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

***Мелкозерова Ю.А., Москаленко С.С, Гайнуллин И.К.***

Аспирант, аспирант, доктор физ.-мат. наук

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

физический факультет, Москва, Россия

E–mail: melkozerova.ia16@physics.msu.ru

Резонансный электронный обмен имеет фундаментальное и практическое значение для анализа поверхности, реактивной способности поверхности и катализа, а также для создания источников пучков отрицательных ионов и других областей физики и химии [1]. С точки зрения практического применения интерес представляет резонансный электронный обмен с неоднородными поверхностями, на поверхности которых имеются различные дефекты, в том числе атомы адсорбатов.

Было обнаружено, что возбужденные электронные состояния очень чувствительны к наличию адсорбатов на поверхности [2]. В рамках данного исследования рассматривалась статическая задача электронного обмена между атомной частицей H- и поверхностью Cu(111) с адсорбатом Na+, при которой расстояние между поверхностью, покрытой адсорбатом и атомной частицей фиксировано. Таким образом, было изучено влияние адсорбата на все электронные состояния, участвующие в процессе электронного обмена (состояние атомной частицы, поверхностное состояние Cu(111) и состояние заряда изображения). Особое внимание уделялось изучению прогнозируемой плотности состояний, которая демонстрирует пики, соответствующие различным локализованным состояниям. При больших расстояниях между атомной частицей и поверхностью единственный видимый пик на графике плотности состояний соответствует иону H-. По мере уменьшения расстояния между H- и поверхностью Cu(111) в спектре плотности состояний появляется больше пиков. Данная особенность является результатом сильного перемешивания атомных орбиталей адсорбата из-за влияния поверхности металла. На графике зависимости энергии от расстояния межу атомной частицей и поверхностью наблюдается 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. Theory of electronic processes in atom scattering from surfaces //Reports on Progress in Physics. – 1989. – Т. 52. – №. 6. – С. 655.
2. Borisov A. G., Teillet-Billy D., Gauyacq J. P. Dynamical resonant electron capture in atom surface collisions: H− formation in H-Al (111) collisions //Physical review letters. – 1992. – Т. 68. – №. 18. – С. 2842.
3. Bahrim B. et al. Electron dynamics in H−/Na/Cu (1 1 1) collisions //Surface science. – 2009. – Т. 603. – №. 4. – С. 703-708