

# Модельный псевдопотенциал для поверхности Cu(110)

© С.С. Циркин\*, С.В. Еремеев\*\*,\*, Е.В. Чулков\*\*\*,\*\*\*\*

\* Томский государственный университет,  
Томск, Россия

\*\* Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,  
Томск, Россия

\*\*\* Donostia International Physics Center (DIPC),  
San Sebastián, Basque Country, Spain

\*\*\*\* Departamento de Física de Materiales,  
Facultad de Ciencias Químicas, UPV/EHU, Centro Mixto CSIC-UPV/EHU,  
San Sebastián, Basque Country, Spain

E-mail: tsirkinss@gmail.com

(Поступила в Редакцию 3 марта 2009 г.

В окончательной редакции 14 мая 2009 г.)

Представлена схема построения двумерного псевдопотенциала для описания электронной структуры поверхности Cu(110). Эта схема применима также для построения соответствующего псевдопотенциала для поверхности (110) ряда других ГЦК-металлов, таких как Ag, Au, Al, Pd, Pt. Полученная электронная структура может быть использована для быстрых расчетов одночастичных и коллективных электронных возбуждений как на чистой поверхности Cu(110), так и на поверхности, покрытой адатомами или ультратонкими пленками других металлов.

## 1. Введение

Электронные поверхностные состояния (ПС) играют ключевую роль в электронных и атомных процессах, происходящих на поверхностях твердых тел. В частности, ПС влияют на работу выхода материалов [1], увеличивают плотность электронов в поверхностных слоях [2], что оказывает непосредственное влияние на релаксацию поверхностных слоев [3,4] и сдвиг энергий остовных электронов [5,6]. ПС и электронные возбуждения в этих состояниях являются ключевым фактором в процессах переноса энергии в фотохимических реакциях, в частности в процессах фотодиссоциации и фотодесорбции [7], а также играют важнейшую роль в каталитических реакциях [8,9].

Теоретическое описание поверхностных свойств и процессов возможно в рамках расчетов, основанных на электронной структуре поверхности, полученной из первых принципов. Однако такие вычисления часто оказываются очень трудоемкими. Например, расчеты обратного времени жизни возбужденных электронов (в случае незанятых поверхностных состояний) или дырок в занятых ПС требуют обращения большого числа матриц порядка  $10^2$ – $10^4$ , шестикратного интегрирования и суммирования по плотной сетке точек в зоне Бриллюэна (ЗБ) [10]. Поэтому для ускорения подобных расчетов представляется целесообразным создание упрощенных моделей электронной структуры поверхности, которые, несмотря на их простоту, сохраняли бы основные характеристики поверхности. К числу таких характеристик относятся ширина и положение энергетической щели в проекции объемных состояний на поверхность, а также энергия и дисперсия поверхностных электронных состояний и состояний потенциала изображения.

Для поверхностей (001) и (111) ряда ГЦК-металлов, (0001) ГПУ-металлов, а также (110) щелочных металлов ранее была предложена псевдопотенциальная модель, которая учитывает изменение зарядовой плотности и потенциала в кристалле с поверхностью только в направлении, перпендикулярном поверхности [11]. В плоскости, параллельной поверхности, потенциал и зарядовая плотность подразумеваются постоянными. Параметры такой модели подгоняются под экспериментальные параметры зонной структуры поверхности в центре поверхностной зоны Бриллюэна, в точке  $\bar{\Gamma}$ . Полученные таким образом псевдопотенциал и соответствующая электронная структура позволили успешно описать широкий спектр свойств этих поверхностей. В частности, был найден механизм затухания возбужденных электронов в состояниях потенциала изображения [12–14] и возбужденных электронов и дырок в поверхностных состояниях [15–18], вычислены времена жизни электронов в состояниях потенциала изображения во внешнем электрическом поле [19] и интерпретированы соответствующие экспериментальные результаты [20], изучена квантовая динамика вызванной лазером десорбции из металла [21], исследовано распространение электронов вдоль нанодномерных систем на Cu(111) [22], проведен детальный анализ электрон-фононного взаимодействия в поверхностных электронных состояниях и в состояниях квантовой ямы [23–27], изучена нейтрализация ионов щелочных атомов на поверхностях благородных металлов (см. [28] и соответствующие ссылки), предсказано существование акустического поверхностного плазмона [29,30] (позднее экспериментально найденного [31]), а также  $\pi$ -возбужденного состояния на одиночных атомах щелочных металлов на поверхности Cu(111) [32], исследована динамика электронов и дырок на границе раздела металл-диэлектрик [33,34], а также в состояниях

квантовой ямы в сверхслоях [35], наноструктурах [36] и на адсорбированных атомах [37,38].

В отличие от поверхностной (111) и (001) благородных металлов, где энергетическая щель в точке  $\bar{\Gamma}$  определяется проекцией объемных состояний соответственно в направлениях  $\Gamma L$  и  $\Gamma X$  объемной ЗБ, на поверхности (110) этих металлов энергетическая щель формируется на границе двумерной ЗБ в точке  $\bar{Y}$  проекцией объемных электронных состояний вдоль направления, не проходящего через центр объемной ЗБ. Именно в данной щели локализуются два поверхностных состояния: занятое, лежащее примерно на 0.5 eV ниже уровня Ферми [39], и незанятое с энергией 1.7 eV [40], что также отличает электронную структуру данной поверхности от (111) и (001), где имеется только одно поверхностное состояние в точке  $\bar{\Gamma}$ . Вследствие этого метод построения одномерного псевдопотенциала, развитый в работе [11], не позволяет дать описание щели в точке  $\bar{Y}$  и одновременно энергии двух поверхностных состояний, локализованных в этой щели. В настоящей работе предлагается метод построения двумерного псевдопотенциала, который позволяет аккуратно воспроизвести экспериментально наблюдаемые (и/или рассчитанные из первых принципов) ширину и положение запрещенной щели вместе с энергиями двух поверхностных состояний на поверхности (110) ГЦК-металла. В качестве примера в работе представляется расчет соответствующего псевдопотенциала для Cu(110), приводятся параметры этого псевдопотенциала в обсуждаются его возможные применения.

## 2. Метод

Изложение предлагаемого метода начнем с Фурье-разложения одноэлектронного псевдопотенциала  $V(\mathbf{r})$ , которое справедливо для идеального (без дефектов) твердого тела

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{g}\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{g}$  — векторы обратной решетки,  $V_{\mathbf{g}}$  — Фурье-компоненты псевдопотенциала.

Одномерный псевдопотенциал, который открывает энергетическую щель в точке  $\bar{\Gamma}$  на поверхности (001) благородных ГЦК-металлов, получается, если в разложении (1) оставить только наибольшие Фурье-компоненты, отвечающие направлению [001],  $V_{001}$  и  $V_{00\bar{1}}$ , а также константу  $V_{000}$ , полагая остальные компоненты равными нулю. В результате получаем искомый псевдопотенциал [11]

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= V_{000} + V_{001} \exp(i\mathbf{g}_{001}\mathbf{r}) + V_{00\bar{1}} \exp(-i\mathbf{g}_{001}\mathbf{r}) \\ &= V_{000} + 2V_{001} \cos\left(\frac{2\pi}{a_s} z\right), \end{aligned} \quad (2)$$

где вследствие симметрии системы  $V_{001} = V_{00\bar{1}}$ . В случае поверхности (111) ГЦК-металлов, где проекция в

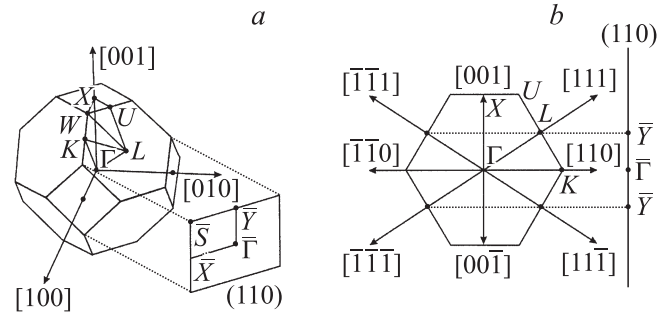


Рис. 1. Зона Бриллюэна ГЦК-решетки (a) и ее проекция на двумерную ЗБ поверхности (110) (b).

точке  $\bar{\Gamma}$  поверхностной ЗБ определяется объемными состояниями вдоль направления  $\Gamma L$ , объемной ЗБ, в разложении (1) удерживаются только Фурье-компоненты типа  $V_{111}$ , а также  $V_{000}$

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= V_{000} + V_{111} \exp(i\mathbf{g}_{111}\mathbf{r}) + V_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} \exp(-i\mathbf{g}_{111}\mathbf{r}) \\ &= V_{000} + 2V_{111} \cos\left(\frac{2\pi}{a_s} z\right). \end{aligned} \quad (3)$$

В (2) и (3)  $a_s$  обозначает расстояние между ближайшими атомными плоскостями с ориентацией (001) и (111) соответственно. Таким образом, для этих поверхностей удастся свести псевдопотенциал для поверхности к одномерному виду.

На поверхности (110) проекция на точку  $\bar{Y}$  определяется объемными состояниями вдоль направлений объемной ЗБ, не проходящих через точку  $\Gamma$ . На рис. 1 приведена зона Бриллюэна ГЦК-решетки и ее проекция на двумерную ЗБ поверхности (110). Из рисунка видно, что в точку  $\bar{Y}$  двумерной ЗБ проектируются точки  $L$  объемной зоны Бриллюэна, и именно Фурье-компоненты потенциала, соответствующие этим точкам, определяют щель в точке  $\bar{Y}$ . Поэтому оставляем только эти компоненты в разложении объемного псевдопотенциала вместе с нулевой компонентой, ответственной за положение щели относительно вакуумного уровня,

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= V_{000} + V_{111} \exp(i\mathbf{g}_{111}\mathbf{r}) + V_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} \exp(i\mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}\mathbf{r}) \\ &\quad + V_{1\bar{1}\bar{1}} \exp(i\mathbf{g}_{1\bar{1}\bar{1}}\mathbf{r}) + V_{\bar{1}\bar{1}1} \exp(i\mathbf{g}_{\bar{1}\bar{1}1}\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\mathbf{g}_{111} = 2\pi/a(111)$ , и вследствие симметрии кристалла

$$V_{111} = V_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} = V_{1\bar{1}\bar{1}} = V_{\bar{1}\bar{1}1}. \quad (5)$$

Выбирая ось  $z$  в направлении  $[110]$  (перпендикулярно поверхности), ось  $y$  в направлении  $[001]$  и ось  $x$  в направлении  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , получаем из (4)

$$V(y, z) = V_{000} + 4V_{111} \cos\left(\frac{2\pi}{a} y\right) \cos\left(\frac{2\pi\sqrt{2}}{a} z\right), \quad (6)$$

где  $a$  — параметр решетки ГЦК-кристалла. Таким образом, в отличие от случая поверхностей (001) и (111),

где потенциал зависит только от одной переменной (меняется в направлении, перпендикулярном выбранной поверхности), для описания проекции зонной структуры кристалла на точку  $\bar{Y}$  двумерной ЗБ поверхности (110) необходимый потенциал зависит от двух переменных.

Из требования непрерывности потенциала вместе с его первыми частными производными по координатам  $y$  и  $z$  следует, что во всем пространстве потенциал должен иметь вид

$$V(y, z) = V^{(0)}(z) + V^{(1)}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{a} y\right), \quad (7)$$

где  $V^{(0)}(z)$  и  $V^{(1)}(z)$  — гладкие функции координаты  $z$ . Мы выбираем их следующим образом, вводя обозначения  $4V_{111} = A_1$  и  $V_{000} = A_{10}$ :

$$V_1^{(0)}(z) = A_{10}, \quad z < 0, \quad (8)$$

$$V_2^{(0)}(z) = A_{20} + A_2 \cos(\beta z), \quad 0 < z < z_1, \quad (9)$$

$$V_3^{(0)}(z) = A_3 \exp(-\alpha(z - z_1)), \quad z_1 < z < z_{im}, \quad (10)$$

$$V_4^{(0)}(z) = \frac{\exp[-\lambda(z - z_{im})] - 1}{4(z - z_{im})}, \quad z_{im} < z, \quad (11)$$

$$V_1^{(1)}(z) = A_1 \cos\left(\frac{2\pi\sqrt{2}}{a} z\right), \quad z < 0, \quad (12)$$

$$V_2^{(1)}(z) = A_4 \exp(-\xi z) \cos(\xi z - \phi), \quad 0 < z < z_1, \quad (13)$$

$$V_3^{(1)}(z) = A_5 \exp\left(-\frac{2\pi}{a}(z - z_1)\right), \quad z_1 < z. \quad (14)$$

Здесь плоскость  $z = 0$  соответствует положению внешнего атомного слоя, и, таким образом, уравнения (8) и (12) описывают потенциал внутри пленки в соответствии с уравнением (6). Уравнение (11) соответствует потенциалу изображения, а уравнение (14) — затуханию периодической зависимости потенциала от  $y$  в вакууме согласно уравнению Лапласа

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \left(V_3^{(1)}(z) \cos\left(\frac{2\pi}{a} y\right)\right) = 0. \quad (15)$$

Переходная область между металлом и вакуумом описывается уравнениями (9), (10) и (13). Всего потенциал имеет 15 параметров:  $A_{10}$ ,  $A_1$ ,  $A_{20}$ ,  $A_2$ ,  $\beta$ ,  $A_3$ ,  $\alpha$ ,  $z_1$ ,  $\lambda$ ,  $z_{im}$ ,  $\xi$ ,  $\xi$ ,  $\phi$ ,  $A_4$  и  $A_5$ , но только пять из них являются независимыми. Мы выбираем  $A_1$ ,  $A_{10}$ ,  $\xi$ ,  $\xi$  и  $\alpha$  в качестве подгоночных параметров. Остальные параметры получаются из требования непрерывности потенциала и его первых частных производных во всем пространстве. При этом из множества решений для точки  $z_1$  выбирается такое, чтобы аргумент косинуса в формуле (13) был близок к  $\pi$ , благодаря чему потенциал  $V(0, z)$  имеет ровно один локальный минимум при  $z > 0$ , а параметр  $\beta$  выбирается равным  $\pi/(4z_1)$ . Параметры  $A_1$  и  $A_{10}$  ответственны за воспроизведение соответственно ширины и положения энергетической щели в точке  $\bar{Y}$ . Вариация трех параметров  $\xi$ ,  $\xi$  и  $\alpha$  позволяет воспроизвести два поверхностных состояния (занятое и незанятое) и первое состояние изображения.

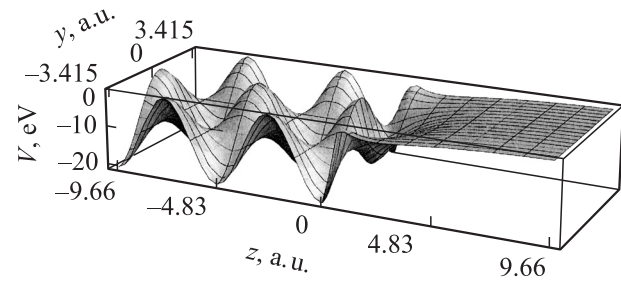


Рис. 2. Двумерный псевдопотенциал, воспроизводящий электронную структуру поверхности меди (110) в точке  $\bar{Y}$ .

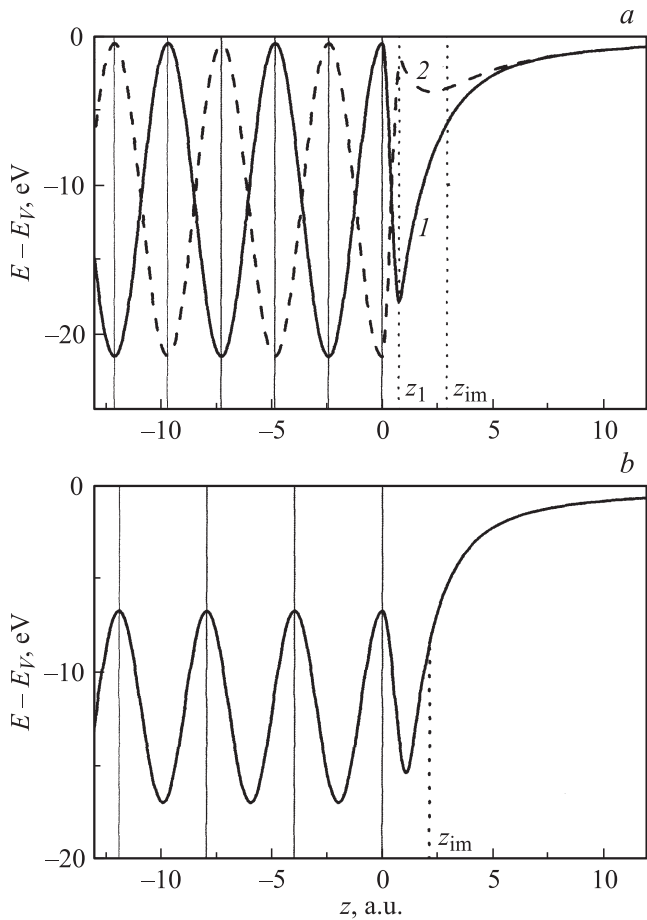
### 3. Результаты и обсуждение

Параметры предложенного модельного двумерного псевдопотенциала были рассчитаны для поверхности меди (110). Подгонка проводилась под экспериментальные данные об электронной структуре данной поверхности в точке  $\bar{Y}$ , полученные для низких и комнатных температур. В обоих случаях экспериментальное значение работы выхода составляло 4.52 eV [41]. Используемые экспериментальные данные и полученные параметры псевдопотенциала приведены в таблице.

Построенный двумерный псевдопотенциал для поверхности Cu(110) показан на рис. 2. Необходимо подчеркнуть, что именно вариация псевдопотенциала в направлении  $y$  позволяет получить два поверхностных состояния с одинаковой симметрией (оба состояния обладают  $s-p_z$ -симметрией) в энергетической щели в точке  $\bar{Y}$ . Сечения данного псевдопотенциала при  $y = 0$  и  $y = \pm a/2$  в сравнении с псевдопотенциалом для поверхности Cu(111) [11] показаны на рис. 3. Как следует из рис. 3, объемный потенциал в направлении  $z$  при фиксированном  $y$  имеет период, равный двум межслоевым расстояниям, в отличие от псевдопотенциала поверхности (111), где период равен одному межслоевому расстоянию. Поскольку в случае поверх-

Параметры псевдопотенциала, воспроизводящие электронную структуру поверхности меди (110) в точке  $\bar{Y}$ , и экспериментальные данные, использованные при подгонке параметров:  $E_0$  — занятое ПС;  $E_1$  — незанятое ПС;  $E_{1S}$  — первое состояние изображения,  $E_{bot}$  и  $E_{top}$  — энергии дна и вершины щели проекции объемных состояний соответственно

Параметр	$T \rightarrow 0$	$T = 300$ K
$A_{10}$ , eV	-10.963	-10.949
$A_1$ , eV	10.428	10.326
$\alpha$ , a.u.	0.340	0.340
$\xi$ , a.u.	3.916	4.046
$\xi$ , a.u.	0.330	0.290
$E_{bot} - E_F$ , eV	-0.94 [39]	-0.89 [11]
$E_{top} - E_F$ , eV	4.25 [11]	4.25 [11]
$E_0 - E_F$ , eV [39]	-0.510	-0.432
$E_1 - E_F$ , eV [40]		17
$E_{1S} - E_F$ , eV [42]		$5.6 \pm 0.5$



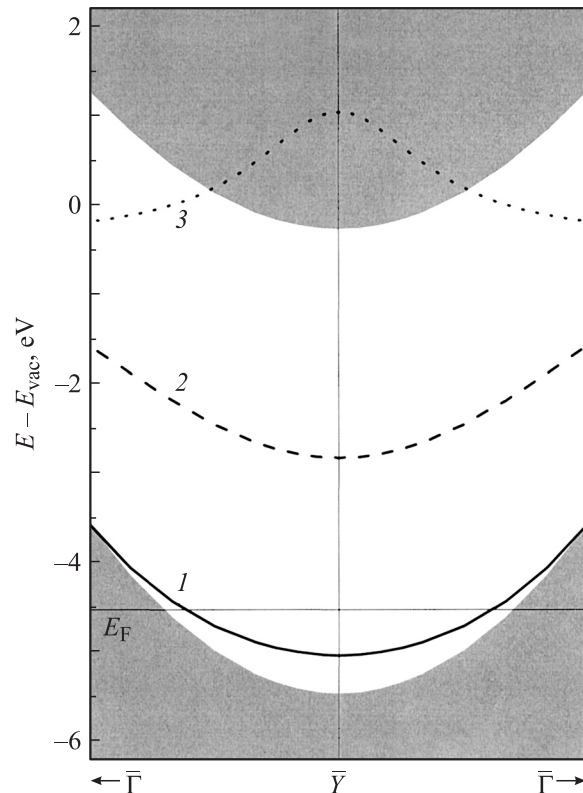
**Рис. 3.** Псевдопотенциалы, описывающие поверхностную электронную структуру Cu(110) (a) и Cu(111) (b). 1 — зависимость потенциала от  $z$  при  $y = 0$ , 2 — зависимость потенциала от  $z$  при  $y = \pm a/2$ . Сплошные вертикальные линии обозначают положение атомных слоев ( $z = 0$  соответствует поверхностному слою), пунктирные вертикальные линии указывают положение плоскости  $z_1$  и плоскости изображения  $z_{im}$ .

ности (111) псевдопотенциал является постоянным в плоскости, параллельной поверхности, и зависит только от координаты  $z$ , в энергетической щели в точке  $\bar{\Gamma}$  поверхностной ЗБ возможно только одно поверхностное состояние  $s-p$ -симметрии [11].

На рис. 4 мы показываем рассчитанную электронную структуру Cu(110) в направлении  $\bar{\Gamma}-\bar{Y}-\bar{\Gamma}$ , где энергия поверхностных состояний увеличивается параболически с эффективными массами ( $m^*/m$ ), меньшими единицы. Вычисленная эффективная масса незанятого поверхностного состояния 0.94 хорошо согласуется с экспериментальным значением  $0.8 \pm 0.2$  [42]. Для эффективной массы занятого поверхностного состояния наш расчет дает значение 0.85, что существенно превышает результат фотоэмиссионной спектроскопии 0.26 [39]. Так как в данной модели псевдопотенциал не зависит от координаты  $x$ , в направлении  $\bar{Y}-\bar{S}$  одноэлектронная энергия является квадратичной функцией квазиимпульса  $k_x^2/2$ .

Параметры псевдопотенциала подбирались таким образом, чтобы кроме энергий двух поверхностных состояний он также воспроизводил энергию первого состояния изображения в точке  $\bar{Y}$ , равную 5.6 eV относительно уровня Ферми [42]. При этом мы находим, что в точке  $\bar{\Gamma}$  это состояние имеет энергию 4.25 эВ, что согласуется с экспериментальным результатом  $4.2 \pm 0.4$  eV, полученным в работе [34]. Таким образом, можно сделать вывод, что данный псевдопотенциал хорошо воспроизводит дисперсию незанятых состояний. В случае занятого поверхностного состояния различие в эффективной массе между теоретической величиной и экспериментальной  $m^*$  может быть легко преодолено в расчетах многих свойств, в частности таких, как времена жизни коллективных и одночастичных возбуждений на поверхности [15–18,29,30].

Рассчитанные плотности вероятности для электронных состояний поверхности Cu(110) в точке  $\bar{Y}$  в сравнении с точкой  $\bar{\Gamma}$  поверхности Cu(111) [11] приведены на рис. 5. Как видно из рисунка, наибольший пик незанятого поверхностного состояния на Cu(110) находится за пределами верхнего атомного слоя в вакууме, как и для поверхностного состояния на Cu(111). В то же время пик занятого поверхностного состояния на Cu(110) приходится на внешний атомный слой, и это состояние

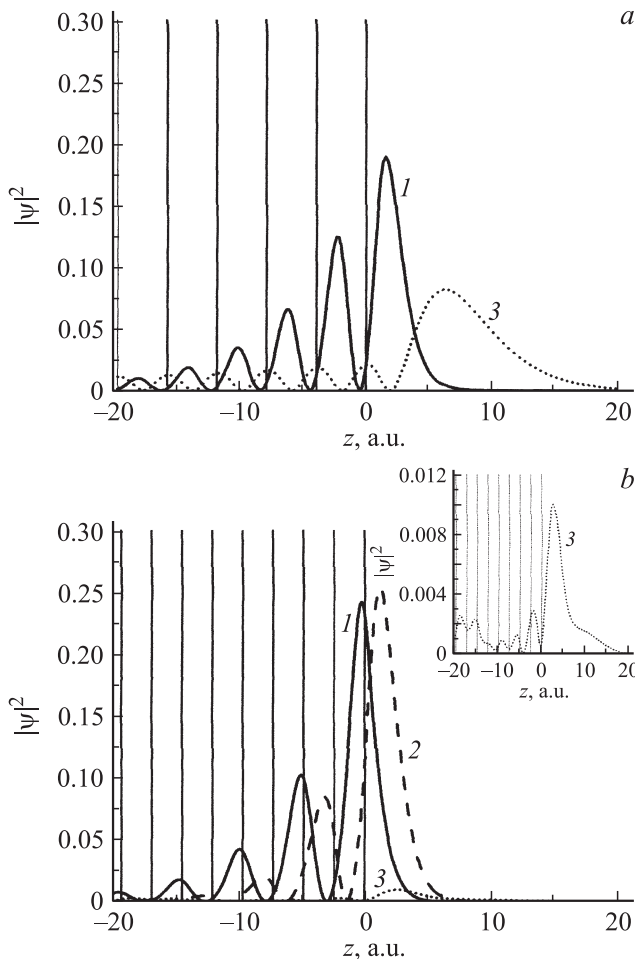


**Рис. 4.** Зонная структура поверхности меди (110) в окрестности точки  $\bar{Y}$ . 1, 2 — занятое и незанятое поверхностные состояния соответственно, 3 — первое состояние изображения. Темная область — проекция континуума объемных состояний на поверхность (110).

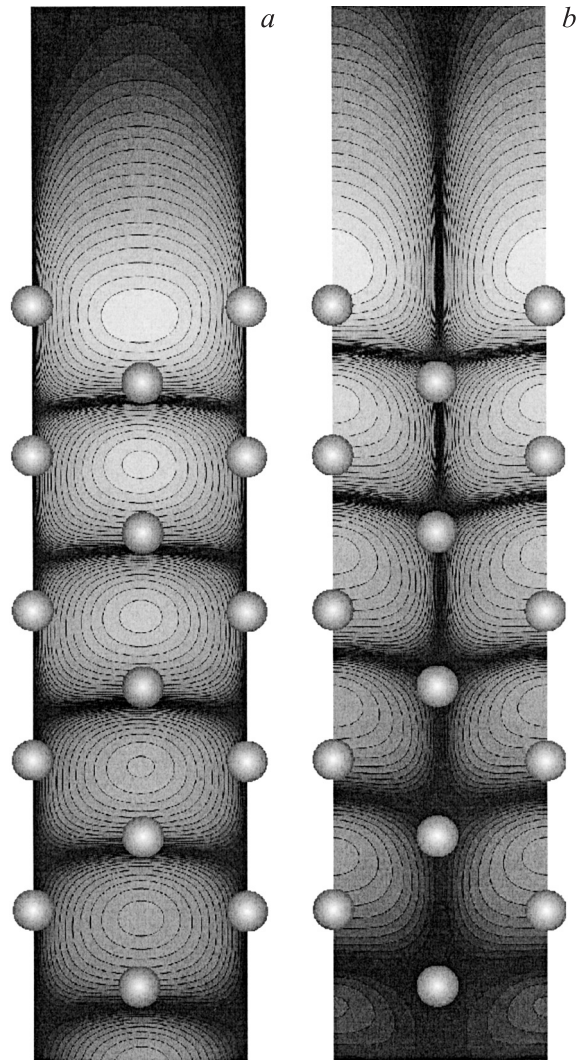


медленнее затухает в объем, чем незанятое. Такое состояние отсутствует на поверхности Cu(111) [11].

На рис. 6 приведено рассчитанное распределение зарядовой плотности обоих поверхностных состояний, где также показано расположение атомов реальной кристаллической структуры поверхности (110). Данное распределение показывает, что оба состояния обладают  $s-p_z$ -симметрией (являются состояниями типа „висячей“ связи). Подобные распределения зарядовой плотности были получены в *ab initio* расчетах на чистых поверхностях и на поверхностях с нанесенными монослоями для состояний  $s-p_z$ -типа [2,43]. Из рисунка видно, что эти два состояния связаны с разными цепочками атомов и их ортогональность обусловлена в основном локализацией их волновых функций в разных областях пространства, т.е. максимумы зарядовой плотности занятого состояния приходятся на минимумы незанятого состояния, и наоборот. Таким образом, поверхностные



**Рис. 5.** Плотность вероятности поверхностных состояний, усредненная в плоскости, параллельной поверхности, как функция координаты  $z$  для точки  $\Gamma$  поверхности Cu(111) (a) и точки  $\hat{Y}$  поверхности Cu(110) (b). 1 — занятое поверхностное состояние, 2 — незанятое поверхностное состояние, 3 — первое состояние изображения. На вставке приведена плотность вероятности первого (резонансного) состояния изображения.



**Рис. 6.** Распределение зарядовой плотности занятого (a) и незанятого (b) поверхностных состояний для Cu(110), рассчитанных с предложенным в настоящей работе модельным псевдопотенциалом в логарифмическом масштабе. Области светло-серого цвета соответствуют максимумам локализации поверхностных состояний. Шарами показаны проекции положений атомов реальной кристаллической структуры меди на плоскость (110).

состояния на Cu(110) разделены в пространстве — такую картину невозможно получить с одномерным псевдопотенциалом.

#### 4. Заключение

Представлен метод построения двумерного псевдопотенциала для описания электронных поверхностных состояний на меди (110). Отличительной чертой электронного спектра такой поверхности в точке  $\hat{Y}$  является наличие двух однотипных поверхностных состояний в одной энергетической щели. Такая электронная структура не может быть описана в рамках одномерной мо-

дели, широко применяемой для описания электронного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  на поверхностях (001) и (111) ГЦК-металлов и свойств, связанных с этим состоянием. Построенный псевдопотенциал может быть использован для расчетов электронных и дырочных возбуждений и затухания таких возбуждений на поверхности Cu(110) с учетом электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий. Предложенный метод может быть использован для построения соответствующего псевдопотенциала для поверхности (110) других ГЦК-металлов.

## Список литературы

- [1] G. Borstel, G. Thörner. Surf. Sci. Rep. **8**, 1 (1988).
- [2] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, E.N. Shirykalov. Surf. Sci. **188**, 287 (1987).
- [3] H.L. Davis, J.B. Hannon, K.B. Ray, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **68**, 2632 (1992).
- [4] V. Chis, B. Hellsing. Phys. Rev. Lett. **93**, 226 103 (2004).
- [5] L.I. Johansson, H.I.P. Johansson, J.N. Andersen, E. Lundgren, R. Niholm. Phys. Rev. Lett. **71**, 2453 (1993).
- [6] P.J. Feibelman, R. Stumpf. Phys. Rev. B **50**, 17 480 (1994).
- [7] W. Ho. J. Phys. Chem. **100**, 13 050 (1996).
- [8] H. Nienhaus. Surf. Sci. Rep. **45**, 1 (2002).
- [9] R. Haight. Surf. Sci. Rep. **21**, 275 (1995).
- [10] E.V. Chulkov, A.G. Borisov, J.P. Gauyacq, D. Sanchez-Portal, V.M. Silkin, V.P. Zhukov, P.M. Echenique. Chem. Rev. **106**, 4160 (2006).
- [11] E. Chulkov, V. Silkin, P. Echenique. Surf. Sci. **437**, 330 (1999); **391**, L 1217 (1997).
- [12] E.V. Chulkov, I. Sarria, V.M. Silkin, J.M. Pitarke, P.M. Echenique. Phys. Rev. Lett. **80**, 4947 (1998).
- [13] J. Osmá, I. Sarria, E.V. Chulkov, J.M. Pitarke, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **59**, 10 591 (1999).
- [14] W. Berthold, U. Höfer, P. Feulner, E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Phys. Rev. Lett. **88**, 056 805 (2002).
- [15] J. Kliewer, R. Berndt, E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique, S. Crampin. Science **288**, 1399 (2000).
- [16] S. Link, H. Dürr, G. Bihlmayer, S. Blügel, W. Eberhardt, E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **63**, 115 420 (2001).
- [17] L. Vitali, P. Wahl, M.A. Schneider, K. Kern, V.M. Silkin, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. Surf. Sci. **523**, L 47, (2003).
- [18] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, M. Machado. Surf. Sci. **482–485**, 693 (2001).
- [19] S. Crampin. Phys. Rev. Lett. **95**, 046 801 (2005).
- [20] D.B. Dougherty, P. Maksymovych, J. Lee, M. Feng, H. Petek, J.T. Yates. Phys. Rev. B **76**, 125 428 (2007).
- [21] P. Saalfrank, M. Nest, I. Andrianov, T. Klamroth, D. Kroner, S. Beyvers. J. Phys.: Cond. Matter **18**, S 1425 (2006).
- [22] S. Diaz-Tendero, S. Fölsch, F.E. Olsson, A.G. Borisov, J.P. Gauyacq. Nano Lett. **8**, 2712 (2008).
- [23] A. Eiguren, B. Hellsing, F. Reinert, G. Nicolay, E.V. Chulkov, V.M. Silkin, S. Hüfner, P.M. Echenique. Phys. Rev. Lett. **88**, 066 805 (2002).
- [24] A. Eiguren, B. Hellsing, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **67**, 235 423 (2003).
- [25] С.В. Еремеев, Г.Г. Русина, С.Д. Борисова, Е.В. Чулков. ФТТ **50**, 311 (2008).
- [26] S.V. Eremeev, I.Yu. Sklyadneva, P.M. Echenique, S.D. Borisova, G. Benedek, G.G. Rusina, E.V. Chulkov. Surf. Sci. **601**, 4553 (2007).
- [27] С.В. Еремеев, Е.В. Чулков. ФТТ **51**, 808 (2009).
- [28] M. Wiatrowski, L. Lavagnino, V.A. Esaulov. Surf. Sci. **601**, L 39 (2007).
- [29] V.M. Silkin, A. Garcia-Lekue, J.M. Pitarke, E.V. Chulkov, E. Zaremba, P.M. Echenique. Europhys. Lett. **66**, 260 (2004).
- [30] V.M. Silkin, J.M. Pitarke, E.V. Chulkov, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **72**, 115 435 (2005).
- [31] B. Diaconescu, K. Pohl, L. Vattuone, L. Salvio, Ph. Hofmann, V.M. Silkin, J.M. Pitarke, E.V. Chulkov, P.M. Echenique, D. Farias, M. Rocca. Nature **448**, 57 (2007).
- [32] A.G. Borisov, V. Sametoglu, A. Winkelmann, A. Kubo, N. Pontius, J. Zhao, V.M. Silkin, J.P. Gauyacq, E.V. Chulkov, P.M. Echenique, H. Petek. Phys. Rev. Lett. **101**, 266 801 (2008).
- [33] C.H. Schwalb, S. Sachs, M. Marks, A. Scholl, F. Reinert, E. Umbach, U. Höfer. Phys. Rev. Lett. **101**, 146 801 (2008).
- [34] I. Andrianov, T. Klamroth, P. Saalfrank, U. Bovensiepen, C. Gahl, M. Wolf. J. Chem. Phys. **122**, 234 710 (2005).
- [35] E.V. Chulkov, J. Kliewer, R. Berndt, V.M. Silkin, B. Hellsing, S. Crampin, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **68**, 195 422 (2003).
- [36] T. Hakala, M.J. Puska, A.G. Borisov, V.M. Silkin, N. Zabala, E.V. Chulkov. Phys. Rev. B **75**, 165 419 (2007).
- [37] A.G. Borisov, A.K. Kazansky, J.P. Gauyacq. Phys. Rev. B **59**, 10 935 (1999).
- [38] A.G. Borisov, J.P. Gauyacq, E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Phys. Rev. B **65**, 235 434 (2002).
- [39] P. Straube, F. Pforte, T. Michalke, K. Berge, A. Gerlach, A. Goldmann. Phys. Rev. B **61**, 14 072 (2000).
- [40] O. Zeybek, A. Davarpanah, S. Barrett. Surf. Sci. **600**, 5176 (2006).
- [41] R. Arafune, K. Hayashi, S. Ueda, S. Ushioda. Phys. Rev. Lett. **92**, 247 601 (2004).
- [42] W. Jacob, V. Dose, U. Kolac, T. Fauster, A. Goldmann. Z. Phys. B **63**, 459 (1986).
- [43] E.V. Chulkov, V.M. Silkin. Surf. Sci. **215**, 385 (1989).