**Трехмерное теоретическое исследование резонансного электронного обмена между ионом H- и поверхностью Cu(111), покрытой адсорбатом Na+**

Ю.А. Мелкозерова1\*), С.С. Москаленко1), И.К. Гайнуллин1)

1) МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

\*) e-mail: melkozerova.ia16@physics.msu.ru

Резонансный электронный обмен имеет фундаментальное и практическое значение для различных областей физики и химии /1/. С точки зрения практического применения интерес представляет резонансный электронный обмен с кристаллографически неидеальными поверхностями, например, содержащими адсорбаты. В рамках данного исследования рассматривалась задача электронного обмена между атомной частицей H- и поверхностью Cu(111) с адсорбатом Na+. Было обнаружено, что возбужденные электронные состояния очень чувствительны к наличию адсорбатов на поверхности /2/. Изучалось влияние адсорбата на все электронные состояния, участвующие в процессе электронного обмена (состояние атомной частицы, поверхностное состояние Cu(111) и состояние заряда изображения). На графике зависимости энергии от расстояния межу атомной частицей и поверхностью был обнаружен минимум связанный с явлением квазипересечения состояний H- и Cu(111)/Na+. Таким образом, квазипересечение уровней накладывает ограничения на динамику электронной плотности. При отсутствии поверхностных адсорбатов электроны в состоянии изображения перемещаются почти свободно параллельно поверхности. Рассеяние на адсорбатах может латерально удерживать эти электроны, и энергетические состояния, возникающие в результате этого удержания, наблюдаются на спектрах плотности состояний /3/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brako R., Newns D.M.// Reports on Progress in Physics, 1989, 52, №. 6, 655.

2. Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.P.// Physical review letters, 1992, 68, №. 18, 2842.

3. Bahrim B. et al. //Surface science, 2009, 603, №. 4, 703-708.