

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА НАНОКРИСТАЛЛА AgCl С АДсорбированным на атомно-шероховатой поверхности ионом серебра

Тимошенко Ю. К., Шунина В. А.

Полуэмпирическим методом сильной связи с самосогласованием по эффективным зарядам и дипольным моментам ионов рассчитаны полные и локальные плотности состояний нанокристаллов AgCl с адсорбированным ионом серебра. Адсорбция рассматривалась как на атомно-шероховатой поверхности (вблизи ступеньки и излома ступеньки), так и на гладкой поверхности. На основе полученных данных делается, в частности, вывод, что следует ожидать усиление локализации фотоэлектронов с уменьшением количества ближайших к адсорбированному иону анионов подложки. То есть, наиболее эффективный захват фотоэлектрона должен происходить на гладкой поверхности, а не вблизи ступенек и их изломов, как до сих пор было принято считать.