

## Трехмерное теоретическое исследование резонансного электронного обмена между ионом $H^-$ и поверхностями $Cu(110)/Cu(111)$ , покрытыми адсорбатами $Li^+/Na^+$

Ю.А. Мелкозерова,<sup>1</sup> И.К. Гайнуллин<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, кафедра физической электроники  
Россия, 119992 Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 16.04.2022; после доработки 28.03.2023; принята к публикации 10.05.2023)

Изучено влияние типа поверхности на протекание резонансного электронного обмена между ионом  $H^-$  и поверхностями  $Cu(110)$  и  $Cu(111)$ , на которых находился атом адсорбата  $Li^+/Na^+$ . Была рассмотрена модельная статическая задача. Процесс моделировался с помощью трехмерной реализации метода распространения волновых пакетов. Псевдопотенциалы, описывающие поверхности  $Cu(110)$  и  $Cu(111)$ , были получены с помощью теории функционала плотности. Был произведен анализ функции заселенности иона  $H^-$ , динамики электронной плотности и скорости туннелирования. В результате было получено, что электрон больше осциллирует в случае поверхности  $Cu(111)$ . Кроме того, резонансный электронный обмен более эффективен в случае поверхности  $Cu(111)$ .

PACS: 79.20.Rf, 34.35.+a, 73.40.Gk УДК: 537, 534

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

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.78.2340504](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2340504)

### ВВЕДЕНИЕ

Ионные пучки широко используются во множестве различных задач, связанных с анализом и изменением свойств физических объектов на атомном уровне. Например, создание функциональных покрытий, диагностика твердых тел, модификация поверхности [1–13], см. также в этом журнале за 2020 г. статьи Ю.В. Балакшина и др. № 3. 23.; А.А. Шемухина и др. № 2. 21. В научной литературе [40] рассматриваются следующие виды электронного обмена атомных частиц с поверхностью твердых тел:

1. резонансный электронный переход/обмен (резонансная ионизация и нейтрализация) — электронный обмен с зоной проводимости с сохранением энергии электрона;
2. Оже-процессы — двухэлектронные процессы, в которых энергия, высвободившаяся от перехода одного электрона, передается другому;
3. квазирезонансный электронный обмен с глубоким (связанным) уровнем;
4. квазирезонансный обмен электроном, непосредственно при соударении с атомом решетки (collision induced reionization/neutralization);

5. нерезонансный электронный переход — одноэлектронный процесс электронного перехода с изменением энергии электрона.

Формирование равновесного зарядового состояния атомной частицы при взаимодействии с металлическими поверхностями, как правило, происходит за счет резонансного электронного обмена [40]. Следует отметить, что смысловая нагрузка термина «резонансный» электронный обмен заключается в сохранении энергии электрона при переходе между атомной частицей и поверхностью. То есть происходит переход электрона между двумя состояниями с равной энергией, находящимися в энергетическом резонансе.

Резонансный электронный обмен имеет фундаментальное и практическое значения для анализа поверхности, реактивной способности поверхности и катализа, а также для создания источников пучков отрицательных ионов и других областей физики и химии [14–19].

Метод рассеяния медленных ионов обладает наилучшей поверхностной чувствительностью [20–24]. Однако если не рассматривать или неправильно учитывать нейтрализацию ионов, то при анализе состава поверхности могут возникнуть значительные ошибки [25]. В методе рассеяния медленных ионов часто используются ионы именно щелочных металлов, поскольку их нейтрализация вблизи металлических поверхностей происходит резонансно, а вероятность нейтрализации не достигает 100% [26]. Также резонансно происходит отрицательная ионизация для большинства атомов, включая водород и дейтерий. По этой причине резонансный электронный обмен важен при анали-

\* E-mail: [ivan.gainullin@physics.msu.ru](mailto:ivan.gainullin@physics.msu.ru)

зе поверхности с помощью метода рассеяния медленных ионов [27–31]. На данный момент имеются теоретические модели описания резонансного электронного обмена для металлических поверхностей, которые согласуются с экспериментальными данными [32–54]

На протекание резонансного электронного обмена влияет тип металлической поверхности. В контексте резонансного электронного обмена различают два типа поверхностей: описываемые моделью свободных электронов и с ограниченным движением электрона. В случае первого типа поверхностей (например, Cu(110) или Ag(110)) электрон распространяется по нормали к поверхности вглубь металла и резонансный электронный обмен осуществляется с трехмерными объемными состояниями металла. В случае поверхностей с ограниченным движением электрона (например, Ag(111) или Cu(111)) электрон распространяется вдоль поверхности, так как распространение по нормали блокируется и резонансный электронный обмен осуществляется через двумерные поверхностные состояния заряда изображения (imagestates) [52].

С точки зрения практического применения интерес представляет резонансный электронный обмен с неоднородными поверхностями. Например, метод рассеяния медленных ионов из-за своей предельной поверхностной чувствительности незаменим для определения концентрации адсорбата на поверхности. Однако точный количественный анализ для данного метода затруднен. Изучение резонансного электронного обмена важно для получения более точных количественных оценок анализа поверхности, полученных методом рассеяния медленных ионов. Метод рассеяния медленных ионов с поверхностями, покрытыми адсорбатом, исследован как экспериментально, так и теоретически [55–58].

Различают локальное и нелокальное влияния адсорбатов на процесс резонансного электронного обмена при столкновениях атомов с поверхностью. Нелокальный эффект характеризуется изменением работы выхода металла вследствие покрытия поверхности адсорбатами, что сопровождается и изменением вероятности переноса электрона. При локальном эффекте модифицируется локальный электростатический потенциал вследствие присутствия атома адсорбата. Нелокальный эффект достаточно хорошо исследован теоретически [59, 60]. Однако 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 атомной частицы [51]. Конечное зарядовое состояние иона  $H^-$  может быть получено интегрированием полуклассического кинетического уравнения. Несмотря на его простоту, многие экспериментальные дан-

ные и важные закономерности электронного обмена, в том числе резонансного электронного обмена при скользящем рассеянии и нейтрализации многозарядных ионов, были объяснены с помощью адиабатического приближения и кинетического уравнения [26, 33, 34]. Общий подход к описанию резонансного электронного обмена при рассеянии ионов на поверхности металла основан на решении уравнения с гамильтонианом Андерсона–Ньюнса [14, 16]. Однако практическая применимость модели Андерсона–Ньюнса ограничена необходимостью расчета матричных элементов взаимодействия, для чего используются существенные допущения, в частности адиабатическое приближение.

Для моделирования резонансного электронного обмена часто применяется метод распространения волновых пакетов [38, 60–67]. Его преимущество заключается в том, что он не использует адиабатическое приближение, а значит, может быть применен для исследования неадиабатических эффектов резонансного электронного обмена [50]. Еще одним преимуществом метода распространения волновых пакетов является то, что он позволяет визуализировать пространственное распределение электронов. Насколько известно, из-за отсутствия трехмерных реализаций неадиабатических методов моделирования резонансного электронного обмена трехмерные неадиабатические эффекты резонансного электронного обмена с адсорбатами ранее теоретически не исследовались.

В этой теоретической работе мы представляем модельное исследование резонансного электронного обмена между ионом  $H^-$  и поверхностями Cu(111) и Cu(110). В контексте электронного обмена принято использовать термин «атомная частица» по отношению к рассматриваемой налетающей частице (в данном случае к иону  $H^-$ ). Данный термин объединяет в себе как ионы, так и нейтральные атомы. В качестве адсорбатов были использованы  $Na^+$  и  $Li^+$ . В разд. 2 описана трехмерная реализация метода распространения волновых пакетов. В разд. 3 обсуждаются результаты численного исследования. Для удобства была использована атомарная система единиц, где  $m_e = e = \hbar = 1$  ат.ед.; 1 ат.ед. расстояния равна 0.53 Å, а характерное время взаимодействия медленных ионов с поверхностью составляет 200 ат.ед. Энергии даны в электронвольтах относительно уровня вакуума ( $E_v = 0$ ).

## 1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

В перечисленных работах можно найти описание теоретической модели и численных методов, использованных в данном исследовании [25, 53, 68–70] (см. также статью И.К.Гайнуллина в этом журнале № 6. 33. (2019)). В данной работе исследуется распад состояния иона  $H^-$  вблизи поверхности металла. Анион водорода рассматривается как водородоподобный атом, состоящий из одного активно-

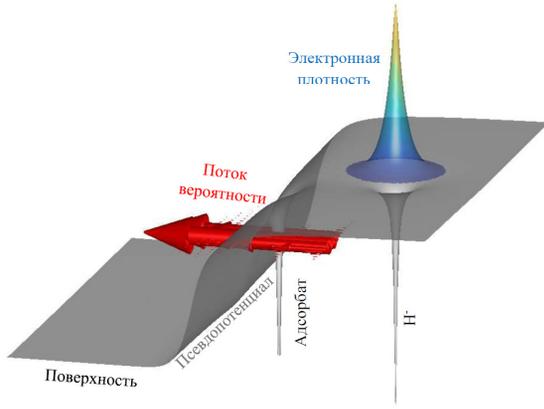


Рис. 1. Иллюстрация задачи резонансного электронного обмена между атомной частицей и поверхностью металла. Поверхность, адсорбат и атомная частица создают потенциал

го электрона и нейтрального атомного остова. Используется трехмерная реализация метода распространения волновых пакетов [71, 72], с помощью которого вычисляется эволюция волнового пакета активного электрона в составном потенциале, создаваемом поверхностью и атомной частицей. Иллюстрация исследуемой задачи представлена на рис. 1.

Численно решается нестационарное уравнение Шредингера с известными начальными условиями [73–77]:

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

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_0(\mathbf{r}),$$

где  $U(\mathbf{r}, t) = V_{e-ion}(\mathbf{r}, t) + V_{e-surf}(\mathbf{r}) + V_{e-ads}(\mathbf{r})$  — зависящий от времени потенциал, действующий на активный электрон.  $V_{e-ion}(\mathbf{r}, t)$  описывает взаимодействие между электроном и ионом,  $V_{e-surf}(\mathbf{r})$  описывает взаимодействие электрона с поверхностью металла и  $V_{e-ads}(\mathbf{r})$  описывает взаимодействие с адсорбатом. В теоретических исследованиях атомная частица рассматривается как атом или ион с одним активным электроном (в данном случае ион водорода  $H^-$ ) [78]. Металлическая поверхность задается с помощью потенциалов, описанных в работах [79, 80]. Для описания адсорбата используется потенциал [81]. В данной работе адсорбат расположен на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью Cu(111) или Cu(110).

В результате численного решения уравнения Шредингера получается зависимость волновой функции туннелирующего электрона от координат и времени  $\psi(\mathbf{r}, t)$ . Проекция волновой функции на начальное состояние  $\psi_0(\mathbf{r})$  — это автокорреляционная функция или амплитуда вероятности того, что волновой пакет останется в начальном состоянии:

$$A(t) = \langle \psi_0(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (2)$$

Квадрат модуля этой функции дает заселенность атомной частицы. Заселенность атомной ча-

стицы — это вероятность нахождения на ней электрона в основном состоянии. При рассмотрении статической задачи заселенность является осциллирующей величиной и зависит от времени. Однако анализ скорости изменения заселенности при рассмотрении статической задачи позволяет определить ширину атомного уровня — ключевой параметр, определяющий эффективность электронного обмена.

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

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» [52]. Следовательно,  $\Gamma(z)$  легко вычисляется из линейной аппроксимации  $\ln(P(t))$ . Подробнее о вычислении  $\Gamma(z)$  см. [54?].

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 2.1. Влияние расстояния между ионом и поверхностью на резонансный электронный обмен

В этом разделе мы исследуем распад иона водорода на поверхности при различных расстояниях между ионом и поверхностью, а также как на протекание электронного обмена влияет тип поверхности. Мы сравниваем резонансный электронный обмен в случае поверхности Cu(111) и Cu(110), когда на поверхности расположен адсорбат на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью.

На рис. 2 и 3 показана динамика резонансного электронного обмена для поверхностей Cu(111) и Cu(110), покрытых адсорбатом  $Li^+$  и адсорбатом  $Na^+$ . В случае поверхности Cu(110), описываемой моделью свободных электронов, электрон туннелирует по нормали к поверхности и продолжает движение в этом направлении [26, 51]. Однако, характер электронного обмена меняется для Cu(111) — поверхности с ограниченным движением электрона. Движение электрона по нормали к поверхности блокируется, электрон распространяется вдоль поверхности. Резонансный электронный обмен в этом случае осуществляется через двумерные поверхностные состояния заряда изображения [52]. По этой причине для поверхности Cu(111) осцилляции электронной плотности выражены в большей степени, чем для поверхности Cu(110).

На рис. 4 показана зависимость заселенности иона  $H^-$  от времени для поверхности Cu(110) и Cu(111). В обоих случаях заселенность  $P$  демонстрирует колебания во времени, что в большей степени проявляется при малых расстояниях между ионом и поверхностью [82].

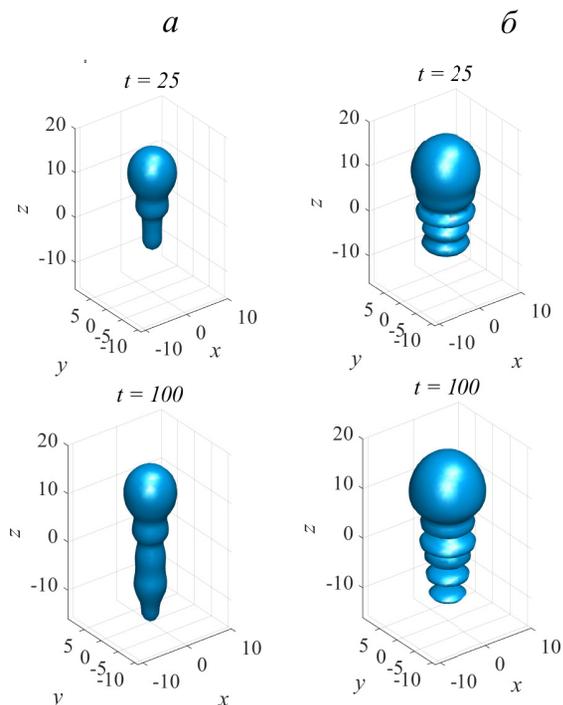


Рис. 2. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена для случая поверхности *a* — Cu(110) и *б* — Cu(111), покрытой адсорбатом  $\text{Li}^+$ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 25 ат. ед. (верхний ряд) и 100 ат. ед. (нижний ряд). Ион  $\text{H}^-$  расположен над адсорбатом

Примечательно, что заселенность иона  $\text{H}^-$  в случае поверхности Cu(111) осциллирует сильнее, чем в случае Cu(110). Кроме того, характер спада заселенности иона  $\text{H}^-$  в этих двух случаях отличается: для поверхности Cu(111) она спадает медленнее.

На рис. 5 представлена зависимость ширины уровня иона  $\text{H}^-$   $\Gamma(Z)$ , определяющая скорость резонансного электронного обмена, от расстояния  $Z$  между поверхностью Cu(110)/Cu(111) и ионом  $\text{H}^-$ . В случае поверхности Cu(111) зависимость монотонная, а в случае Cu(110) наблюдается максимум. Кроме того, скорость резонансного электронного обмена для ориентации Cu(111) больше, чем для Cu(110) при малых расстояниях ( $<14$  ат. ед.).

Стоит отметить, что указанные выше зависимости для адсорбатов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Li}^+$  различаются лишь количественно, но не качественно.

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

В этом разделе исследуется влияние латерального положения  $X$  иона  $\text{H}^-$  на резонансный электронный обмен с поверхностью, покрытой адсорбатом, при фиксированном расстоянии между ионами  $Z = 12$  ат. ед. для поверхностей Cu(111) и Cu(110).

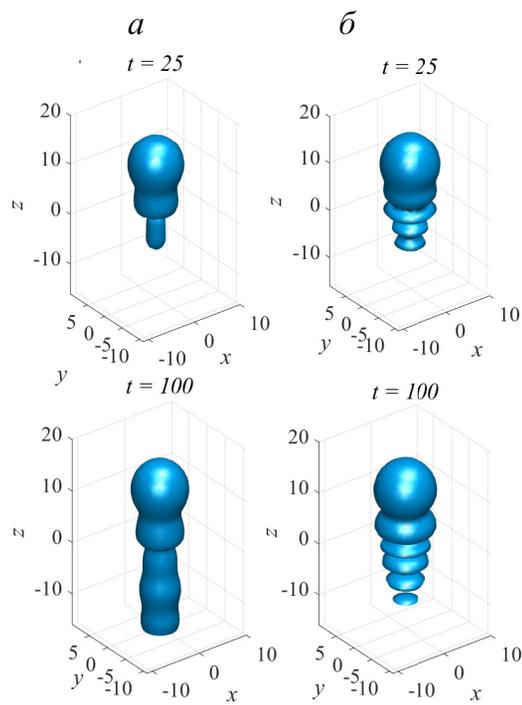


Рис. 3. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена для случая поверхности *a* — Cu(110) и *б* — Cu(111), покрытой адсорбатом  $\text{Na}^+$ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 25 ат. ед. (верхний ряд) и 100 ат. ед. (нижний ряд). Ион  $\text{H}^-$  расположен над адсорбатом

Адсорбат находится на расстоянии 2.5 ат. ед. над поверхностью Cu(111)/Cu(110), при этом его латеральное положение считается нулевым ( $X = 0$ ).

На рис. 6 и рис. 7 показана эволюция электронной плотности для различных латеральных положений иона  $\text{H}^-$ . Туннелирование электрона при  $X \leq 12$  ат. ед. из-за более тонкого потенциального барьера происходит через атом адсорбата. С увеличением расстояния  $X$  влияние адсорбата снижается и электроны туннелируют сразу вдоль нормали к поверхности. Поскольку в случае поверхности Cu(111) резонансный электронный обмен осуществляется через двумерные поверхностные состояния заряда изображения, то осцилляции электронной плотности выражены в большей степени, чем для поверхности Cu(110).

Заселенность иона  $\text{P}$  демонстрирует колебания во времени (рис. 8). Следует отметить, что эти колебания затухают при  $X \geq 8$  ат. ед. для поверхности Cu(110) и при  $X \geq 12$  ат. ед. для поверхности Cu(111).

На рис. 9 представлена зависимость ширины уровня иона  $\Gamma(X)$  от латерального положения иона относительно атома адсорбата. Эффективность электронного обмена, которая определяется величиной  $\Gamma(X)$ , уменьшается с отдалением от адсорбата. Однако для поверхности Cu(110) данная функция имеет более линейный характер, чем для поверхности Cu(111).

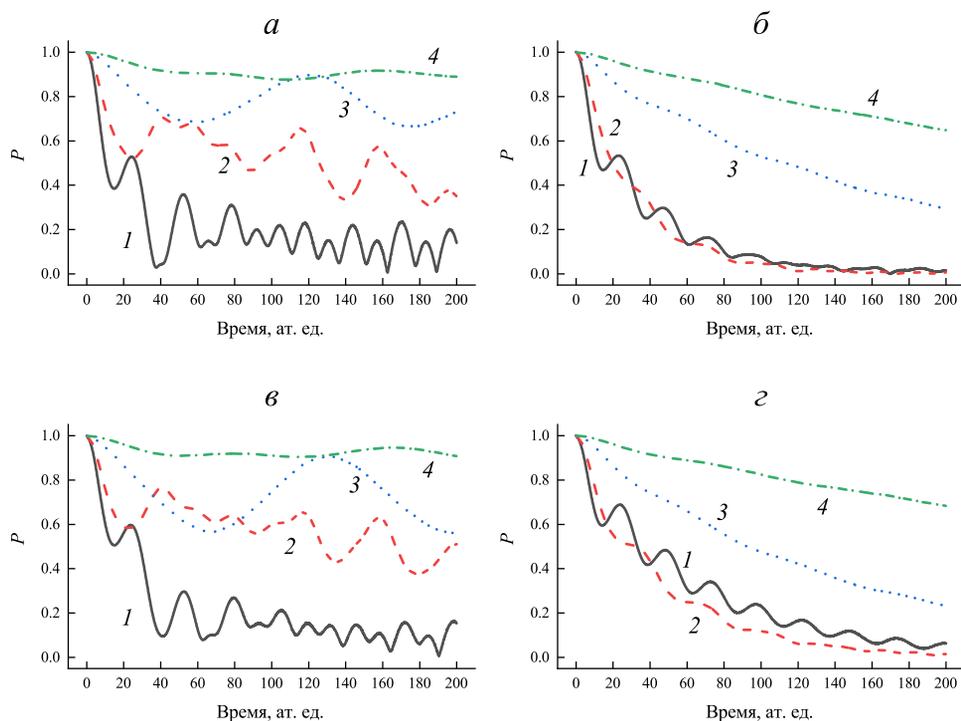


Рис. 4. Зависимость заселенности иона  $H^-$  от времени для расстояний между ионом и поверхностью: 6 ат. ед. (1), 8 ат. ед. (2), 12 ат. ед. (3), 16 ат. ед. (4): а — для покрытой адсорбатом  $Li^+$  поверхности  $Cu(111)$ ; б — для покрытой адсорбатом  $Li^+$  поверхности  $Cu(110)$ ; в — для покрытой адсорбатом  $Na^+$  поверхности  $Cu(111)$ ; г — для покрытой адсорбатом  $Na^+$  поверхности  $Cu(110)$

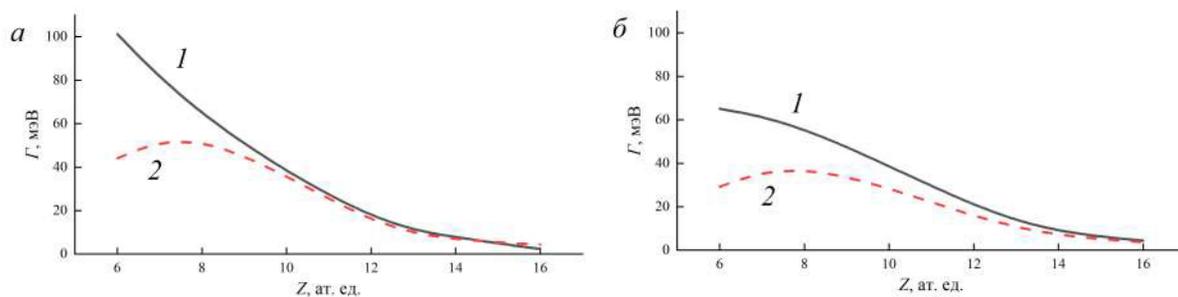


Рис. 5. Зависимость ширины уровня иона от расстояния между ионом и поверхностью для поверхности  $Cu(111)$  (1) и  $Cu(110)$  (2), покрытой адсорбатом  $Li^+$  (а),  $Na^+$  (б)

Так же, как и в предыдущем разделе, наблюдаются только количественные различия  $Na^+$  и  $Li^+$ , но не качественные.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе было теоретически исследовано влияние типа поверхности на протекание электронного обмена между ионом  $H^-$  и поверхностями  $Cu(111)$  и  $Cu(110)$ , покрытыми адсорбатами  $Na^+$  и  $Li^+$ . Изучалась статическая задача, когда ион закреплен над поверхностью.

$Cu(110)$  является поверхностью, описываемой мо-

делью свободных электронов. В то время как  $Cu(111)$  — это поверхность с ограниченным движением электрона.

Анализ эволюции электронной плотности показал, что туннелирование электрона от иона  $H^-$  через адсорбат  $Na^+/Li^+$  к поверхности  $Cu(111)$  происходит с большими осцилляциями электронной плотности, чем к поверхности  $Cu(110)$ . Аналогичный результат отражает зависимость заселенности иона  $H^-$  от времени. Функция заселенности осциллирует с большей амплитудой и дольше затухает в случае поверхности  $Cu(111)$ , чем в случае  $Cu(110)$ . Ввиду более медленного затухания заселенности иона  $H^-$  электронный обмен более эффективен с поверхно-

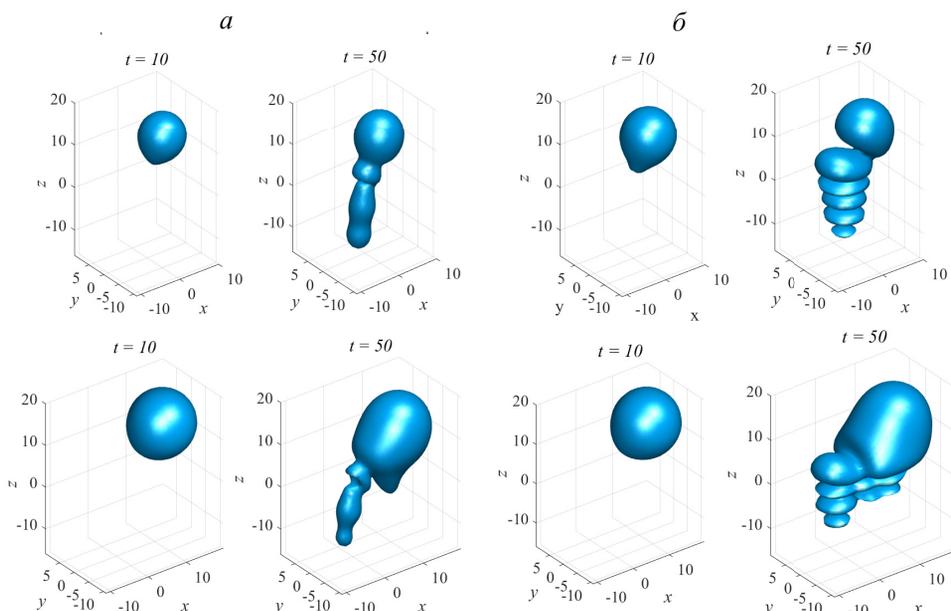


Рис. 6. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена между ионом и *a* — поверхностью Cu(110), *б* — поверхностью Cu(111), покрытой адсорбатом  $\text{Li}^+$ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 10 ат. ед. (слева) и 50 ат. ед. (справа). Ион  $\text{H}^-$  расположен на уровне 12 ат. ед. над поверхностью, латеральное положение относительно атома адсорбата составляет 4 ат. ед. для верхней части рисунка и 12 ат. ед. для нижней части

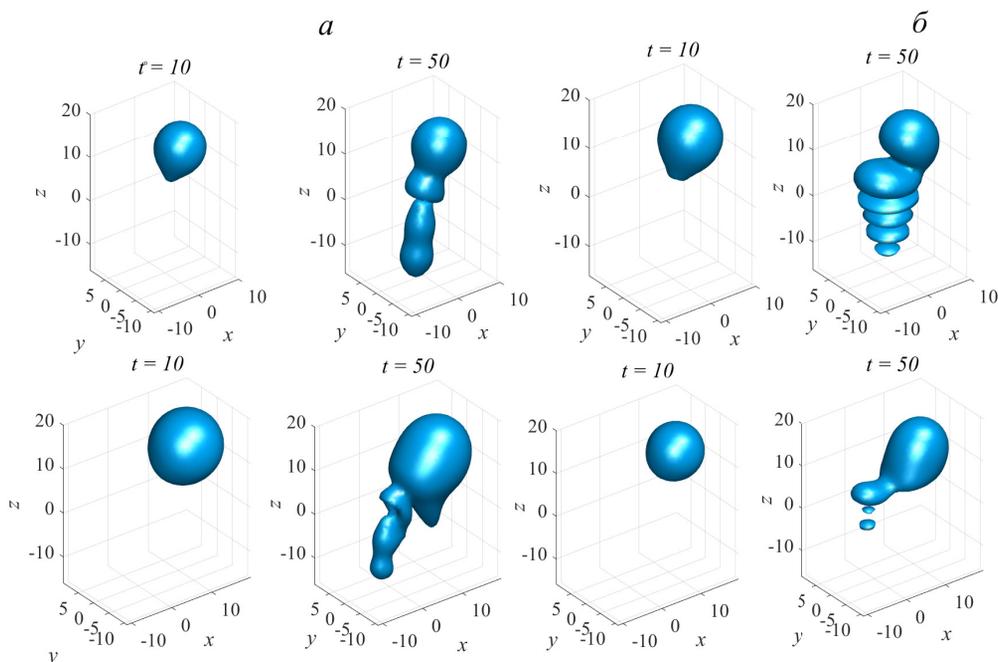


Рис. 7. Иллюстрация динамики резонансного электронного обмена между ионом и *a* — поверхностью Cu(110), *б* — поверхностью Cu(111), покрытой адсорбатом  $\text{Na}^+$ . Показаны изоповерхности электронной плотности в последовательные моменты времени 10 ат. ед. (слева) и 50 ат. ед. (справа). Ион  $\text{H}^-$  расположен на уровне 12 ат. ед. над поверхностью, латеральное положение относительно атома адсорбата составляет 4 ат. ед. для верхней части рисунка и 12 ат. ед. для нижней части

стью Cu(111) по сравнению с Cu(110). Следует отметить, что в случае поверхности Cu(111) движение электрона по нормали к поверхности блокиру-

ется и резонансный электронный обмен осуществляется через двумерные поверхностные состояния заряда изображения.

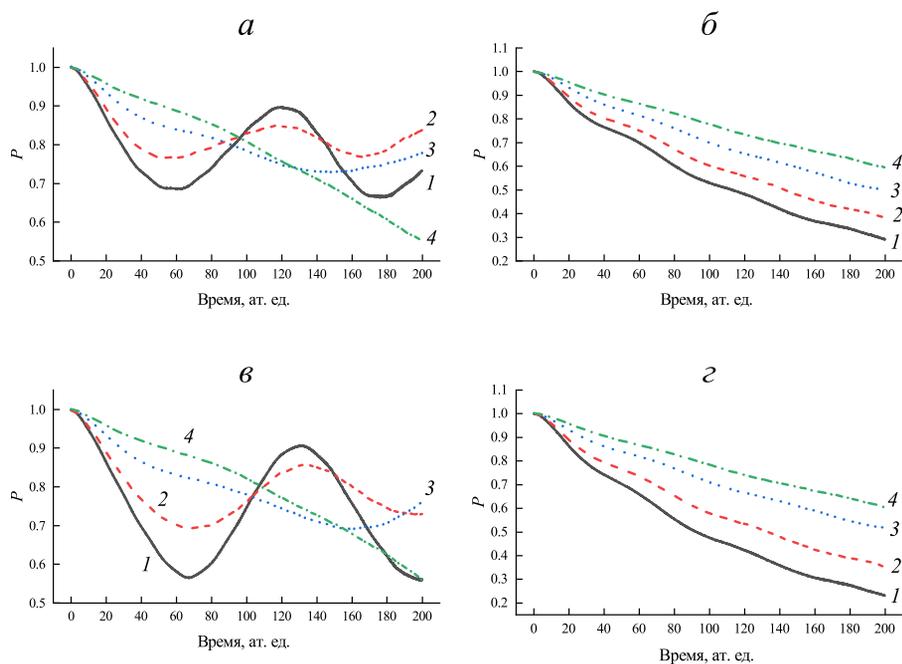


Рис. 8. Зависимость заселенности иона  $\text{H}^-$  от времени для латеральных положений иона  $\text{H}^-$ : 0 ат. ед. (1), 4 ат. ед. (2), 8 ат. ед. (3), 12 ат. ед. (4). *a* — для покрытой адсорбатом  $\text{Li}^+$  поверхности  $\text{Cu}(111)$ ; *б* — для покрытой адсорбатом  $\text{Li}^+$  поверхности  $\text{Cu}(110)$ ; *в* — для покрытой адсорбатом  $\text{Na}^+$  поверхности  $\text{Cu}(111)$ ; *г* — для покрытой адсорбатом  $\text{Na}^+$  поверхности  $\text{Cu}(110)$

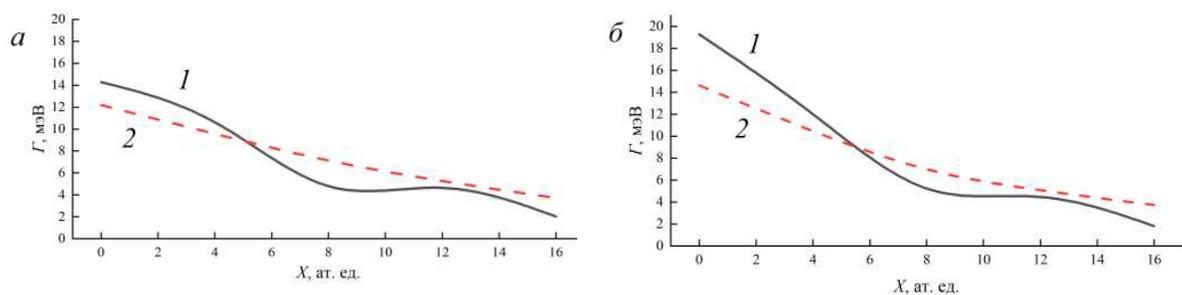


Рис. 9. Зависимость средней скорости резонансного электронного обмена  $\Gamma$  (ширины уровня ионов) от латерального положения иона на покрытой адсорбатом  $\text{Li}^+$  (*a*) и  $\text{Na}^+$  (*б*) поверхности  $\text{Cu}(111)$  (1) и  $\text{Cu}(110)$  (2)

Исследование влияния латерального положения иона показало, что перенос электрона на поверхность происходит через промежуточное заселение атома адсорбата с более выраженными осцилляциями электронной плотности в случае поверхности  $\text{Cu}(111)$ . Зависимость ширины уровня  $\Gamma$  от латерального положения  $X$  в большей степени линейна для поверхности  $\text{Cu}(110)$ , чем для  $\text{Cu}(111)$ .

Одна из проблем метода рассеяния медленных ионов заключается в том, что некорректный учет перезарядки может привести к значительным ошибкам в измерении поверхностных концентраций элементов. Особенности резонансного электронного об-

мена с поверхностями, покрытыми адсорбатом, которые были обнаружены в данной работе, могут способствовать увеличению точности анализа состава поверхности с помощью рассеяния медленных ионов. Следует отметить, что в данной статье 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 метода рассеяния медленных ионов — тема отдельной статьи.

[1] Martyanenko Yu.V. // *Rad. Eff. And Defects in Solids.* 20. 211. (1973).

[2] Urazgil'din I.F. // *Phys. Rev. B.* 47. 4139. (1993).

- [3] *Bogomolova L.D., Borisov A.M., Kurnaev V.A., Mashkova E.S.* // *Nucl. Inst. Meth. B.* **212**. 164. (2003).
- [4] *Mosunov A.S., Ryzhov Y.A., Shkarban I.I.* et al. // *Rad. Eff. and Defects in Solids.* **162**. 401. (2007).
- [5] *Alarcón L.S., Chen L., Esaulov V.A.* et al. // *J. Phys. Chem. C.* **114**. 19993. (2010).
- [6] *Chen L., Shen J., Valdés J.E.* et al. // *Phys. Rev. A.* **83**. 032901. (2011).
- [7] *Zhou H., Chen L.* et. al. // *Phys. Rev. A.* **85**. 014901. (2012).
- [8] *Chen L.* et. al. // *Phys. Rev. A.* **88**. 044901. (2013).
- [9] *Ullah M.W., Kuronen A., Djurabekova F.* et al. // *Vacuum.* **105**. 88. (2014).
- [10] *Зыкова Е.Ю., Хайдаров Е.Ю., Иваненко И.П., Гайнуллин И.К.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. (2012). № 11. 7. <https://elibrary.ru/item.asp?id=17965536> (*Zykova E.Y., Khaidarov A.A., Ivanenko I., Gainullin I.K.* // *J. of Surface Investigation.* **6**. 877. (2012).)
- [11] *Klavysyuk A.L., Kolesnikov S.V., Gainullin I. K., Saletsky A. M.* // *Eur. Phys. J. B.* **85**. 331. (2012).
- [12] *Брюквина Л.И., Липко С.В., Мартынович Е.Ф.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. № 7. 14. (2013). <https://elibrary.ru/item.asp?id=19105075> (*Bryukvina L.I., Lipko S.V., Martynovich E.F.* // *J. of Surface Investigation.* **7**. 617. (2013).)
- [13] *Мамедов Н.В., Мамедов И.М.* // Изв. РАН. Сер. физ. **84**, № 6. 863. (2020). <https://sciencejournals.ru/cgi/getPDF.pl?jid=izvfiz&year=2020&vol=84&iss=6&file=IzvFiz2006017Mamedov.pdf> (*Mamedov N.V., Mamedov I.M.* // *Bull. of the RAS: Physics.* **84**. 713. (2020).)
- [14] *Brako R., Newns D.M.* // *Rep. Prog. Phys.* **52**. 655. (1989).
- [15] *Shao H., Langreth D.C., Nordlander* Low Energy Ion-Surface Interactions, edited by Rabalais J.W. (Wiley, New York, 1994).
- [16] *Los J., Geerlings J.J.C.* // *Phys. Rep.* **190**. 133. (1990).
- [17] *Burgdorfer J.* Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions, edited by Lin C.D. (World Scientific, Singapore, 1993)
- [18] *Thumm U.* Ion-surface interactions. Book of Invited Papers, XXII. ICPEAC, Santa Fe, NM. / ed. by Burgdorfer J., Cohen J.S., Datz S. and Vane C.R. Rinton Press, Princeton, NJ, 592603, 2002.
- [19] *Gainullin I.K.* // *Phys. Usp.* **63**. (2020). DOI: .
- [20] *Brongersma H.H., Draexler M., de Ridder M., Bauer* // *Surf. Sci.* **62**. 63. (2007).
- [21] *He X., Zhou W., Wang Z.Y.* et al. // *Phys. Rev. Lett.* **110**. 156101. (2013).
- [22] *Cushman C.V., Bruner , Zakel J.* et al. // *Analytical Meth.* **8**. 3419. (2016).
- [23] *Yin C., Guo Z., Gellman A.J.* // *J. Phys. Chem. C.* **124**. 10605. (2020).
- [24] *Bruckner B., Bauer , Primetzhofer D.* // *Surf. Sci.* **691**. 121491. (2020).
- [25] *Gainullin I.K.* // *Surf. Sci.* **677**. 324. (2018).
- [26] *Winter H.* // *Phys. Rep.* **367**. 387. (2002).
- [27] *Bacal M., Wada M.* // *Appl. Phys. Rev.* **2**. 021305. (2015).
- [28] *Dudnikov V.* // *Phys. Usp.* **62**. 1233. (2019).
- [29] *Oohara W., Kaji T., Hirose K.* et. al. // *AIP Advances.* **10**. 095006. (2020).
- [30] *Oohara W., Fujii M., Watai M.* et al. // *AIP Advances.* **9**. 085303. (2019).
- [31] *Sereda I., Tseluyko A., Ryabchikov D.* et al. // *Vacuum.* **162**. 163. (2019).
- [32] *Borisov A.G., Teillet-Billy D., Gauyacq J.* // *Phys. Rev. Lett.* **68**. 2842. (1992).
- [33] *Thumm U., Bárányi A., Cederquist H.* et al. // *Phys. Rev. A.* **56**. 4799. (1997).
- [34] *Ducrée J.J., Casali F., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **57**. 338. (1998).
- [35] *Kuerpick , Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **58**. 2174. (1998).
- [36] *Shaw J., Monismith D., Zhang Y.* et al. // *Atoms.* **7**. 89. (2020).
- [37] *Usman E.Yu., Urazgil'din I.F., Borisov A.G., Gauyacq J.* // *Phys. Rev. B.* **64**. 205405. (2001).
- [38] *Chakraborty H., Niederhausen T., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **69**. 052901. (2004).
- [39] *Chakraborty H., Niederhausen T., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **70**. 052903. (2004).
- [40] *Liu G.F., Sroubek Z., Yarmoff J.A.* // *Phys. Rev. Lett.* **92**. 216801. (2004).
- [41] *Canario A.R., Kravchuk T., Esaulov V.A.* // *New Journal of Physics.* **8**. 227. (2006).
- [42] *Bahrim B., Makarenko B., Rabalais J.W.* // *Surf. Sci.* **594**. 62. (2005).
- [43] *Obreshkov B., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **74**. 012901. (2006).
- [44] *Schmitz A., Shaw J., Chakraborty H.S., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **81**. 042901. (2010).
- [45] *Chen L., Shen J., Jia J.* et al. // *Phys. Rev. A.* **84**. 052901. (2010).
- [46] *Meyer C., Bonetto F., Vidal R.* et al. // *Phys. Rev. A.* **86**. 032901. (2012).
- [47] *Obreshkov B., Thumm U.* // *Phys. Rev. A.* **87**. 022903. (2013).
- [48] *Gao L., Zhu Y., Shi Y.* et al. // *Phys. Rev. A.* **96**. 052705. (2017).
- [49] *Shaw J., Zhang Y., Doerr D.* et al. // *Phys. Rev. A.* **98**. 052705. (2018).
- [50] *Xiao Y., Shi Y., Liu* et al. // *Nucl. Inst. Meth. B.* **450**. 73. (2019).
- [51] *Canario A.R., Borisov A.G., Gauyacq J., Esaulov V.A.* // *Phys. Rev. B.* **71**. 121401(R). (2005).
- [52] *Gauyacq J., Borisov A.G.* // Quantum Dynamics of Complex Molecular Systems. Springer, Berlin, Heidelberg, 2007., 87-109.
- [53] *Gainullin I.K.* // *Phys. Rev. A.* **95**. 052705. (2017).
- [54] *Gainullin I.K.* // *Surf. Sci.* **681**. 158. (2019).
- [55] *Bahrim B., Makarenko B., Rabalais J.W.* // *Surf. Sci.* **603**. 703. (2009).
- [56] *Iglesias-García A., Romero M.A., García E.A., Goldberg E.C.* // *Phys. Rev. B.* **102**. 115406. (2020).
- [57] *Gauyacq J., Borisov A.G.* // *J. Phys.: Cond. Matt.* **10**. 6585. (1998).
- [58] *Esaulov V.A.* // Low Energy Ion Scattering and Recoiling Spectroscopy in Surface Science, edited by G. Bracco and B. Holst; Surface Science Techniques. Springer Series in Surface Sciences, vol 51. (Springer, Berlin, 2013).
- [59] *Kimmel G.A., Goodstein D.M., Levine Z.H., Cooper B.H.* // *Phys. Rev. B.* **43**. 9403. (1991).
- [60] *Ermoshin V.A., Kazansky A.K.* // *Phys. Lett. A.* **218**. 99. (1996).
- [61] *Gainullin I.K., Urazgildin I.F.* // *Phys. Rev. B.* **74**. 205403. (2006).
- [62] *Amanbaev E.R., Gainullin I.K., Zykova E.Yu.,*

- Urazgildin I.F.* // *Thin Solid Films*. **519**. 4737. (2011).
- [63] *Аманбаев Е.Р., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. (2009). № 11. 23. <https://elibrary.ru/item.asp?id=12952091> (*Amanbaev E.R., Shestakov D.K., Gainullin I.K.* // *Journal of Surface Investigation*. **3**. 865. (2009).)
- [64] *Shestakov D.K., Polivnikova T.Yu., Gainullin I.K., Urazgildin I.F.* // *Nucl. Inst. Meth. B*. **267**. 2596. (2009).
- [65] *Магунов А.А., Шестаков Д.К., Гайнуллин И.К., Уразгильдин И.Ф.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. № 9. 93. (2008). <https://elibrary.ru/item.asp?id=11155132> (*Magunov A.A., Shestakov D.K., Gainullin I.K., Urazgil'din I.F.* // *Journal of Surface Investigation*. **2**. 764. (2008).)
- [66] *Gainullin I.K., Usman E.Yu., Urazgildin I.F.* // *Nucl. Inst. Meth. B*. **232**. 22. (2005).
- [67] *Gainullin I.K., Usman E.Yu., Song Y.W., Urazgil'din I.F.* // *Vacuum*. **72**. 263. (2003).
- [68] *Gainullin I.K., Sonkin M.A.* // *Phys. Rev. A*. **92**. 022710. (2015).
- [69] *Александров А.Ф., Гайнуллин И.К., Сонькин М.А.* // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. (2020). № 8. 42. <https://elibrary.ru/item.asp?id=43039685> (*Aleksandrov A.F., Gainullin I.K., Sonkin M.A.* // *Journal of Surface Investigation*. **14**. 791. (2020).)
- [70] *Gainullin I.K.* // *Phys. Rev. A*. **100**. 032712. (2019).
- [71] *Gainullin I.K., Sonkin M.A.* // *Comp. Phys. Comm.* **188**. 68. (2015).
- [72] *Gainullin I.K.* // *Comp. Phys. Comm.* **210**. 72. (2017).
- [73] *Majorosi S., Czirják A.* // *Comp. Phys. Comm.* **208**. 9. (2016).
- [74] *Fu Y., Zeng J., Yuan J.* // *Comp. Phys. Comm.* **210**. 181. (2017).
- [75] *Lüdde H.J., Horbatsch M., Kirchner T.* // *The European Physical Journal B*. **91**. 99. (2018).
- [76] *Zhou S., Liu A.H., Liu F.C. et al.* // *Chinese Physics B*. **28**. 083101. (2019).
- [77] *Liu Q., Liu F., Hou C.* // *Procedia Computer Science*. **171**. 312. (2020).
- [78] *Cohen J.S., Fiorentini G.* // *Phys. Rev. A*. **33**. 1590. (1986).
- [79] *Chulkov E.V., Silkin V. M., Echenique M.* // *Surf. Sci.* **437**. 330. (1999).
- [80] *Jennings J., Jones R. O., Weinert M.* // *Phys. Rev. B*. **37**. 6113. (1988).
- [81] *Bardsley J. N.* // *Case Studies At. Phys.* **4**. 299. (1974).
- [82] *Гайнуллин И.К., Клавсюк А.Л.* // Изв. РАН. Сер.физ. **76**, № 5. 609. (2012). <https://elibrary.ru/item.asp?id=17726902> (*Gainullin I.K., Klavsyuk A.L.* // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*. **76**. 542. (2012).)

## Tree-dimensional theoretical study of resonant charge transfer between $H^-$ ion and $Cu(111)/Cu(110)$ metal surfaces covered with $Li^+/Na^+$ adsorbates

J.A. Melkozerova, I.K. Gainullin<sup>a</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physical Electronics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University  
Moscow 119991, Russia*

*E-mail: <sup>a</sup>ivan.gainullin@physics.msu.ru*

The influence of the surface type on resonant charge exchange between  $H^-$  ion with a metal surfaces  $Cu(111)$  and  $Cu(110)$  covered by adsorbate  $Li^+/Na^+$  has been studied. A model static problem was considered. For modeling, a three-dimensional realization of the wave-packet propagation method was used. The  $Cu(110)$  and  $Cu(111)$  surfaces were described by a pseudopotential, derived from a density functional theory (DFT). An occupation of  $H^-$  ion, an electron density dynamics and an ion level width were analyzed. As a result, we obtained that an electron oscillates more in case of the surface  $Cu(111)$ . Furthermore, the resonant charge exchange is more efficient for  $Cu(111)$  surface.

PACS: 79.20.Rf, 34.35.+a, 73.40.Gk.

*Keywords:* ion-surface interaction, electron exchange, computer simulation, three-dimensional calculations, atomic structure, adsorbates.

*Received 16 April 2023.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2023. **78**, No. 4. Pp. 541-550.

### Сведения об авторах

1. Мелкозерова Юлия Алексеевна — бакалавр, студент; e-mail: [melkozerova.ia16@physics.msu.ru](mailto:melkozerova.ia16@physics.msu.ru).
2. Гайнуллин Иван Камилевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-19-79, e-mail: [ivan.gainullin@physics.msu.ru](mailto:ivan.gainullin@physics.msu.ru).