

УДК 537.534

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ ВОДОРОДА, ДЕЙТЕРИЯ, ТРИТИЯ И МЮОНИЯ НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

© 2022 г. И. К. Гайнуллин¹*, Е. Ю. Зыкова¹, В. Г. Дудников²

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, Москва, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Новосибирский национальный исследовательский государственный университет”, Новосибирск, Россия

*E-mail: ivan.gainullin@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 13.12.2021 г.

После доработки 24.12.2021 г.

Принята к публикации 21.01.2022 г.

Разработана теоретическая модель расчета вероятности отрицательной ионизации, в рамках которой уровень сродства отрицательного иона считается постоянным вблизи поверхности, в связи с чем рассчитанная вероятность ионизации не сильно зависит от исходного расстояния от атома до поверхности. Рассчитана вероятность отрицательной ионизации водорода, дейтерия, трития и мюония на металлических поверхностях с низкой работой выхода.

DOI: 10.31857/S0367676522050064

ВВЕДЕНИЕ

Отрицательные ионы используются в тандемных ускорителях, имплантерах высокоэнергетических ионов, ускорительной масс-спектрометрии, получения сверхколлимированных пучков, перезарядной инъекции в циклические ускорители и накопители, перезарядного вывода пучков из циклотронов, инъекции нейтралов высокой энергии в плазменные установки, перезарядной разводки пучков и ряда других направлений [1–6].

Одной из наиболее важных областей применения источников отрицательных ионов является создание термоядерных реакторов. Актуальность получения интенсивных пучков отрицательных ионов обусловлена использованием ускоренных до кинетической энергии ~ 1 МэВ нейтральных атомов водорода/дейтерия/трития для нагрева плазмы в токамаках до температуры горения [6]. Пучок ускоренных нейтральных атомов может быть получен из пучка положительных атомов при прохождении через газовую среду. Однако, эффективность нейтрализации положительных ионов быстро уменьшается с ростом кинетической энергии и для требуемых значений энергии ~ 1 МэВ становится практически нулевой. В то же время, эффективность нейтрализации отрицательных ионов при больших энергиях выходит на асимптотическое значение $\sim 60\%$, что является приемлемым с технологической точки зрения. Отрицательные ионы мюония использу-

ются для ускорения мюонов в ускорителях от низких энергий [7].

Принципы создания источников отрицательных ионов подробно описаны в ссылках [4, 6]. В наше время в высокоинтенсивных источниках отрицательных ионов используется поверхностно-плазменный метод получения отрицательных ионов на покрытых цезием поверхности [8, 9]. Покрытие преобразующей поверхности цезием значительно увеличивает эмиссию отрицательных ионов за счет уменьшения работы выхода поверхности. Это достигается путем введения в газовый разряд вблизи поверхности незначительного количества цезия или других веществ с низким потенциалом ионизации [9]. Уменьшение работы выхода значительно увеличивает вероятность вылета частиц в виде отрицательных ионов при распылении (десорбции) и отражении (рассеянии).

Высокая эффективность отрицательной ионизации для потока частиц, удаляющегося от поверхности с повышенными скоростями, объясняется закономерностями резонансного электронного обмена (РЭО) между твердым телом и частицей на небольших расстояниях от поверхности [10, 11]. Вблизи поверхности металла уровень сродства отрицательного иона смещается вниз из-за электростатического взаимодействия электрона с металлом. Сдвиг уровня сродства к электрону относительно уровня Ферми металла может быть аппроксимирован потенциалом изображе-

ния. При приближении к поверхности уровень атомной частицы уширяется и опускается относительно уровня сродства к электрону свободных частиц S на величину $\Delta S = -1/4z^1$. Поскольку резонансная отрицательная ионизация происходит на расстояниях ион-поверхность, где уровень сродства ниже уровня Ферми металла, то уровень Ферми металла (или работа выхода поверхности) оказывает решающее влияние на вероятность ионизации. Общая картина такова, что вероятность отрицательной ионизации экспоненциально возрастает с уменьшением работы выхода поверхности преобразователя [12–14].

Для исследования РЭО между атомами/ионами и поверхностью твердых тел часто используется рассеяние медленных ионов (РМИ) [14–44]. Общий подход к теоретическому описанию РЭО с металлическими поверхностями основан на решении гамильтониана Андерсона–Ньюнса [19, 45, 46]. Однако практическая применимость модели Андерсона–Ньюнса ограничена необходимостью расчета матричных элементов взаимодействия, для которых используются основные предположения. В последние десятилетия был разработан метод распространения волновых пакетов (РВП), который был применен ко многим проблемам РЭО [47], включая описание не-адиабатических эффектов РЭО [48]. При малых нормальных скоростях атомной частицы ($v_{norm} < 0.1$ ат. ед.), например, во время скользящего рассеяния, часто используется адиабатическое приближение [26]. При этом считается, что эффективность РЭО зависит только от расстояния ион-поверхность, но не от скорости иона и фазы волновой функции. Окончательное зарядовое состояние атомной частицы получается путем интегрирования полуклассического кинетического уравнения. Несмотря на свою простоту, многие экспериментальные данные и важные характеристики электронного обмена, в том числе РЭО при скользящем рассеянии были объяснены с помощью адиабатического приближения и кинетического уравнения [46, 47]. Адиабатическое приближение подходит для расчета вероятности отрицательной ионизации. Вероятность отрицательной ионизации обычно рассчитывается только для траектории отлета, так как начальное состояние атомной частицы “стирается” вблизи поверхности. Это свойство известно как эффект “потери памяти”, который подтверждается экспериментальными исследованиями [49–51]. Также обычно используется классическая прямолинейная траектория движения с постоянной скоростью, которая не учитывает притяжение к заряду изображения иона [45]. Это дает

разумные результаты для $E_{norm} > 10$ эВ. Однако такой подход не учитывает кинетический порог отрицательной ионизации: отлетающие отрицательные частицы, имеющие кинетическую энергию $1/2mv^2 < (\phi - E_a) \sim 1$ эВ при $z = z_0$ не могут покинуть потенциальный барьер вблизи поверхности: они нейтрализуются и преобразуются в свободные нейтральные частицы или остаются в адсорбированном состоянии.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Кинетическое уравнение для расчета вероятности отрицательной ионизации

Мы рассматриваем одноэлектронный процесс отрицательной ионизации водородоподобного нейтрального атома с помощью резонансного электронного обмена (РЭО). Так как типичные значения кинетической энергии в поверхностно-плазменных источниках отрицательных ионов составляют 10–100 эВ, то применяется адиабатическое приближение. В этом случае РЭО рассчитывается с помощью кинетического уравнения [26]. Чтобы найти населенность атомного состояния, мы интегрируем кинетическое уравнение вдоль траектории движения иона [52, 53]:

$$\frac{dP^-}{dt} = -\Gamma_{loss}(z)P^- + \Gamma_{capture}(z)(1 - P^-), \quad (1)$$

где z является расстоянием до поверхности, $\Gamma_{loss}(z) = g_{loss}\Gamma(z)F_{loss}(z)$, $\Gamma_{capture}(z) = g_{capture}\Gamma(z)F_{capture}(z)$, $\Gamma(z)$ – ширина уровня иона, $F_{loss}(z)$ и $F_{capture}(z)$ – коэффициенты потери и захвата электрона, соответственно. Статистические факторы обычно принимаются за $g_{loss} = 1$ и $g_{capture} = 0.5$ для учета спина электрона [26, 54].

Процедура расчета $\Gamma(z)$ как функции расстояния ион-поверхность подробно описана в работах [55, 56]. Вкратце, мы проводим серию вспомогательных расчетов распада отрицательного иона вблизи металлической поверхности при фиксированном расстоянии ион-поверхность. Отрицательный ион считается водородоподобным атомом, состоящим из одного активного электрона и нейтрального атомного ядра. Мы используем трехмерную реализацию метода распространения волновых пакетов [57, 58]. Таким образом, мы численно решаем нестационарное уравнение Шрёдингера с заданными начальными условиями [59–68]:

$$i\frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} = \left(-\frac{\Delta}{2} + U(\vec{r}, t)\right)\psi(\vec{r}, t), \quad (2)$$

где $U(\vec{r}, t) = V_{e-ion}(\vec{r}, t) + V_{e-surf}(\vec{r})$ зависящий от времени потенциал, действующий на активный электрон. Здесь $V_{e-ion}(\vec{r}, t)$ – потенциал атомной части-

¹ Для удобства используется атомная система единиц, где $m_e = e = \hbar = 1$; например, 1 ат. ед. расстояния равна 0.53 Å. Энергии даются в электрон-Вольтах, относительно уровня вакуума ($E_v = 0$).

цы, $V_{e-surf}(\vec{r})$ – потенциал металлической поверхности. Следует отметить, что потенциал $U(\vec{r}, t)$ учитывает движения атомной частицы, так как $V_{e-ion}(\vec{r}, t)$ зависит от расположения ионов. Для отрицательного иона водорода [69] и некоторых металлических поверхностей [70, 71] разработаны потенциалы, имеющие аналитический вид. Поскольку электронная структура дейтерия, трития и мюония очень близка к электронной структуре водорода, то для описания вышеуказанных частиц используется потенциал для атома водорода [72].

Численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера дает эволюцию волнового пакета системы $\psi(\vec{r}, t)$ во времени. Проекция текущей волновой функции на основное состояние $\psi_0(\vec{r})$ дает амплитуду выживания электрона в исходном состоянии:

$$A(t) = \psi_0(\vec{r})|\psi(\vec{r}, t), \quad (3)$$

это сложная функция. Квадрат модуля которой дает вероятность сохранения электрона на атомной частице, т.е. вероятность частица является отрицательным ионом:

$$P^-(t) = |A(t)|^2. \quad (4)$$

Ширина уровня иона $\Gamma(z)$, которая характеризует эффективность РЭО рассчитывается из следующего приближения:

$$P^-(t) = \exp(-\Gamma t). \quad (5)$$

Следует отметить, что в большинстве случаев происходит так называемый “экспоненциальный распад” [26]. Следовательно, $\Gamma(z)$ можно легко вычислить из линейного приближения $\log(P(t))$.

Наконец, чтобы найти отрицательную вероятность ионизации P^- мы интегрируем кинетическое уравнение (1) вдоль исходящей ионной траектории на расстоянии $3 < z < 20$ ат. ед.

Расчет коэффициентов потери и подхвата электрона

Традиционный подход к расчету коэффициентов потери и подхвата электрона $F_{loss}(z)$ и $F_{capture}(z)$ основан на анализе проекции плотности электронных состояний. Вес подхвата электрона пропорционален части электронной плотности $f_e(E, z)$, расположенной ниже уровня Ферми: $F_{loss}(z) = \int_{E < E_f} f_e(E, z) dE$. И, наоборот, вес потери электрона пропорционален части электронной плотности, выше уровня Ферми: $F_{capture}(z) = \int_{E \geq E_f} f_e(E, z) dE$. Обычно используется Лоренцево уширение атомного уровня: $f_e(E, z) =$

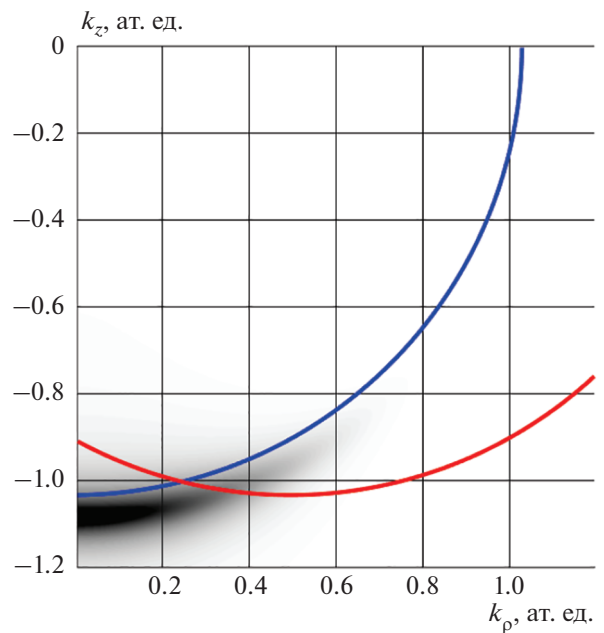


Рис. 1. Иллюстрация расчета коэффициентов потери и захвата электрона. Затененная область показывает плотность распределения активного электрона в k -пространстве $f(\vec{k})$. Синяя сплошная линия соответствует сфере Ферми для $W(110)$ в статическом случае; красная сплошная линия к сфере Ферми для $v_{par} = 0.5$ ат. ед.

$= (0.5\Gamma(z)) / ((0.5\Gamma(z))^2 + (E - E_a(z))^2)$, где $E_a(z)$ является уровнем сродства. Для удобства мы обозначим этот подход как традиционный.

Следует отметить, что традиционный подход не учитывает параллельную скорость иона. Для этого нужно учитывать распределение электронов в пространстве волновых векторов (k -пространство), как было предложено в ссылке [73]. Чтобы рассчитать коэффициенты потери и подхвата электрона $F_{loss}(z)$ и $F_{capture}(z)$, мы анализируем распределение активного электрона в k -пространстве. Распределение активного электрона внутри металла в k -пространстве получается с помощью Фурье преобразования волновой функции электрона.

Важно отметить, что распределение электронов в k -пространстве становится квазистационарным после времени ~ 100 ат. ед. от начала взаимодействия. Пример распределения активного электрона в k -пространство представлен на рис. 1. Можно заметить, что плотность распределения электрона $f(\vec{k})$ локализована вокруг сферы определенного радиуса k_a , которая зависит от расстояния ион-поверхность (см. затененную область на рис. 1). Выражение $k_a^2/2$ дает энергию электрона E_a , относительно дна зоны проводимости. E_a

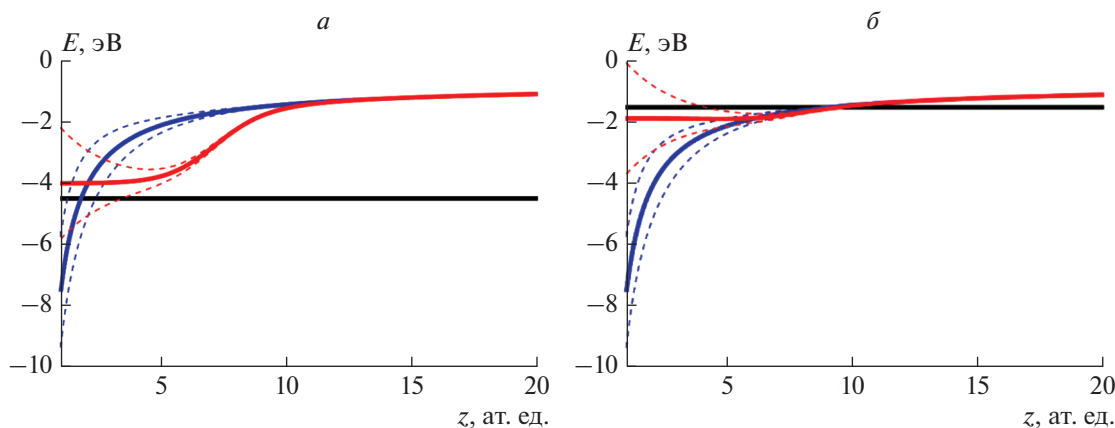


Рис. 2. Иллюстрация зависимости уровня сродства к электрону $E_a(z)$ и ширины уровня от расстояния до поверхности. Синяя сплошная линия показывает уровень сродства, который рассчитывается с помощью классического потенциала изображения. Красная сплошная линия показывает зависимость уровня сродства от расстояния ион–поверхность, которая используется в данной статье. Черная прямая линия показывает уровень Ферми металла. Тонкие пунктирные линии изображают уровень, расширяющийся вблизи поверхности. Слева: $E_f = -4.5$ эВ и $E_0 = -3.75$ эВ, справа: $E_f = -1.45$ эВ и $E_0 = -1.85$ эВ.

уменьшается с уменьшением расстояния ион–поверхность вследствие взаимодействия с потенциалом изображения [26]. Потеря электрона возможна, когда его плотность $f(\vec{k})$ находится за пределами сферы Ферми металла – это означает, что энергетический уровень активного электрона находится выше уровня Ферми, следовательно, возможна только резонансная потеря электрона, потому что внутри металла нет занятых электронных состояний выше уровня Ферми. И наоборот, если распределение активного электрона $f(\vec{k})$ находится внутри сферы Ферми, то возможен подхват электрона.

Таким образом, коэффициенты потери и подхвата электрона (F_{loss} и $F_{capture}$) пропорциональны части электронной плотности, расположенной снаружи и внутри сферы Ферми соответственно [52]. Следует отметить, что для нулевой параллельной скорости наша модель и традиционный подход дают одинаковые значения коэффициентов потери и подхвата электрона.

Подход к заданию уровня сродства к электрону

Два основных параметра, которые характеризуют РЭО и определяют вероятность ионизации: 1) энергетическое положение иона $E_a(z)$; и 2) ширина уровня $\Gamma(z)$. Процедура расчета $\Gamma(z)$ описана выше. Традиционный подход к заданию энергетического положения иона заключается в том, что уровень ионов вблизи поверхности смещается вниз на значение потенциала изображения $E_a(z) = E(\infty) - 1/4z$ (синяя сплошная линия на рис. 2). Однако традиционный подход приводит к существенно завышенным значениям вероятности

ионизации, а также к ее сильной зависимости от начального расстояния z_0 . Поэтому в настоящей статье мы предлагаем следующий подход к уровню сродства:

$$E_a(z) = (1 - g(z))(E_a(\infty) - 1/4z) + f(z)E_0, \quad (6)$$

где функция $g(z) = 1/(1 + \exp(\alpha(z - \beta)))$ это функция, которая мягко “переключает” уровень сродства от классического подхода на больших ион–поверхностных расстояниях до постоянного эффективного значения E_0 вблизи поверхности (красная сплошная линия на рис. 2). Аналогичный подход с постоянным уровнем сродства вблизи поверхности применялся в работах [14, 74, 75].

В наших расчетах мы используем коэффициенты $\alpha = 1$ и β , равное расстоянию, на котором традиционный уровень сродства является средним между $E(\infty)$ и E_0 : $E_a(\beta) = E(\infty) - 1/4\beta = (E(\infty) + E_0)/2$. Например, для W(110) коэффициент β равен порядка 7 ат. ед. Следует отметить, что выбор параметров α и β не оказывает существенного влияния на вероятность отрицательной ионизации. Вероятность ионизации также практически независима на начальном расстоянии z_0 (для $z_0 < 4$ ат. ед.), потому что в нашем подходе уровень сродства вблизи поверхности квази-постоянный. Таким образом, E_0 является единственным параметром аппроксимации в нашей модели.

Кинетическое уравнение (1) может быть переписано как $dP^-/dt = \Gamma(z)(P_{eq}^-(z) - P^-)$, где $P_{eq}^-(z)$ является равновесной заселенностью иона [26]. Для малых нормальных скоростей ($v_{norm} < 0.1$ ат. ед.) и небольших расстояний ион–поверхность, текущая

заселенность e $P^-(z)$ близка к $P_{eq}^-(z)$, потому что она быстро достигает своего равновесного состояния [26]. Равновесное значение можно определить на основе экспериментальных данных о зависимости вероятности ионизации от нормальной скорости ионов. Принимая во внимание асимптотический характер зависимости вероятности ионизации от нормальной скорости, для больших скоростей ($v_{norm} > 0.1$ ат. ед.) вероятность ионизации может рассматриваться как равновесная заселенность вблизи поверхности.

Физическое значение параметра E_0 это не фактическое значение уровня сродства вблизи поверхности, но эффективное значение уровня сродства, которое приводит к равновесной заселенности P_{eq}^- , соответствующей экспериментальным данным. Можно заметить, что с физической точки зрения в качестве параметра аппроксимации правильнее рассмотреть равновесную заселенность вблизи поверхности P_{eq}^- . Тем не менее, параметр E_0 больше подходит для численного решения кинетического уравнения.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для верификации физической модели и численного метода решения задачи отрицательной ионизации было проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. На рис. 3 показана зависимость вероятности отрицательной ионизации водорода от нормальной компоненты скорости для поверхности покрытого цезием $W(110)$. Работа выхода для покрытой цезием $W(110)$ поверхности составляла 1.45 эВ [76], а параметр $E_0 = -1.47$ эВ. Можно видеть, что результаты наших расчетов количественно соответствуют экспериментальным данным [14].

Помимо водорода, практический интерес для создания источников отрицательных ионов представляют ионы дейтерия, трития и мюония. На рис. 4–7 приведена вероятность отрицательной ионизации для водорода, дейтерия, трития и мюония как функция энергии удаления от поверхности для различных значений уровня Ферми. Значения уровня Ферми приведены относительно уровня вакуума $E_v = 0$, т.е. уровень Ферми равняется работе выхода металла с отрицательным знаком. Значение параметра E_0 равнялось -2.0 эВ. Также отметим, что в представленных расчетах учитывалось самопритяжение отрицательного иона к заряду изображения.

Основным фактором, определяющим вероятность отрицательной ионизации, является разница между уровнем Ферми металла и энергетическим положением иона. Можно видеть, что вероятность отрицательной ионизации сильно зависит от рабо-

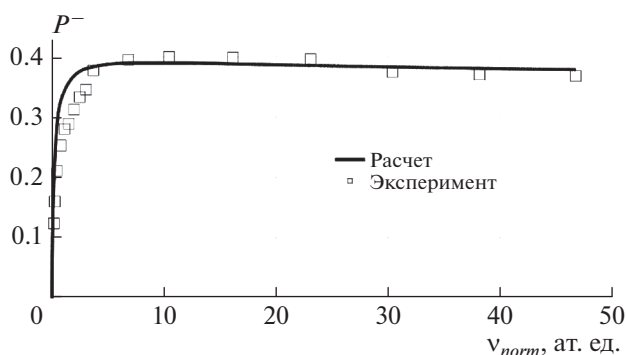


Рис. 3. Вероятность отрицательной ионизации водорода на покрытой цезием поверхности $W(110)$ в зависимости от нормальной компоненты скорости вылета. Расчеты были сделаны в соответствии с моделью, представленной в разделе 2. Экспериментальные данные взяты из [76].

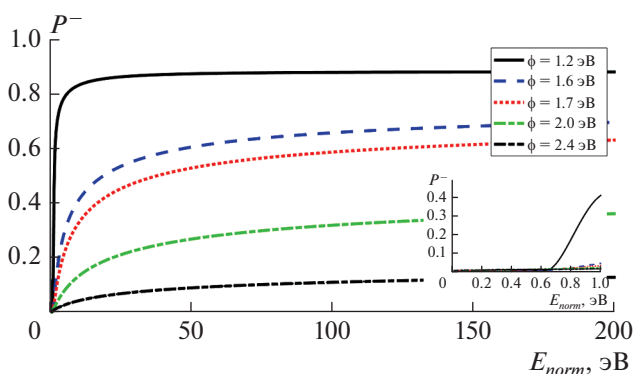


Рис. 4. Зависимость вероятности отрицательной ионизации водорода от энергии удаления от поверхности для различных значений работы выхода металла. На врезке показана пороговая энергия удаления.

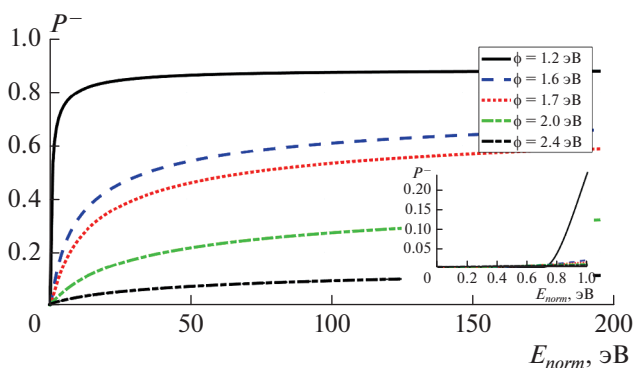


Рис. 5. Зависимость вероятности отрицательной ионизации дейтерия от энергии удаления от поверхности для различных значений работы выхода металла. На врезке показана пороговая энергия удаления.

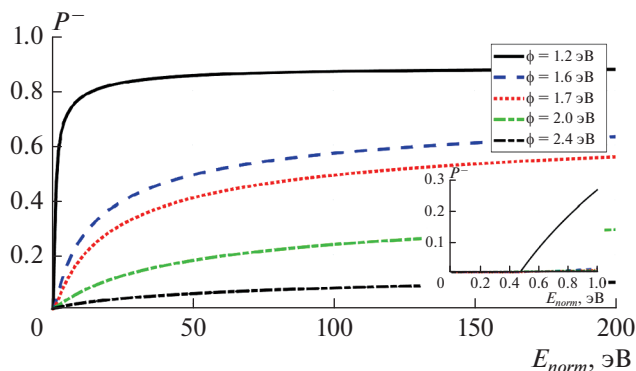


Рис. 6. Зависимость вероятности отрицательной ионизации трития от энергии удаления от поверхности для различных значений работы выхода металла. На врезке показана пороговая энергия удаления.

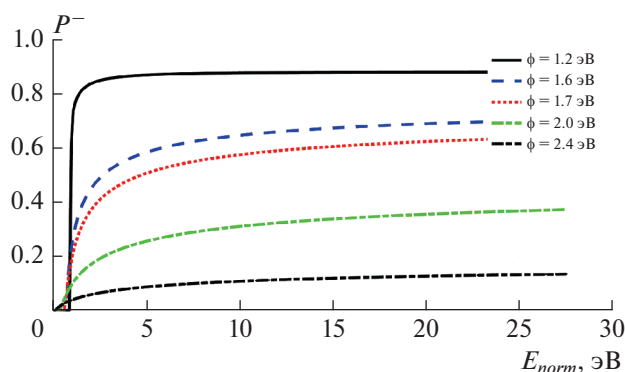


Рис. 7. Зависимость вероятности отрицательной ионизации мюония от энергии удаления от поверхности для различных значений работы выхода металла.

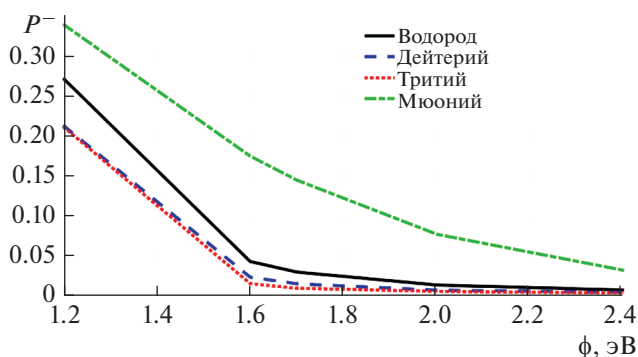


Рис. 8. Интегральная зависимость выхода различных типов отрицательных ионов от работы выхода металлической поверхности.

ты выхода металла. При сравнении с известными результатами для водорода, следует отметить, что для малых энергий (~ 10 эВ), вероятность отрицательной ионизации на $\sim 20\%$ больше, чем в работе [10], но наши результаты соответствуют результатам из работы [12].

Общей закономерностью для представленных результатов является увеличение вероятности отрицательной ионизации при увеличении скорости вылета атомной частицы, а также при уменьшении работы выхода металла. Зависимость от скорости вылета атомной частицы объясняется тем, что при увеличении скорости отлета уменьшается время взаимодействия атомной частицы с поверхностью, в результате чего уменьшается вероятность потери электрона. Зависимость от работы выхода металла объясняется тем, что при уменьшении работы выхода повышается уровень Ферми, что приводит как к увеличению равновесной заселенности ионного уровня вблизи поверхности, так и к увеличению конечной заселенности иона.

Также следует отметить наличие пороговой скорости отлета атомной частицы, ниже которой отрицательная ионизация не происходит. Если кинетическая энергия отрицательного иона меньше, чем энергия взаимодействия с зарядом изображения, то ион не может оторваться от поверхности. Из рис. 4–7 видно, что пороговое значение скорости иона зависит от его массы: наименьшее значение пороговой скорости наблюдается для ионов трития, а наибольшее для ионов мюония².

На рис. 8 показана интегральная зависимость выхода различных типов отрицательных ионов от работы выхода металлической поверхности. Интегральная вероятность рассчитывалась с учетом функции распределения вылетающих частицы по энергиям [77]. Общей закономерностью является уменьшение вероятности отрицательной ионизации с увеличением работы выхода. Это хорошо согласуется с известными экспериментальными данными и теоретическими результатами по изучению электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучены закономерности формирования отрицательных ионов водорода, дейтерия, трития и мюония, которые представляют практический интерес для создания источников отрицательных ионов в интересах термоядерного синтеза и для ускорителей. Мы представили теоретическую модель расчета вероятности отрицательной ионизации на металлических поверхностях с низкой работой выхода. Первоначально мы проанализировали существующие подходы к расчету РЭО в ходе ион-поверхностных взаимодействий. Наиболее общим подходом является модель Андерсона–Ньюнса. Однако его практическая применимость ограничена необходимостью расчета матричных

² Уменьшение пороговой энергии для мюония с увеличением работы выхода, вероятно является артефактом расчетов, связанным с дискретностью значений скоростей иона, используемых в расчетах.

элементов взаимодействия, для чего используются существенные допущения. Для медленных ионов применимо так называемое адиабатическое приближение, где предполагается, что ширина уровня атомной частицы, характеризующая эффективность электронного обмена, не зависит от энергии иона. Окончательное зарядовое состояние атомной частицы можно получить путем интегрирования полуклассического кинетического уравнения. Скорость потери и подхвата электрона пропорциональна части электронной плотности, расположенной выше и ниже уровня Ферми металла, соответственно. Мы вычисляли коэффициенты потери и подхвата электрона в k -пространстве, что позволяет учитывать эффект параллельной скорости.

Одним из ключевых факторов, определяющих окончательную отрицательную вероятность ионизации, является задание энергетического положения (уровня сродства к электрону) отрицательного иона вблизи поверхности. Простое приближение $E_a(z) = E(\infty) - 1/4z$ приводит к нереально высоким значениям вероятности ионизации и резкой зависимости вероятности ионизации от начального расстояния z_0 . В нашей модели мы предполагаем, что уровень иона является постоянным вблизи поверхности. Преимущество такого подхода заключается в том, что рассчитанная вероятность ионизации не сильно зависит от начального расстояния z_0 . Сравнение с экспериментальными данными показывает, что представленная модель количественно описывает зависимость вероятности отрицательной ионизации водорода.

Основным фактором, определяющим вероятность отрицательной ионизации, является разница между уровнем Ферми металла и энергетическим положением иона. Общей закономерностью для представленных результатов является увеличение вероятности отрицательной ионизации при увеличении скорости вылета атомной частицы, а также при уменьшении работы выхода металла. Также следует отметить наличие пороговой скорости отлета атомной частицы, ниже которой отрицательная ионизация не происходит.

Исследование частично поддержано Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 20-02-00577).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дудников В.Г. // УФН. 2019. Т. 189. С. 1315; Dudnikov V.G. // Phys. Usp. 2019. V. 62. No. 12. P. 1233.
2. Дудников В. Источники отрицательных ионов. Н.: НГУ, 2019.
3. Bacal M., Wada M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2020. V. 29. No. 3. Art. No. 033001.
4. Dudnikov V. Development and applications of negative ion sources. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics Book, 2019.
5. Dudnikov V. Development and applications of negative ion sources. Cham: Springer, 2019. P. 31.
6. Bacal M., Wada M. // Appl. Phys. Rev. 2015. V. 2. No. 2. Art. No. 021305.
7. Dudnikov V., Dudnikov A. // AIP Conf. Proc. 2018. V. 2052. Art. No. 060001.
8. Belchenko Yu., Dimov G., Dudnikov V. // Nucl. Fusion. 1974. V. 14. P. 113.
9. Дудников В.Г. Способ получения отрицательных ионов. Патент СССР № 9355182, 1974.
10. Kishinevskii M. // Zh. Tekh. Fiz. 1975. V. 45. P. 1281.
11. Janev R.K. // Surf. Sci. 1975. V. 47. P. 583.
12. Janev R.K., Vojvodic S.B. // Phys. Lett. 1980. V. 75a. P. 348.
13. Norskov J.K., Lundqvist B.I. // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. P. 5661.
14. Rasser B., Van Wunnik J.N.M., Los J. // Surf. Sci. 1982. V. 118. P. 697.
15. Bruckner B., Bauer P., Primetzhofer D. // Surf. Sci. 2020. V. 691. Art. No. 121491.
16. Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.P. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 2842.
17. Магунов А.А., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К., Уразгильдин И.Ф. // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2008. № 9. С. 93; Magunov A.A., Shestakov D.K., Gainullin I.K., Urazgildin I.F. // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron. Neutron Tech. 2008. V. 2. P. 764.
18. Obreshkov B., Thumm U. // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. Art. No. 012901.
19. Shestakov D.K., T. Polivnikova Yu., Gainullin I.K., Urazgildin I.F. // Nucl. Instrum. Meth. B. 2009. V. 267. P. 2596.
20. Amanbaev E.R., Gainullin I.K., Zyкова E.Yu., Urazgildin I.F. // Thin Solid Films. 2011. V. 519. P. 4737.
21. Meyer C., Bonetto F., Vidal R. et al. // Phys. Rev. A. 2012. V. 86. Art. No. 032901.
22. Gao L., Zhu Y., Shi Y. et al. // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. Art. No. 052705.
23. Shaw J., Zhang Y., Doerr D. et al. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. Art. No. 052705.
24. Kondo S.I. // J. Phys. Soc. Japan. 2020. V. 89. Art. No. 044706.
25. Los J., Geerlings J.J.C. // Phys. Rep. 1990. V. 190. P. 133.
26. Winter H. // Phys. Rep. 2002. V. 367. P. 387.
27. Зыкова Е.Ю., Хайдаров А.А., Иваненко И.П., Гайнуллин И.А. // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2012. № 11. С. 7; Zyкова E.Y., Khaidarov A.A., Ivanenko I.P., Gainullin I.K. // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2012. V. 6. P. 877.
28. Мамедов Н.В., Мамедов И.М. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 6. С. 863; Mamedov N.V., Mamedov I.M. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 6. P. 713.
29. Balakshin Y.V., Kozhemiako A.V., Evseev A.P. et al. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 218.
30. Shemukhin A.A., Smirnov A.M., Evseev A.P. et al. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 133.
31. Yin C., Guo Z., Gellman A.J. // J. Phys. Chem. C. 2020. V. 124. Art. No. 10605.
32. Gainullin I.K. // Surf. Sci. 2018. V. 677. P. 324.

33. Xiao Y., Shi Y., Liu P. et al. // Nucl. Instrum. Meth. B. 2019. V. 450. P. 73.
34. Gainullin I.K. // Surf. Sci. 2019. V. 681. P. 158.
35. Shaw J., Monismith D., Zhang Y. et al. // Atoms. 2020. V. 7. P. 89.
36. Iglesias-García A., Romero M.A., García E.A., Goldberg E.C. // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. Art. № 115406.
37. Gainullin I.K., Urazgildin I.F. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. Art. No. 205403.
38. Аманбаев Е.Р., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К. // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2009. № 11. С. 23; Amanbaev E.R., Shestakov D.K., Gainullin I.K. // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2009. V. 3. P. 865.
39. Gainullin I.K., Usman E.Yu., Urazgildin I.F. // Nucl. Instrum. Meth. B. 2005. V. 232. P. 22.
40. Александров А.Ф., Гайнуллин И.К., Соськин М.А. // Поверхн. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2020. № 8. С. 42; Alexandrov A.F., Gainullin I.K., Sonkin M.A. // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2020. V. 14. P. 791.
41. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. Art. No. 032712.
42. Гайнуллин И.К., Клавсюк А.Л. // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. С. 609; Gainullin I.K., Klavsyuk A.L. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2012. V. 76. P. 542.
43. Riascos V.Q., Tacca M., Vidal R. et al. // Phys. Rev. A. 2021. V. 103. Art. No. 062805.
44. Wang L., Sun G., Liu X. et al. // Nucl. Instrum. Meth. B. 2021. V. 497. P. 10.
45. Brako R., News D.M. // Rep. Progr. Phys. 1989. V. 52. P. 655.
46. Гайнуллин И.К. // УФН. 2020. V. 190. P. 950; Gainullin I.K. // Phys. Usp. 2020. V. 63. P. 888.
47. Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Lett. A. 1996. V. 218. P. 99.
48. Canario R., Borisov A.G., Gauyacq J.P., Esaulov V.A. // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. Art. No. 121401R.
49. Guillemot L., Esaulov V.A. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 4552.
50. Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.P. et al. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. Art. No. 17166.
51. Maazouz M., Borisov A.G., Esaulov V.A. et al. // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. Art. № 13869.
52. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. Art. No. 052705.
53. Liu P., Yin L., Zhang Z. et al. // Phys. Rev. A. 2020. V. 101. Art. No. 032706.
54. Hecht T., Winter H., Borisov A.G. et al. // Faraday Discuss. 2000. V. 117. P. 27.
55. Гайнуллин И.К. // Вест. МГУ. Сер. физ. и астрон. 2019 № 6. С. 33; Gainullin I.K. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2019. V. 74. P. 585.
56. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. Art. No. 022710.
57. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Comp. Phys. Comm. 2015. V. 188. P. 68.
58. Gainullin I.K. // Comp. Phys. Comm. 2017. V. 210. P. 72.
59. Majorosi S., Czirják A. // Comp. Phys. Comm. 2016. V. 208. P. 9.
60. Fu Y., Zeng J., Yuan J. // Comp. Phys. Comm. 2017. V. 210. P. 181.
61. Lüdde H.J., Horbatsch M., Kirchner T. // Eur. Phys. J. B. 2018. V. 91. P. 99.
62. Wang C.C., Ding D.J. // Chin. Phys. B. 2019. V. 28. Art. No. 083101.
63. Majorosi S., Czirják A. // Comp. Phys. Comm. 2016. V. 208. P. 9.
64. Fu Y., Zeng J., Yuan J. // Comp. Phys. Comm. 2017. V. 210. P. 181.
65. Murakami M., Kirchner T., Horbatsch M. et al. // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. Art. No. 052704.
66. Zhou S.P., Liu A.H., Liu F.C. et al. // Chin. Phys. B. 2019. V. 28. Art. No. 083101.
67. Liu Q., Liu F., Hou C. // Proc. Comput. Sci. 2020. V. 171. P. 312.
68. Dong H., Fei-Yang S., Ji-Yuan L. et al. // Acta Phys. Sinica. 2020. V. 69. No. 14. Art. No. 148501.
69. Cohen J.S., Fiorentini G. // Phys. Rev. A. 1986. V. 33. P. 1590.
70. Chulkov V., Silkin V.M., Echenique P.M. // Surf. Sci. 1999. V. 437. P. 330.
71. Jennings P.J., Jones R.O., Weinert M. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6113.
72. Kinghorn D. B., Adamowicz L. // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4589.
73. News D.M., Makoshi K., Brako R., van Wunnik J.N.M. // Phys. Scripta. 1983. V. 1983. P. 5.
74. Gainullin I.K., Dudnikov V.G. // Plasma Res. Expr. 2020. V. 2. Art. № 045007.
75. Gainullin I.K., Dudnikov V.G. // AIP Conf. Proc. 2021. V. 2373. Art. No. 070001.
76. Van Wunnik J.N.M., Gerlings J.J.C., Los J. // Surf. Sci. 1983. V. 131. P. 1.
77. Wada M., Kenmotsu T., Sasao M. // AIP Conf. Proc. 2015. V. 1655. Art. No. 020010.

Theoretical study of the probability of negative ionization of hydrogen, deuterium, tritium and muonium on metal surfaces

I. K. Gainullin^{a,*}, E. Yu. Zykova^a, V. G. Dudnikov^b

^a Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, 119992 Russia

^b Novosibirsk State University, Novosibirsk, 630090 Russia

*e-mail: ivan.gainullin@physics.msu.ru

We present a theoretical model for calculating the probability of negative ionization. A key feature of the model is that the negative ion affinity level is considered constant near the surface, so the calculated ionization probability does not strongly depend on the initial atom-surface distance. The probability of negative ionization of hydrogen, deuterium, tritium and muonium on metal surfaces with a low work function is calculated.