

# Dysypacja nadmiarowej energii adsorbentu - termalizacja za pomocą tunelowania elektronu

2020

Paweł Strąk, Konrad Sakowski, Paweł Kempisty, Stanisław Krukowski  
Instytut Wysokich Ciśnień PAN, Warszawa

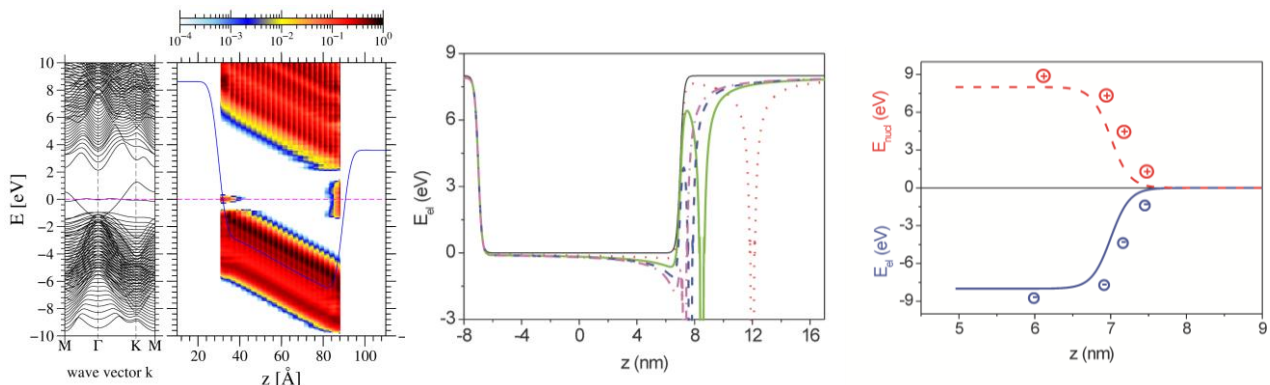
1920

1920-2020



100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

Został zaproponowany nowy scenariusz procesu termalizacji adsorbentów tj. nowo przyłączonych atomów lub cząsteczek na powierzchniach ciał stałych. Scenariusz ten opiera się na istnieniu elektrycznej warstwy dipolowej, w której funkcje falowe elektronów rozciągają daleko poza linie ostatniej warstwy dodatnich jonów na powierzchni tworząc silne lokalne pole elektryczne, które wciąga elektrony do wnętrza ciała stałego i odpycha dodatnie jony. Podczas adsorpcji atomów/cząsteczek ich elektrony tunelują do wnętrza ciała stałego, przenosząc energię nadmiarową uzyskaną wskutek przyciągania adsorbentu przez powierzchnię ciała stałego. Adsorbent zachowuje się jak jony dodatnie które są opóźniane przez pole, tracąc nadmiar energii kinetycznej, i gładko lądują w węzłach adsorpcyjnych na powierzchni. W takim scenariuszu nadmiar energii nie jest rozpraszany lokalnie, co pozwala uniknąć topnienia lub tworzenia defektów, co jest zgodne z wynikami eksperymentów oraz z ogromną liczbą obserwacji. Scenariusz ten jest poparty wynikami obliczeń *ab initio*, w tym obliczeniami teorii funkcjonału gęstości dotyczącą słabów reprezentujących powierzchnię AlN oraz z rozwiązaniami równania Schrodingera dla ewolucji w czasie atomu wodoru adsorbowanego na powierzchni ciała stałego (AlN).



Rys. 1 **Lewy wykres:** Diagram pasmowy w przestrzeni pędowej i rzeczywistej dla 24 warstw atomowych Al-N dla półizolującego słabiu AlN. Niebieska linia nałożona na wykres to jest potencjał elektryczny, uśredniony w płaszczyźnie równoległej do powierzchni, w jednostkach energii elektronu; **Środkowy wykres:** Potencjał modelowy (energia elektronów) atomu wodoru i skończonej płyty AlN ciała stałego, dla wybranych kilku odległości pomiędzy atomem a powierzchnią. **Prawy wykres:** Energia potencjalna elektronu (niebieska linia ciągła) i jonu dodatniego (czerwona linia przerywana) pochodząca z modelowania warstwy AlN metodą *ab initio*.

## Literatura:

1. PAWEŁ STRĄK, KONRAD SAKOWSKI, PAWEŁ KEMPISTY AND STANISŁAW KRUKOWSKI  
[DISSIPATION OF THE EXCESS ENERGY OF THE ADSORBATE- THERMALIZATION VIA ELECTRON TRANSFER](#)  
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS - 10 MARCH 2107; 19: 9149– 55
2. PAWEŁ STRĄK, KONRAD SAKOWSKI, PAWEŁ KEMPISTY AND STANISŁAW KRUKOWSKI  
[A CASE REPORT ON: DISSIPATION OF THE EXCESS ENERGY OF THE ADSORBATE- THERMALIZATION VIA ELECTRON TRANSFER](#)  
JOURNAL OF PHYSICS AND ASTRONOMY - 10 DECEMBER 2017; 5: 4

**Słowa kluczowe:** Adsorpcja, termalizacji, *ab initio*, powierzchnie ciał stałych

