

ТРЕХМЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАРЯДОВОГО ОБМЕНА ИОНОВ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ

© 2019 г. *И.К. Гайнуллин¹, М.А. Сонькин²*

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Томский политехнический университет

Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (16-02-00478).

DOI: 10.1134/S0234087919040063

Ионные пучки применяются для диагностики и модификации поверхности твердых тел. Моделирование зарядового обмена ионов с поверхностью необходимо не только для понимания его фундаментальных закономерностей, но и для количественной диагностики, т.к. в большинстве экспериментальных установок регистрируются именно заряженные частицы (ионы). В силу существенной численной сложности прямого моделирования зарядового обмена, до недавнего времени применялись только приближенные одно- и двумерные методики. В последние годы авторами был создан программный код, реализующий прямое трехмерное моделирование зарядового обмена на графических вычислителях. В данной статье представлены некоторые примеры расчетов и изучен вопрос корректного задания начальных условий.

Ключевые слова: резонансный электронный обмен, ионные пучки, трехмерное моделирование, уравнение Шредингера, графические вычислители.

THREE-DIMENSIONAL MODELING OF CHARGE EXCHANGE BETWEEN IONS AND METALLIC SURFACES

I.K. Gainullin¹, M.A. Sonkin²

¹Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University

²Tomsk Polytechnic University

Ion beams are widely used for surface analysis and modification. The modeling of charge exchange between ion beams and surface is necessary for its fundamental basis investigation, as well as for quantitative diagnostics, because the charged particles (ions) are registered in the most of experimental setups. Due to significant computational complexity, until the last time only approximate 1D and 2D numerical methods were used for charge

exchange modeling. Last years the authors created computer program for direct 3D modeling of charge exchange on graphical processing units. In this paper some calculations examples are given and the problem of initial state definition is investigated.

Keywords: resonant charge transfer, ion beams, three-dimensional modeling, Schrodinger equation, graphical processing units.

1. Введение

Изучение зарядового (электронного) обмена при взаимодействии атомных частиц с поверхностью твердых тел представляет фундаментальный и прикладной интерес для нескольких областей физики и химии. Для фундаментальной науки зарядовый обмен интересен при изучении рассеяния, распыления, адсорбции и диссоциации молекул [1,2]. Практическая важность электронного обмена обусловлена различными приложениями, включая миниатюризацию полупроводниковой электроники за счет напыления тонких пленок, реактивное ионное травление, катализ, модификацию и анализ поверхности [3–11]. Электронный обмен между атомными частицами и поверхностью является важнейшим фактором для количественной диагностики элементного состава и структуры твердых тел с помощью ионных пучков в условиях сверхвысокого вакуума. Ведь в большинстве экспериментальных методик регистрируются пространственные и энергетические спектры именно заряженных атомных частиц (ионов), которые определяются двумя факторами: 1) траекториями и энергиями движения атомных частиц; 2) их конечным зарядовым состоянием [12].

В случае отсутствия энергетических ограничений, одноэлектронный процесс резонансного электронного туннелирования доминирует над остальными каналами зарядового обмена, такими как Оже-процессы и нерезонансные переходы. Поскольку для многих комбинаций атом/поверхность реализуются условия для резонансных переходов, то резонансный электронный обмен является определяющим фактором при формировании конечного зарядового состояния атомной частицы.

Резонансный электронный обмен атомных частиц с поверхностью металлов достаточно интенсивно изучался в последние десятилетия [13-16]. В большинстве исследований электронный обмен изучался для систем, состоящих из массивного металлического образца и атома или иона с одним активным (т.е. переходящим) электроном, таких как H^+ или атомы щелочных металлов. Расчет резонансного электронного обмена атомной частицы с поверхностью твердого тела основан на численном решении одноэлектронного нестационарного уравнения Шредингера [17-19]. Ключевыми мо-

ментами расчета являются 1) задание начального зарядового состояния атомной частицы; 2) задание траектории движения атомной частицы; 3) задание псевдопотенциалов, описывающих атомную частицу и твердое тело. Для описания металлических поверхностей на текущий момент широко используются 2 типа "одномерных" псевдопотенциалов (зависят только от расстояния до поверхности): потенциал Дженнингса для модели свободных электронов [20] и потенциал [21] для металлов с ограниченным движением электрона вдоль определенных направлений (projected band gap). Псевдопотенциалы для отрицательного иона водорода и атомов щелочных металлов задаются аналитическими выражениями [22,23].

Численное решение типичной задачи электронного обмена требует моделирования пространственной области объемом порядка 10^3-10^4 нм⁴ (10^9-10^{10} дискретных точек), что является технически сложной задачей, поэтому для моделирования электронного обмена ранее использовались одно- и двумерные методики [24,25], накладывающие на рассматриваемую систему условия сферической или цилиндрической симметрии. Поскольку геометрия подавляющего большинства экспериментов не обладает ни сферической, ни цилиндрической симметрией, то при применении "двумерных" методик к описанию "трехмерных" экспериментов приходится использовать ряд приближений. Так, в литературе широко используется адиабатическое приближение, когда полагают, что скорость перехода электрона между атомной частицей и металлом определяется расстоянием до поверхности и не зависит от скорости движения частицы. Далее скорость перехода электрона Γ (ширина атомного уровня) определяется путем решения серии цилиндрически-симметричных статических задач (атом закреплен над поверхностью) для разных расстояний ион-поверхность, а вероятность изменения зарядового состояния P определяется путем интегрирования кинетического уравнения ($dP/dt = -\Gamma(z)P$) вдоль траектории движения атомной частицы [26,27]. В некоторых работах решалась двумерная задача в координатах X-Z, а полученные результаты по вероятности электронного перехода умножались на некий "трехмерный фактор" [28]. Для описания экспериментов по скользящему рассеянию ионов применяется трансляционный фактор, т.е. численно решается задача нормального падения на поверхность, а при вычислении зарядового состояния уровень Ферми металла сдвигается на кинетическую энергию электрона [29,30].

В разделе 2 описываются физическая и математическая модели резонансного электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями, численный метод и его параллельная реализация на графических

вычислителях. В разделе 3.1 изучается вопрос влияния начальных условий на результаты расчета электронного обмена, а примеры расчетов приведены в разделах 3.2 и 3.3.

2. Постановка задачи и метод решения

В работе рассматривается физический процесс резонансного электронного туннелирования между атомной частицей и металлическим образцом. Наш подход основан на методе распространения волновых пакетов [31]. Он позволяет учитывать реалистичную электронную структуру металлов и неадиабатические эффекты [32-34]. Вкратце мы моделируем эволюцию волнового пакета активного электрона, который движется в заданном потенциальном рельефе, являющемся комбинацией потенциала взаимодействия электрона с атомной частицей и металлом. Подробное описание используемой физической модели приведено в [17,35].

Суть физической модели расчета вероятности электронного перехода сводится к прямому решению нестационарного уравнения Шредингера для отлетающей атомной частицы. Моделирование начинается с расстояния $z = z_f$, где z_f – расстояние пересечения энергетического положения атомной частицы¹ с уровнем Ферми в металле. Результатом моделирования является вероятность сохранения электрона на атомной частице. Начальное зарядовое состояние атомной частицы $P_0 = P(z_f)$ является параметром аппроксимации. Конечное зарядовое состояние, т.е. заселенность, получается путем умножения P_0 на вероятность сохранения зарядового состояния:

$$P_{final} = P_0(z_f) \cdot P_{calc}(z > z_f). \quad (1)$$

Резонансный электронный переход описывается нестационарным уравнением Шредингера:

$$i \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = H(t)\psi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

гамильтониан которого включает в себя оператор Лапласа и зависящий от времени трехмерный потенциал:

$$H = -\Delta / 2 - U(\mathbf{r}, t),$$

$$U(\mathbf{r}, t) = V_{ion}(\mathbf{r}) + V_{metal}(\mathbf{r}). \quad (3)$$

¹ Энергетическое положение (уровень) атомной частицы – потенциальная энергия электрона, находящегося на атомной частице. Для изолированного нейтрального атома его энергетическое положение равняется энергии ионизации.

Для ионов и металлов, рассматриваемых в работе, разработаны аналитические потенциалы [20-23]. В качестве начального состояния задается волновая функция основного состояния электрона на атомной частице. Значение волновой функции получается из решения стационарного уравнения Шредингера для изолированной атомной частицы, описываемой псевдопотенциалом. В разделе 3 данный вопрос рассмотрен более детально.

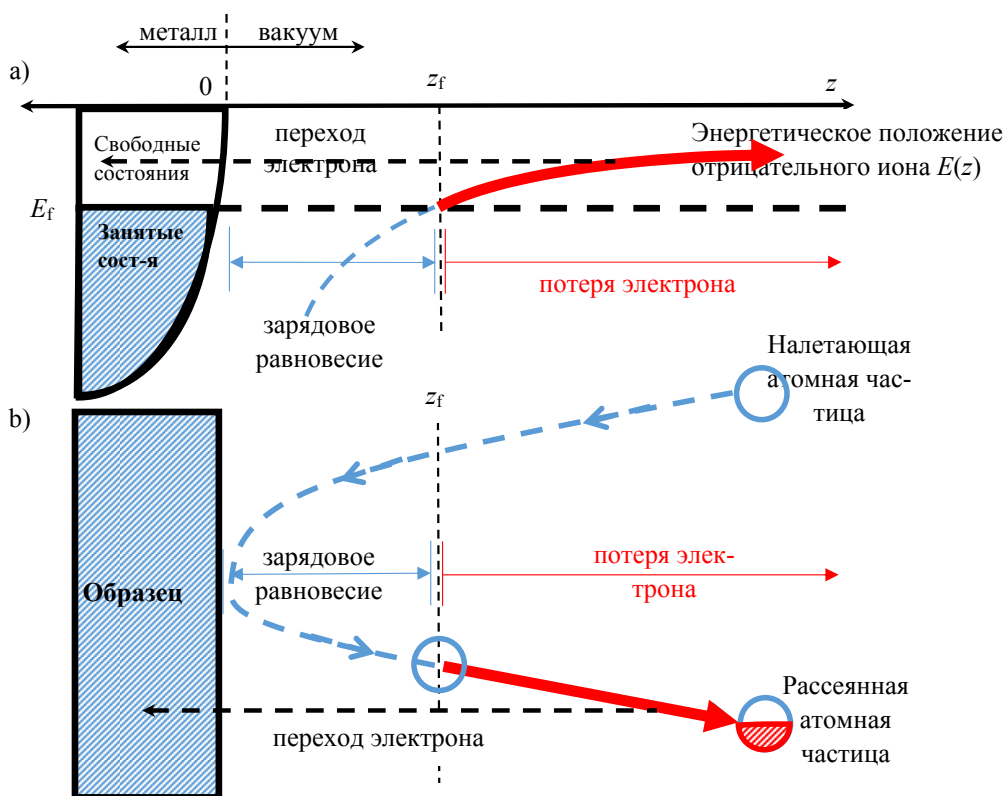


Рис.1. Иллюстрация модели расчета вероятности электронного перехода.

В работе используются нулевые граничные условия Дирихле. Для подавления отражения волновой функции от границ расчетной сетки, вблизи границ применяется мнимый поглощающий потенциал параболического вида:

$$V = 0.0025i \cdot (\text{dist}_{to\ boundary} - 20 \text{ am.ed.})^2. \quad (4)$$

Областью моделирования является прямоугольный параллелепипед (в декартовых координатах) или цилиндр при использовании цилиндрических координат. Размер расчетной области составляет $10^3 - 10^5 \text{ нм}^3$.

Для численного решения нестационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах используется явная численная схема второго порядка, известная под названием "leapfrog" [36]. Подробное описание численной схемы и ее реализации на графических вычислителях приведено в [37]. Поскольку описанная численная схема является численной схемой второго порядка, то актуален вопрос об ее точности. Результаты верификации показали, что численная ошибка после выполнения 10^6 итераций не превышает 1% (точность на каждом шаге порядка 10^{-8}), что является приемлемым результатом для изучаемых задач. Существуют явные численные схемы более высокого порядка, например, [38]. Их использование повышает точность вычислений, но сокращает производительность. Дело в том, что существенным аспектом расчетов на графических вычислителях (GPU) является оптимизация доступа к памяти вычислителя. Использование схемы 4-го порядка в два раза увеличивает объем необходимой памяти, поэтому для каждого вычислителя приходится в два раза уменьшать объем расчетной области (и, соответственно, в два раза увеличивать число задействованных графических вычислителей). В конечном итоге это приводит к уменьшению производительности расчетов. Таким образом, для рассматриваемого класса проблем (электронный обмен атомных частиц с поверхностью) явная численная схема второго порядка является оптимальной с точки зрения баланса между точностью и производительностью расчетов.

Для типовой задачи электронного обмена (атомная частица налетает на поверхность), перевод расчетов в цилиндрическую систему координат почти на порядок уменьшает количество дискретных точек (по сравнению с декартовой системой координат) за счет меньшей детализации на границах расчетной области. Основная проблема при переходе в цилиндрические координаты состоит в том, что используемая явная численная схема становится неустойчивой вблизи оси $\rho = 0$. В 2017 году была разработана гибридная численная схема для нестационарного уравнения Шредингера, в которой устраняется данная неустойчивость при сохранении высокой эффективности распараллеливания на графических вычислителях. Подробное описание гибридной численной схемы и ее реализации приведено в [39].

Вышеописанные математическая модель и численная схема реализованы в программном пакете на языке программирования C с использованием интерфейсов "CUDA extension". Для параллельных расчетов на нескольких вычислителях применяется технология MPI (Message Passing Interface) [40,41]. Подробности реализации и тестирования производительности приведены в [37,39].

Сравнение с другими программами решения нестационарного уравнения Шредингера показало, что относительная производительность разработанного программного пакета TDSE GPU Solver (в декартовых координатах) в 3 раза превышает производительность аналогичных программ [37]. Относительная производительность версии в цилиндрических координатах превышает аналоги почти на порядок [39]. Также существенным плюсом разработанного программного пакета является хорошая масштабируемость и большой предельный объем расчетной области, что позволяет моделировать электронный обмен атомных частиц с поверхностью твердых тел и наносистемами (масштабируемость многих программ-аналогов позволяет решать задачи только для "атомных" объемов).

Помимо увеличения относительной производительности, существенным преимуществом расчетов в цилиндрических координатах является уменьшение дискретных точек примерно на порядок. Соответственно на порядок уменьшается и количество требуемых вычислителей (из-за сокращения объема памяти под хранение значений волновой функции в дискретных точках). В результате моделирование одноэлектронных процессов в больших областях пространства (до 10^3 нм^3) может проводиться на обычном персональном компьютере, оборудованном графическим вычислителем. Для расчетов на суперкомпьютерах преимущество заключается в повышении порога масштабируемости. Если в декартовых координатах на 32 вычислителях обрабатывается область пространства порядка $3 \times 10^3 \text{ нм}^3$, то в цилиндрических координатах она составит порядка $3 \times 10^4 \text{ нм}^3$. С учетом данных по масштабируемости программного кода, предельный объем расчетной области оценивается как 10^5 нм^3 .

3. Результаты моделирования

В данном разделе рассмотрены некоторые примеры расчетов электронного обмена атомной частицы с металлическими поверхностями.

3.1. Влияние начальных условий. Согласно описанной физической модели расчета вероятности электронного перехода, моделирование электронного обмена начинается в точке $z = z_f$. Важным моментом является задание волновой функции отлетающей атомной частицы в начальный момент времени. В первом приближении в качестве начального значения волновой функции берется собственное состояние изолированной атомной частицы. Данное предположение логично при начальных расстояниях порядка 15 ат. ед. (когда атомная частица практически не взаимодействует с поверхностью), но требует обоснования при меньших расстояниях. Анализ эволюции вол-

новой функции показывает, что на начальном этапе взаимодействия иона с поверхностью (2-20 ат. ед., в зависимости от расстояния) происходит переходный процесс, в результате которого собственная волновая функция изолированного иона трансформируется с учетом влияния поверхности. На рис.2 сплошной линией показана заселенность H^- при отлете от поверхности $Cu(110)$. Небольшое плато (т.е. постоянная заселенность) в начальный момент времени соответствует переходному процессу, по завершению которого устанавливается динамическое равновесие с поверхностью, заключающееся в квазипостоянной скорости распада иона (уменьшение заселенности). Далее скорость распада иона плавно уменьшается при увеличении расстояния до поверхности.

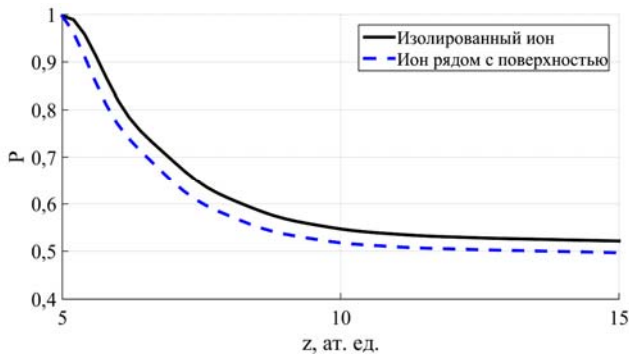


Рис.2. Оценка влияния способа задания волновой функции в начальный момент времени.

На рисунке показана сравнительная зависимость заселенности иона H^- , отлетающего от поверхности $Cu(110)$ со скоростью 0.1 ат. ед. (250 эВ). "Изолированный ион" – начальная волновая функция системы соответствует собственному состоянию изолированного иона H^- . "Ион рядом с поверхностью" – начальная волновая функция системы рассчитывается с учетом влияния поверхности.

Пунктирной линией на рис.2 показана заселенность H^- , рассчитанная с использованием начальной волновой функции, учитывающей влияние поверхности. Видно, что в данном случае переходный процесс отсутствует и скорость распада иона H^- квазипостоянна с самого начала взаимодействия. Относительная разница между заселенностями иона, рассчитанная с учетом и без учета влияния поверхности на начальное состояние, составляет менее 6%. Заметим, что модельный расчет проведен для нижнего диапазона энергий иона (250 эВ), при увеличении энергии относительная разница между заселенностями иона, рассчитанная с учетом и без учета влияния поверхности на начальное состояние, несколько уменьшается (до 5% в случае скорости 0.15 ат. ед.). Однако изменение относительной разницы крайне невелико, поэтому можно говорить о том, что задание начальной волновой функ-

ции с учетом влияния поверхности приводит к постоянной поправке при вычислении заселенности иона. Данную поправку можно учитывать при моделировании электронного обмена, но существенного влияния на полученные в работе результаты она не оказывает.

С точки зрения моделирования экспериментов с помощью вышеописанной физической модели расчета вероятности электронного перехода способ задания начальной волновой функции не играет значимой роли. Действительно, конечное зарядовое состояние получается путем умножения $P_0=P(z_f)$ на вероятность сохранения зарядового состояния. Следовательно, небольшое изменение вероятности сохранения зарядового состояния за счет более корректного задания начальных условий, будет "компенсироваться" небольшим изменением параметра аппроксимации $P_0=P(z_f)$.

3.2. Электронный обмен в наносистемах. Электронный обмен в наносистемах активно изучался авторами в последние годы [42-48]. В данном разделе рассмотрена модельная задача перехода электрона с иона H^+ на тонкую островковую пленку, имеющую форму диска. Принципиальным отличием электронного обмена с наносистемами от электронного обмена с массивным образцом является то, что вследствие конечного размера наносистем движение электрона вдоль одного или нескольких направлений ограничено, а энергия его движения вдоль данных направлений квантуется. Таким образом, электронный обмен описывается взаимодействием с несколькими дискретными уровнями энергии электрона в наносистеме. Общей закономерностью перехода электрона с атомной частицы в наносистему является иерархическая последовательность заполнения дискретных уровней электрона в наносистеме: вначале проявляется дискретность в направлении электронного перехода (т.е. перпендикулярном поверхности), а затем в направлении, параллельном поверхности наносистемы. Пространственное распределение плотности активного электрона в наносистеме является суперпозицией нескольких релевантных дискретных уровней энергии и движущейся части волнового пакета (рис.3).

В асимметричном случае наблюдается интересный феномен – квантовые вихри (рис.4). Из рисунка видно, что вблизи точек $x \sim -3.5$ ат. ед. и $y = \pm 12$ ат. ед. электронный ток образует вращающиеся структуры, которые и называются квантовыми вихрями. Квантовые вихри представляют определенный интерес для фундаментальной науки и об их формировании сообщалось ранее [49]. Существенным отличием в рассматриваемом случае является то, что квантовые вихри наблюдаются для статической задачи (т.е. гамильтониан в нестационарном уравнении Шредингера не зависит от времени).

Следует отметить, что наблюдение квантовых вихрей в статической системе является очень интересным результатом, который не может быть получен с помощью двумерных расчетов. В общем случае можно сказать, что время и место образования квантовых вихрей определяется расположением атомной частицы и локализацией собственных состояний в наносистеме. Однако закономерности формирования квантовых вихрей и их эволюции нуждаются в дальнейшем изучении.

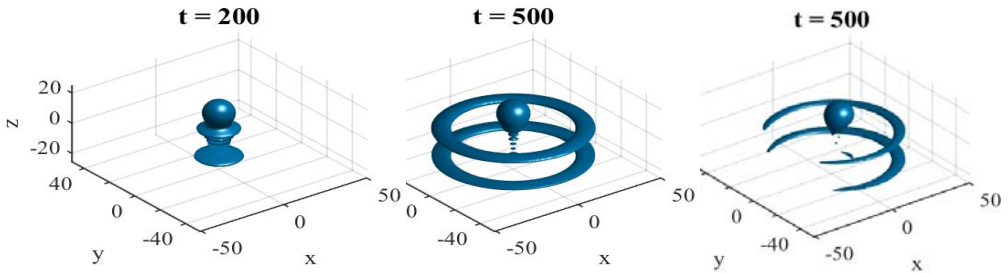


Рис.3. Изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени при взаимодействии иона H^+ с пленкой Al радиусом 50 ат. ед. и толщиной 15 ат. ед. Расстояние ион-пленка 12 ат. ед. Слева и по центру ион находится на оси симметрии, справа смещен на 5 ат. ед.

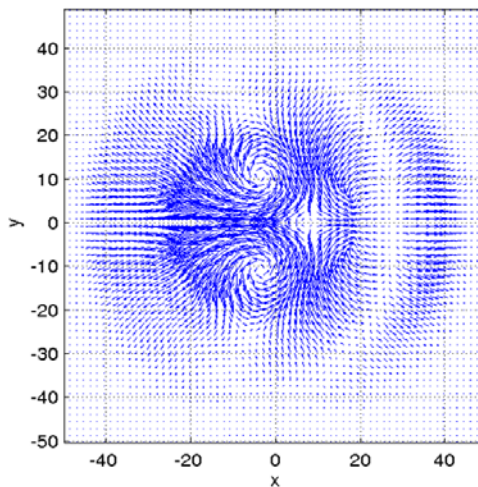


Рис.4. Иллюстрация квантовых вихрей, возникающих в асимметричном случае ($X=5$ ат. ед.). На рисунке показан электронный ток (поток вероятности), усредненный по координате z в момент времени 1500 ат. ед.

3.3. Моделирование экспериментов. В данном разделе модель расчета вероятности электронного перехода применяется для прямого моделирования экспериментов по зависимости электронного обмена от угла вылета

атомной частицы. Следует отметить, что в силу трехмерной геометрии данной задачи, она не может быть промоделирована напрямую с помощью одно- и двумерных численных методик. В рассматриваемых экспериментах [50] производится сравнение угловой зависимости фракции выхода ионов H^- при рассеянии на поверхностях $Ag(111)$ и $Ag(110)$. В оригинальной статье расчеты сделаны только для поверхности со свободным движением электронов $Ag(110)$, поскольку используемая одномерная методика не предназначена для моделирования электронного обмена с поверхностью металлов, где движение электрона ограничено.

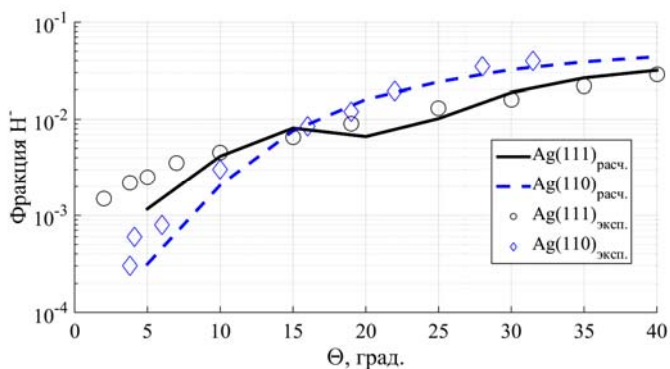


Рис.5. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [50]. На рисунке показана фракция выхода H^- как функция угла выхода (от поверхности). Энергия первичного пучка H^+ составляет 1 кэВ.

На рис.5 показаны результаты трехмерных расчетов для обеих поверхностей. Общей закономерностью является увеличение фракции выхода H^- с увеличением угла (от поверхности). Полученная закономерность является логичной: при увеличении угла выхода уменьшается время взаимодействия и, следовательно, уменьшается вероятность электронного перехода (процент электронной плотности, перешедшей с атомной частицы на поверхность). Более интересной особенностью представленных экспериментов является пересечение кривых для $Ag(110)$ и $Ag(111)$ вблизи угла 15° . Для больших углов (меньшее время взаимодействия) меньшая фракция выхода H^- для поверхности $Ag(111)$ обусловлена большей эффективностью электронного перехода. Но для меньших углов (большее время взаимодействия) становятся значимыми неадиабатические эффекты электронного обмена с поверхностью $Ag(111)$ – в силу блокировки распространения вдоль нормали к поверхности, электрон частично отражается в обратном направлении и переходит обратно на атомную частицу. В результате эффективность электронного перехода (распада иона H^-) уменьшается по сравнению со случаем $Ag(110)$.

Из рис.5 можно заметить, что результаты расчетов достаточно хорошо воспроизводят экспериментальные данные и "чувствуют разницу" между адиабатическим и неадиабатическим случаем. Значение единственного параметра аппроксимации P_0 равно 0.09 в обоих случаях. Следует отметить, что представленные расчеты дают значительно меньшую фракцию выхода ионов H^- в области малых углов (большое время взаимодействия).

4. Заключение

В работе описана методика компьютерного моделирования процессов резонансного электронного обмена атомных частиц с металлическими поверхностями. Моделирование электронных переходов производится путем решения нестационарного одноэлектронного уравнения Шредингера в относительно большой расчетной области. Следует подчеркнуть, что для решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера недостаточно просто использовать стандартные программы на современных вычислительных мощностях, но надо обеспечить эффективное использование ресурсов и масштабируемость. Специально для этого была разработана гибридная численная схема, основанная на методе конечных разностей в цилиндрических координатах. Основная часть вычислений производится явным образом, но вблизи оси $\rho = 0$ для устранения неустойчивости применяются неявные расчеты. Был создан программный пакет, реализующий эффективное распараллеливание расчетов на графических вычислителях за счет использования явной (гибридной) схемы. Производительность программного пакета в несколько раз превышает аналоги, существующие для молекулярных масштабов, а поддерживаемый размер расчетной области до 10^5 нм^3 делает его уникальным инструментом для моделирования задач электронного обмена.

Был исследован вопрос корректного задания волновой функции системы в начальный момент времени. Показано, что относительная разница между конечными зарядовыми состояниями атомной частицы, рассчитанными с учетом и без учета влияния поверхности на начальное состояние, составляет менее 6%. С точки зрения моделирования экспериментов с помощью вышеописанной модели расчета вероятности электронного перехода, способ задания начальной волновой функции не играет значимой роли, т.к. "компенсируется" небольшим изменением параметра аппроксимации.

С помощью разработанной методики компьютерного моделирования электронного обмена был изучен переход электрона с отрицательного иона на островковую металлическую пленку. Показано, что общей закономерностью является иерархическая последовательность заполнения дискретных уровней электрона в наносистеме: вначале проявляется дискретность в на-

правления электронного перехода (т.е. перпендикулярном поверхности), а затем в направлении, параллельном поверхности наносистемы. Также было продемонстрировано возникновение квантовых вихрей.

Представленная модель расчета вероятности электронного перехода была применена для моделирования экспериментов по электронному обмену. Продемонстрировано количественное совпадение расчетов с экспериментальными данными по зависимости вероятности образования иона H^- от угла вылета иона при рассеянии на различных поверхностях. Трехмерная расчетная методика позволяет проводить прямое моделирование экспериментов без использования адиабатического приближения. Благодаря этому она "улавливает" неадиабатические эффекты, которые проявляются в относительно небольшой разнице в вероятности образования H^- на поверхностях $Ag(111)$ и $Ag(110)$.

И.К. Гайнуллин благодарит проф. А.Ф. Александрова и проф. М.В. Кузелева за ценные замечания при обсуждении работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ю.В. Мартыненко*. К теории распыления монокристаллов // Физика твердого тела, 1964, т. 3529, с.2003;
Iu.V. Martynenko. К теории распыления монокристаллов // Fizika tverdogo tela, 1964, t.3529, s.2003.
2. *В.Е. Юрасова, В.С. Черныш, М.В. Кувакин, Л.Б. Шелякин*. Изменение распыления монокристалла при переходе через точку Кюри // Письма в ЖЭТФ, 1975, т.21, №3, с.197;
V.E. Yurasova, V.S. Chernysh, M.V. Kuvakin, L.B. Shelyakin. Change in the sputtering of single-crystal nickel on going through the Curie point // JETP Letters, 1975, v.21, №3, p.79-92.
3. *J. Los, J.J.C. Geerlings*. Charge exchange in atom-surface collisions // Physics reports, 1990, v.190, №3, p.133-190.
4. *J.P. Gauyacq, A.G. Borisov, D. Teillet-Billy*. In Formation/Destruction of Negative Ions in Heavy Particle-Surface Collisions // ed. by Esaulov V. A. – Cambridge University Press, 1996.
5. *H. Chakraborty, T. Niederhausen, U. Thumm*. Resonant neutralization of H^- near Cu surfaces: Effects of the surface symmetry and ion trajectory // Physical Review A, 2004, v.70, №5, p.052903.
6. *E. Marenkov, V. Kurnaev, A. Lasa, K. Nordlund*. On the molecular effect in hydrogen molecular ions penetration through thin films // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2012, v.269, №9, p.876-880.
7. *П.А. Карасев, К.В. Карабешкин, А.И. Титов, В.Б. Шилов, Г.М. Ермолаева, В.Г. Маслов, А.О. Орлова*. Нелинейный оптический эффект при облучении GaN малыми клас-

- терными ионами // Физика и техника полупроводников, 2014, т. 48, №4, с.462-466;
P.A. Karaseov, K.V. Karabeshkin, A.I. Titov, V.B. Shilov, G.M. Ermolaeva, V.G. Maslov, A.O. Orlova. Nonlinear optical effect upon the irradiation of GaN with cluster ions // Semiconductors, 2014, v.48, №4, p.446-450.
8. *N.N. Andrianova, A.M. Borisov, E.S. Mashkova, V.I. Shulga.* Influence of surface corrugation on the sputtering of carbon materials under high-fluence ion bombardment // Journal of Clinical Investigation, 2016, v.10, p.412.
 9. *V.V. Evstifeev, I.V. Ivanov.* Computer simulation of Cs⁺ ion scattering from a W (100) surface // Surface Science, 1989, v.217, №1-2, p.L373-L376.
 10. *A. Tolstogousov, S. Daolio, C. Pagura.* Hyperthermal and low-energy Ne⁺ scattering from Au and Pt surfaces // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2001, v.183, №1-2, p.116-127.
 11. *A. Tolstogousov, S. Daolio, C. Pagura.* Evaluation of inelastic energy losses for low-energy Ne⁺ ions scattered from aluminum and silicon surfaces // Surface science, 1999, v.441, №1, p.213-222.
 12. *I.K. Gainullin.* Slow ion scattering by crystal surfaces and nanostructures // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2012, v.6, p.122-126.
 13. *I.K. Gainullin, E.Yu. Usman, Y. W. Song, I.F. Urazgil'din.* Electron-exchange processes between hydrogen negative ion and thin aluminum films // Vacuum, 2003, v.72, p.263-268.
 14. *A.R. Canario et al.* Nonadiabatic effects in atom-surface charge transfer // Physical Review B, 2005, v.71, №12, p.121401.
 15. *I.K. Gainullin, E.Y. Usman, I.F. Urazgil'din.* Electron exchange between hydrogen ion and thin disk: Quantum-size effect observation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2005, v.232, №1, p.22-26.
 16. *A.A. Magunov, D.K. Shestakov, I.K. Gainullin and I.F. Urazgil'din.* Quantum size effect during the electron exchange between a negative hydrogen ion and a cluster of aluminum atoms. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2008, v.2, №5, p.764-767.
 17. *I.K. Gainullin.* Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces // Physical Review A, 2017, v.95, №5, p.052705.
 18. *I.K. Gainullin, V.A. Khodyrev,* Quantum-hydrodynamic approach to the problem of electron exchange between atomic particles and nanosystems // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2011, №6, p.1126-1129.
 19. *И.К. Гайнуллин, А.Л. Клавсюк.* Подхват электрона при столкновении протона с атомом водорода // Известия РАН. Серия физическая, 2012, т.76, №5, с.609-609;
I.K. Gainullin, A.L. Klavsyuk. Electron capture in the collision of a proton with a hydrogen atom // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2012, v.76, №5, p. 542-545.
 20. *P.J. Jennings, R.O. Jones, M. Weinert.* Surface barrier for electrons in metals // Physical Review B, 1988, v. 37, №11, p. 6113.
 21. *E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique.* Image potential states on metal surfaces: binding energies and wave functions // Surface science, 1999, v.437, №3, p.330-352.
 22. *J.N. Bardsley.* Pseudopotentials in atomic and molecular physics. – Univ. of Pittsburgh, 1974.
 23. *J.S. Cohen, G. Fiorentini.* Stripping of H⁻ in low-energy collisions with antiprotons: Classical-trajectory Monte Carlo calculation // Physical Review A, 1986, v.33, №3, p.1590.
 24. *A.G. Borisov, D. Teillet-Billy, J.P. Gauyacq, H. Winter, G. Diercks* // Phys. Rev. B, 1996, v.54, №17, p.166.

25. B. Bahrim, B. Makarenko, J.W. Rabalais. Band gap effect on H⁻ ion survival near Cu surfaces // *Surface science*, 2005, v.594, №1, p.62-69.
26. L.Y. Ming, N.D. Lang. Direct evidence of electron tunneling in the ionization of sputtered atoms // *Physical Review Letters*, 1983, v.50, №2, p.127.
27. A. Henriët, F. Masnou-Seeuws. Model potential calculations for the ground, excited and Rydberg 2Σ states of Li₂⁺, Na₂⁺ and K₂⁺: Core polarization effects // *Chemical physics letters*, 1983, v.101, №6, p.535-540.
28. H. Chakraborty, T. Niederhausen, U. Thumm. Effects of the surface Miller index on the resonant neutralization of hydrogen anions near Ag surfaces // *Physical Review A*, 2004, v.69, №5, p.052901.
29. J.N.M. Van Wunnik et al. Effect of parallel velocity on charge fraction in ion-surface scattering // *Surface Science*, 1983, v.126, №1-3, p.618-623.
30. A.G. Borisov, D. Teillet-Billy, J.P. Gauyacq. Dynamical resonant electron capture in atom surface collisions: H⁻ formation in H-Al (111) collisions // *Physical review letters*, 1992, v.68, №18, p.2842.
31. V.A. Ermoshin, A.K. Kazansky. Wave packet study of H⁻ decay in front of a metal surface // *Physics Letters A*, 1996, v.218, №1-2, p.99-104.
32. H. Winter. Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence // *Physics Reports*, 2002, v.367, №5, p.387-582.
33. A.G. Borisov, A.K. Kazansky, J.P. Gauyacq. Finite time effect in the charge transfer process during an ion-metal surface collision // *Physical review letters*, 1998, v.80, №9, p.1996.
34. J.P. Gauyacq, A.G. Borisov. Dynamics of Resonant Electron Transfer in the Interaction Between an Atom and a Metallic Surface // *Springer Series in Chemical Physics*, 2007, 83. 87-109. 10.1007/978-3-540-34460-5_4.
35. I.K. Gainullin. Towards quantitative LEIS with alkali metal ions // *Surface Science*, 2018, v.677, p.324-332.
36. C. Leforestier et al. A comparison of different propagation schemes for the time dependent Schrödinger equation // *Journal of Computational Physics*, 1991, v.94, №1, p.59-80.
37. I.K. Gainullin, M.A. Sonkin. High-performance parallel solver for 3D time-dependent Schrödinger equation for large-scale nanosystems // *Computer Physics Communications*, 2015, v.188, p.68-75.
38. T. Iitaka. Solving the time-dependent Schrödinger equation numerically // *Physical Review E*, 1994, v.49, №5, p.4684.
39. I.K. Gainullin. High-performance GPU parallel solver for 3D modeling of electron transfer during ion-surface interaction // *Computer Physics Communications*, 2017, v.210, p.72-78;
40. I. Foster. Designing and building parallel programs. – Boston: Addison Wesley Publishing Company, 1995, v.78.
41. P. Micikevicius. 3D finite difference computation on GPUs using CUDA // *Proceedings of 2nd workshop on general purpose processing on graphics processing units. – ACM*, 2009, p.79-84.
42. E.R. Amanbaev, I.K. Gainullin, E.Y. Zyкова, I.F. Urazgildin. Electron exchange between atomic particle and thin metal island films // *Thin Solid Films*, 2011, v.519, №15, p.4737-4741.
43. I.K. Gainullin, M.A. Sonkin. Three-dimensional effects in resonant charge transfer between atomic particles and nanosystems // *Physical Review A*, 2015, v.92, №2, p.022710.

44. D.K. Shestakov, I.K. Gainullin, I.F. Urazgil'din. Features of the electron exchange under grazing scattering of H^- ions from a thin aluminum disk // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2009, v.3, №1, p.33-37.
45. D.K. Shestakov, T.Yu. Polivnikova, I.K. Gainullin, I.F. Urazgildin. Electron exchange between an H^- ion and a spherical cluster of aluminum atoms // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2009, v.267, №16, p.2596-2600.
46. E.R. Amanbaev, D.K. Shestakov, I.K. Gainullin. Features of electron exchange under grazing scattering of negative hydrogen ions by a spherical cluster of aluminum atoms // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2009, v.3, №6, p.865.
47. I.K. Gainullin, I.F. Urazgildin. Quantum size effect in the electron exchange between a H^- ion and a thin metal disk // Physical Review B, 2006, v.74, №20, p.205403.
48. E.Yu. Zykova, A.A. Khaidarov, I.P. Ivanenko, I.K. Gainullin. Formation of aluminum island films under electron irradiation of a sapphire surface // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2012, v.6, №6, p.877-881.
49. J.H. Macek et al. Origin, Evolution, and Imaging of Vortices in Atomic Processes // Physical review letters, 2009, v.102, №14, p.143201.
50. L. Guillemot, V.A. Esaulov. Interaction time dependence of electron tunneling processes between an atom and a surface // Physical review letters, 1999, v.82, №22, p.4552.

Поступила в редакцию 28.05.18

После доработки 28.05.18

Принята к публикации 19.11.18