

УДК 537.534

ТРЕХМЕРНОЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ОБМЕНА МЕЖДУ ИОНОМ H^- И ПОВЕРХНОСТЬЮ $Al(001)$, ПОКРЫТОЙ АДсорБАТОМ Li^+/Na^+

© 2022 г. Ю. А. Мелкозерова^а, И. К. Гайнуллин^{а, *}

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Москва, 119992 Россия

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

Поступила в редакцию 26.01.2022 г.

После доработки 18.03.2022 г.

Принята к публикации 18.03.2022 г.

Изучены особенности резонансного электронного обмена между ионом H^- и поверхностью $Al(001)$, на которой находился атом адсорбата Li^+/Na^+ . Для моделирования использована трехмерная реализация метода распространения волновых пакетов. Поверхность $Al(001)$ описывали псевдопотенциалом, полученным с помощью теории функционала плотности. Была рассмотрена модельная статическая задача. В результате анализа функции заселенности иона H^- , динамики электронной плотности и скорости туннелирования установлено, что существуют периоды времени, когда электрон туннелирует обратно от адсорбата к иону.

Ключевые слова: взаимодействие ионов с поверхностью, электронный обмен, компьютерное моделирование, трехмерные расчеты, атомная структура.

DOI: 10.31857/S1028096022110140

ВВЕДЕНИЕ

Ионные пучки широко используются для диагностики твердых тел, разработки функциональных покрытий, контролируемой модификации поверхности, лечения рака и других задач, связанных с анализом и изменением свойств физических объектов на атомном уровне [1–15]. Активно исследуется резонансный электронный обмен при рассеянии ионных пучков и при распылении поверхности, т.е. в случаях одноэлектронного туннелирования через потенциальный барьер между атомом и поверхностью при сохранении энергии электрона. Резонансный электронный обмен имеет фундаментальное и практическое значение для анализа поверхности, реактивной способности поверхности и катализа, а также для создания источников пучков отрицательных ионов и других областей физики и химии [16–22].

Метод рассеяния медленных ионов обладает наилучшей поверхностной чувствительностью [23–27]. При анализе состава поверхности могут возникнуть значительные ошибки, если не рассматривать или неправильно учитывать нейтрализацию ионов [28]. В методе рассеяния медленных ионов часто используют ионы именно щелочных металлов, поскольку их нейтрализация вблизи металлических поверхностей происходит

резонансно [29]. Так же резонансно происходит отрицательная ионизация большинства атомов, включая водород и дейтерий. По этой причине резонансный электронный обмен важен при анализе поверхности с помощью метода рассеяния медленных ионов [30–34]. На данный момент имеются теоретические модели описания резонансного электронного обмена для металлических поверхностей, которые согласуются с экспериментальными данными [35–57].

В зависимости от типа металлической поверхности обмен может протекать в двух различных режимах. В случае поверхностей, описываемых моделью свободных электронов (например, Al или $Ag(110)$), электрон распространяется по нормали к поверхности вглубь металла, и осуществляется резонансный электронный обмен с трехмерными объемными состояниями металла. В случае поверхностей с ограниченным движением электрона (например, $Ag(111)$ или $Cu(100)$) электрон распространяется вдоль поверхности, так как распространение по нормали блокируется, и резонансный электронный обмен осуществляется через двумерные поверхностные зарядовые состояния изображения (image states) [54].

С точки зрения практического применения представляет интерес резонансный электронный обмен с неоднородными поверхностями. К примеру, метод рассеяния медленных ионов из-за

своей предельной поверхностной чувствительности незаменим для определения концентрации адсорбата на поверхности. Однако у данного метода есть недостаток – точный количественный анализ затруднен. Изучение резонансного электронного обмена важно для получения более точных количественных оценок, полученных методом рассеяния медленных ионов, при анализе поверхностей, покрытых адсорбатом [58–60].

Различают локальное и нелокальное влияние адсорбатов на резонансный электронный обмен при столкновениях атомов с поверхностью. При нелокальном эффекте изменяется работа выхода металла вследствие покрытия поверхности адсорбатами, поэтому вероятность переноса электрона также меняется. Нелокальный эффект достаточно хорошо изучен теоретически [21, 61]. При локальном эффекте изменяется локальный электростатический потенциал вследствие присутствия атома адсорбата. Из-за необходимости применения трехмерных численных методов локальный эффект изучен гораздо меньше.

Для расчета вероятности туннелирования электрона часто используется так называемое адиабатическое приближение, в котором предполагается, что скорость туннелирования электрона не зависит от энергии и текущей заселенности уровня атома [54]. Конечное зарядовое состояние снаряда может быть получено интегрированием полуклассического кинетического уравнения. Несмотря на его простоту, многие экспериментальные данные и важные закономерности электронного обмена, в том числе при скользящем рассеянии и нейтрализации многозарядных ионов, были объяснены с помощью адиабатического приближения и кинетического уравнения [29, 36, 37]. Общий подход к описанию резонансного электронного обмена при рассеянии ионов на поверхности металла основан на решении уравнения с гамильтонианом Андерсона–Ньюнса [16, 18]. Однако практическая применимость модели Андерсона–Ньюнса ограничена необходимостью расчета матричных элементов взаимодействия, для чего используются существенные допущения, в частности адиабатическое приближение.

В последние десятилетия был разработан метод распространения волновых пакетов, который был применен ко многим задачам резонансного электронного обмена [41, 62–69]. Поскольку этот метод не использует адиабатическое приближение, он может быть применен к исследованию неадиабатических эффектов обмена [53]. Еще одним преимуществом метода распространения волновых пакетов является то, что он позволяет визуализировать пространственное распределение электронов. Насколько известно, из-за отсутствия трехмерной реализации неадиабатических методов моделирования резонансного электронного обмена трехмерные неадиабатические эффекты обмена с адсорбатами ранее теоретически не исследовали.

В настоящей теоретической работе представлено модельное исследование резонансного электронного обмена между ионом H^- и поверхностью $Al(001)$. В качестве адсорбатов брали Na^+ и Li^+ . Для удобства была использована атомарная система единиц, где $m_e = e = \hbar = 1$ ат. ед., 1 ат. ед. расстояния равна 0.53 \AA . Энергия дана в эВ относительно уровня вакуума ($E_v = 0$).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

В [28, 56, 70–73] можно найти описание теоретической модели и численных методов, использованных в настоящем исследовании. В работе изучен распад состояния иона H^- вблизи поверхности металла. Анион водорода рассматривается как водородоподобный атом, состоящий из одного активного электрона и нейтрального атомного остова. Используем трехмерную реализацию метода распространения волновых пакетов [74, 75], с помощью которого вычислим эволюцию волнового пакета активного электрона в составном потенциале, создаваемом поверхностью и атомной частицей. Иллюстрация исследуемой задачи представлена на рис. 1. Таким образом, численно решим нестационарное уравнение Шредингера с известными начальными условиями [76–80]:

$$i \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + U(r, t) \right) \Psi(r, t), \quad (1)$$

$$\Psi(r, 0) = \Psi_0(r),$$

где $U(r, t) = V_{e-ion}(r, t) + V_{e-surf}(r) + V_{e-ads}(r)$ – зависящий от времени потенциал, воздействующий на активный электрон, $V_{e-ion}(r, t)$ описывает взаимодействие между электроном и снарядом, $V_{e-surf}(r)$ – взаимодействие электрона с поверхностью металла и $V_{e-ads}(r)$ – взаимодействие с адсорбатом. В теоретических исследованиях в качестве частицы рассматривают атом или ион с одним активным электроном (в данном случае ион водорода H^-) [81], ее можно смоделировать с помощью аналитического псевдопотенциала [82, 83]. Псевдопотенциал металлической поверхности, содержащей адсорбаты, находится с помощью теории функционала плотности. В работе адсорбат расположен на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью $Al(001)$.

Численное решение уравнения Шредингера дает зависимость волновой функции туннелирующего электрона от координат и времени $\Psi(r, t)$. Проекция волновой функции на начальное состояние $\Psi_0(r)$ дает амплитуду вероятности того, что волновой пакет останется в начальном состоянии, или автокорреляционную функцию:

$$A(t) = \langle \Psi_0(r) | \Psi(r, t) \rangle. \quad (2)$$

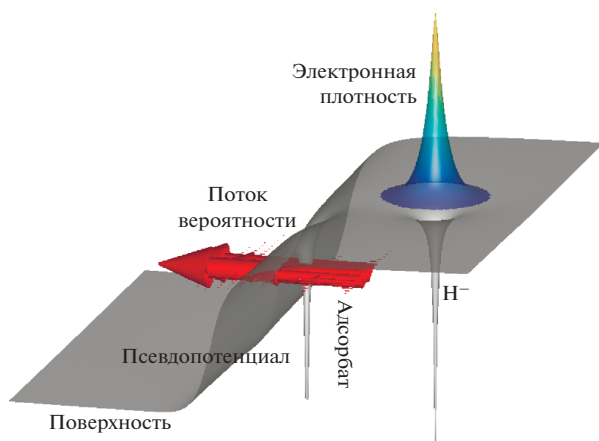


Рис. 1. Иллюстрация задачи резонансного электронного обмена между атомом и поверхностью металла. Потенциал создают поверхность, адсорбат и атом.

Квадрат модуля этой функции дает вероятность исходного состояния

$$P(t) = |A(t)|^2. \quad (3)$$

Ширина уровня иона $\Gamma(Z)$, характеризующая скорость резонансного электронного обмена, рассчитывается из следующего приближения:

$$P(t) = \exp(-\Gamma t). \quad (4)$$

Следует отметить, что в большинстве случаев имеет место так называемое “экспоненциальное затухание” [54]. Следовательно, $\Gamma(Z)$ легко вычислить из линейной аппроксимации $\ln(P(t))$ [56, 72].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Влияние расстояния между ионом и поверхностью на резонансный электронный обмен

Исследуем распад иона водорода на поверхности при различных расстояниях между ионом и поверхностью. Сравним резонансный электронный обмен в случае чистой поверхности и в случае, когда адсорбат расположен на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью.

На рис. 2 показана динамика резонансного электронного обмена для чистой и покрытой адсорбатом Li^+ и адсорбатом Na^+ поверхности $\text{Al}(001)$. В обоих случаях электрон туннелирует по норма-

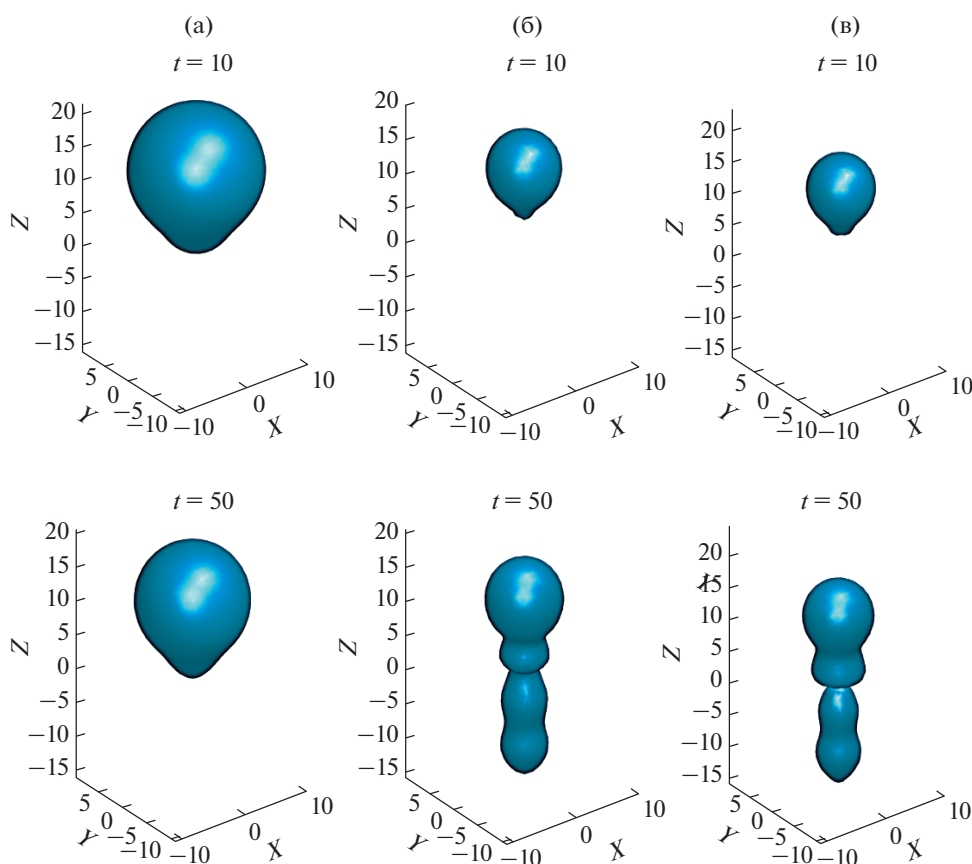


Рис. 2. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена в случае поверхности $\text{Al}(001)$: а – чистой; б – покрытой адсорбатом Li^+ ; в – Na^+ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 10 и 50 ат. ед. Ион H^- расположен над адсорбатом.

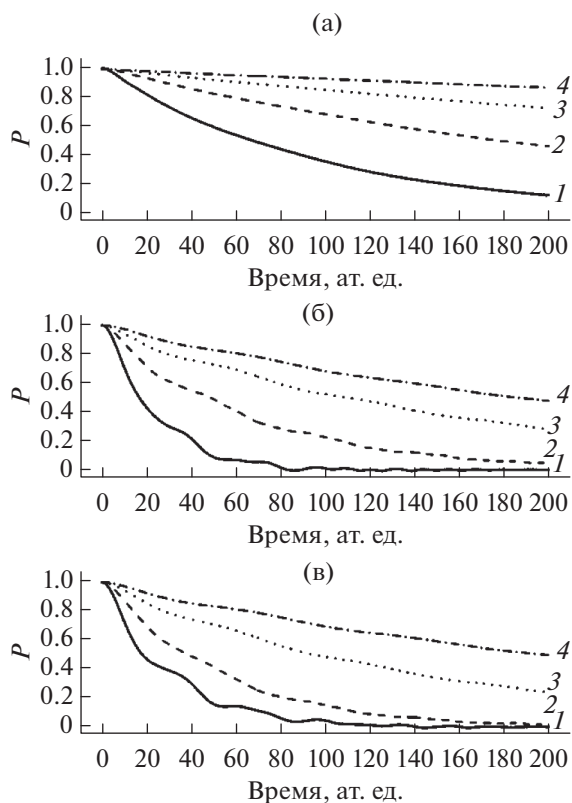


Рис. 3. Зависимость заселенности P иона H^- от времени для расстояний 8 (1), 10 (2), 12 (3), 14 ат. ед. (4) между ионом и чистой поверхностью Al(001) (а), покрытой адсорбатом Li^+ (б) и Na^+ (в).

ли к поверхности и продолжает движение в этом направлении. Такое поведение типично для поверхностей, описываемых моделью свободных электронов, таких как Al(001) [29, 54]. Следует отметить, что в случае поверхности, покрытой адсорбатом, электроны туннелируют к поверхности через адсорбат. Сначала электрон туннелирует к атому адсорбата. Затем он частично туннелирует как в обратном направлении к иону, так и на поверхность, и возникают осцилляции между ионом и атомом адсорбата.

На рис. 3 показана зависимость заселенности иона H^- от времени. В случае чистой поверхности заселенность P экспоненциально убывает, что согласуется с теорией [29, 54]. Однако в случае поверхности, покрытой адсорбатом, P демонстрирует колебания во времени, что в большей степени проявляется при малых расстояниях между ионом и поверхностью. Колебания заселенности означают, что в течение определенных периодов времени электрон туннелирует обратно к иону. После промежуточного заселения атома адсорбата электрон может туннелировать как в металл, так и обратно к иону. Аналогичные осцилляции P

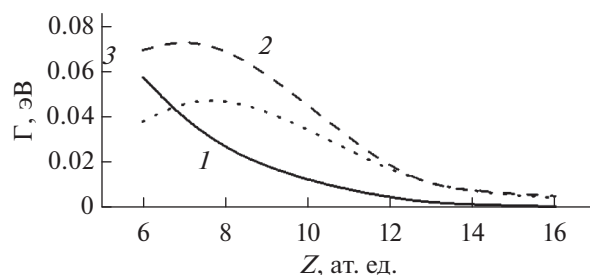


Рис. 4. Зависимость средней скорости резонансного электронного обмена Γ (ширины уровня иона) от расстояния Z между ионом и поверхностью Al(001): чистой (1); покрытой адсорбатом Li^+ (2); Na^+ (3).

наблюдаются в случае резонансного электронного обмена между двумя атомами [84].

Ширина уровня иона $H^- \Gamma(Z)$, определяющая скорость обмена, в случае чистой поверхности экспоненциально уменьшается с увеличением расстояния между ионами и поверхностью (рис. 4). Однако для поверхности, покрытой адсорбатом, скорость резонансного электронного обмена не монотонно зависит от расстояния между ионом и поверхностью. Следует отметить, что на рис. 4 представлена средняя частота обмена за весь период взаимодействия. Для чистой поверхности усредненная скорость резонансного электронного обмена равна его мгновенной скорости (т.е. в случае короткого времени взаимодействия). В случае поверхности, покрытой адсорбатом, средняя скорость резонансного электронного обмена значительно меньше его мгновенной скорости из-за колебаний $P(t)$. Поэтому немонотонная зависимость $\Gamma(Z)$ объясняется балансом между двумя конкурирующими факторами: с одной стороны, мгновенная скорость обмена возрастает экспоненциально в случае более коротких расстояний между ионами и поверхностью; с другой стороны, его средняя скорость вблизи поверхности снижается из-за колебаний $P(t)$.

Влияние на резонансный электронный обмен латерального положения иона относительно атома адсорбата на поверхности металла

Исследуем влияние латерального положения X иона H^- на резонансный электронный обмен с поверхностью, покрытой адсорбатом, при фиксированном расстоянии между ионами $Z = 12$ ат. ед. Адсорбат находится на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью Al(001), при этом его латеральное положение считается нулевым ($X = 0$).

На рис. 5 и 6 показана эволюция электронной плотности для различных латеральных положений иона H^- . При $X < \sim 12$ ат. ед. электрон сначала туннелирует к атому адсорбата из-за более тонкого потенциального барьера. При больших расстоя-

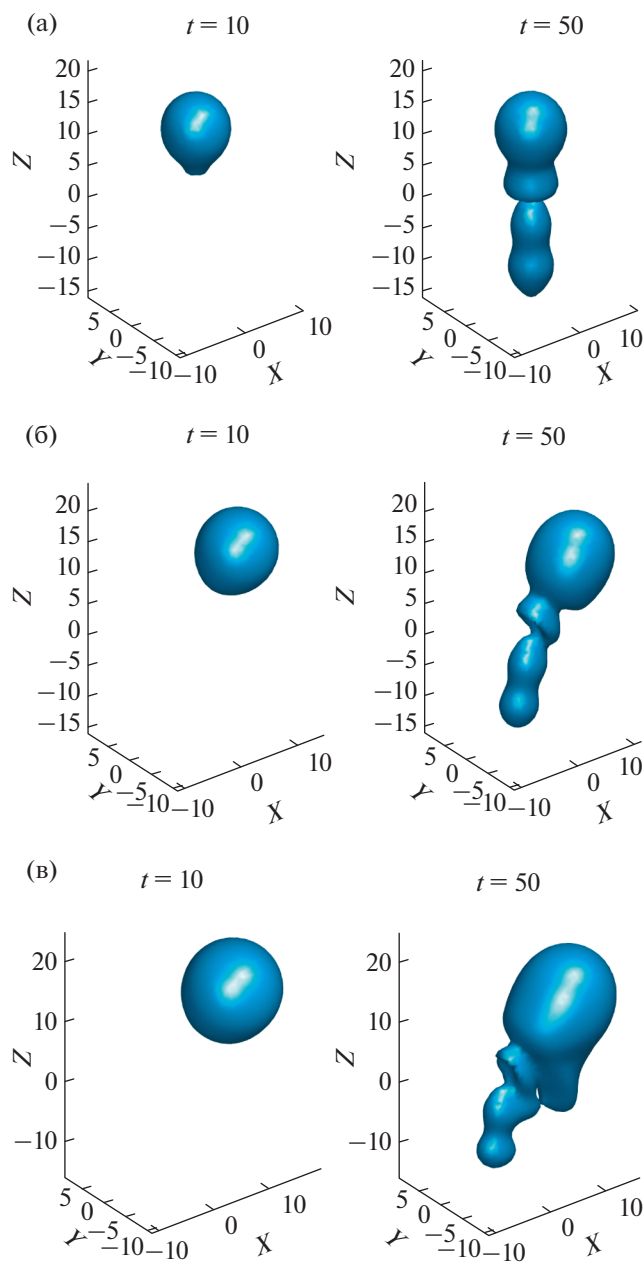


Рис. 5. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена между атомом водорода и поверхностью Al(001), покрытой адсорбатом Na^+ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 10 и 50 ат. ед. Ион H^+ расположен на уровне 12 ат. ед. над поверхностью, латеральное положение относительно атома адсорбата: а – 0; б – 8; в – 12 ат. ед.

ниях X адсорбат расположен относительно далеко от иона, поэтому электроны туннелируют сразу вдоль нормали к поверхности. Следует отметить, что резонансный электронный обмен в этом случае аналогичен обмену с чистой поверхностью из-за небольшого влияния адсорбата. Однако при $X < 12$ ат. ед. наличие адсорбата сильно влияет на

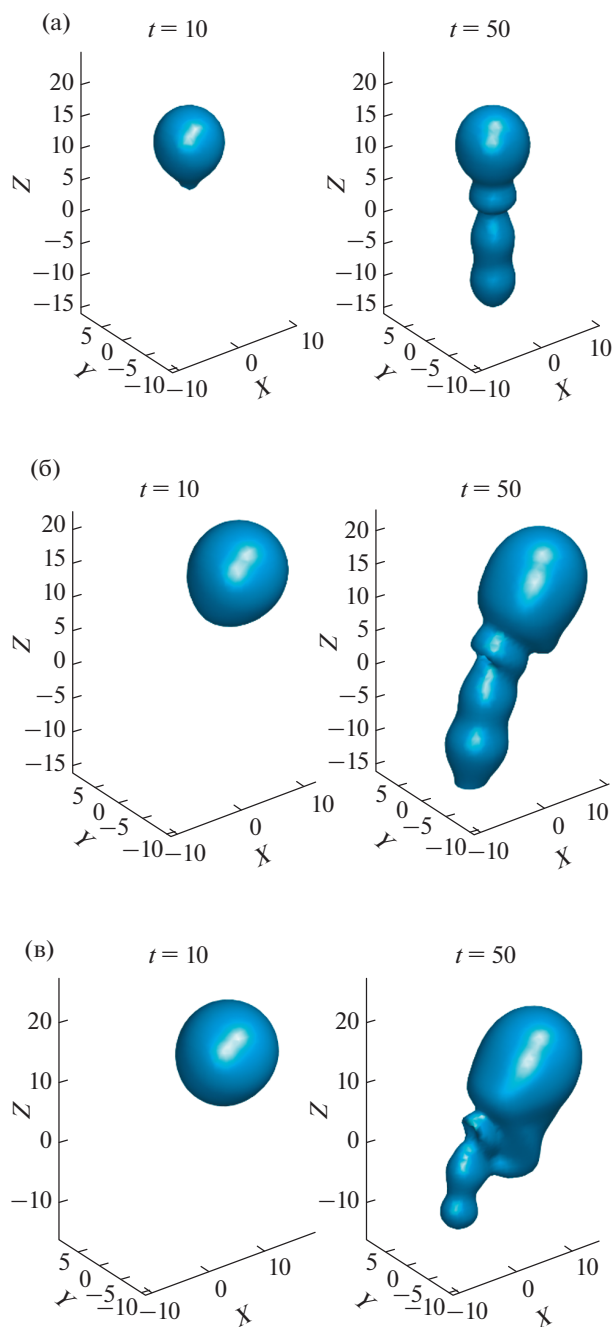


Рис. 6. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена между атомом водорода и поверхностью Al(001), покрытой адсорбатом Li^+ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 10 и 50 ат. ед. Ион H^+ расположен на уровне 12 ат. ед. над поверхностью, латеральное положение относительно атома адсорбата: а – 0; б – 8; в – 12 ат. ед.

обмен. Видно, что изначально электрон туннелирует в направлении ион–адсорбат. На втором этапе электрон туннелирует от адсорбата к поверхности. Следует отметить, что электрон не распространяется строго по нормали к поверхно-

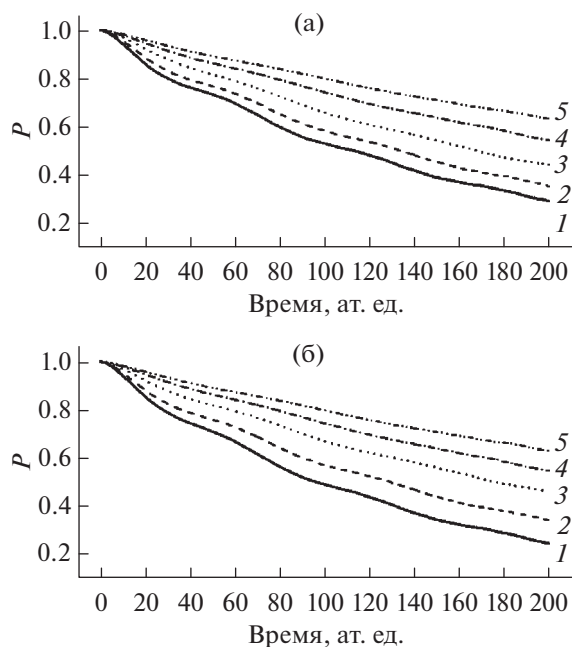


Рис. 7. Зависимость заселенности P иона H^- от времени для его латеральных положений: 0 (1); 4 (2); 8 (3); 12 (4); 16 ат. ед. (5). Ион H^- расположен на расстоянии 12 ат. ед. над поверхностью $Al(001)$, покрытой адсорбатом Li^+ (а) и Na^+ (б).

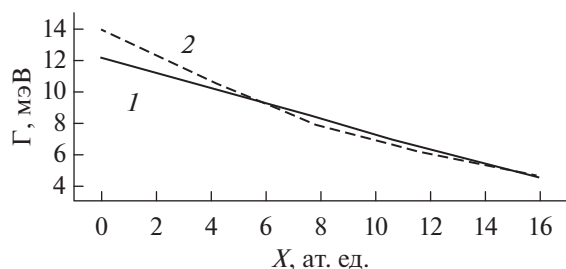


Рис. 8. Зависимость средней скорости резонансного электронного обмена Γ (ширины уровня ионов) от латерального положения иона на поверхности $Al(001)$, покрытой адсорбатом Li^+ (1) и Na^+ (2).

сти, как в случае с чистой поверхностью. Эта особенность может быть важной, если учесть влияние атомной структуры поверхности на резонансный электронный обмен, например, на анизотропию распространения электронов.

Ионная заселенность P демонстрирует колебания во времени (рис. 7), описанные в предыдущем разделе. Следует отметить, что эти колебания затухают при $X \geq 8$ ат. ед. В случае, когда на поверхности расположен адсорбат, ширина уровня иона $\Gamma(X)$ зависит от латерального положения иона относительно атома адсорбата (рис. 8). Эффективность электронного обмена, которая определяется величиной $\Gamma(X)$, уменьшается с отдалением от адсорбата.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе был теоретически исследован электронный обмен между ионом H^- и поверхностью $Al(001)$, покрытой адсорбатами Na^+ и Li^+ . Была рассмотрена статическая задача, когда ион закреплен над поверхностью. Анализ эволюции электронной плотности показывает, что туннелирование электрона от иона H^- к поверхности $Al(001)$ происходит через промежуточное заселение атома адсорбата. В случае чистой поверхности $Al(001)$ заселенность иона H^- демонстрирует экспоненциальный спад, типичный для резонансного электронного обмена с поверхностями, описываемыми моделью свободных электронов. В случае присутствия адсорбата характер обмена изменяется: функция заселенности иона H^- осциллирует во времени, что типично для обмена между двумя атомами. Таким образом, существуют периоды времени, когда электрон туннелирует обратно от адсорбата к иону. Мгновенная скорость резонансного электронного обмена монотонно уменьшается с расстоянием между ионом и поверхностью. Она больше в случае поверхности, покрытой адсорбатом, из-за меньшего потенциального барьера. Однако средняя скорость обмена немонотонно зависит от расстояния между ионом, поверхностью и адсорбатом, поскольку на коротких расстояниях ($d < 10$ ат. ед.) электрон колеблется между ионом и адсорбатом, что снижает среднюю скорость резонансного электронного обмена. В результате средняя скорость обмена в случае поверхности, покрытой адсорбатом, может быть, как выше, так и ниже, чем в случае чистой поверхности.

Исследование влияния латерального положения иона подтверждает, что перенос электрона на поверхность происходит через промежуточное заселение атома адсорбата. Следует отметить, что в этом случае волновой пакет электрона распространяется не по нормали к поверхности, как в случае чистой поверхности, а по направлению ион-адсорбат. Резонансный электронный обмен между ионом и адсорбатом также демонстрирует колебания электронной плотности.

Обнаруженные особенности резонансного электронного обмена с поверхностями, покрытыми адсорбатом, важны для анализа состава поверхности с помощью рассеяния медленных ионов. Напомним, что некорректный учет перезарядки может привести к значительным ошибкам в измерении поверхностных концентраций элементов. Следует отметить, что мы представили только результаты модельных исследований, которые раскрывают основные особенности резонансного электронного обмена с поверхностями, покрытыми адсорбатом. Сравнение с экспериментальными данными и практическое применение теоретических результатов для повышения точности

рассеяния медленных ионов – тема отдельной работы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-02-00577).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Martyanenko Yu.V.* // Radiat. Eff. Defects Solids. 1973. V. 20. P. 211.
2. *Urazgil'din I.F.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 4139.
3. *Bogomolova L.D., Borisov A.M., Kurnaev V.A., Mashkova E.S.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 212. P. 164.
4. *Mosunov A.S., Ryzhov Y.A., Shkarban I.I., Yurasova V.E., Zykova E.Yu.* // Radiat. Eff. Defects Solids. 2007. V. 162. P. 401.
5. *Alarcón L.S., Chen L., Esaulov V.A., Gayone J.E., Sánchez E.A., Grizzi O.* // J. Phys. Chem. C. 2010. V. 114. P. 19993.
6. *Chen L., Shen J., Valdés J.E., Vargas P., Esaulov V.A.* // Phys. Rev. A. 2011. V. 83. P. 032901.
7. *Zhou H., Chen L., Feng D., Gou Y., Ji M., Wang G., Zhou W., Li Y., Zhao L., Chen X.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 014901.
8. *Chen L., Ding B., Li Y., Qiu S., Xiong F., Zhou H., Gou Y., Chen X.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 88. P. 044901.
9. *Ullah M.W., Kuronen A., Djurabekova F., Nordlund K., Titov A.I., Karaseov P.A.* // Vacuum. 2014. V. 105. P. 88.
10. *Zykova E.Y., Khaidarov A.A., Ivanenko I.P., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2012. V. 6. P. 877.
11. *Klavsyuk A.L., Kolesnikov S.V., Gainullin I.K., Salletsky A.M.* // Eur. Phys. J. B. 2012. V. 85. P. 331.
12. *Bryukvina L.I., Lipko S.V., Martynovich E.F.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2013. V. 7. P. 617.
13. *Mamedov N.V., Mamedov I.M.* // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2020. V. 84. P. 713.
14. *Balakshin Y.V., Kozhemiako A.V., Evseev A.P., Minnebaev D.K., Elsehly E.M.* // Moscow University Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 218.
15. *Shemukhin A.A., Smirnov A.M., Evseev A.P., Vorobyeva E.A., Kozhemiako A.V., Minnebaev D.K., Balakshin Y.V., Nazarov A.V., Chernysh V.S.* // Moscow University Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 133.
16. *Brako R., News D.M.* // Rep. Prog. Phys. 1989. V. 52. P. 655.
17. *Shao H., Langreth D.C., Nordlander P.* Low Energy Ion-Surface Interactions / Ed. Rabalais J.W. New York: Wiley, 1994.
18. *Los J., Geerlings J.J.C.* // Phys. Rep. 1990. V. 190. P. 133.
19. *Burgdorfer J.* Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions / Ed. Lin C.D. World Scientific, 1993.
20. *Thumm U.* Ion-Surface Interactions. Book of Invited Papers, XXII. ICPEAC, Santa Fe, NM / Ed. Burgdorfer J., Cohen J.S., Datz S., Vane C.R. Princeton: Rinton Press, 2002.
21. *Esaulov V.A.* Low Energy Ion Scattering and Recoiling Spectroscopy // Surface Science Surface Techniques. Springer Series in Surface Sciences / Ed. Bracco G., Holst B. Vol. 51. Berlin: Springer, 2013.
22. *Gainullin I.K.* // Phys. Usp. 2020. V. 63. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2019.11.038691>
23. *Brongersma H.H., Draxler M., de Ridder M., Bauer P.* // Surf. Sci. 2007. V. 62. P. 63.
24. *He X., Zhou W., Wang Z.Y., Zhang Y.N., Shi J., Wu R.Q., Yarmoff J.A.* // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 156101.
25. *Cushman C.V., Bruner P., Zakel J., Major G.H., Lunt B.M., Smith N.J., Grehl T., Linford M.R.* // Analytical Meth. 2016. V. 8. P. 3419.
26. *Yin C., Guo Z., Gellman A.J.* // J. Phys. Chem. C. 2020. V. 124. P. 10605.
27. *Bruckner B., Bauer P., Primetzhofer D.* // Surf. Sci. 2020. V. 691. P. 121491.
28. *Gainullin I.K.* // Surf. Sci. 2018. V. 677. P. 324.
29. *Winter H.* // Phys. Rep. 2002. V. 367. P. 387.
30. *Bacal M., Wada M.* // Appl. Phys. Rev. 2015. V. 2. P. 021305.
31. *Dudnikov V.* // Phys. Usp. 2019. V. 62. P. 1233.
32. *Oohara W., Kaji T., Hirose K., Fujii M., Watano R., Watai M., Hiraoka Y., Yoshida M.* // AIP Adv. 2020. V. 10. P. 095006.
33. *Oohara W., Fujii M., Watai M., Hiraoka Y., Egawa M., Morinaga Y., Takamori S., Yoshida M.* // AIP Adv. 2019. V. 9. P. 085303.
34. *Sereda I., Tseluyko A., Ryabchikov D., Hrechko Y., Azarenkov N.* // Vacuum. 2019. V. 162. P. 163.
35. *Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.P.* // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 2842.
36. *Thumm U., Bárány A., Cederquist H., Hägg L., Setterlind C.J.* // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. P. 4799.
37. *Ducrée J.J., Casali F., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 338.
38. *Kuerpick P., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 1998. V. 58. P. 2174.
39. *Usman E.Yu., Urazgil'din I.F., Borisov A.G., Gauyacq J.P.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 205405.
40. *Chakraborty H., Niederhausen T., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. P. 052901.
41. *Chakraborty H., Niederhausen T., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 052903.
42. *Liu G.F., Sroubek Z., Yarmoff J.A.* // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 216801.
43. *Canario A.R., Kravchuk T., Esaulov V.A.* // New J. Phys. 2006. V. 8. P. 227.
44. *Bahrim B., Makarenko B., Rabalais J.W.* // Surf. Sci. 2005. V. 594. P. 62.
45. *Obreshkov B., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P. 012901.
46. *Schmitz A., Shaw J., Chakraborty H.S., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2010. V. 81. P. 042901.
47. *Chen L., Shen J., Jia J., Kandasamy T., Bobrov K., Guillemot L., Fuhr J.D., Martiarena M.L., Esaulov V.A.* // Phys. Rev. A. 2010. V. 84. P. 052901.

48. Meyer C., Bonetto F., Vidal R., Garcia A., Gonzales C., Ferron J., Goldberg E.C. // Phys. Rev. A. 2012. V. 86. P. 032901.
49. Obreshkov B., Thumm U. // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 022903.
50. Gao L., Zhu Y., Shi Y., Liu P., Xiao Y., Li G., Liu Y., Esaulov V. A., Chen X., Chen L., Guo Y. // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. P. 052705.
51. Shaw J., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H., Monismith D. // Phys. Rev. A. 2018. V. 98. P. 052705.
52. Xiao Y., Shi Y., Liu P., Zhu Y., Gao L., Guo Y., Chen L., Chen X., Esaulov V. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2019. V. 450. P. 73.
53. Canario A.R., Borisov A.G., Gauyacq J.P., Esaulov V.A. // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 121401(R).
54. Gauyacq J.P., Borisov A.G. // Springer Ser. Chem. Phys. 2007. V. 83. P. 87.
https://doi.org/10.1007/978-3-540-34460-5_4
55. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. P. 052705.
56. Gainullin I.K. // Surf. Sci. 2019. V. 681. P. 158.
57. Shaw J., Monismith D., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H.S. // Atoms. 2020. V. 7. P. 89.
58. Bahrim B., Makarenko B., Rabalais J.W. // Surf. Sci. 2009. V. 603. P. 703.
59. Iglesias-García A., Romero M.A., García E.A., Goldberg E.C. // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. P. 115406.
60. Gauyacq J.P., Borisov A.G. // J. Phys.: Cond. Matter. 1998. V. 10. P. 6585.
61. Kimmel G.A., Goodstein D.M., Levine Z.H., Cooper B.H. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 9403.
62. Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Lett. A. 1996. V. 218. P. 99.
63. Gainullin I.K., Urazgildin I.F. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 205403.
64. Amanbaev E.R., Gainullin I.K., Zykova E.Yu., Urazgildin I.F. // Thin Solid Films. 2011. V. 519. P. 4737.
65. Amanbaev E.R., Shestakov D.K., Gainullin I.K. // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2009. V. 3. P. 865.
66. Shestakov D.K., Polivnikova T.Yu., Gainullin I.K., Urazgildin I.F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 2596.
67. 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.
68. Gainullin I.K., Usman E.Yu., Urazgildin I.F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 232. P. 22.
69. Gainullin I.K., Usman E.Yu., Song Y.W., Urazgildin I.F. // Vacuum. 2003. V. 72. P. 263.
70. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. P. 022710.
71. Aleksandrov A.F., Gainullin I.K., Sonkin M.A. // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2020. V. 14. P. 791.
72. Gainullin I.K. // Moscow University Phys. Bull. 2019. V. 74. P. 585.
73. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. P. 032712.
74. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Comp. Phys. Commun. 2015. V. 188. P. 68.
75. Gainullin I.K. // Comp. Phys. Commun. 2017. V. 210. P. 72.
76. Majorosi S., Czirják A. // Comp. Phys. Commun. 2016. V. 208. P. 9.
77. Fu Y., Zeng J., Yuan J. // Comp. Phys. Commun. 2017. V. 210. P. 181.
78. Lüdde H.J., Horbatsch M., Kirchner T. // Eur. Phys. J. B. 2018. V. 91. P. 99.
79. Zhou S.P., Liu A.H., Liu F.C., Wang C.C., Ding D.J. // Chin. Phys. B. 2019. V. 28. P. 083101.
80. Liu Q., Liu F., Hou C. // Proc. Comp. Sci. 2020. V. 171. P. 312.
81. Cohen J.S., Fiorentini G. // Phys. Rev. A. 1986. V. 33. P. 1590.
82. Chulkov E.V., Silkin V.M., Echenique P. M. // Surf. Sci. 1999. V. 437. P. 330.
83. Jennings P.J., Jones R. O., Weinert M. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6113.
84. Gainullin I.K., Klavsyuk A. L. // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2012. V. 76. P. 542.

3D Theoretical Study of Resonant Charge Exchange between H⁻ Ion and Al(001) Surface Covered with Li⁺/Na⁺ Adsorbate

J. A. Melkozerova¹, I. K. Gainullin¹, *

¹Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, 119992 Russia

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

The features of the resonant charge exchange between the H⁻ ion and the Al(001) surface covered with Li⁺/Na⁺ adsorbate were studied. For modeling, a three-dimensional realization of the wave-packet propagation method was used. The Al(001) surface was described by a pseudopotential derived using the density functional theory. A model static problem was considered. As a result of the analysis of the occupancy function of the H⁻ ion, the electron density dynamics, and the tunneling rate, it was found that there were periods of time when the electron tunneled back from the adsorbate to the ion.

Keywords: interaction of ions with a surface, electron exchange, computer simulation, three-dimensional calculations, atomic structure.