

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 544.723.2

**Ориентационная зависимость параметров двойного
электрического слоя поверхности адсорбционной системы W-Cs**

**Аслан-Гирей Мартинович Масаев¹, Наталия Сергеевна Реуцкая², Заур Анатольевич Коков³,
Хамидби Хажисмелович Калажоков⁴, Павел Константинович Коротков⁵, Светлана Наниевна
Ахкубекова⁶**

^{1,2,3,4,5} Кабардино-Балкарский государственный университет имени Х. М. Бербекова, Нальчик, Россия

⁶ Кабардино-Балкарский аграрный университет им. В.М. Кокова, Нальчик, Россия

¹ aslangeri.masaev.00@mail.ru

² _natalie@mail.ru

³ zak@kbsu.ru

⁴ khh49@mail.ru

⁵ pkorotkov1984@mail.ru

⁶ aminka07-07@mail.ru

Аннотация. С использованием уравнения Гельмгольца проведен расчет ориентационной зависимости дипольных моментов атомов цезия, адсорбированных на монокристаллические поверхности вольфрама. Оказалось, что величина определяемого дипольного момента зависит от места, занимаемого адатомом на поверхности кристалла.

Ключевые слова: адсорбция, работа выхода электрона, ориентационная зависимость, дипольный момент адатомов

Для цитирования: Масаев А.М., Реуцкая Н.С., Коков З.А., Калажоков Х.Х., Коротков П.К., Ахкубекова С.Н. Ориентационная зависимость параметров двойного электрического слоя поверхности адсорбционной системы W-Cs // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, N 1. С. 30–33.

PHYSICS

Original article

**Oriental dependence of the parameters of the double
electric layer of the surface of the adsorption system W-Cs**

**Aslan-Girey M. Masayev¹, Nataliya S. Reutskaya², Zaur A. Kokov³, Khamidbi Kh. Kalazhokov⁴,
Pavel K. Korotkov⁵, Svetlana N. Akhkubekova⁶**

^{1,2,3,4,5} Kabardino-Balkarian State University, Nalchik, Russia

⁶ Kabardino-Balkarian State Agrarian University, Nalchik, Russia

¹ aslangeri.masaev.00@mail.ru

² _natalie@mail.ru

³ zak@kbsu.ru

⁴ khh49@mail.ru

⁵ pkorotkov1984@mail.ru

⁶ aminka07-07@mail.ru

Abstract. Using the Helmholtz equation, the orientation dependence of the dipole moments of cesium atoms adsorbed on single-crystal tungsten surfaces was calculated. It turned out that the value of the determined dipole moment depends on the position of the adatom on the crystal surface.

Keywords: adsorption, electron work function, orientation dependence, and dipole moment of adatoms

For citation: Masaev A.M., Reutskaya N.S., Kokov Z.A., Kalazhokov Kh.Kh., Korotkov P.K., Akhkubekova S.N. Orientational dependence of the parameters of the double electric layer of the surface of the adsorption system W-Cs // Proceedings Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(1):30–33.

Введение

В литературе представлено большое количество экспериментальных данных по изучению адсорбции чужеродных атомов на однородные поверхности металлов [1–4]. Одним из способов изучения таких систем, как *металлическая поверхность – адсорбированный атом (ада́том)*, является измерение работы выхода электрона (РВЭ) [1–3, 5]. Однако при определении параметров двойного электрического слоя (ДЭС) – дипольного момента адатома (m_0), длины плеча диполя (d_0) и др. – недостаточное внимание уделяется их зависимости от ориентации кристаллической плоскости. Нет четкости также при определении угла наклона касательной к кривой изотермы РВЭ [$\varphi(N)$] при малых заполнениях поверхности металла (при степени заполнения $q \ll 1$) [1, 2, 4]. Аппроксимация кривой $\varphi(N)$ в начальной области ее заполнения линейной функцией также может оказаться не всегда достаточно точной. Тем не менее, за неимением лучшего, исследователи пользуются таким приближением [1, 2]. Ниже приведены результаты наших расчетов параметров ДЭС m_0 и d_0 в зависимости от ориентации кристаллической плоскости, полученные с использованием экспериментальных данных по РВЭ широко известной системы W-Cs [1, 2].

1. Методика определения параметров m_0 и d_0 ДЭС поверхности адсорбционной системы $(hkl)W-Cs$

Для определения величины дипольного момента m_0 адатома воспользуемся известным уравнением Гельмгольца [2, 4], описывающим изменение РВЭ однородной поверхности металлического кристалла в зависимости от адсорбции чужеродных атомов [2, 4–6]

$$j(N) = j_0 - 4\pi m_0 N, \quad (1)$$

где $\varphi(N)$ – РВЭ поверхности металла с адсорбатом концентрации N , φ_0 – РВЭ поверхности чистого металла, m_0 – дипольный момент одиночного адатома.

Формула (1) одинаково хорошо описывает начальный этап заполнения поверхности как для систем *жидкая поверхность – чужеродные адатомы* [7], так и для систем *твердая однородная поверхность–чужеродные адатомы* [1, 2, 4].

Для систем *монокристаллическая поверхность–чужеродные адатомы* уравнение (1) перепишем в виде [6, 7]

$$j(q) = j_0 - 4\pi m_0 N_{0s} q, \quad (2)$$

где $q = N/N_{0s}$ – степень заполнения поверхности металла адатомами, N_{0s} – концентрация адсорбционных мест поверхности металла.

Ниже рассмотрим расчеты параметров двойного электрического слоя m_0 и d_0 адсорбционной системы монокристаллическая поверхность вольфрама– атомы цезия $(hkl)W-Cs$ [1, 2].

2. Результаты расчетов параметров m_0 и d_0 ДЭС системы $(hkl)W-Cs$

В качестве примера рассмотрим изменения РВЭ однородных граней вольфрама $(hkl)W$ в зависимости от адсорбции атомов цезия [1, 2].

Результаты экспериментальных измерений РВЭ методом контактной разности потенциалов для четырех граней вольфрама: (111), (110), (100) и (112) при адсорбции атомов цезия по данным работ [1, 2] представлены на *рисунке 1*.

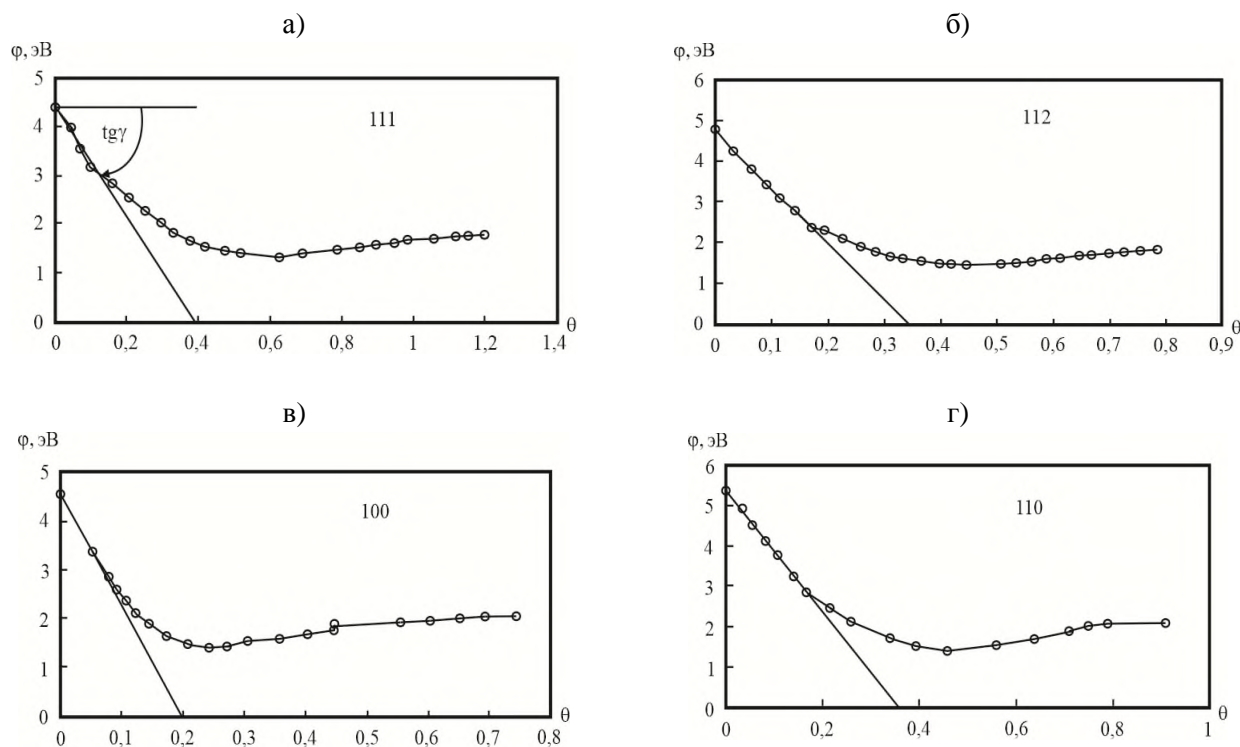


Рисунок 1 – Изменения РВЭ различных граней вольфрама (а-г) в зависимости от степени заполнения поверхности атомами цезия (q)

Как видно из *рисунка 1*, РВЭ поверхности кристалла при адсорбции цезия изменяется сложным образом. Начальные участки кривых *а* и *в* – явно нелинейные функции, а начальные участки кривых *б* и *г* представляют собой приблизительно линейные функции. Тем не менее, при расчетах параметров ДЭС и особенно при определении $\Delta(\Delta\varphi(q))/\Delta q$ часто допускают линейную аппроксимацию начального участка изотермы РВЭ [1, 2, 4-7]. Поэтому для начальных участков кривых изотерм РВЭ мы тоже будем использовать линейную аппроксимацию кривых РВЭ.

Для удобства и наглядности перепишем уравнение (2) в виде

$$Dj(q) = 4\pi m_0 N_{0s} q, \quad (3)$$

где $\Delta\varphi(q) = \varphi_0 - \varphi(q)$ – изменение РВЭ вольфрама при адсорбции цезия.

Анализ полученных кривых позволил графически определить (*рисунк 1, а-г*) наклоны изменения РВЭ от степени покрытия $q = N/N_{0s}$, соответствующие началам ($q \approx 0$) кривых изотерм (РВЭ) (*рисунк 1*). Воспользовавшись выражением (3), найдем угловой коэффициент начального участка кривой $\varphi(q)$ приближенно:

$$\frac{d(Dj(q))}{dq} \gg \frac{D(Dj(q))}{Dq} = 4\pi m_0 N_{0s}. \quad (4)$$

Заметим, что угловой коэффициент $\Delta(\Delta\varphi(q))/\Delta q$ вычисляется из *рисунка 1* графическим способом по указанной схеме – вручную.

Из *рисунка 1* видно, что выражение (4) справедливо для начального участка кривой $\varphi(q)$. То есть приблизительно для системы W-Cs до значений параметра $q = 0,3 - 0,4$.

Для расчетов m_0 нами использовано выражение (4), которое принимает следующий вид в системе СИ:

$$m_0 = \frac{D(Dj(q))}{Dq} \frac{e_0}{N_{0s}}, \quad (5)$$

где $e_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная.

Ниже в таблице приведены, найденные нами из *рисунка 1* значения $\Delta(\Delta\varphi(q))/\Delta q$ а также вычисленные значения N_{0s} , m_0 -дипольные моменты адатомов и d_0 – длины плеч диполей.

Результаты расчетов m_0 и d_0 в зависимости от типа грани металла приведены в *таблице 1*.

Таблица 1 – Входные данные [1, 2, 8] и вычисленные параметры ДЭС $m\theta$ и d_0 в зависимости от грани W-Cs

(hkl)	$N_{os},$ 10^{18} ат/м ²	$\Delta(\Delta\varphi(q))/\Delta q,$ эВ	$m\theta,$ 10^{-30} КлЖ	$m\theta,$ Д (Дебай)	плечо дип. момента. $d_0,$ Å
(111)	8,5 (5,7*)	11,0	11,6(17,16*)	5,30(5,14*)	0,73(1,1*)
(112)	9,5	14,12	13,21	3,96	0,83
(100)	10,0	23,9	21,29	6,37	1,33
(110)	14,2	15,4	9,73	2,92	1,82

*по литературным данным.

Сравнение полученных нами результатов $m\theta$ и d_0 с данными других авторов [по [9] $d_0=1,57$ Å; по [1, 2] $m\theta = 5,3$ Д для грани (111)] показывает, что способ измерения РВЭ позволяет получить вполне реальные результаты $m\theta$ и d_0 в зависимости от места занимаемого адатомом на поверхности кристалла. С другой стороны, интересен следующий факт: полная адсорбционная емкость поверхности грани (111) W: $N_{os}(111) = 8,5 \times 10^{18}$ ат/м² больше адсорбционной емкости $N_{os}(111) = 5,7 \times 10^{18}$ ат/м² этой же поверхности, обусловленной потенциальными «ямами», «бороздками», которыми богата последняя [1].

Как видно из данных первой строчки таблицы 1, для грани (111) W расчет параметров $m\theta$ и d_0 , дает лучшие результаты по $m\theta$, почти совпадающие с данным [1] (5,3 и 5,14 Д). Сравнение наших результатов для четырех граней вольфрама (таблица 1) подтверждает вывод работы [1]: при заполнении «ямок» и «бороздок» значения d_0 для таких поверхностей оказываются меньше, чем для плотноупакованных граней (100) и (110) W.

Заключение

Отработана методика расчетов $m\theta$ и d_0 адсорбционных систем «подложка-адатом» в области малых взаимодействий образуемых дипольных моментов. Оказалось, что методика, используемая для расчетов параметров поверхности $m\theta$ и d_0 , позволяет достоверно выявить ориентационную зависимость определяемых параметров поверхности кристалла, а также дает более ясное представление о строении поверхностного слоя адсорбционной системы. Различные значения полученных результатов $m\theta$ и d_0 связаны с местами и рельефом поверхности металла. Так, если адатом занимает положение над атомами самого первого слоя [грани (100) и (110)], значения d_0 больше по сравнению с d_0 граней (112) и (111), когда адатом занимает углубления типа «ямок» или «бороздок» в поверхностной решетке [1]. Сравнение полученных в настоящей работе значений $m\theta$ и d_0 с литературными данными других авторов исследователей показывает вполне удовлетворительное их согласие. Незначительные расхождения наших данных с результатами других [1, 9–11], по-видимому, связаны с аппроксимацией начального участка кривой $\varphi(x)$ линейной функцией.

Библиография

1. Медведев В.К., Якивчук А.И. Структура и электронно-адсорбционные свойства пленок цезия на грани (111) монокристалла вольфрама // ФТТ. 1975. Т. 17. С. 14–22.
2. Большов Л.А., Напартович А.П., Наумовец А.Г., Федорус А.Г. Субмонослойные пленки на поверхности металлов // УФН. 1977. Т. 122, № 1. С. 125–158.
3. Давыдов С.Ю., Носков И.В. К расчету изменения работы выхода при адсорбции атомов цезия на поверхности (110) TiO₂ // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27, № 20. С. 1–6.
4. Робертс М., Макки Ч. Химия поверхности раздела металл-газ. М.: Мир, 1981. 540 с.
5. Добрецов Л.Н., Гомоюнова М.Н. Эмиссионная электроника. М.: Наука, 1966. 546 с.
6. Вудраф Д. Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М.: Мир, 1989. 564 с.
7. Kalazhokov Z.Kh., Kalazhokov Kh.Kh. Surface tension of pure aluminium melt // Technical Physics. 2003. V. 48, N 2. P. 272–273.
8. Холдеев Г.В., Сюр Т.А. Электрохимия монокристаллов переходных металлов с хорошо аттестованными поверхностями // Успехи химии. 1992. Т. 61, № 4. С. 734–764.
9. Чернов А.А. Катодная электроника: учебное пособие: сборник задач. М.: ГИЭМ, 2011. 35 с.