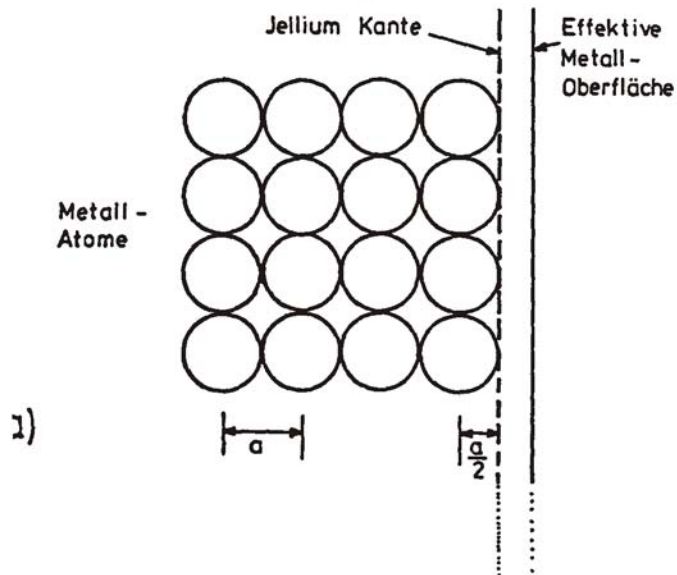


Jellium-Modell

- einfaches Modell für Oberflächenphysik und Clusterphysik,
- sinnvoll für einfache Metalle mit schwacher Wechselwirkung von Leitungselektronen mit Ionenrümpfen (Bsp. Natrium)



- Ionenrümpfe werden als gleichförmige Hintergrundladungsdichte betrachtet

- Ladungsdichte:

$$\mathbf{n}_+(\mathbf{r}) = \begin{cases} \bar{n} & , z < 0 \\ 0 & , z > 0 \end{cases}$$

mit: $1/\bar{n} = (4\pi/3) \cdot r_s^3$

r_s ist der Wigner-Seitz-Radius im Jellium-Modell, Werte liegen zwischen 2 und 5

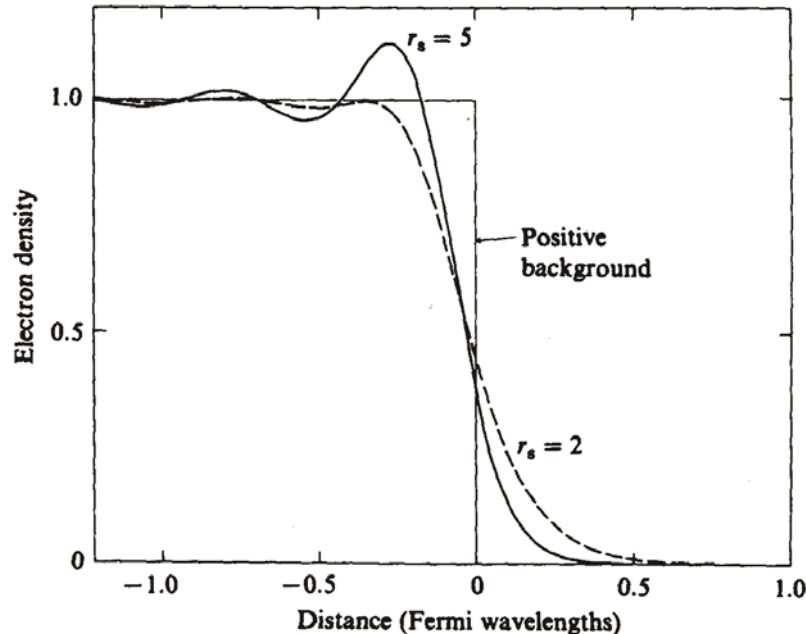
Zangwill, page 57

Definition der Oberfläche: $d_{||} = \frac{1}{\bar{n}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \cdot z \frac{dn(z)}{dz}$

Spill-out

- Ladungsdichte der Elektronen ragt über die Ionenrumpfe heraus
- dieser spill-out erzeugt den Oberflächendipol, er die Austrittsarbeit beschreibt
- Ladungsdichte $n(z)$ oszilliert (Friedel-Oszillation)

Fig. 4.2. Electron density profile at a jellium surface for two choices of the background density, r_s (Lang & Kohn, 1970).



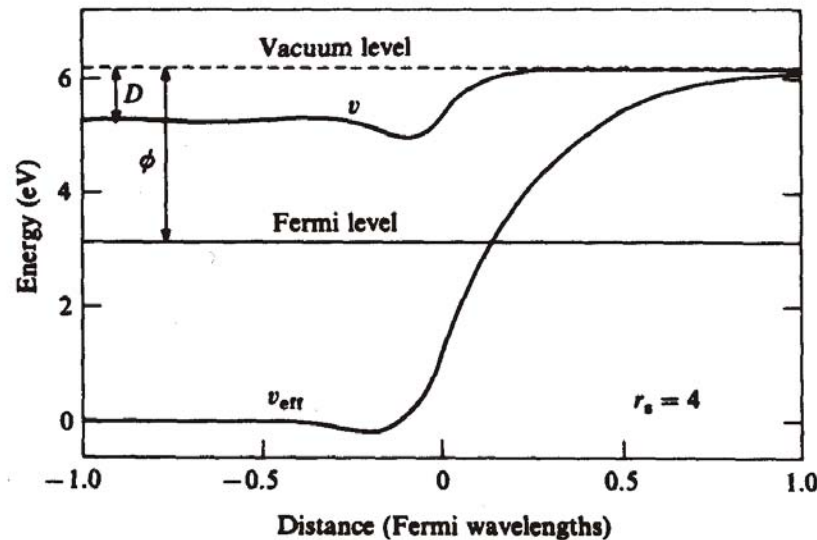
Ursache der Oszillation:
Elektronen mit festen Wellenvektor versuchen pos. Hintergrundladung abzuschirmen; hieraus folgen leichte Verschiebungen der einzelnen Atomlagen im Bereich der Oberfläche

Zangwill, page 58

Elektrostatisches Potential im Jellium

Oberflächendipol: $D = v(\infty) - v(-\infty)$

Fig. 4.3. Electrostatic potential, $v(z)$, and total effective one-electron potential, $v_{\text{eff}}(z)$, near a jellium surface (Lang & Kohn, 1970).



$v(z)$: elektrost. Potential

v_{eff} : effektives Ein-Elektronen Potential

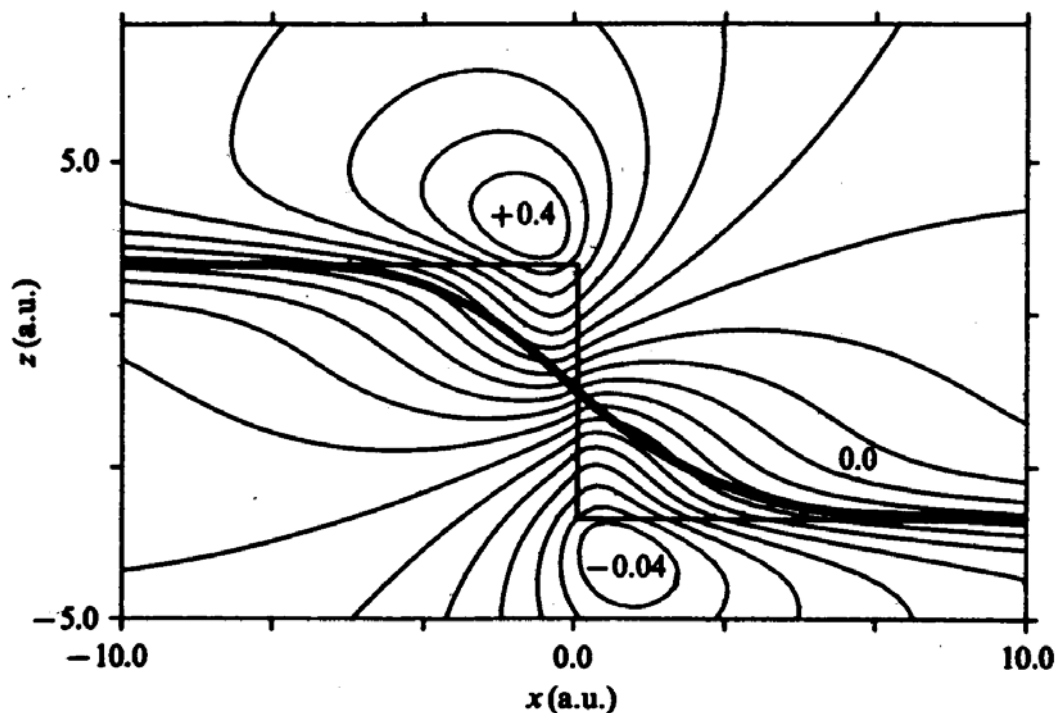
ϕ : Austrittsarbeit

Zangwill, page 58

Einfluss von Stufenkanten auf Austrittsarbeit

Verringerung der Austrittsarbeit durch positive Ladung an Stufenkante

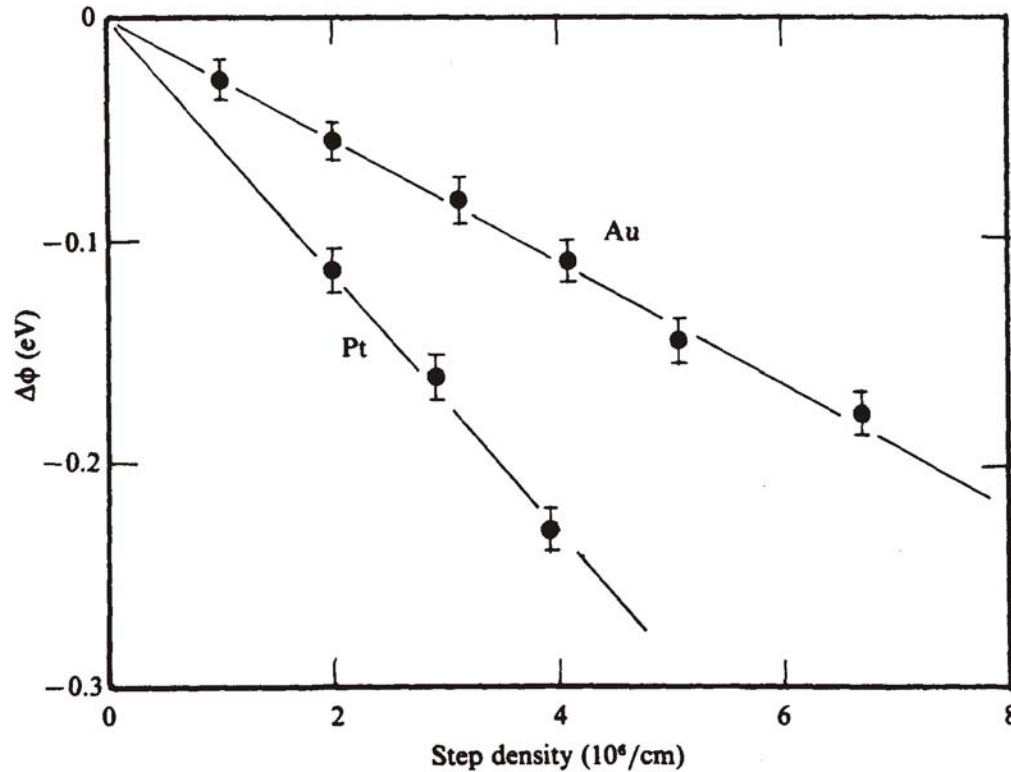
Fig. 4.4. Electrostatic potential near a jellium step. The smoothed electron 'surface', $d_1(x)$, is indicated by the heavy solid curve (Thompson & Huntington, 1982).



Zangwill, page 59

Änderung Austrittsarbeit durch Stufendichte

Fig. 4.5. Work function change for stepped metal surfaces (Besocke, Krahl-Urban & Wagner, 1977).

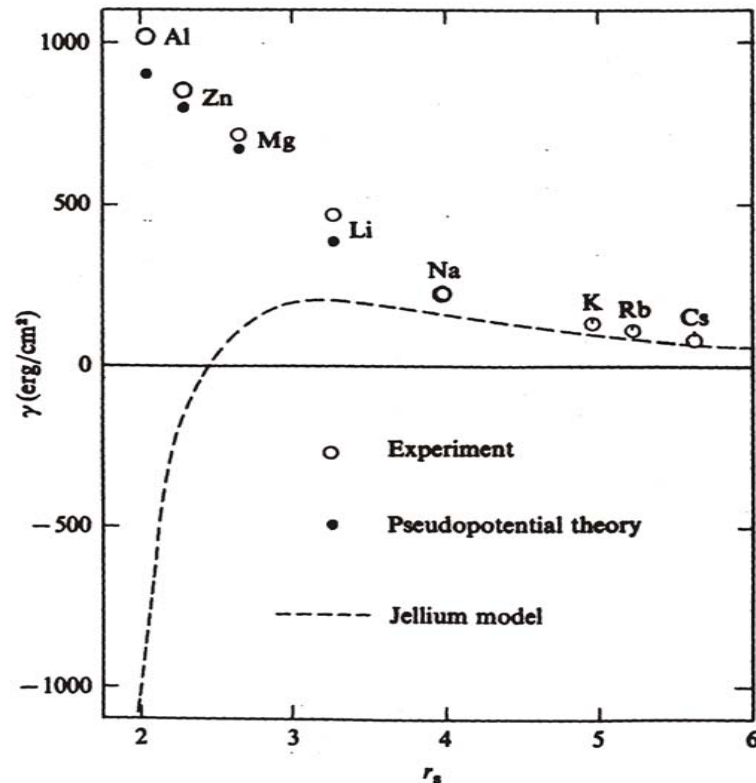


Zangwill, page 60

Erhöhung der Stufendichte bedeutet Verringerung der Austrittsarbeit

Oberflächenspannung im Jellium-Modell

Fig. 4.6. Comparison of surface tension data with the results of the jellium model (Lang & Kohn, 1970).

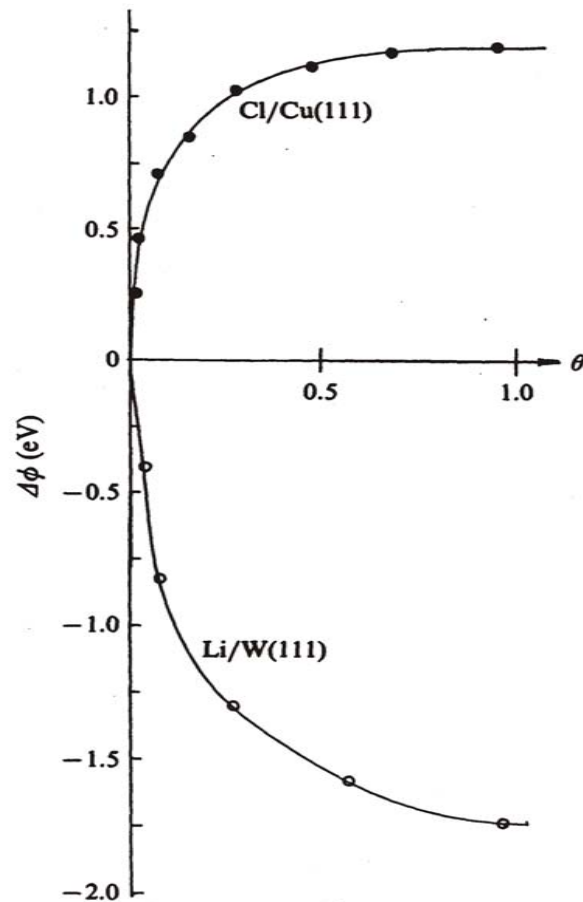


Grenzen des Jellium-Modells:

- gute Übereinstimmung für Alkali (Cs, Rb, K, Na, nicht Li)
- Probleme für Erdalkali-Metalle

Zangwill, page 61

Austrittsarbeitsänderung durch Chemisorption



Austrittsarbeit wird durch Adsorbate verändert, abhängig von der Menge (Bedeckung) und der elektronischer Struktur

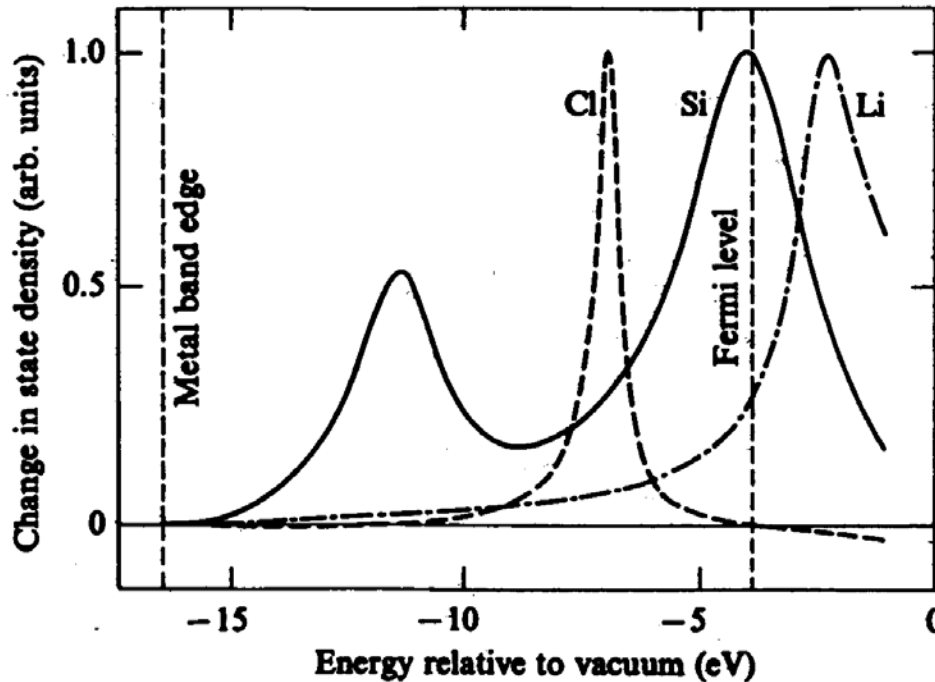
Adsorption von Chlor (Cl):
Erhöhung der Austrittsarbeit durch Erhöhung des Dipols an der Oberfläche

Adsorption von Lithium (Li):
Erniedrigung der Austrittsarbeit durch Verringerung des Dipols an der Oberfläche

Zangwill, page 213

Change in density of state by adsorption

Fig. 9.10. Change in density of states due to chemisorption for Cl, Si and Li atoms adsorbed on jellium ($r_s = 2$). The silicon curve exhibits both 3s-derived and 3p-derived resonances (Lang & Williams, 1978).

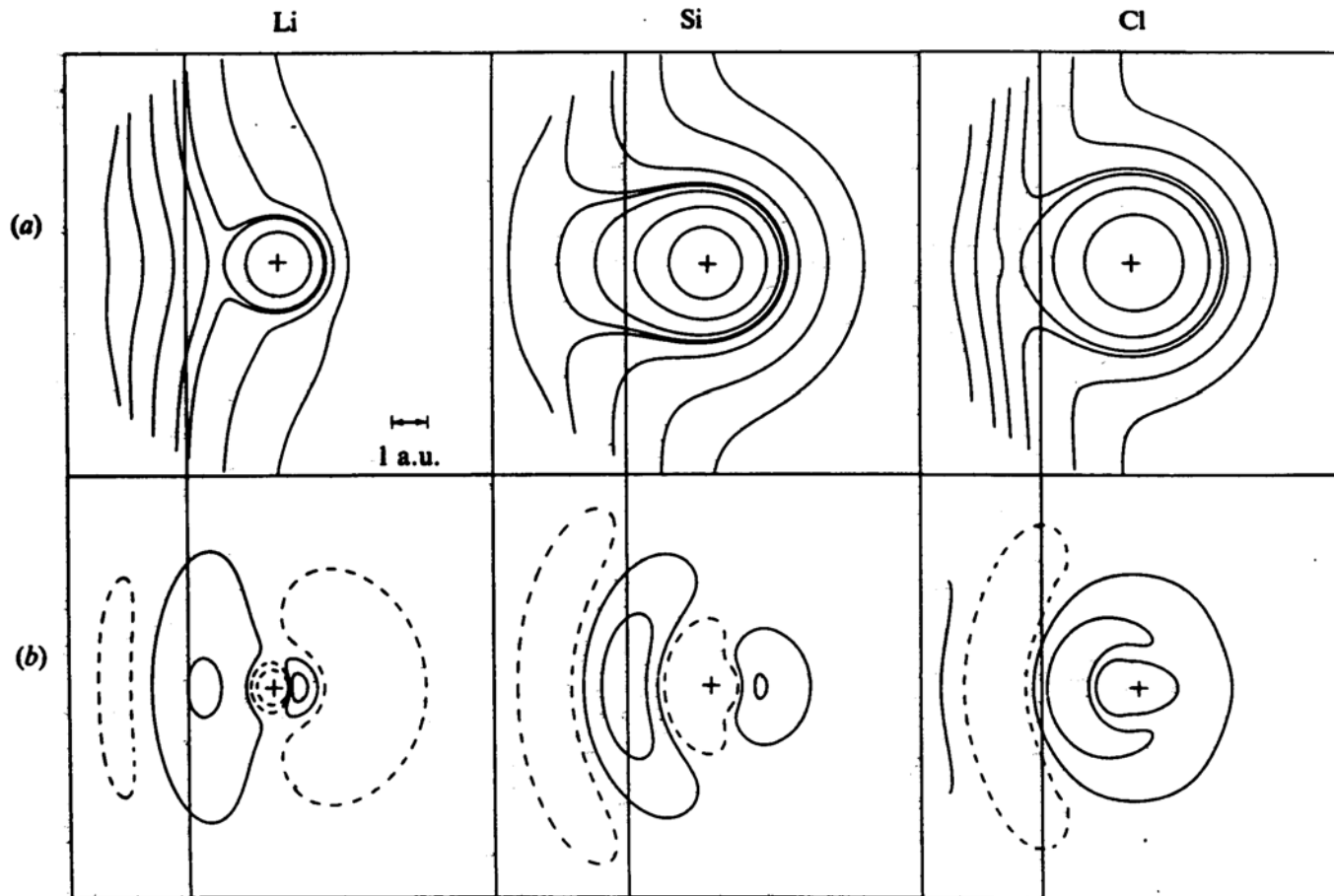


Zangwill, page 216

Potentialverlauf bei Adsorbaten

Fig. 9.11. Contours of constant charge density for Cl, Si and Li atoms adsorbed on a jellium substrate: (a) total charge; (b) induced charge. Solid (dashed) curves denote a surfeit (depletion) of electrons (Lang & Williams, 1978).

Zangwill, page 217



Schematisches Adsorptionsmodell

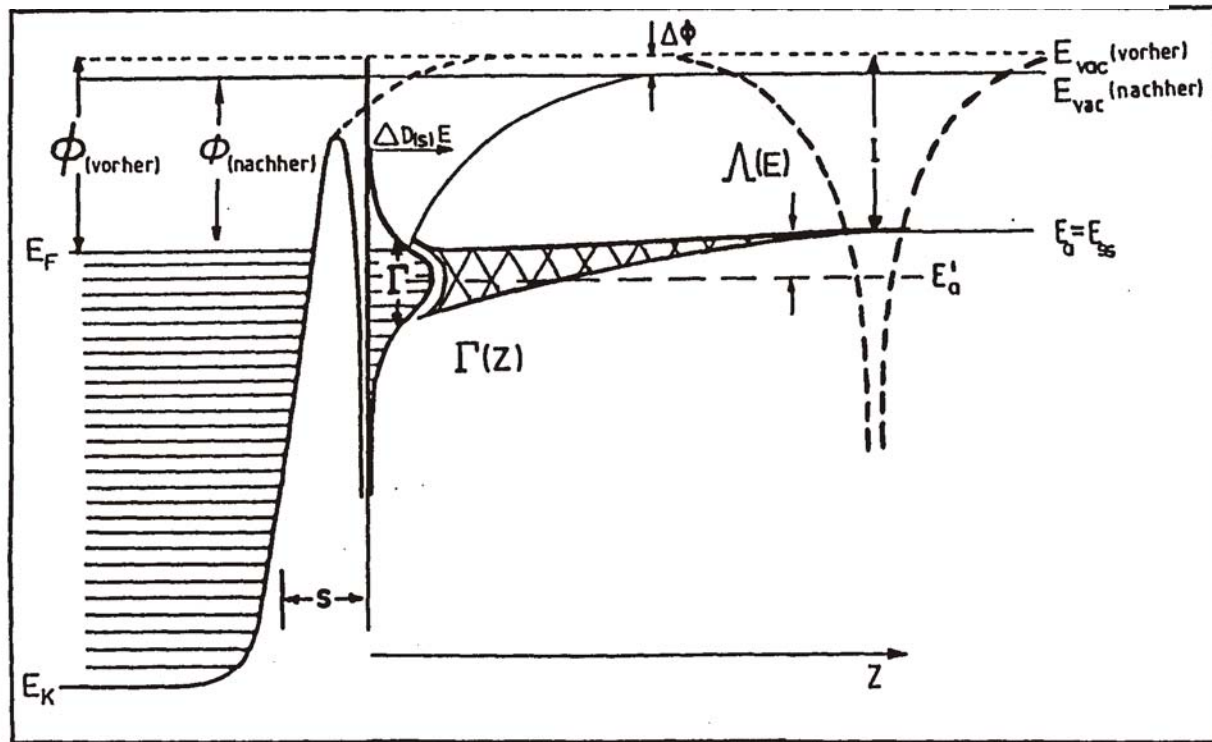


Abb. 5.6.13

Schematische Darstellung der Wechselwirkung eines Atoms mit einer Metalloberfläche. Das Atomniveau wird um $\Lambda(E)$ von E_a nach E'_a verschoben und ist im Abstand s um Γ verbreitert. Als Folge der Chemisorption tritt eine Austrittsenergieänderung $\Delta\phi$ auf.

Henzler-Göpel, page 474