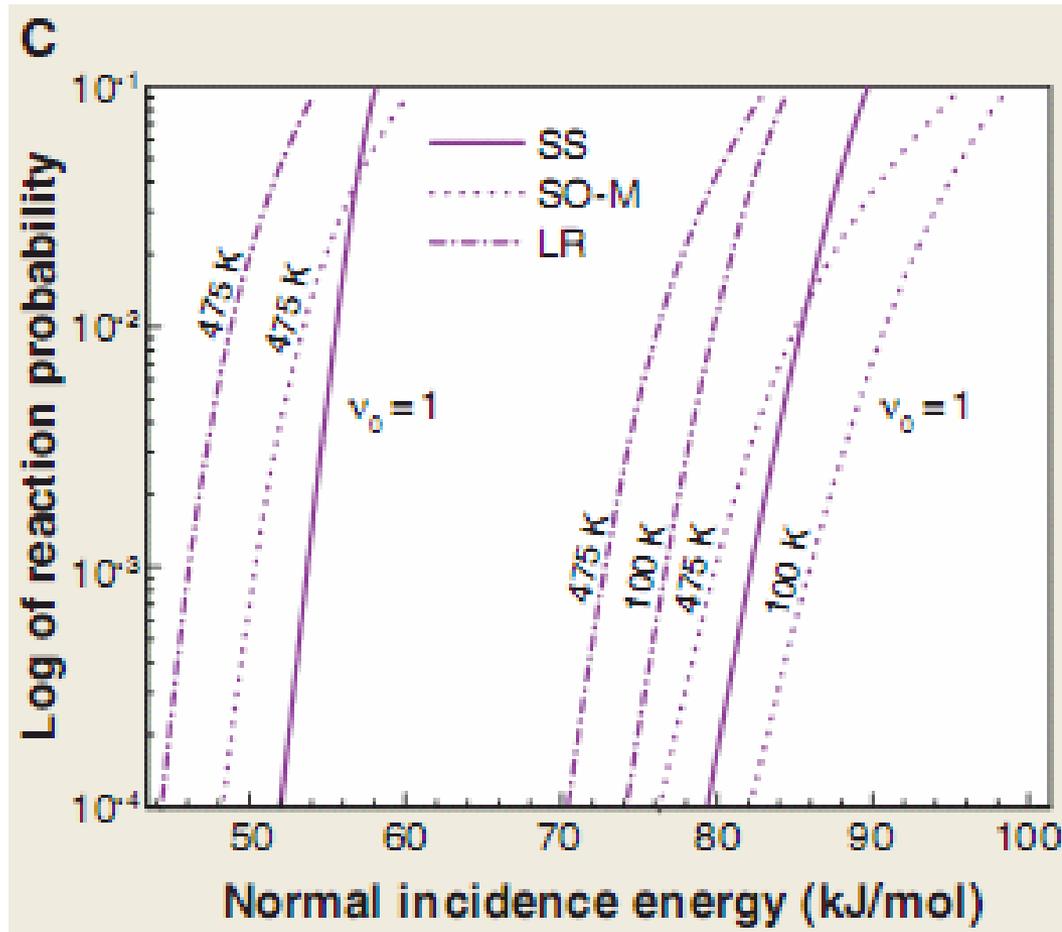
RAIRS: REFLECTION-ABSORPTION INFRARED SPECTROSCOPY



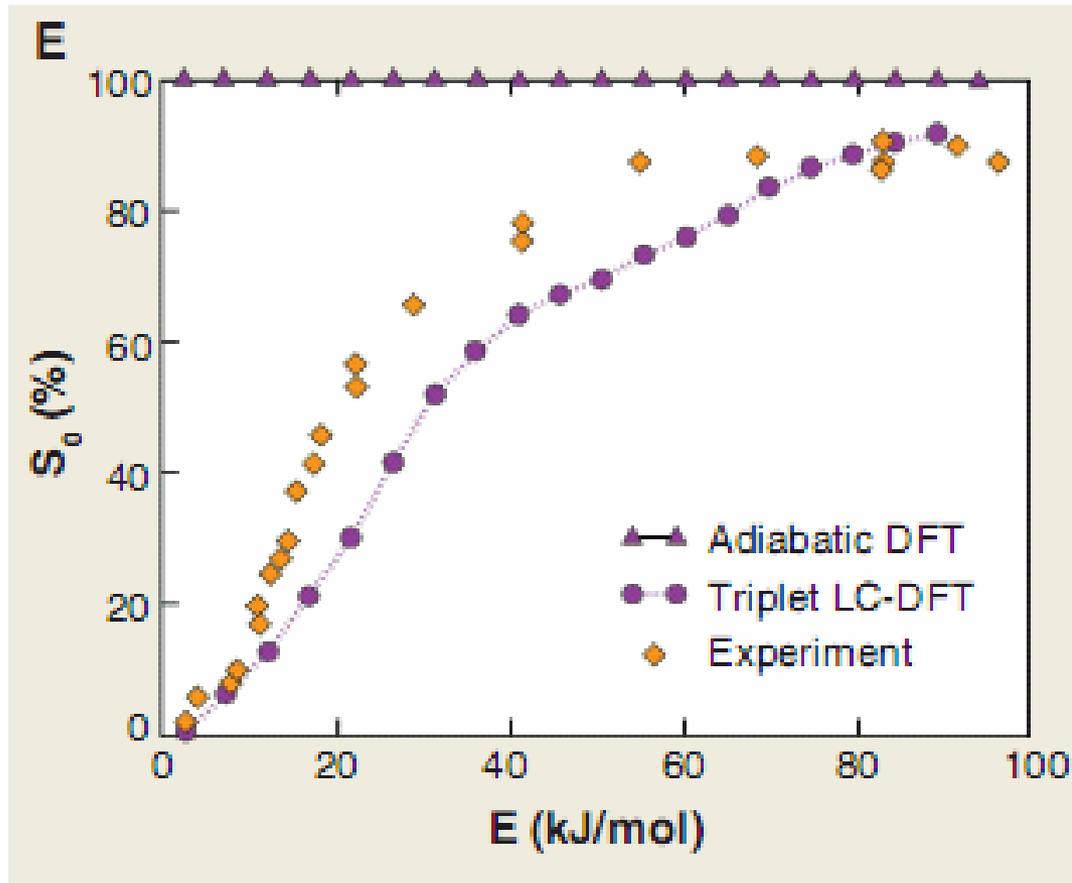
ПРИМЕР: N₂ / Ru(0001)



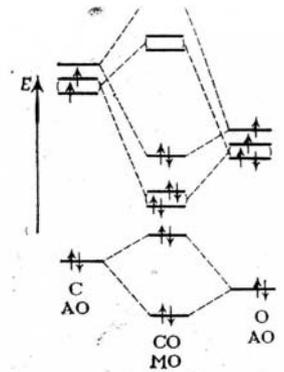
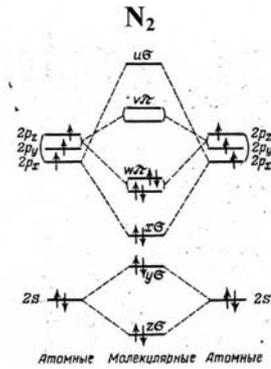
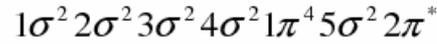
ПРИМЕР: CH₄ / Ni(111)



ПРИМЕР: O₂ / Al(111)



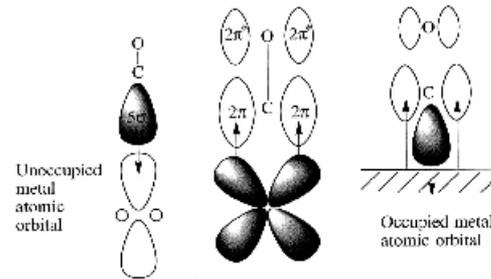
АДСОРБЦИЯ СО



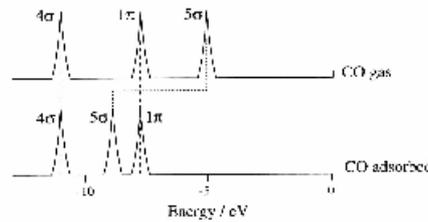
(a)

(b)

(c)



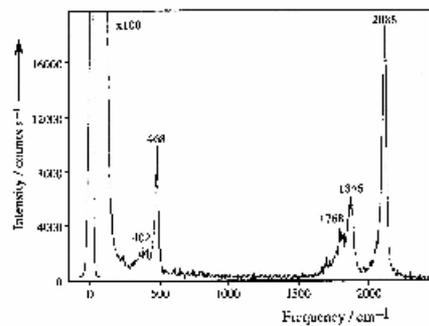
Сопоставление УФЭС в газовой фазе и на поверхности



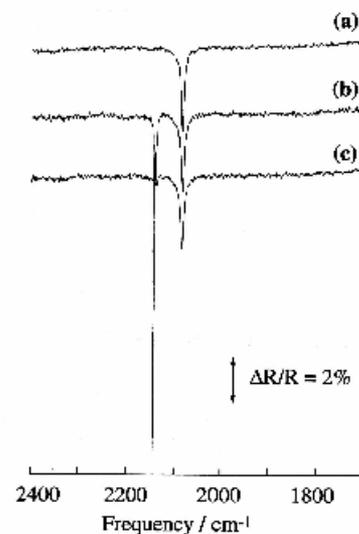
АДСОРБЦИЯ СО					
ДИССОЦИАТИВНАЯ			НЕ ДИССОЦИАТИВНАЯ		
Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag
W	Re	Os	Ir	Pt	Au

АДСОРБЦИЯ СО: КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

Спектр характеристических потерь СО на Pt(111) при максимальном заполнении и комнатной темп.



ИК спектр СО на Cu (100) при 23 – 26 К

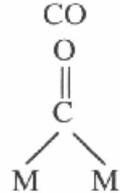


Terminal



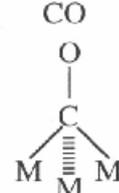
$\nu_{\text{CO}} \sim 2100$
 -2000 cm^{-1}

M₂ - bridged



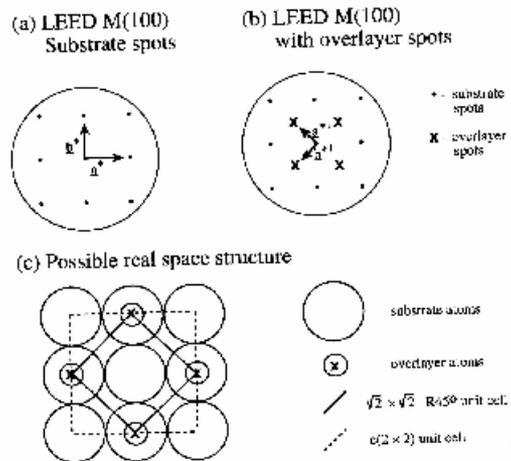
$\nu_{\text{CO}} \sim 2000$
 -1850 cm^{-1}

M₃ - bridged



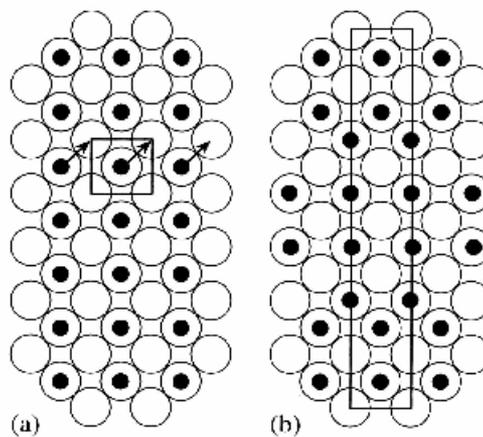
$\nu_{\text{CO}} \sim 1900$
 -1700 cm^{-1}

АДСОРБЦИЯ СО: СТРУКТУРА СЛОЯ

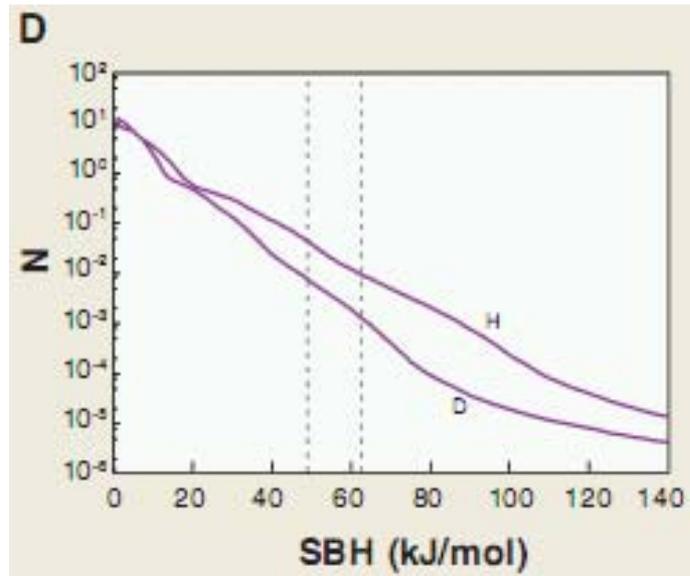


Структура адсорбционных слоев СО на Cu(100):

(a) - $\Theta=50\%$? Cu(100) $(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$; (b) - $\Theta>50\%$ Cu(100) $(7\sqrt{2} \times 7\sqrt{2})R45^\circ$



ПРИМЕР: H и D / Cu(111)



ПРИМЕР: КАТОД ЛЮМИНЕСЦЕНТНОЙ ЛАМПЫ

