

# Применение потенциала Морзе для описания процессов десорбции из двумерных адсорбированных слоев

© М.В. Кузьмин, И.И. Пилюгин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: i.pilyugin@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 11 ноября 2024 г.  
В окончательной редакции 18 июля 2025 г.  
Принято к публикации 25 сентября 2025 г.

Предложены модели десорбции из двумерных адсорбированных слоев в приближении потенциала Морзе. Установлена взаимосвязь параметров кинетики десорбции и потенциала взаимодействия адатом–подложка в данном приближении. Сформулированы условия реализации того или иного десорбционного механизма. Предложенные модели апробированы на основе экспериментальных результатов по десорбционной кинетике для систем редкоземельный металл — Si(111). Полученные результаты важны для более глубокого понимания процессов десорбции атомов металлов с поверхностей полупроводников, которые подвержены структурным трансформациям.

**Ключевые слова:** поверхность, адсорбированная частица, потенциал Морзе, механизм десорбции.

DOI: 10.61011/JTF.2026.01.62035.414-24

## Введение

В исследованиях процессов десорбции атомов с поверхности металлов и полупроводников, как правило, применяется кинетический подход, в рамках которого анализируют результаты термодесорбционной или изотермической десорбционной спектроскопии и определяют три количественных параметра, а именно порядок десорбционной кинетики ( $n$ ), энергию активации десорбции ( $E_d$ ) и предэкспоненциальный множитель ( $C$ ) [1,2]. В наиболее простом случае, когда концентрация  $N$  адсорбата столь мала, что латеральное взаимодействием в адсорбированном слое можно пренебречь (далее такие слои будем называть двумерным (2D) газом), скорость десорбции можно описать кинетическим уравнением первого порядка:

$$-\frac{dN}{dt} = C \cdot N \cdot \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана. Используя это уравнение, на основе кривых десорбции, можно определить величину  $E_d$ , равную энергии связи адатома, и предэкспоненту

$$C = \frac{f_i}{f_0} \cdot \frac{k_B T}{h}, \quad (2)$$

где  $f_0$  и  $f_i$  — статистические суммы состояний атома, находящегося в адсорбционном положении и активированном комплексе соответственно,  $h$  — постоянная Планка. В зависимости от свойств адсорбционного положения и особенностей десорбционного процесса отношение  $\frac{f_i}{f_0}$  может быть на несколько порядков величины как меньше, так и больше единицы.

При увеличении поверхностной концентрации  $N$  латеральное взаимодействие в адсорбированном слое начинает играть все более существенную роль. Это приводит к 2D-фазовым переходам на поверхности, например, переходу 2D-газ  $\rightarrow$  2D-островки (двумерная конденсация) [3]. Очевидно, что при такой трансформации в адсорбированном слое должны измениться и параметры кинетики десорбции. Действительно, было показано, что в случае равновесия между островками и 2D-газом скорость десорбции описывается кинетическим уравнением нулевого порядка:

$$-\frac{dN}{dt} = C \cdot a_0^{-2} \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right), \quad (3)$$

(где  $a_0$  — постоянная решетки подложки), в котором полученная из эксперимента величина  $E_d$  равна энергии удаления краевого атома островка в вакуум, а предэкспонента  $C$  может на несколько порядков превышать аналогичное значение для 2D-газа (более подробно см. далее).

Из сказанного выше ясно, что параметры кинетики десорбции, хоть и содержат ценные сведения о структуре адслоя и его термической устойчивости, они еще не дают информации о механизмах десорбции индивидуальных атомов. Так, очевидно, что механизмы десорбции из 2D-газа и 2D-островков должны иметь качественные отличия. В то же время отличия параметров  $E_d$  и  $C$  для этих адсорбционных фаз носят лишь количественный характер. Следовательно, необходим подход, который позволил бы на основе кинетических параметров устанавливать и анализировать процессы десорбции на атомарном уровне.

Цель настоящей работы — восполнить указанный пробел хотя бы частично, и установить взаимосвязь между

кинетическими параметрами и механизмами десорбции. В настоящей работе показано, что информация об этих механизмах может быть получена на основе представлений о форме потенциала взаимодействия адсорбированных частиц с поверхностью, которая, в свою очередь, определяется полученными в эксперименте значениями  $E_d$  и  $C$  для адсорбированного слоя.

В настоящее время для описания взаимодействия адсорбат–поверхность могут быть использованы полуэмпирические потенциалы Леннарда–Джонса и Морзе, а также их разновидности [4]. В отличие от потенциала Леннарда–Джонса и его производных, которые, строго говоря, не имеют физического обоснования, потенциал Морзе широко применялся при описании различных физических объектов и явлений, например, в исследованиях динамики решетки, структуры дефектов в металлах, упругих свойств твердых тел, вращательно-колебательных переходов в двухатомных молекулах, нелинейной динамики в биологических системах, термодинамики и транспортных свойств газов [5–10]. В настоящей работе, используя приближение потенциала Морзе, исследован механизм десорбции из слоев адсорбата, имеющих различную структуру.

## 1. Результаты и их обсуждение

Для решения задачи, поставленной во введении, необходимо связать форму потенциала Морзе с известными величинами кинетики десорбции для адсорбционных систем, в которых реализуются различные структуры адсорбированного слоя. Также для анализа вида потенциала необходим критерий, на основании которого можно классифицировать формы потенциальной кривой в приближении Морзе, что далее дает возможность установить качественные различия механизмов десорбционного процесса на атомарном уровне. Поэтому вначале проведем сравнительный анализ известных экспериментальных данных кинетики десорбции, полученных ранее для пленочных структур редкоземельный металл (РЗМ)–кремний, в которых происходят фазовые переходы  $2D\text{-газ} \rightarrow 2D\text{-островки}$ .

### 1.1. Экспериментальные исследования систем РЗМ–Si(111): параметры кинетики десорбции

Подробные данные по кинетике десорбции для адсорбированных слоев, представляющих собой  $2D\text{-газ}$  либо систему вида „ $2D\text{-островки плюс } 2D\text{-газ}$ “, были получены для трех систем: Yb–Si(111) [11], Eu–Si(111) [12,13] и Sm–Si(111) [14]. Формирование адсорбированного слоя в указанных системах носит очень похожий характер. В области малых покрытий адсорбата ( $\leq 0.02$  монолитного слоя) и при высоких температурах подложки (1175–1220 K в случае Yb, 1315–1430 K в случае Eu и 1410–1490 K в случае Sm) атомы металла образуют  $2D$  газ на поверхности. При увеличении степени

**Таблица 1.** Параметры кинетики десорбции, полученные для различных фаз адсорбционных систем. Данные взяты из работ [11–14]

Адсорбционная система	$2D\text{-газ}$		Структура (3 × 2) (2D-островок)	
	$E_d, \text{eV}$	$C^{-1}, \text{s}$	$E_d, \text{eV}$	$C^{-1}, \text{s}$
Yb–Si(111)	2.9	$1 \cdot 10^{-12}$	4.4	$5 \cdot 10^{-16}$
Eu–Si(111)	3.5	$2 \cdot 10^{-12}$	4.7	$2 \cdot 10^{-15}$
Sm–Si(111)	3.2	$1 \cdot 10^{-11}$	4.95	$1.5 \cdot 10^{-16}$

покрытия и/или небольшом понижении температуры в адсорбированном слое происходит фазовый переход  $2D\text{-газ} \rightarrow 2D\text{-островок}$ , в результате чего образуется поверхностная реконструкция  $3 \times 2$ . Параметры кинетики десорбции, полученные для обеих фаз, представлены в табл. 1.

При исследовании десорбции атомов РЗМ из реконструкции (3 × 2) наблюдался стационарный режим, т. е. островки находились в равновесии с  $2D\text{-газом}$ , что приводило к нулевому порядку десорбции. Это означает, что полученное в эксперименте значение  $E_d$  соответствует энергии удаления краевого атома островка в вакуум [3,15].

Из анализа результатов табл. 1 видно, что фазовый переход в адсорбированном слое РЗМ сопровождается существенным упрочнением (на 1.2–1.7 eV) связи атомов с поверхностью подложки. Этот вывод неудивителен. Действительно, согласно результатам, полученным с помощью сканирующей тунNELьной микроскопии (СТМ) [16,17], фотоэлектронной спектроскопии [18] и расчетов на основе теории функционала плотности (ФП) [19], формирование  $2D\text{-островковой}$  фазы сопровождается не только появлением дальнего порядка в адсорбированном слое, но и существенной перестройкой поверхности кремниевой подложки, индуцированной атомами РЗМ. В реконструкции  $3 \times 2$  она образована линейными цепочками атомов Si в форме пчелиных сот (*honeycomb chains*), включающими необычные двойные  $\pi$ -связи  $\text{Si}=\text{Si}$ , и пустые каналы (*channels*), которые лежат между кремниевыми цепочками и заполняются атомами металла (в литературе такая конфигурация получила название НСС-структур). Ясно, что она является неавтономной, так как не может существовать в отсутствие стабилизирующего ее адсорбата. При удалении атомов РЗМ из  $2D\text{-островка}$ , реконструкция  $3 \times 2$  разрушается и переходит в структуру, характерную для поверхности, не покрытой адсорбатом. Все это означает, что вклад в энергию удаления краевого атома из островка в вакуум должно давать не только слагаемое, связанное с разрывом связей атома металла с поверхностью (как в случае одиночного адатома), но и дополнительный

член, соответствующий энергии, которую необходимо затратить на перестройку поверхности кремния.

Не менее важный вывод на основе данных табл. 1 касается предэкспоненциального множителя. Как видно, переход  $2D\text{-газ} \rightarrow$  структура  $3 \times 2$  сопровождается ростом значения  $C$  на 3–5 порядков. Ясно, что столь значительные изменения обусловлены тем, что десорбция атомов РЗМ из  $2D$ -газа и островка  $3 \times 2$  имеет, скорее всего, различную природу. Далее рассмотрим этот вопрос более подробно.

## 1.2. Потенциальная энергия взаимодействия адсорбат–поверхность и ее взаимосвязь с параметрами $C$ и $E_d$ . Критерий выбора модели десорбции

Будем предполагать, что значения параметров  $E_d$  и  $C$ , с одной стороны, и вид потенциала Морзе, который описывает взаимодействие атома адсорбата с подложкой в процессе десорбции, с другой стороны, однозначно связаны друг с другом. Ясно, что форма потенциала зависит от состояния поверхности, в частности, от особенностей взаимодействия адсорбированная частица–подложка, и следовательно, может служить в качестве „отпечатка пальцев“ (fingerprint) для различных адсорбционных фаз. Так как величина, обратная параметру  $C$ , имеет размерность времени (с), удобно ввести временную константу  $t_0 = 1/C$ . Как показано далее, параметр  $t_0$  играет важную роль в модели Морзе и может быть поставлен в соответствие десорбционному процессу. Данные по кинетике десорбции [11,13,14,20] свидетельствуют, что значение этого параметра может быть как больше, так и меньше периода колебаний гармонического осциллятора  $k_B T/h$ , причем это отличие может составлять несколько порядков величины.

Введем также характерное время  $t$ , за которое происходит переход атома адсорбата из основного невозбужденного состояния в потенциальной яме на поверхности на достаточно удаленное расстояние в вакууме (время десорбции). Тогда вероятность десорбции частицы можно выразить как  $W = t_0/t = \exp(-U_0/k_B T)$ , где  $U_0$  — потенциальная энергия частицы в основном невозбужденном состоянии в потенциальной яме. Данное уравнение можно переписать в виде

$$t = t_0 \cdot \exp(U_0/k_B T). \quad (4)$$

Оно может быть легко преобразовано к уравнению для константы скорости десорбции, получаемому из теории абсолютных скоростей химических реакций:  $k = 1/t = C \cdot \exp(-E_d/k_B T)$ , где  $E_d = U_0$ .

Проведенное выше рассмотрение пока еще не дает возможности построить иные модели десорбции, кроме простейшей. Это связано с отсутствием в настоящем времени критерия, который позволил бы различить физические условия колебаний десорбирующихся атомов. В настоящей работе такой критерий предложен из

сравнительного анализа энергии колебательного кванта адатома  $h\nu_0$ , где  $\nu_0 = 1/\hat{t}_0$  — частота колебаний, а  $\hat{t}_0$  — период колебаний адатома, который может отличаться от величины  $t_0 = 1/\nu$ . На основе такого анализа можно выделить три качественно различающихся случая:

- 1)  $\nu \approx k_B T/h$ ,
- 2)  $\nu \ll k_B T/h$ ,
- 3)  $\nu \gg k_B T/h$ .

Очевидно, первый случай соответствует простейшей модели колебаний, которую можно назвать равновесной (адатом в потенциальной яме и решетка подложки находятся в равновесии). Выполняется соотношение  $t_0 \approx \hat{t}_0$ . Последнее означает, что в рамках кинетической модели десорбции величина  $f_i/f_0 \sim 1$ . Второй и третий случаи соответствуют неравновесным моделям колебаний, в которых величина  $\nu$  для адатома значительно отличается от частоты тепловых колебаний решетки. В случае 2, как показано далее, механизм десорбции имеет резонансно-ступенчатый характер. Он реализуется, в частности, для  $2D$ -газа. Наконец, случай 3 противоположен случаю 2 и характерен для десорбции из островков. Рассмотрим каждую из трех моделей десорбции подробнее.

## 1.3. Равновесная модель колебаний

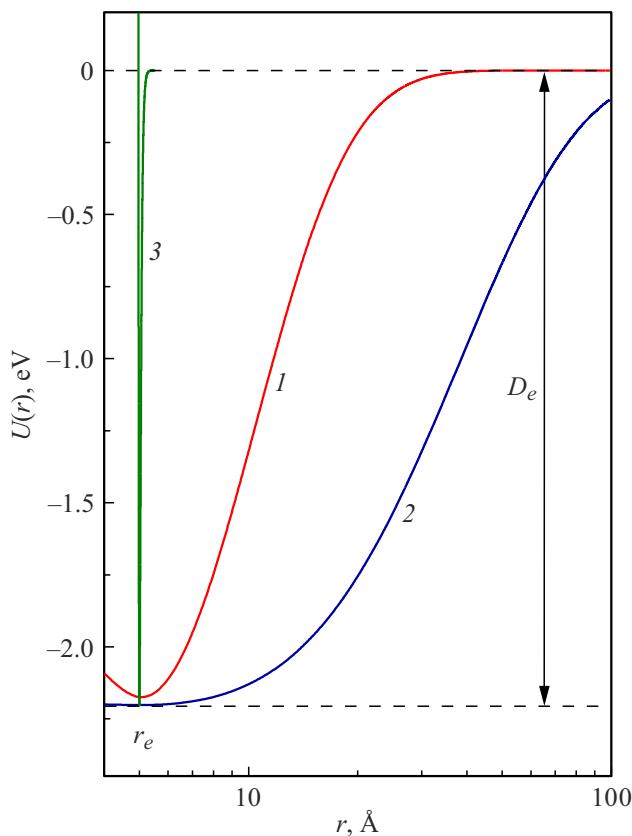
Колебания адсорбированных частиц часто представляют простой гармонической моделью, в которой колебательные уровни эквидистантны. В то же время спектральные данные по колебаниям молекул показывают, что колебания ангармоничны. Следует ожидать, что колебания адатома вблизи поверхности тоже ангармоничны, поэтому применение модели Морзе [21] для адсорбционных систем разумно. В ней потенциал взаимодействия частиц имеет вид

$$U(r) = D_e \cdot (1 - \exp(-a(r - r_e)))^2, \quad (5)$$

где  $D_e$  — глубина потенциальной ямы,  $r$  — текущее расстояние от поверхности,  $r_e$  — равновесное расстояние от поверхности, а  $a$  — параметр размерности обратного расстояния, величина которого определяет ширину потенциальной ямы. Различные варианты графика этой кривой при одном и том же значении  $r_e = 5 \text{ \AA}$  и различных значениях  $a$  приведены на рисунке.

Модель гармонических колебаний не дает ограничений по энергии возбуждения адсорбированной частицы. В то же время модель Морзе имеет ограниченное количество уровней в потенциальной яме. Самый верхний из них имеет энергию  $E_{n_m} \approx D_e$ , где  $n_m = \frac{2D_e - h\nu_0}{h\nu_0}$  — номер уровня,  $\nu_0 = \frac{a}{2\pi} \sqrt{\frac{2D_e}{m}}$  — частота колебаний адатома массы  $m$ . Следующий за ним уровень уже является уровнем континуума, и модель Морзе в данной области энергий применяться не может. Типичная кривая Морзе представлена на рисунке, кривая 1.

Рассмотрим данные по кинетике десорбции (формула (4)) в приближении потенциала Морзе:



Кривые Морзе для различных моделей десорбции: 1 —  $a \approx 2 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$ , 2 —  $a \approx 2 \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$ , 3 —  $a \approx 2 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-1}$ .

1)  $U_0 = D_0 = E_d$ ; здесь параметр  $D_0$  характеризует положение нулевого уровня колебаний, отсчитываемого от уровня вакуума. Понятно, что  $D_0 < D_e$ ;

2) предположим, что десорбция идет с уровня  $E_{nm}$ , при этом расстояние адатома от поверхности составляет  $x_0 + r_e$ , где  $x_0$  вычисляется из соответствия  $t_0$  периоду колебаний атома массы  $m$  ( $\nu_0$  в модели Морзе):

$$x_0 = -\frac{1}{a} \cdot \ln \left( 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{ha}{4\pi} \right)^2 \frac{1}{2D_e m}} \right). \quad (6)$$

Величина  $x_0$  есть точка пересечения кривой Морзе с последним колебательным уровнем модели Морзе. Тогда мы получаем простую модель десорбции атома за одно колебание и границу десорбции на расстоянии  $x_0 + r_e$ , а также параметр „ $a$ “ модели Морзе, который приблизительно равен  $\frac{1}{x_0}$ .

#### 1.4. Резонансно-ступенчатая модель десорбции

Теперь проанализируем случай  $\nu \ll k_B T/h$ . Он соответствует резонансно-ступенчатой модели десорбции, происходящей за несколько колебаний. Предположим, что первое колебание происходит на нижнем уровне энергии. При возврате атома к поверхности адатом возбуждается колебательным квантром поверхности со

средней энергией  $U = k_B T$  и переходит на следующий уровень энергии и колеблется на нем до следующего возвращения к поверхности. У поверхности атом снова возбуждается квантлом с энергией  $k_B T$  и так ступеньками добирается до уровня с энергией  $E_{nm}$ , с которого десорбируется. Для реализации такого процесса необходимо, чтобы  $n_m \gg \frac{E_{nm}}{k_B T} = \ln W$ . В случае реализации такого резонансно-ступенчатого возбуждения экспериментально наблюдаемое значение  $t_0$  представляется в виде

$$\frac{t_0}{\hat{t}_0} = 1 + w_1 + \dots + w_n + \dots + w_{n_m} = (n_m + 1) = \frac{2D_e}{h\nu_0}, \quad (7)$$

где  $w_n$  — вероятность для частицы находиться на уровне  $n$ , которая численно равна  $w_n = t_n \cdot \nu_n$ , где  $\nu_n$  — частота колебаний атома на уровне  $n$ , а  $t_n$  — время жизни частицы на уровне  $n$ . Так как  $t_n \approx h/\Delta E_{n0}$ , где  $\Delta E_{n0} = E_n - E_0$  — разность энергий уровней Морзе, то  $w_n = E_n/\Delta E_{n0} = 1 + o(1)$ . Отсюда получаем оценку частоты

$$\hat{t}_0 = \sqrt{\frac{ht_0}{2D_e}}. \quad (8)$$

На рисунке (кривая 2), представлена типичная кривая Морзе, соответствующая резонансно-ступенчатой модели десорбции, если полагать, что частота колебаний атома есть  $\nu$ . Если частота колебаний описывается формулой (8), то случаю отвечает кривая 1.

Из формулы (8) легко получается взаимозависимость  $t_0$  и  $D_e$ , которая объясняет феномен, получивший в литературе название компенсационного эффекта взаимозависимости кинетических параметров десорбции  $E_d$  и  $C$  [22].

В наших экспериментах случаю резонансно-ступенчатой десорбции соответствует десорбция из 2D-газа, результаты расчетов которой представлены в табл. 2.

#### 1.5. Десорбция из узкой потенциальной ямы

В случае реализации условия  $\nu \gg k_B T/h$  десорбция принимает характер выхода частицы из узкой потенциальной ямы с малым количеством колебательных уровней. Значение параметра  $a$  таково, что адсорбционная связь разрывается вблизи состояния равновесия молекулы у поверхности, т.е.  $x_0 \ll 1 \text{ \AA}$  (см. рисунок, кривая 3). Такая ситуация реализуется для 2D-островков, экспериментальные данные для которых приведены в табл. 1. С помощью этих данных и представленных выше формул получены параметры модели Морзе, приведенные в табл. 3. Следует заметить, что при вычислении глубины десорбционной ямы по формуле (4) от  $D_e$  отнималась энергия нулевого уровня  $E_0 = h/(2\hat{t}_0) - (h/(2\hat{t}_0))^2/(4D_e)$ , а  $t_0 = \hat{t}_0$ . Параметр  $x_0$  вычислялся по формуле

$$x_0 = -\frac{1}{a} \cdot \ln \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{D_0}{D_e}} \right), \quad (9)$$

где  $D_0 = D_e - E_0$ .

**Таблица 2.** Физические параметры десорбции для РЗМ из 2D-газа

Система	$E_d$ , eV	$C^{-1}$ , с	$n_m$	$D_e$ , eV	$r_e$ , Å	$\hat{t}_0$ , с	$T$ , К	$t$ , с
Yb–Si(111)	2.9	$1 \cdot 10^{-12}$	37	2.98	0.38	$2.6 \cdot 10^{-14}$	1195	1.7
Eu–Si(111)	3.5	$2 \cdot 10^{-12}$	57	3.56	0.56	$3.35 \cdot 10^{-14}$	1350	23.3
Sm–Si(111)	3.2	$1 \cdot 10^{-11}$	129	3.22	1.33	$8.3 \cdot 10^{-14}$	1425	2.28

**Таблица 3.** Физические параметры десорбции для РЗМ на краю островковых пленок

Система	$E_d$ , eV	$C_*^{-1}$ , с	$n_m$	$D_e$ , eV	$r_e$ , Å	$T_1$ , К	$t_1$ , с	$T_2$ , К	$t_2$ , с
Yb–Si(111)	4.4	$3.3 \cdot 10^{-18}$	0	349	0.00053	1150	64	1195	12
Eu–Si(111)	4.7	$8.3 \cdot 10^{-17}$	0	22.7	0.0038	1295	163	1350	29
Sm–Si(111)	4.95	$1.1 \cdot 10^{-17}$	0	117	0.0011	1340	46	1425	3.6

Примечание. Температура  $T_1$  соответствует потоку частиц из островков  $1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}\text{s}^{-1}$ . Температура  $T_2$  соответствует потоку частиц из островков  $6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}\text{s}^{-1}$ .

Также в расчетах был использован параметр  $C_*^{-1} = t_0$ . Он в 6 раз меньше параметра  $C^{-1}$  из табл. 1. Использование величины  $C_*$  в настоящей работе связано с тем, что в работах [11–14] в качестве параметра  $a_0$ , согласно моделям [16,17,19], использовалось значение постоянной решетки подложки (т.е. Si(111)(1 × 1)), в то время как для описания процесса десорбции из структуры 3 × 2 необходимо принять во внимание, что площадь элементарной ячейки 3 × 2 в шесть раз больше, чем ячейки (1 × 1) и что число адсорбционных мест в этой структуре в шесть раз меньше аналогичной величины для поверхности 1 × 1.

В этом случае параметр  $n_m = 0$ , и в потенциальной яме Морзе находится только основной уровень. Это состояние долгоживущее, время  $t$  — велико. Кроме того, при десорбции возникает перестройка поверхности Si(111) за короткий промежуток времени.

Параметр модели Морзе  $r_e$  в обеих таблицах оценивался из модели Леннарда–Джонса [23] для притягивающей ветви кривой по формуле:

$$y(r) = \min(r_e) \sum_r \left| \left( \left( \frac{r_e}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_e}{r} \right)^6 \right) - \left( \exp(-2a(r - r_e)) - 2 \exp(-a(r - r_e)) \right) \right|. \quad (10)$$

Здесь  $r_e \leq r \leq x_0$ , где  $x_0$  — оценивается по формуле (9). Применимость такого подхода основана на том, что притягивающая ветвь потенциала Леннарда–Джонса имеет физическое обоснование в виде сил Ван-дер-Ваальса между поверхностью и атомом. Значения  $r_e$  для островковых пленок подтверждаются экспериментами по СТМ [16,17] и расчетами на основе теории ФП [19], которые отчетливо показывают, что атомы РЗМ существенно заглублены в поверхность кремния (они могут располагаться даже на 0.35 Å ниже верхнего слоя

атомов кремния в структуре НСС). Также обращают на себя внимание значения  $D_e$  в табл. 3. Следует подчеркнуть, что столь высокие величины этого параметра характеризуют не энергию, которую необходимо затратить для выхода краевого атома островка в вакуум, а форму потенциальной кривой Морзе, в частности, связанные с ее шириной. Следовательно, этот параметр отражает особенности данного механизма десорбции, а не прочность адсорбционной связи атома металла в структуре 3 × 2.

## 1.6. Критерий применимости потенциала Морзе для описания десорбции атомов с поверхности

Последнее замечание настоящей работы посвящено вопросу применимости потенциала Морзе для моделирования десорбции.

Особенностью модели является значение приведенной массы для частицы у поверхности:  $\mu = m \cdot M / (M + m) \approx m$ , где  $m$  — масса адатома, а  $M$  — суммарная масса всех атомов поверхности.

Второй особенностью является наличие плоской поверхности, перпендикулярно которой происходит десорбция. Это дает возможность использовать одномерный потенциал Морзе для анализа ситуации.

## Заключение

Предложены и проанализированы три модели для описания десорбционных процессов в системах двумерный адсорбированный слой — подложка в приближении потенциала Морзе. На примере пленочных систем РЗМ–Si(111) показано, что параметры потенциала Морзе для адсорбированного атома могут быть однозначно определены из известных данных по кинетике десорбции,

а именно  $n$ ,  $E_d$  и  $C$ . Рассмотрены три частных случая, каждый из которых характеризуется индивидуальным механизмом десорбции атома. При выполнении условия  $hv \approx k_B T$  десорбционный процесс описывается в рамках простой одностадийной модели равновесных колебаний частицы на поверхности, в которой разрыв адсорбционных связей происходит за одно колебание, а граница десорбции составляет  $x_0 \sim 1-10 \text{ \AA}$ . При  $hv \ll k_B T$  для описания десорбционного процесса хорошим приближением является резонансно-ступенчатая модель, в которой выход частицы в вакуум является многостадийным, а ее энергия возрастает небольшими порциями, равными  $k_B T$ , последовательно при переходах с нижележащих колебательных уровней на вышележащие в потенциальной яме. Такой механизм характерен для десорбции из 2D-газа. Наконец, при условии  $hv \gg k_B T$  характер десорбции принимает вид выхода частицы из узкой потенциальной ямы с малым числом колебательных уровней (даже единственным уровнем), а разрыв адсорбционной связи происходит вблизи ее равновесного положения на поверхности ( $x_0 \ll 1 \text{ \AA}$ ). Данный механизм характерен для десорбции из 2D-островков, находящихся в равновесии с 2D-газом на поверхности.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] В.Н. Агеев. Поверхность, **3**, 5 (1984).
- [1] S. Guenther, T.O. Mentes, M.A. Nino, A. Locatelli, S. Boeklein, J. Wintterlin. Nature Comm., **5**, 3853 (2014).
- [3] R. Kern, G. LtLay, J.J Metois. In: *Current Topic in Material Science., V.3. Basic mechanisms in the early stages of epitaxy* Ed. E. Kaldis. (North-Holland, 1979), p. 131–419.
- [4] И.Г. Каплан. *Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы* (БИНОМ. Лаборатория знаний, М., 2012), [пер. с англ. 394 с. ISBN 978-5-94774-939-7]
- [5] E. Shustorovich. Surf. Sci., **175**, 561 (1986).
- [6] A. Mirzanejad. Appl. Surf. Sci., **359**, 576 (2015).
- [7] S. Zdravkovic, A.N. Bugay, A.Y. Parkhomenko. Nonlinear Dynamics, **90**, 2841 (2017).
- [8] N. Ayyappan, C. Maria Joy, I. Kavitha. Mater. Today: Proceed., **51**, 1793 (2022).
- [9] H. Cacan, B. Mamedov. J. Chem. Thermodynamics, **138**, 147 (2019).
- [10] S. Goryainov. Conden. Matter, **407**, 4233 (2012).
- [11] Т.В. Крачина, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. ФТТ, **39** (2), 256 (1997).
- [12] Т.В. Крачина, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. ФТТ, **42** (3), 553 (2000).
- [13] T.V. Krachina, M.V. Kuzmin, M.V. Loginov, M.A. Mittsev. Appl. Surf. Sci., **182**, 115 (2001).
- [14] Т.В. Крачина, М.В. Кузьмин, М.В. Логинов, М.А. Митцев. ФТТ, **40** (2), 371 (1998).
- [15] В.Б. Бондаренко, М.В. Кузьмин, М.А. Митцев. ФТТ, **43**, 1129 (2001).
- [16] M. Kuzmin, R.-L. Vaara, P. Laukkonen, P.E. Perala, J.J. Vayrynen. Surf. Sci., **538**, 124 (2003).
- [17] E. Ehret, F. Palmino, L. Mansour, E. Duverger, J.-C. Labrune. Surf. Sci., **569**, 23 (2004).
- [18] M. Kuzmin, P. Laukkonen, R.E. Perala, R.-L. Vaara, J.J. Vayrynen. Phis. Rev. B, **71**, 155334 (2005).
- [19] S. Ozkaya, M. Cakmak, B. Alkan. Surf. Sci., **604**, 1899 (2010).
- [20] Э.Г. Назаров, У.Х. Расулов. *Нестационарные процессы поверхности ионизации* (Институт электроники им. У.А. Арифова АН Республики Узбекистан Ташкент, 1991)
- [21] Электронный ресурс. Режим доступа: [https://en.wikipedia.org/wiki/Morse\\_potential](https://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential).
- [22] Г.Г. Владимиров. *Физика поверхности твердого тела* (Изд-во Лань, СПб. 2016), 352 с.
- [23] Электронный ресурс. Режим доступа: [https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones\\_potential](https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential)