

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

ГАЙНУЛЛИН ИВАН КАМИЛЕВИЧ

**Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому
описанию электронного обмена ионных пучков с металлическими
поверхностями**

1.3.5. Физическая электроника

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва, 2023 г.

Работа выполнена на кафедре физической электроники физического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова

**Официальные
оппоненты:**

Зиновьев Александр Николаевич,
д.ф.-м.н., старший научный сотрудник, заведующий лабораторией атомных столкновений в твердых телах, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Плохотников Константин Эдуардович,
д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», Физический факультет, Кафедра математического моделирования и информатики

Тетельбаум Давид Исаакович,
д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник, Научно-исследовательский физико-технический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный университет им.Н.И. Лобачевского»

Защита диссертации состоится «15» июня 2023 г. в 15-30 на заседании диссертационного совета МГУ.013.7 Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2, Физический факультет МГУ, ауд. ____.

E-mail: igorkartashov@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., д.27) и на сайте <https://dissovet.msu.ru/dissertation/013.7/2419>

Автореферат разослан «__» _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.



И.Н.Карташов

Введение

Актуальность и текущее состояние по теме исследования

Ионные пучки применяются для диагностики поверхности твердых тел, контролируемой модификации ее свойств, создания функциональных покрытий, лечения онкологических заболеваний и решения прочих задач, связанных с анализом и изменением физических свойств объектов на атомном уровне [1-7]. Советские и российские ученые, включая сотрудников МГУ имени М.В. Ломоносова, внесли весомый вклад в развитие данной области науки. Физические процессы, происходящие при взаимодействии ионов с твердым телом, принято подразделять по форме передачи энергии на упругие (рассеяние ионов, распыление атомов твердого тела, модификация приповерхностной области) и неупругие (электронный обмен, перестройка электронной подсистемы, электронная эмиссия).

Электронный (или зарядовый) обмен *атомных частиц* (т.е. ионов или нейтральных атомов) с поверхностью представляет интерес как для фундаментальной, так и для прикладной науки [8-14]. С фундаментальной точки зрения, понимание механизмов и правильное численное описание закономерностей электронного обмена актуально для физики поверхности, атомной физики и смежных областей [С31]. В прикладном плане электронный обмен атомных частиц с поверхностью используется для создания газовых сенсоров, источников отрицательных ионов¹ [15] и диагностики элементного состава поверхности методом рассеяния медленных² ионов (РМИ). **РМИ обладает наилучшей поверхностной чувствительностью** и незаменим при измерении состава самого верхнего слоя поверхности. В силу особенностей экспериментального оборудования (времяпролетные анализаторы для регистрации нейтральных атомов дорогие и громоздкие), в большинстве установок регистрируются положительно заряженные ионы.

¹ Источники ионов H/D^- являются важным звеном в разработке термоядерных реакторов, т.к. для нагрева плазмы до температуры горения используются пучки нейтральных атомов H/D , ускоренные до ~ 1 МэВ. Для получения нейтральных пучков необходимы высокоэффективные источники H^- , т.к. эффективность нейтрализации H^+ при таких энергиях близка к нулю.

² Медленными принято считать ионы с энергией до 10 кэВ.

Поэтому для количественной диагностики, т.е. определения состава поверхности по измеренным спектрам рассеянных ионов, требуется измерять или вычислять сечение рассеяния и вероятность нейтрализации [С23]. Расчет траекторий и сечения рассеяния ионов изучен достаточно хорошо, аналитические потенциалы взаимодействия количественно описывают экспериментальные данные [С23]. Электронный обмен изучен в существенно меньшей мере; имеется множество необъясненных экспериментальных закономерностей. При этом игнорирование или **некорректный учет электронного обмена приводят к кратным (!) ошибкам** в определении концентрации элементов [С23]. Необходимо отметить, что в большинстве экспериментов исследуется электронный обмен с металлическими поверхностями, т.к. диэлектрики быстро накапливают заряд и отражают пучок ионов. В случае отсутствия энергетических ограничений, *резонансное электронное туннелирование* доминирует над остальными каналами электронного обмена, такими как двухэлектронные Оже-процессы и нерезонансные переходы. Для большинства элементов таблицы Менделеева электронный обмен с металлическими поверхностями осуществляется резонансно. Исключение составляют ионы инертных газов, нейтрализация которых происходит через Оже-процессы и при непосредственном соударении с атомами решетки [12].

Информация, получаемая из эксперимента ограничена, поэтому расчетное моделирование электронного обмена важно для понимания его фундаментальных закономерностей. Например, мы можем детектировать вероятность электронного перехода между атомной частицей и поверхностью, но не можем измерить пространственное распределение электронов, перешедших в металл. Расчет резонансного электронного обмена является сложной квантово-механической задачей, поэтому для ее решения применяется ряд приближений. Часто используется *адиабатическое приближение*, в котором эффективность электронного туннелирования Γ

считается зависящей только от расстояния до поверхности, но не учитываются движение атомной частицы и фаза волновой функции [12].

Наиболее простой физический подход к расчету зарядового состояния рассеянной атомной частицы основан на интегрировании полуклассического *кинетического уравнения* (или уравнения баланса): $dP/dt = \Gamma_{capture}(z)(1-P) - \Gamma_{loss}(z)P$. Скорости подхвата и потери электрона $\Gamma_{capture}(z)$ и $\Gamma_{loss}(z)$, задаются эмпирически или вычисляются в рамках определенных моделей. Относительно строгое формальное описание резонансного электронного обмена было предложено в 80-х годах Р. Брако и Д.М. Ньюнсом – так называемая модель Андерсона-Ньюнса, в которой рассматривается переход электрона между состояниями атомной частицы и твердого тела [16]. Однако, практическая применимость данной модели ограничена необходимостью задавать матричные элементы взаимодействия, при вычислении которых применяются существенные допущения, включая адиабатическое приближение. Следует отметить, что **неадиабатические эффекты электронного обмена оказывают существенное (до 2-х раз) влияние на конечное зарядовое состояние** [17]. В последние десятилетия был разработан метод распространения волновых пакетов (РВП), который в отличие от двух предыдущих подходов, не опирается на адиабатическое приближение. Суть метода РВП состоит в расчете эволюции волновой функции активного (переходящего) электрона в потенциальном рельефе, описывающем атомную частицу и металл [11,12,17,C21,C23].

Большинство экспериментов по рассеянию ионов и изучению электронного обмена проводится в трехмерной геометрии³. Однако, в силу численной сложности трехмерных расчетов, при моделировании электронного обмена, **как правило, используется двумерная постановка задачи**⁴ (цилиндрическая симметрия при движении атомной частицы вдоль нормали к поверхности [11,17]). Двумерная постановка задачи может учитывать

³ Т.к. сложно установить и источник, и детектор ионов над одной точкой вдоль нормали к поверхности.

⁴ В последние годы была представлена трехмерная реализация модели Андерсона-Ньюнса, но она не учитывает неадиабатические эффекты [14].

зависимость электронного обмена от расстояния до поверхности, времени взаимодействия (скорости иона), а также атомную/электронную структуру поверхности вдоль нормали. При этом двумерная постановка пренебрегает неоднородностью поверхности и требует цилиндрической симметрии волновой функции электрона на атомной частице, что в общем случае выполняется только для s-состояний. Для описания реальных "трехмерных" экспериментов применяется адиабатическое приближение: 1) вначале рассчитывается эффективность электронного туннелирования $\Gamma(z)$ при фиксированном расстоянии до поверхности (двумерная постановка); 2) далее вероятность изменения зарядового состояния определяется путем интегрирования кинетического уравнения вдоль траектории движения атомной частицы. Существующие адиабатические расчетно-теоретические модели описывают базовые закономерности электронного обмена для металлов в приближении свободных электронов и для малых нормальных скоростей ионов (энергия ионов ~ 100 эВ или скользящие траектории), но не учитывают реальную атомную/электронную структуру поверхности и неадиабатические эффекты, что может приводить к кратным ошибкам⁵ [С31].

"Несмотря на то, что основные механизмы электронного обмена известны, на текущий момент не существует универсального способа определения вероятности электронного обмена для проведения количественного анализа" с помощью рассеяния медленных ионов [18]. В настоящее время ряд практически значимых классов экспериментальных закономерностей электронного обмена не описывается существующими адиабатическими моделями. К ним относятся: 1) влияние атомной структуры кристалла (например, зависимость от азимутального направления движения ионов [12]); 2) влияние неоднородности поверхности (дефекты, рельеф и адсорбаты) и дискретной электронной структуры в наносистемах (например, сильное увеличение вероятности нейтрализации на нанокластерах [8]); 3)

⁵ Для рассмотренных в диссертации 17 экспериментов, средняя погрешность расчетов в оригинальных статьях составляет 120%. Даже после линейной калибровки для наилучшего соответствия данным эксперимента погрешность расчетов составляет 23,5%, что не является приемлемой точностью.

неадиабатические эффекты электронного обмена и влияние реальной электронной структуры (например, немонотонная зависимость вероятности нейтрализации от энергии [13]). Для их объяснения **требуется полноценное трехмерное неадиабатическое рассмотрение** задачи электронного обмена с учетом неоднородной атомной и электронной структуры поверхности.

Цели и задачи исследования

Учитывая текущее состояние по теме диссертационного исследования, общей целью работ являлось совершенствование существующих расчетно-теоретических моделей и построение методов трехмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью, учитывающих неадиабатические эффекты, реальную электронную и атомную структуру поверхности. Для достижения данной цели были решены следующие задачи:

1. Физическая модель формирования конечного зарядового состояния усовершенствована с учетом неоднородного рельефа поверхности и скорости движения атомной частицы.
2. Построена физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена с учетом неадиабатических эффектов, неоднородной электронной и атомной структуры поверхности.
3. Разработаны численная схема и *комплекс программ* для трехмерного моделирования электронного обмена в больших пространственных областях (до 10^5 нм³).
4. Методика трехмерного моделирования и усовершенствованная физическая модель применены к решению новых классов задач, включающих влияние: атомной структуры поверхности и ее неоднородности, неадиабатических эффектов, дискретной электронной структуры наносистем.

Объект и предмет исследования

Объектом исследования являются ионные пучки и отдельные атомные частицы, взаимодействующие с металлическими поверхностями. Предметом исследования является резонансный электронный обмен между атомной частицей и металлической поверхностью.

Научная новизна

Принципиальная научная новизна диссертационного исследования заключается в создании трехмерного неадиабатического подхода к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с поверхностью твердых тел с учетом их неоднородной электронной и атомной структуры. Следует подчеркнуть основные составляющие научной новизны:

1. Физическая методика трехмерного моделирования и усовершенствованная физическая модель обеспечивают полноценное трехмерное рассмотрение задачи электронного обмена, с учетом неадиабатических эффектов, реальной электронной и атомной структуры поверхности.
2. Комплекс программ, использующий графические вычислители, позволяет проводить трехмерное моделирование электронного обмена в больших пространственных областях (до 10^5 нм³), тогда как раньше трехмерное моделирование проводилось только для "атомных" объемов, а для моделирования электронного обмена ионов с поверхностью применялись двумерные методики.
3. За счет трехмерного рассмотрения, дано количественное объяснение ряда важных классов экспериментальных закономерностей электронного обмена, включая зависимость от азимутального направления движения ионов, немонотонную зависимость вероятности нейтрализации положительных ионов от энергии, сильное увеличение вероятности нейтрализации на нанокластерах.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость работы заключается в переходе от двумерного к трехмерному рассмотрению задачи электронного обмена, что позволило отказаться от использования адиабатического приближения, учитывать неоднородность поверхности, ее реальную электронную и атомную структур. Благодаря этому точность расчетов была улучшена в несколько раз и стало возможным количественное описание экспериментов по зарядовому

обмену ионных пучков с поверхностью металлов. Был рассмотрен ряд новых задач и показана важность трехмерных и неадиабатических эффектов электронного обмена, учет которых в ряде случаев дает кратное отличие от результатов двумерного/адиабатического рассмотрения задачи и позволяет объяснить экспериментальные данные.

С практической точки зрения показано, что игнорирование или некорректный учет электронного обмена приводит к кратным ошибкам в определении концентрации элементов методом РМИ. Даны рекомендации по практическому использованию трехмерного моделирования электронного обмена для повышения точности анализа состава поверхности методом РМИ и повышения эффективности источников отрицательных ионов.

Методология диссертационного исследования

Диссертационное исследование является расчетно-теоретическим. Методология исследования включает в себя использование современных вычислительных технологий (параллельные расчеты на графических вычислителях), применение апробированных подходов к моделированию (теория функционала плотности, метод распространения волновых пакетов) и совершенствование существующего расчетно-теоретического базиса.

Защищаемые положения

1. Усовершенствованная физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы учитывает неоднородный рельеф поверхности и направление скорости иона в трехмерном пространстве, что позволило объяснить ряд важных закономерностей, в том числе:

- существенное увеличение вероятности нейтрализации положительных ионов на металлических нанокластерах при уменьшении размера нанокластеров до ~ 1 нм (с 3 до 50% при нейтрализации Na^+ на кластерах Au), которое происходит из-за ослабления взаимодействия с зарядом изображения.

- немонотонную энергетическую зависимость вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов при рассеянии на поверхностях с большой работой выхода, которая возникает из-за конкуренции между

увеличением времени взаимодействия иона с поверхностью и уменьшением расстояния, с которого начинается нейтрализация иона.

2. Построенная физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена между атомными частицами и металлическими поверхностями за счет применения теории функционала плотности и трехмерных вычислений позволяет изучать динамику электронного перехода без применения адиабатического приближения, с детализацией на атомном уровне и учетом неоднородности поверхности. Впервые был обнаружен важный трехмерный эффект - анизотропия распространения электрона; показано, что электрон, туннелирующий с атомной частицы, распространяется вдоль направления $\langle 001 \rangle$ поверхности Cu(110) в ~ 2 раза быстрее, чем вдоль ортогонального направления.

3. За счет использования разработанной гибридной численной схемы и эффективного распараллеливания расчетов на графических вычислителях, производительность и масштабируемость комплекса программ для моделирования электронного обмена минимум в 3 раза превышают существующие аналоги, что позволило впервые реализовать трехмерное моделирование электронного обмена между движущейся атомной частицей и поверхностью в большой расчетной области (до 10^5 нм³).

4. Физическая методика трехмерного моделирования позволила впервые теоретически изучить и объяснить ряд новых физических эффектов, включая:

- квантово-размерный эффект, заключающийся в немонотонной зависимости эффективности туннелирования электрона в наносистему от радиуса островковой пленки или кластера атомов. Квантово-размерный эффект объясняется энергетическим резонансом, при возникновении которого эффективность электронного обмена с наносистемами увеличивается до 5 раз по сравнению со случаем макроскопического образца.

- зависимость вероятности электронного обмена от азимутального направления ионного пучка, экспериментально обнаруженную при скользящем рассеянии ионов водорода на поверхности Cu(110). Азимутальная

зависимость объясняется анизотропией распространения электрона, вследствие чего вероятность подхвата электрона будет зависеть от азимутального направления движения атомной частицы.

5. Трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена, основанный на усовершенствованной физической модели и физической методике трехмерного моделирования, описывает широкий спектр экспериментальных данных с точностью ~10%, что в ~2,5 раза улучшает точность расчетов по сравнению с ранее применяемыми подходами.

Совокупность разработанных теоретических положений и полученных прикладных результатов позволяют сформулировать суть научного достижения – создание трехмерного неадиабатического подхода к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена ионных пучков с поверхностью твердых тел с учетом их неоднородной электронной и атомной структуры. Это в ~2,5 раза повысило точность расчетов по сравнению с ранее применяемыми адиабатическими подходами и позволило количественно (с точностью 10%) описывать экспериментальные данные.

Степень достоверности и апробация результатов

Верификация численных методик проводилась путем сравнения результатов расчетов с известными теоретическими данными и ранее изученными задачами. Валидация физической модели проводилась путем сопоставления с экспериментальными результатами. Основные результаты по теме диссертации изложены в 33 статьях, опубликованных в рецензируемых научных журналах, индексируемых в Scopus, Web of Science, RSCI. Важным элементом апробации результатов диссертационного исследования было их обсуждение на международных конференциях и публикация результатов в ведущих журналах. Научные результаты докладывались на следующих конференциях:

1. Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП) – 1999, 2001, 2003, 2005, 2007, 2009, 2011, 2013, 2015, 2017, 2019 и 2021 гг.

2. Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids (ICACS)- 2004, 2006, 2008 и 2012 гг.
3. Inelastic Ion-Surface Collisions (IISC) – 2004, 2006 и 2008 гг.
4. Eur. Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis – 2005 и 2007 гг.
5. Int. Workshop on High-Resolution Depth Profiling (HRDP) – 2009 и 2013 гг.
6. International meeting on ion beam analysis (IBA) – 2009 г.
7. International Nano Electronics Conference (INEC) – 2010 г.
8. International Conference "ThinFilms" – 2010 г. (приглашенный доклад).
9. International Conference on Atomic Physics (ICAP) – 2010 и 2014 гг.
- 10.Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC) - 2011 г.
- 11.International Conference on Structure of Surfaces (ICSOS) – 2011 г.
- 12.Int. Symposium on Negative Ions, Beams and Sources (NIBS) – 2020 г.

Личный вклад автора

подавляющее большинство научных результатов было получено автором лично. Работы по изучению электронного обмена с наносистемами были начаты под руководством проф. И.Ф. Уразгильдина.

Личный вклад автора в большинстве публикаций является определяющим, исключения составляют совместные работы [С29,С33], где автор отвечал за теоретическую часть.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из Введения, Заключение, 5 глав и трех приложений. Объем работы: 460 страниц (в том числе расширенный литературный обзор 131 страница и список литературы 42 страницы), 192 рисунка, 14 таблиц и 438 литературных источников.

Краткое содержание работы

Первая глава

В первой главе приводится расширенный литературный обзор по теме диссертационного исследования [С31]. Для удобства в диссертационной работе, если явно не оговорено иное, используется атомная система единиц, в

которой $m_e = e = \hbar = 1$; 1 ат. ед. расстояния - 0,53 Å, 1 ат. ед. времени - $2,419 \cdot 10^{-17}$ с., 1 ат. ед. скорости - $2,188 \cdot 10^8$ см/с, 1 ат. ед. энергии - 27,211 эВ.

Вторая глава

Во второй главе описана постановка и трехмерный неадиабатический подход к решению задачи электронного обмена, а также применяемые численные методы и их реализация [T16, T17, C8, C14, C15, C18, C20, C24, C29, C31, C33]. Изучаемая система состоит из: 1) атомной частицы; 2) металлической поверхности; 3) *активного* (переходящего) *электрона*.

Физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы определяет начальные условия и участок траектории ее движения, на котором проводится моделирование электронного обмена. Базовыми положениями физической модели являются (см. рис. 1): 1) Вследствие взаимодействия с зарядом изображения, *энергетическое положение* атомной частицы (энергия активного электрона) $E_a(z)$ зависит от расстояния до плоской металлической поверхности примерно как $+1/4z$ для положительных и $-1/4z$ для отрицательных или нейтральных атомных частиц [12]; 2) Потеря электрона атомной частицей возможна, если ее энергетическое положение находится выше уровня Ферми металла, в обратном случае происходит подхват электрона; 3) Вблизи поверхности устанавливается квазиравновесное зарядовое состояние, а конечное зарядовое состояние атомной частицы формируется при ее отлете от поверхности на расстояниях 5-20 ат. ед.⁶ Исходя из вышеизложенного, электронный обмен численно моделируется только на траектории отлета атомной частицы $z > z_f$, где z_f – расстояние пересечения с уровнем Ферми металла ($E_a(z_f) = E_f$, см. рис. 1; характерное значение z_f составляет 5-15 ат. ед.). Зарядовое состояние атомной частицы в точке z_f вычисляется или аппроксимируется из дополнительных

⁶ Для медленных ионов экспериментально установлен эффект "потери памяти" о начальном зарядовом состоянии [12], заключающийся в том, что конечное зарядовое состояние рассеянной атомной частицы не зависит от ее начального зарядового состояния и траектории движения непосредственно при соударении с поверхностью (0-3 ат. ед.).

условий задачи, например, атомы щелочных металлов считаются в точке z_f однократно положительно ионизированными.

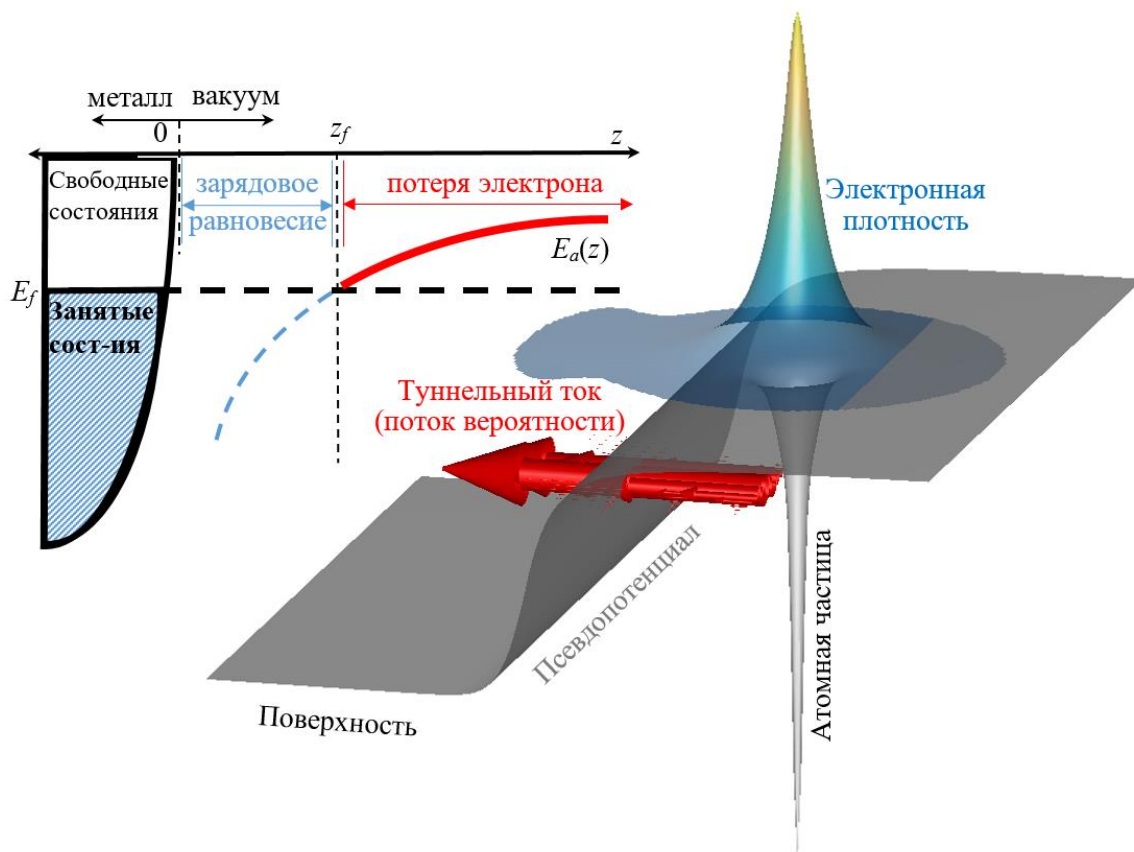


Рис. 1 Левая-верхняя часть – иллюстрация базовой физической модели формирования конечного зарядового состояния: слева показана электронная структура металла (заполненные/свободные состояния ниже/выше уровне Ферми E_f), справа показано энергетическое положение отрицательного иона $E_a(z)$ и области установления зарядового равновесия и потери электрона. Правая-нижняя часть - иллюстрация физической методики трехмерного моделирования; показан составной псевдопотенциал (серая поверхность), описывающий атомную частицу и металл, плотность распределения активного электрона и туннельный ток $j = (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) / 2i$. Более подробные комментарии даны в тексте.

Базовая физическая модель была усовершенствована диссертантом с учетом неоднородного рельефа поверхности и скорости движения атомной частицы. Для неоднородной (неплоской) металлической поверхности конфигурация зарядов, индуцированных ионом на поверхности, будет отличаться от случая плоской поверхности. Следовательно, будет меняться энергетическое положение иона $E_a(z)$ и расстояние z_f , что может оказывать существенное влияние на вероятность нейтрализации (см. рис. 5). Суть учета

скорости иона заключается в том, что мы анализируем возможность и направление электронного перехода в трехмерном пространстве волновых векторов. При моделировании статической задачи распределение активного электрона в k -пространстве локализовано около определенной точки. Следовательно, можно определить волновой вектор активного электрона \mathbf{k} ; при этом величина $E_a = |\mathbf{k}|^2/2$ является энергией активного электрона (энергетическим положением атомной частицы) относительно дна зоны проводимости. В динамическом случае распределение активного электрона в k -пространстве смещается на величину скорости атомной частицы $f(\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{v}) = f(\mathbf{k})$. Это приводит к изменению $E_a(z)$ на величину $\Delta E(z) = |\mathbf{k}'|^2/2 - |\mathbf{k}|^2/2 = |\mathbf{v}|^2/2 - \mathbf{v} \cdot \mathbf{k}$, и, соответственно, к изменению расстояния пересечения с уровнем Ферми z_f , что в конечном счете влияет на вероятность электронного перехода (см. рис. 6).

Для теоретического объяснения перезарядки при скользящем рассеянии ионов применяется модель пересекающихся сфер Ферми металла и переходящего электрона, в которой вероятность подхвата/потери электрона пропорциональна доле электронной плотности, находящейся внутри/вне сферы Ферми металла, соответственно. С учетом преобразования распределения электрона в k -пространстве из движущейся системы отсчета, связанной с ионом, в неподвижную систему отсчета, связанную с поверхностью, происходит относительное смещение двух сфер на величину скорости движения иона. Следовательно, вероятность перезарядки будет зависеть от величины параллельной скорости иона. Модель пересекающихся сфер Ферми была усовершенствована диссертантом с учетом реального распределения электронной плотности в трехмерном k -пространстве.

Физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена ионов с поверхностью металлов определяет способ описания атомной частицы и поверхности, вычисления эффективности электронного обмена и вероятности перезарядки. Физическая методика основана на трехмерной

реализации метода РВП и использовании трехмерных потенциалов, описывающих металл на атомном уровне. Путем решения нестационарного уравнения Шредингера моделируется туннелирование электрона через потенциальный барьер между атомной частицей и металлом (см. рис. 1 и работы [12,C21,C23]):

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta}{2} + U(\mathbf{r}, t) \right) \psi(\mathbf{r}, t); \quad \psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_0(\mathbf{r}) \quad (1)$$

где потенциал системы, "видимый" активным электроном, является суперпозицией псевдопотенциалов взаимодействия электрона с атомом/ионом, поверхностью и потенциалом заряда изображения $U(\mathbf{r}, t) = V_{atom}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_a(t)) + V_{surface}(\mathbf{r}) + V_{image}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_a(t))$. Вероятность нахождения электрона на атомной частице вычисляется как $P(t) = |\langle \psi(\mathbf{r}, t) | \psi_0(\mathbf{r}, t) \rangle|^2$.

Трехмерная реализация метода РВП требует моделирования в относительно большой расчетной области (например, $\sim 100 \times 100 \times 100 \text{ \AA}^3$ для островковой пленки радиусом 50 \AA и $\sim 10^7 \text{ \AA}^3$ для скользящих траекторий иона; что соответствует количеству дискретных точек $\sim 10^9 - 10^{10}$). Это является технически сложной задачей, для решения которой недостаточно просто использовать стандартные программы на современных вычислительных мощностях, т.к. требуется реализовать эффективное параллельное использование вычислительных ресурсов и масштабируемость. Для численного решения нестационарного уравнения Шредингера (1) в декартовых координатах диссертантом используется явная численная схема второго порядка, известная под названием "чехарда" или "leapfrog" [19,C18] $\varphi^{n+1} = -2i\tau [H\varphi^n] + \varphi^{n-1}, n \geq 1$. Дискретизация волновой функции и гамильтониана осуществляется методом конечных разностей. Описанное сочетание позволяет эффективно распараллелить вычисления. Для рассматриваемой задачи, переход в цилиндрические координаты почти на порядок уменьшает количество дискретных точек (и сложность вычислений) за счет более грубой дискретизации периферийных областей. Но, явная численная схема в

цилиндрических координатах неустойчива. Диссертантом была разработана гибридная численная схема, основанная на методе конечных разностей [C20]. Основная часть вычислений производится явным образом, но вблизи оси $\rho = 0$ для устранения неустойчивости применяется неявная схема.

Диссертантом был создан комплекс программ для моделирования электронного обмена [C18,C20]. Параллельные вычисления проводятся на графических вычислителях. При использовании нескольких (многих) вычислителей, масштабируемость $\sim 100\%$ достигается за счет применения технологии MPI (Message Parsing Interface). Верификация проводилась на хорошо изученных задачах, таких как моделирование атома водорода, и путем сравнения с результатами двумерных расчетов в цилиндрически симметричных системах. Производительность комплекса программ в несколько раз превосходит аналоги, существующие для молекулярных масштабов, а поддерживаемый размер расчётной области до 10^5 нм³ делает его уникальным инструментом для моделирования электронного обмена. Например, характерное время расчета задачи нейтрализации иона на нанокластере (объем расчетной области $\sim 150 \times 150 \times 150$ ат. ед.³, $\sim 0.5 \times 10^9$ дискретных точек, 3×10^5 шагов по времени) составляет около 10 часов, на сервере, оснащённом 4-мя вычислителями NVidia Tesla M2090.

Третья глава

В третьей главе с помощью физической методики трехмерного моделирования изучаются трехмерные эффекты электронного обмена [T18,T19,C19,C21]. На основе теории функционала плотности были построены трехмерные псевдопотенциалы для поверхностей Cu(100), Cu(110) и Cu(111), которые хорошо воспроизводят известные качественные и количественные закономерности электронного обмена, такие как характер электронного перехода [свободное туннелирование для поверхности Cu(110) и ограниченное движение для поверхностей Cu(100) и Cu(111), см. рис. 2],

зависимость эффективности электронного перехода от расстояния до поверхности и энергию поверхностного состояния [-5,33 эВ для Cu(111)].

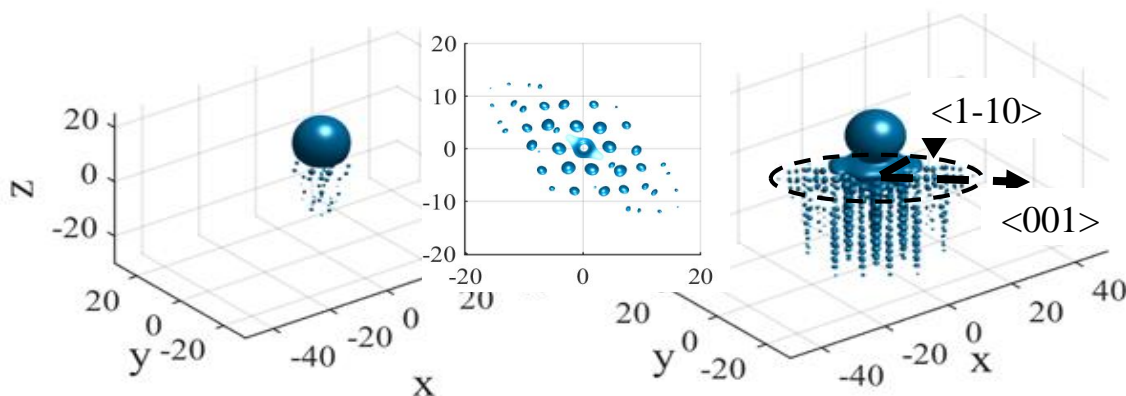


Рис. 2 Распределение электронной плотности при электронном обмене Н с поверхностью через 100 ат. ед. после начала взаимодействия. Слева - Cu(100), справа - Cu(110); по центру - первый слой Cu(110) (вид сверху).

За счет применения трехмерных псевдопотенциалов, впервые была получена реалистичная картина электронного перехода с детализацией на атомном уровне. Для поверхности Cu(110) был обнаружен интересный трехмерный эффект – анизотропия распространения электрона вдоль поверхности. Расчеты показали, что скорость распространения электронной плотности вдоль направления $\langle 001 \rangle$ примерно в два раза выше, чем вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (рис. 2), причем подобная анизотропия не наблюдается для поверхностей Cu(100) и Cu(111). Анизотропия распространения электрона является чисто трехмерным эффектом, который принципиально не мог быть получен в рамках двумерного рассмотрения. Он играет ключевую роль в объяснении азимутальной зависимости электронного обмена (см. Главу 4).

Также были исследованы особенности электронного обмена атомных частиц с наносистемами, такими как металлические нанокластеры и островковые пленки на диэлектрической подложке [T1-T15, C1-C17, C22]. 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. Общей закономерностью перехода электрона с атомной частицы⁷ в наносистему является иерархическая последовательность заполнения дискретных электронных состояний в наносистеме: вначале проявляется дискретность в направлении электронного перехода, т.е. вдоль нормали к поверхности, а затем в направлении параллельном поверхности наносистемы (см. рис. 3 в). Заметим, что трехмерная методика дает реалистичное распределение электронной плотности в нанокластере. Пространственное распределение плотности активного электрона в наносистеме является суперпозицией нескольких соответствующих собственных состояний электрона в наносистеме и движущейся части волнового пакета. Электронный ток (поток вероятности) при этом может образовывать квантовые вихри.

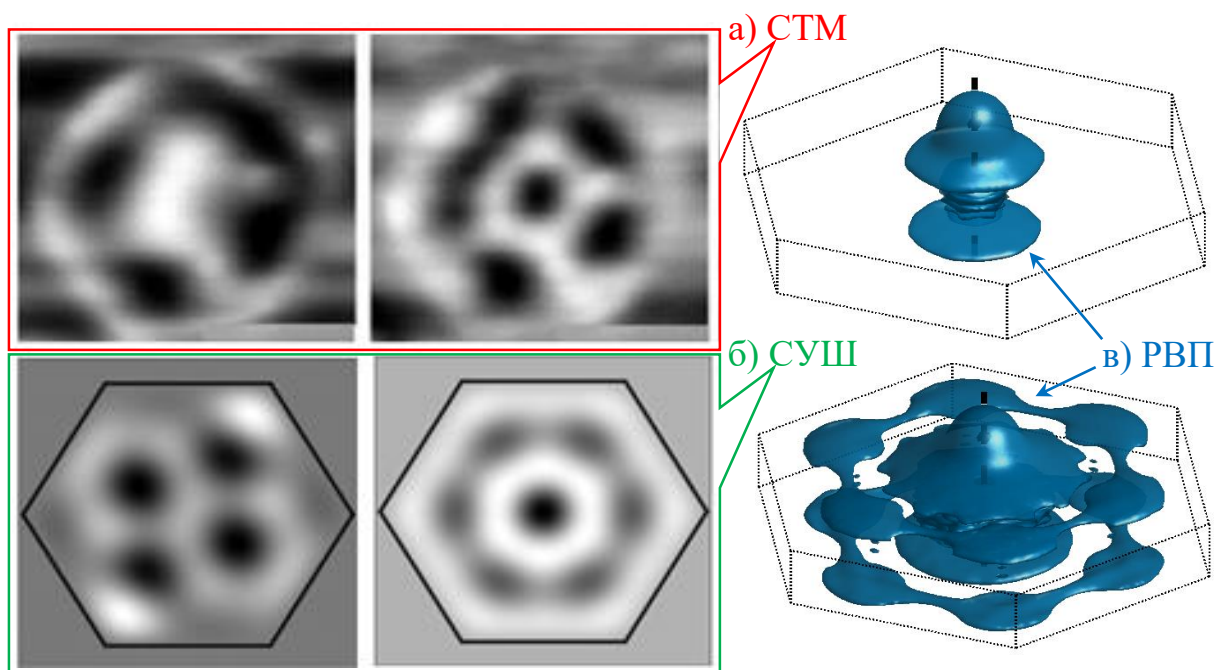


Рис. 3 Иллюстрация дискретной электронной структуры наносистем. а) СТМ-изображения электронной плотности для некоторых собственных состояний на поверхности гексагонального нанокластера Ag с внутренним диаметром 10.4 нм [20]; б) результаты расчета электронной плотности с помощью стационарного уравнения Шредингера; в) результаты моделирования туннелирования электрона из иона H⁻ в нанокластер методом РВП через 300 и 600 ат. ед. времени с начала взаимодействия.

⁷ На примере отрицательного иона водорода H⁻. Следует отметить, что распад/формирование H⁻ часто рассматривается в качестве эталонной задачи при изучении резонансного электронного обмена [12].

Если при электронном обмене с массивным образцом основным фактором, определяющим эффективность электронного обмена, является расстояние между атомной частицей и поверхностью, то в случае наносистем надо учитывать дискретность их электронной структуры. Эффективность электронного обмена с наносистемами сильно зависит от размеров наносистемы и латерального положения атомной частицы. Впервые был обнаружен квантово-размерный эффект, заключающийся в немонотонной зависимости эффективности электронного обмена от радиуса островковой пленки (рис. 4).

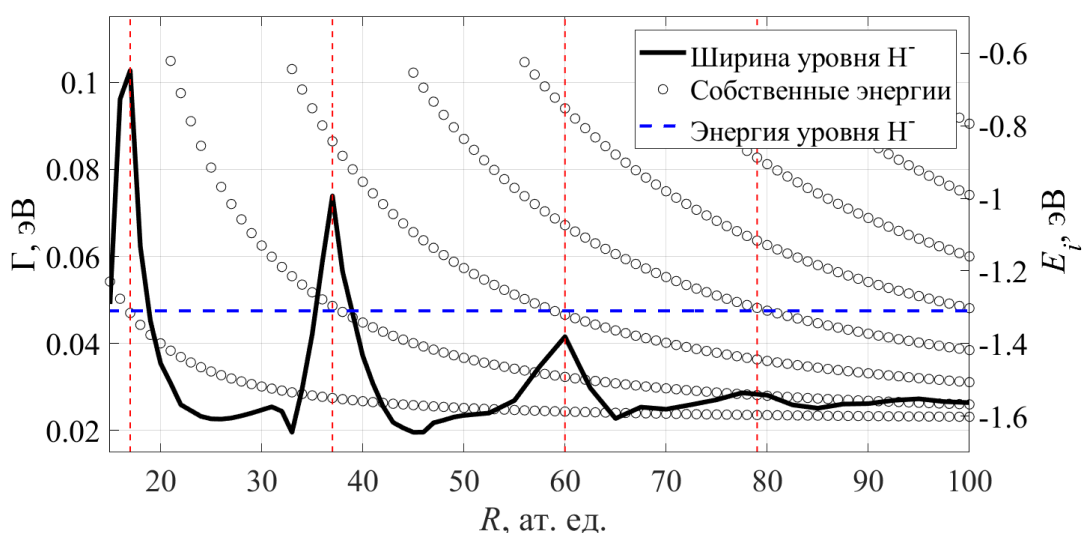


Рис. 4 Иллюстрация квантово-размерного эффекта: зависимость эффективности электронного обмена (ширины уровня – сплошная черная линия) и собственных уровней энергии по ρ (круглые маркеры) от радиуса островковой пленки Al толщиной 15 ат. ед.

Квантово-размерный эффект проявляется и для других геометрических форм металлических наносистем, например, шаровых кластеров атомов. Квантово-размерный эффект объясняется выполнением резонансных условий между энергетическим уровнем атомной частицы и определенным дискретным уровнем энергии электрона в наносистеме. При выполнении резонансных условий эффективность электронного обмена с наносистемами увеличивается до 5 раз по сравнению со случаем массивного образца. Влияние латерального (т.е. в плоскости поверхности) положения атомной частицы

объясняется тем, что при фиксированном расстоянии до поверхности электронный обмен происходит более эффективно (до 2-х раз), если атомная частица находится напротив локализации одного из собственных состояний наносистемы. Это является чисто "трехмерным" эффектом.

В заключении продемонстрировано, что основные закономерности сканирующей электронной микроскопии/спектроскопии с наносистемами, обусловленные их дискретной электронной структурой, могут быть адекватно описаны с помощью метода РВП при рассмотрении резонансного туннелирования электрона с иона на наносистему. На рис. 3 показано дискретное распределение электронной плотности в кластере Ag. Результаты расчетов (рис. 3 б) хорошо совпадают с данными [20] сканирующей туннельной микроскопии [21] (рис. 3 а). Также предложен эксперимент по регистрации квантово-размерного эффекта, который можно классифицировать как теоретическое предсказание.

Четвертая глава

Рассмотрим применение трехмерного неадиабатического подхода к моделированию экспериментов по зарядовому обмену [C21,C25-C29,C33]. Интересной экспериментальной закономерностью является существенное увеличение вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов при рассеянии на нанокластерах Au с уменьшением размеров кластера до 1 нм (рис. 5, [8]). Проведенный анализ показывает, что ранее предложенные модели не могут количественно объяснить данный эффект. Напомним физическую модель - нейтрализация ионов щелочных металлов осуществляется резонансно на расстояниях $z > z_f$. Из-за ослабления взаимодействия с зарядами изображения, энергетическое положение иона $E_a(z)$ рядом с нанокластером смещается вниз по шкале энергий, по сравнению со случаем сплошной плоской металлической поверхности (см. вставку на рис. 5). Это приводит к уменьшению расстояния z_f и существенному увеличению вероятности нейтрализации. Таким образом усовершенствованная физическая

модель количественно объясняет важный класс экспериментальных закономерностей (рис. 5).

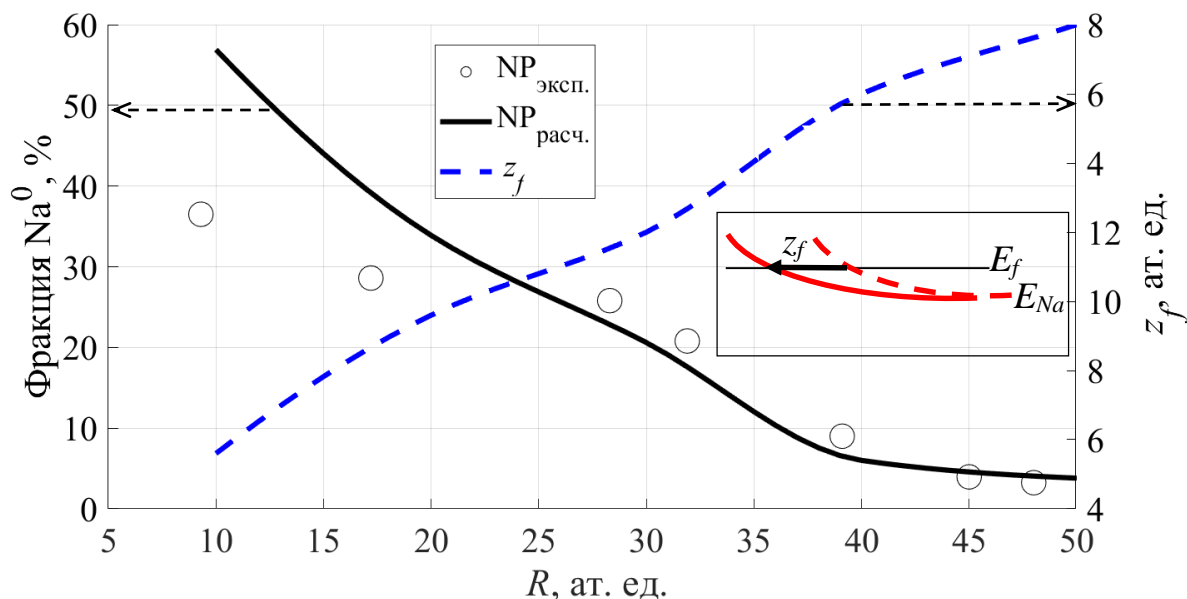


Рис. 5 Вероятность нейтрализации ионов Na^+ как функция радиуса нанокластера. Первичная энергия пучка 2 кэВ, угол рассеяния 150° . Экспериментальные данные взяты из работы [8]. Синей пунктирной линией показана зависимость z_f от радиуса кластера. На вставке проиллюстрировано уменьшение z_f за счет "понижения" энергетического положения иона: красная пунктирная линия – энергетическое положение иона $E_a(z)$ рядом со сплошной плоской металлической поверхностью, красная сплошная – рядом с металлическим нанокластером, сплошная черная линия – уровень Ферми E_f .

Также следует отметить объяснение немонотонной энергетической зависимости вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов на поверхностях с большой работой выхода [13]. В случае рассеяния Li^+ на поверхности Ag, монотонно убывающая вероятность нейтрализации логично объясняется тем, что при больших энергиях вероятность нейтрализации меньше в силу меньшего времени взаимодействия. Но, для Cu и Au энергетическая зависимость вероятности нейтрализации имеет немонотонный характер (рис. б), что ранее не было объяснено при адиабатическом рассмотрении задачи. Усовершенствованная физическая модель формирования конечного зарядового состояния объясняет немонотонную энергетическую зависимость за счет конкуренции двух факторов: 1) с одной

стороны, с ростом энергии иона сокращается время взаимодействия, что уменьшает вероятность нейтрализации; 2) с другой стороны, с ростом энергии иона понижается его энергетическое положение, вследствие чего уменьшается z_f и увеличивается вероятность нейтрализации (см. рис. 6).

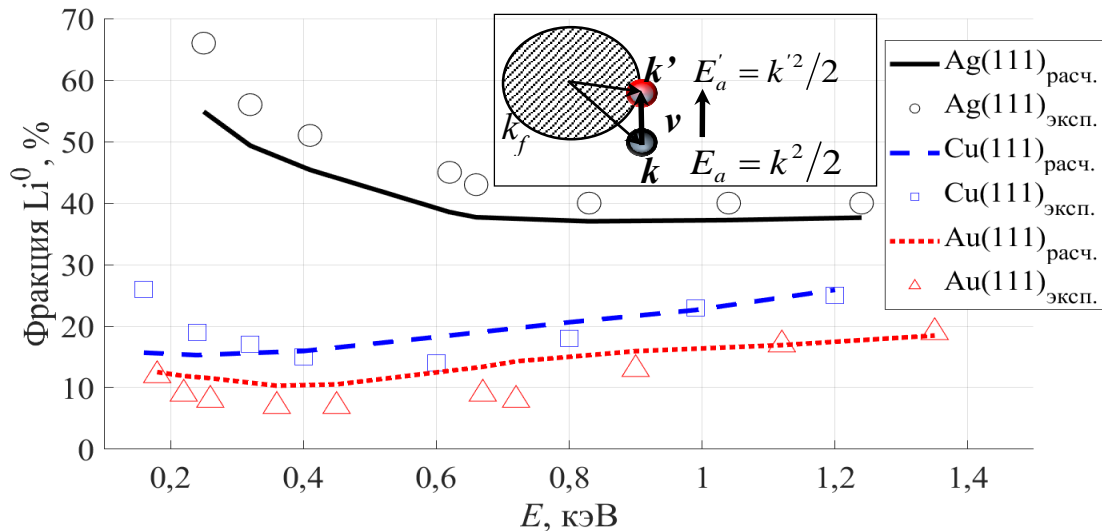


Рис. 6 Расчетная и экспериментальная [13] фракция выхода Li^0 как функция энергии первичного пучка для различных поверхностей. На вставке проиллюстрирована усовершенствованная физическая модель формирования конечного зарядового состояния: k_f – сфера Ферми металла, k и E_a – волновой вектор и энергия активного электрона при статическом рассмотрении, k' и E'_a – волновой вектор и энергия активного электрона с учетом движения атомной частицы (доп. комментарии в тексте).

Также было показано, что трехмерный подход позволяет «улавливать» тонкие неадиабатические эффекты, например, различия в вероятности выхода ионов H⁺ при рассеянии на поверхностях Ag(110) и Ag(111).

Благодаря учету реального распределения электронной плотности в трехмерном k -пространстве впервые было получено количественное совпадение с рядом экспериментов по электронному обмену при скользящем рассеянии. Показано, что для поверхностей с ограниченным движением электрона, например, Cu(111), распределение электрона в пространстве волновых векторов имеет не сферическую, а кольцеобразную форму, что увеличивает вероятность электронного перехода. Также была учтена анизотропия распространения электрона на поверхности (см. Главу 3). Из-за

анизотропии распределение активного электрона в k -пространстве имеет вид эллипсоида, а не сферы. Поэтому, функция пересечения эллипсоида и сферы от величины параллельной скорости будет зависеть и от азимутального направления движения атомной частицы (см. вкладки на рис. 7). Благодаря учету анизотропии распространения электрона, впервые было дано количественное объяснение экспериментальных данных по зависимости вероятности формирования ионов H^- от азимутального угла при скользящем рассеянии на поверхности $Cu(110)$ (рис. 7). Подчеркнем, что объяснение "азимутальной зависимости" стало возможным только благодаря трехмерному рассмотрению задачи и учету атомной/электронной структуры поверхности.

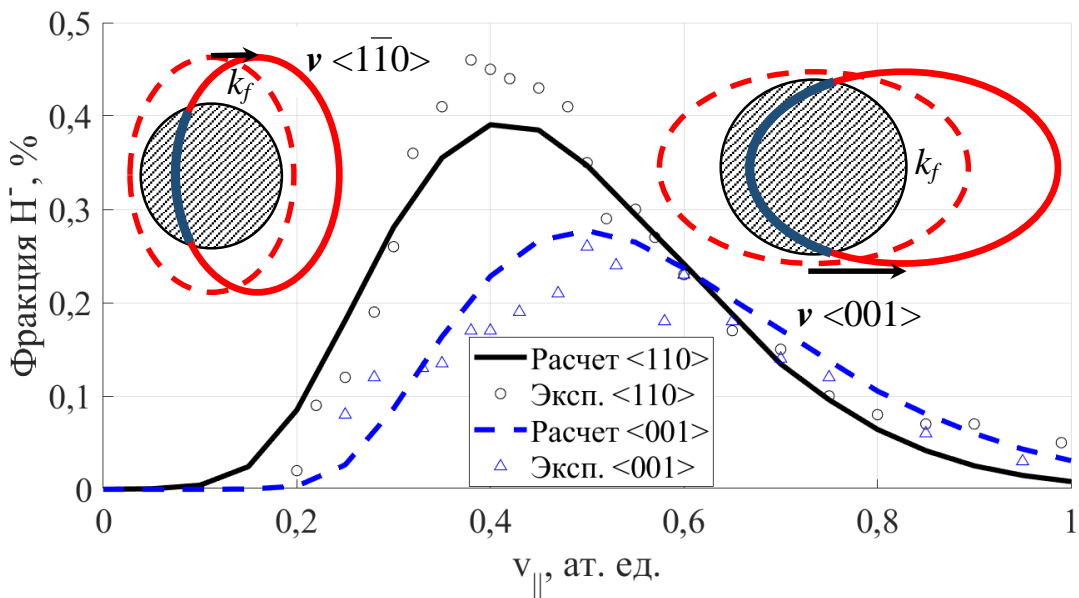


Рис. 7 Расчетная и экспериментальная [12] фракция ионов H^- , рассеянных от поверхности $Cu(110)$ как функция параллельной поверхности компоненты скорости ионного пучка. На вкладках - иллюстрация пересечения сферы Ферми металла с эллипсоидом распределения вероятности нахождения активного электрона.

Трехмерный неадиабатический подход был применен к 18 экспериментам, отражающим разнообразные аспекты электронного обмена, такие как: 1) разные типы ионов (Li^+ , Na^+ , H^-); 2) различные материалы мишени (Ag , Al , Au , Cu) и типы поверхности (со свободным и ограниченным движением электрона); 3) возможные направления электронного перехода (потеря и подхват электрона); 4) зависимость вероятности перезарядки от

энергии и угла вылета атомной частицы. Ключевым преимуществом трехмерного неадиабатического подхода является отказ от адиабатического приближения, что в совокупности с учетом атомной структуры и усовершенствованной физической моделью, **позволяет количественно описывать экспериментальные данные** - погрешность составляет менее 10%. Это сопоставимо с экспериментальной погрешностью и **в несколько раз улучшает точность расчетно-теоретического описания экспериментов** по сравнению с ранее применяемыми адиабатическими подходами.

Пятая глава

Разработанный трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена имеет практическое значение для анализа элементного состава с помощью рассеяния медленных ионов и повышения эффективности источников отрицательных ионов [С23,С30,С32].

Традиционно для количественного анализа состава используется метод эталонных образцов. Его суть заключается в калибровке относительной элементной чувствительности $\eta_i = P_i^+ d\sigma_i/d\Omega$ на чистых веществах или материалах с известным элементным составом. Однако, метод эталонных образцов достаточно хорошо работает в случае рассеяния ионов инертных газов: их нейтрализация осуществляется "короткодействующими" Оже-процессами и непосредственно при соударении с атомом решетки. Нейтрализация ионов щелочных металлов осуществляется резонансно на расстоянии 5-15 ат. ед. от поверхности. Поэтому вероятность нейтрализации ионов щелочных металлов существенно зависит от макроскопических свойств поверхности, в первую очередь от работы выхода. Пренебрежение этим фактом может приводить к существенным ошибкам. Диссертантом рассмотрено несколько примеров анализа состава металлических поверхностей методом РМИ с ионами щелочных металлов. На примере определения концентрации Zn на поверхности Pt(111) [22] было показано, что из-за высокой (60-70%) вероятности нейтрализации Na^+ на эталонной

поверхности Zn, регистрируется только треть рассеянных ионов, что в 3 раза занижает элементную чувствительность к Zn. Следовательно, метод эталонных образцов без учета нейтрализации приводит к **трехкратной ошибке**. Для учета нейтрализации ионов необходимо корректировать данные, полученные методом эталонных образцов, либо проводить прямой расчет элементной чувствительности. На конкретных примерах диссертантом показано применение обоих вариантов. При этом, прямой расчет элементной чувствительности не требует дополнительных измерений на эталонных образцах, что сокращает количество экспериментов.

Также была рассмотрена возможность повышения эффективности источников отрицательных ионов за счет использования эффекта параллельной скорости. Показано, что конфигурация источника отрицательных ионов, которая реализует столкновение частиц водорода с преобразующей поверхностью и выход из нее H⁻ под наклонным углом, может увеличить вероятность образования ионов H⁻ до 30%.

Заключение

В заключении приводится развернутое описание выводов по результатам проделанной работы и перспективы дальнейшего развития работ по данной теме. В диссертационной работе показана важность "трехмерных" и неадиабатических эффектов электронного обмена, учет которых в ряде случаев дает кратное отличие от результатов "двумерного" рассмотрения задачи и позволяет объяснить экспериментальные данные.

Выводы

1. Физическая модель формирования конечного зарядового состояния атомной частицы была усовершенствована за счет учета ее скорости и рельефа поверхности. Было показано, что энергетическое положение атомной частицы зависит от: 1) ее скорости - за счет смещения распределения плотности активного электрона в пространстве волновых векторов; 2) рельефа поверхности – за счет изменения конфигурации индуцированных зарядов на

поверхности. В результате чего изменяется расстояние пересечения уровня атомной частицы с уровнем Ферми z_f и вероятность электронного перехода.

2. Построена физическая методика трехмерного моделирования электронного обмена между ионом и поверхностью с учетом атомной структуры последней. С ее помощью рассмотрены особенности электронного обмена между ионом и металлической поверхностью в трехмерном случае, получена реалистичная картина динамики электронного перехода. Обнаружен эффект анизотропии распространения электрона вдоль поверхности, важный для количественного описания экспериментальных данных. На примере поверхности Cu(110) показано, что вдоль направления $\langle 001 \rangle$ волновой пакет электрона H^- распространяется примерно в 2 раза быстрее, чем вдоль ортогонального направления.

3. Создан комплекс программ для трехмерного моделирования электронного обмена, обладающий высокой производительностью за счет специально разработанной гибридной численной схемы и эффективного распараллеливания расчетов на графических вычислителях. Производительность комплекса программ в несколько раз превосходит существующие аналоги, а поддерживаемый размер расчётной области до 10^5 nm^3 делает его уникальным для моделирования задач электронного обмена.

4. Изучены особенности электронного обмена атомных частиц с наносистемами. Показано, что общей закономерностью перехода электрона с атомной частицы в наносистему является иерархическая последовательность заполнения дискретных уровней электрона в наносистеме в перпендикулярном и параллельном поверхности направлениях. Трехмерное рассмотрение задачи позволяет получить реалистичное распределение электронной плотности и наблюдать квантовые вихри.

5. Показано, что эффективность электронного обмена с наносистемами зависит от ее размеров (квантово-размерный эффект) и латерального положения атомной частицы. Квантово-размерный эффект объясняется выполнением резонансных условий между энергетическим уровнем атомной

частицы и дискретным уровнем энергии электрона в наносистеме. При выполнении резонансных условий эффективность электронного обмена с наносистемами увеличивается до 5 раз по сравнению со случаем массивного образца. Влияние латерального положения атомной частицы в плоскости поверхности объясняется тем, что электронный обмен происходит эффективнее, если атомная частица находится вблизи пространственной локализации одного из трехмерных собственных состояний наносистемы.

6. Изучены условия, необходимые для проявления квантово-размерного эффекта. Первым условием является время взаимодействия иона с наносистемой не менее 500 ат. ед. времени, что соответствует максимальной скорости ионов порядка 0,05 ат. ед. скорости (или энергии ~ 60 эВ для ионов водорода и 2,5 кэВ для ионов аргона). Вторым условием является радиальный размер островковой пленки не более 100 ат. ед., т.к. при больших размерах перестает проявляться дискретная электронная структура наносистемы.

7. Дано количественное объяснение сильного увеличения вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов при рассеянии на нанокластерах золота по сравнению со случаем макроскопического образца. Эффект объясняется изменением энергетического положения иона за счет взаимодействия с зарядом изображения, которое заметно отличается в случае нанокластера и плоской поверхности. Так вероятность нейтрализации Na^+ возрастает с 3% при рассеянии на массивном образце Au до 50% при рассеянии на нанокластере Au радиусом 1 нм.

8. Дано количественное объяснение немонотонной энергетической зависимости вероятности нейтрализации ионов щелочных металлов (Li^+/Na^+) при рассеянии на поверхностях с большой работой выхода [Cu(111) и Au(111)] основанное на конкуренции между двумя факторами: 1) уменьшение времени взаимодействия с ростом энергии иона, что уменьшает вероятность нейтрализации; 2) уменьшения расстояния z_f , что увеличивает вероятность нейтрализации.

9. Рассмотрен электронный обмен при скользящем рассеянии ионов на металлических поверхностях. Модель пересекающихся сфер Ферми была усовершенствована с учетом реального распределения электронной плотности в трехмерном пространстве волновых векторов; было получено количественно совпадение с рядом экспериментов. Благодаря учету трехмерного эффекта анизотропии распространения электрона, впервые было дано количественное объяснение зависимости вероятности формирования H^- от азимутального угла при скользящем рассеянии на поверхности $Cu(110)$.

10. На основе усовершенствованной физической модели и физической методики трехмерного моделирования был разработан трехмерный неадиабатический подход к расчетно-теоретическому описанию электронного обмена, которой был применен к расчету 18 экспериментов, отражающих различные аспекты электронного обмена. Точность расчетов была повышена в $\sim 2,5$ раза по сравнению с ранее применяемыми адиабатическими подходами, что позволило количественно (с точностью 10%) описывать экспериментальные данные.

11. Продемонстрировано, что при анализе состава металлических поверхностей с помощью рассеяния ионов щелочных металлов, широко используемый метод эталонных образцов приводит к существенным (кратным) ошибкам, если не учитывать нейтрализацию ионов. Например, в работе [22] в 3 раза завышена концентрация Zn на поверхности $Pt(111)$. Показано, что для учета нейтрализации ионов необходимо корректировать данные, полученные методом эталонных образцов, либо рассчитывать элементную чувствительность. Вероятность нейтрализации ионов можно оценить из имеющихся экспериментальных данных, либо рассчитать с помощью трехмерного неадиабатического подхода, созданного в рамках диссертационного исследования. Прямой расчет элементной чувствительности позволяет избежать дополнительных измерений на эталонных образцах.

Публикации в трудах конференций

- T1. Гайнуллин И. К. и др. Квантово-размерный эффект при резонансном электронном обмене между ионом и тонкими металлическими пленками // Взаимодействие ионов с поверхностью 2001 (ВИП-2001), — Т. 1. — С. 27.
- T2. Gainullin I. K., Usman E. Y., Urazgildin I. F. Quantum-size effect during interaction of hydrogen negative ion with thin metal disk // 21th International conference on Atomic Collisions in Solids. — Genova, Italy, 2004. — P. 190.
- T3. Gainullin I. K., Usman E. Y., Goryunov D. G., Urazgil'din I. F. Electron-exchange processes between an atomic particle and low dimension systems // 15th International Workshop on Inelastic Ion Surface Collisions. — Ise-Shima, Mie, Japan, 2004. — P. 135.
- T4. Гайнуллин И. К., Сатарин К. К., Усман Е. Ю., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена между ионом и тонким металлическим диском. Наблюдение квантово-размерного эффекта // ВИП-2005. — С. 249.
- T5. Gainullin I. K., Urazgil'din I. F. Electron exchanges in the collision between hydrogen and thin aluminum disk // 11th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA05, in Vienna. — Vol. 1. — 2005. — P. 297.
- T6. Gainullin I. K., Usman E. Y., Satarin K. K., Urazgil'din I. F. Parallel velocity effect on electron exchange under grazing scattering of hydrogen ions H^- from thin aluminum film // 1th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis, — Vol. 1. — 2005.
- T7. Gainullin I. K., Satarin K. K., Shestakov D. K., Urazgildin I. F. Quantum size effect during collision between ion and thin metal film // 22th International Conference on Atomic Collisions in Solids. — Berlin (Germany), 2006. — P. 21–26.
- T8. Shestakov D. K., Magunov A. A., Gainullin I. K., Urazgildin I. F. Electron exchange between a h^- ion and a spherical cluster of aluminum atoms // 23th International Conference on Atomic Collisions in Solids (ICACS-2008). — Phalaborwa, South Africa, 2008. — P. 50.
- T9. Аманбаев Е. Р., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К. Эффект параллельной скорости при скользящем рассеянии иона водорода на шаровом кластере атомов алюминия // ВИП-2009. — 2009. — С. 202–205.
- T10. Shestakov D. K., Gainullin I. K. Theoretical approach to nanoobjects sizes measurement // 19th International meeting on ion beam analysis. — Cambridge, UK, 2009. — P. 185.
- T11. Gainullin I. K., Shestakov D. K. Determination of thickness of thin films from grazing scattering experiments // 5th International Workshop on High-Resolution Depth Profiling (HRDP-5). — Vol. 5. — Kyoto, Japan, 2009. — P. 30.
- T12. Satarin K. K., Polivnikova T. N., Gainullin I. K. Electron charge transfer along quantum nanosystems // Proc. of the International Nano Electronics Conference 2010. — 2010. — P. 589.

- T13. Gainullin I. K., Urazgildin I. F. Electron exchange in thin films (invited talk) // Proceedings of 5th International Conference on Technological Advances of Thin Films and Surface Coatings ThinFilms-2010. — Harbin, China, 2010.
- T14. Gainullin I. K. Calculation of electron tunneling between atomic particle and metal surface // 22nd International Conference on Atomic Physics (ICAP-2010). — Cairns, Australia, 2010.
- T15. Gainullin I. K., Zyкова E. Y. Electronic structure of thin island metal films // 10th International Conference on Structure of Surfaces. — Hong Kong, China, 2011. — P. 38.
- T16. Гайнуллин И. К. Высокоэффективный способ численного решения трехмерной задачи зарядового обмена // 21-ая Международная конференция "Взаимодействие ионов с поверхностью". — Ярославль, 2013. — С. 306–309.
- T17. Gainullin I. K. High-performance parallel solver for 3D time-dependent Schrodinger equation for large-scale nanosystems // Proceeding of the 24th International Conference in Atomic Physics. — Washington, USA, 2014.
- T18. Гайнуллин И.К. Трехмерные эффекты при резонансном электронном обмене между атомными частицами и наносистемами // Взаимодействие ионов с поверхностью. — Москва, 2015. — Т. 1. — С. 210-213.
- T19. Gainullin I. K. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces // 23-ья Международная конференция "Взаимодействие ионов с поверхностью". — Москва, 2017. — Т. 1. — С. 180.

Статьи в журналах WoS, Scopus, RSCI

- C1. Гайнуллин И. К., Горюнов Д. Г., Усман Е. Ю., Уразгильдин И. Ф. Квантово-размерный эффект при резонансном электронном обмене между ионом и тонкими металлическими пленками // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2002. — Т. 66. — С. 1004–1007. [IF: RSCI – 0,583]
- C2. Gainullin I. K., Usman E. Yu., Song Y. W., Urazgil'din I. F. Electron-exchange processes between hydrogen negative ion and thin aluminum films // Vacuum. — 2003. — V. 72. — P. 263. [IF: WoS – 4,11]
- C3. Гайнуллин И. К., Усман Е. Ю., Сонг Ё. В., Уразгильдин И. Ф. Резонансная перезарядка при взаимодействии иона H⁻ и тонкой металлической пленки // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2004. — Т. 68. — С. 351. [IF: RSCI – 0,583]
- C4. Gainullin I. K., Usman E. Y., Urazgil'din I. F. 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. — P. 22. [IF: WoS – 1,279]
- C5. Гайнуллин И. К., Сатарин К. К., Усман Е. Ю., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена между ионом и тонким металлическим диском. Наблюдение квантово-размерного эффекта // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2005. — № 1. — С. 39–42. [IF: RSCI – 0,863]

- C6. Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена при столкновении иона H^- с тонким металлическим диском // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2006. — Т. 70. — С. 897–901. [IF: RSCI – 0,583]
- C7. Gainullin I. K., Urazgildin I. F. Quantum size effect in the electron exchange between a H^- ion and a thin metal disk // Physical Review B. — 2006. — V. 74. — N. 20. — P. 205403. [IF: WoS – 3,908]
- C8. Сатарин К. К., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Переход электрона вдоль атомной цепочки // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2007. — Т. 7. — С. 98–101. [IF: RSCI – 0,863]
- C9. Магунов А. А., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена при столкновении отрицательного иона водорода с кластером атомов алюминия // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2007. — Т. 71, № 10, — С. 1525. [IF: RSCI – 0,583]
- C10. Магунов А. А., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Квантово-размерный эффект при электронном обмене между отрицательным ионом водорода и кластером атомов алюминия // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2008. — № 9. — С. 93–96. [IF: RSCI – 0,863]
- C11. Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К., Уразгильдин И. Ф. Особенности электронного обмена при скользящем рассеянии ионов H^- на тонком алюминиевом диске // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2009. — № 1. — С. 38–42. [IF: RSCI – 0,863]
- C12. Shestakov D. K., Polivnikova T. Yu., Gainullin I. K., Urazgildin I. F. 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. — P. 2596. [IF: WoS – 1,279]
- C13. Аманбаев Е. Р., Шестаков Д. К., Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена при скользящем рассеянии ионов водорода на шаровом кластере атомов алюминия // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2009. — № 11. — С. 23–26. [IF: RSCI – 0,863]
- C14. Сатарин К. К., Аманбаев Е. Р., Гайнуллин И. К. Особенности электронного транспорта вдоль неоднородных атомных цепочек // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2010. — Т. 74. — С. 167–171. [IF: RSCI – 0,583]
- C15. Поливникова Т. Н., Сатарин К. К., Хайдаров А. А., Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена отрицательного иона водорода с атомными цепочками // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2010. — № 9. — С. 105–108. [IF: RSCI – 0,863]
- C16. Amanbaev E. R., Gainullin I. K., Zyкова E. Y., Urazgildin I. F. Electron exchange between atomic particle and thin metal island films // Thin Solid Films. — 2011. — V. 519. — P. 4737. [IF: WoS – 2,358]

- C17. Аманбаев Е. Р., Зыкова Е. Ю., Клавсюк А.Л., Поливникова Т. Н., Хайдаров А. А., Гайнуллин И. К. Расчет электронной структуры металлических островковых пленок // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – № 7. – С. 70. [IF: RSCI – 0,863]
- C18. Gainullin I. K., Sonkin M. A. High-performance parallel solver for 3D time-dependent Schrodinger equation for large-scale nanosystems // Computer Physics Communications. – 2015. – V. 188. – P. 68-75. [IF: WoS – 4,717]
- C19. Gainullin I. K., Sonkin M. A. Three-dimensional effects in resonant charge transfer between atomic particles and nanosystems // Physical Review A. – 2015. – V. 92.– P. 022710. [IF: WoS – 2,971]
- C20. Gainullin I. K. High-performance GPU parallel solver for 3D modeling of electron transfer during ion–surface interaction // Computer Physics Communications. – 2017. – V. 210. – P. 72. [IF: WoS – 4,717]
- C21. Gainullin I. K. Three-dimensional modeling of resonant charge transfer between ion beams and metallic surfaces // Physical Review A. – 2017. – V. 95. – N. 5. – P. 052705. [IF: WoS – 2,971]
- C22. Поддельская О. В., Зыкова Е. Ю., Нищак О. Ю., Стрелецкий О. А., Гайнуллин И. К. Влияние геометрических размеров наносистемы на основные характеристики зарядового обмена с отрицательным ионом // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2018. — № 6. — С. 74-82. [IF: RSCI – 0,863]
- C23. Gainullin I. K. Towards quantitative LEIS with alkali metal ions // Surface Science. – 2018. – V. 677. – P. 324-332. [IF: WoS – 2,07]
- C24. Гайнуллин И. К., Сонькин М. А. Трехмерное моделирование зарядового обмена ионов с металлическими поверхностями // Математическое моделирование. – 2019. – Т. 31. – С. 95. [IF: RSCI – 0,613]
- C25. Gainullin I. K. Theoretical explanation of strong enhancement of alkali metal ion neutralization on Au nanoclusters // Surface Science. – 2019. – V. 681. – P. 158-165. [IF: WoS – 2,07]
- C26. Гайнуллин И. К. Особенности электронного обмена ионов с металлическими нанокластерами // Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2019. – №. 5. – С. 33. [IF: WoS – 0,536]
- C27. Gainullin I. K. Theoretical investigation of the ion-induced polarization-charge influence on resonant charge transfer // Physical Review A. – 2019. – V. 100. – P. 032712. [IF: WoS – 2,971]
- C28. Александров А.Ф., Гайнуллин И. К., Сонькин М.А. Некоторые особенности электронного обмена ионов с поверхностью металлов, обусловленные ее атомной структурой // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2020. — № 8. — С. 42-49. [IF: RSCI – 0,863]
- C29. Liu P., Yin L., Zhang Z., Ding B., Shi Y., Li Y., Zhang X., Song X., Guo Y., Chen L., Chen X., Gainullin I. K., Esaulov V.A. Anomalous neutralization

- characteristics in Na⁺ neutralization on Al(111) surfaces // *Physical Review A*. – 2020. – V. 101. – P. 032706. [IF: WoS – 2,971]
- C30. Gainullin I. K., Dudnikov V. G. Theoretical investigation of the negative ionization of hydrogen particles on metal surfaces with low work function // *Plasma Research Express*. – 2020. – V. 2. – P. 045007. [IF: Scopus – N/D]
- C31. Гайнуллин И. К. Резонансный электронный обмен при рассеянии ионов на металлических поверхностях // *Успехи физических наук*. – 2020. – Т. 190. – №. 9 – С. 950. [IF: WoS – 3,361; RSCI – 2,090]
- C32. Гайнуллин И. К., Зыкова Е. Ю., Дудников В. Г. Теоретическое изучение вероятности отрицательной ионизации водорода, дейтерия, трития и мюония на металлических поверхностях // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. — 2022. — Т. 86. — С. 673–680. [IF: RSCI – 0,583]
- C33. Shi Y., Yin L., Ding B., Song X., Zhang L., Guo Y., Chen L., Chen X., Melkozerova J. A., Klavsyuk A. L., Gainullin I.K., Esaulov V.A. Thickness-dependent neutralization of low-energy alkali-metal ions scattering on graphene // *Physical Review A*. – 2022. – V. 105. – P. 042807. [IF: WoS – 2,971]

Библиографический список

1. Мартыненко Ю. В. К теории распыления монокристаллов // *Физика твердого тела*. – 1964. – Т. 6. – С. 2003.
2. Зорин Е. И., Павлов П. В., Тетельбаум Д. И. Ионное легирование полупроводников. - М. : Энергия. 1975. - 129 с.
3. Курнаев В. А., Машкова Е. С., Молчанов В. А. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. – М.: Энергоатомиздат. 1985.
4. Еловигов С. С., Зыкова Е. Ю., Мосунов А. С., Семенов А. А., Шкарбан И. И., Юрасова В.Е. Зависимость распыления нитрида бора от энергии, массы и угла падения ионов // *Известия РАН. Серия Физическая* – 2002. – Т. 66. – С. 558.
5. Тужилкин М. С., Карасев П.А., Титов А.И. и др. Формирование наночастиц Au и особенности травления подложки Si после облучения атомарными и молекулярными ионами // *Физика и техника полупроводников*. – 2020. – Т. 54. – №. 1. – С. 90-96.
6. Кононина А. В., Шемухин А.А., Черныш В.С. и др. Аморфизация кремниевых нанонитей при облучении ионами аргона // *Письма в ЖТФ*. – 2022. – Т. 48. – №. 2. – С. 11.
7. Andrianova N. N., Borisov A. M., Mashkova E. S., Shulga V. I. Influence of surface corrugation on the sputtering of carbon materials under high-fluence ion bombardment // *Journal of Surface Investigation*. – 2016. – V. 10. –P. 412.
8. Liu G. F., Sroubek Z., Yarmoff J. A. Detection of quantum confined states in Au nanoclusters by alkali ion scattering // *Physical review letters*. – 2004. – V. 92. – N. 21. – P. 216801.
9. Urazgil'din I. F. Chemical effects in secondary ion emission from metal surfaces // *Physical Review B*. – 1993. – V. 47. – N. 7. – P. 4139.

10. Guillemot L., Esaulov V. A. Interaction time dependence of electron tunneling processes between an atom and a surface // *Physical review letters*. – 1999. – V. 82. – N. 22. – P. 4552.
11. Bahrim B., Makarenko B., Rabalais J. W. Band gap effect on H⁻ ion survival near Cu surfaces // *Surface science*. – 2005. – V. 594. – N. 1. – P. 62-69.
12. Winter H. Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence // *Physics Reports*. – 2002. – V. 367. – N. 5. – P. 387-582.
13. Canario A. R., Kravchuk T., Esaulov V. A. Bandgaps, surface states and the anomalous neutralization of Li⁺ on (111) surfaces of noble metals // *New Journal of Physics*. – 2006. – V. 8. – N. 10. – P. 227.
14. Obreshkov B., Thumm U. H⁻ formation in collisions of hydrogen atoms with Al (100) surfaces // *Physical Review A*. – 2013. – V. 87. – N. 2. – P. 022903.
15. Бельченко Ю. И., Димов Г. И., Дудников В. Г. Физические основы поверхностно-плазменного метода получения пучков отрицательных ионов // Новосибирск: ИЯФ СО АН СССР. – 1977. – Т. 43. – С. 77-56.
16. Los J., Geerlings J. J. C. Charge exchange in atom-surface collisions // *Physics reports*. – 1990. – V. 190. – N. 3. – P. 133-190.
17. Canario A. R. et al. Nonadiabatic effects in atom-surface charge transfer // *Physical Review B*. – 2005. – V. 71. – N. 12. – P. 121401.
18. Оура К., Лифшиц В. Г., Саранин А. А., Зотов А. В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. М.: Наука, 2006, 490с.
19. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М: Изд-во Московского ун-та. 1999.
20. Li J., Schneider W.-D., Crampin S., Berndt R. Tunnelling spectroscopy of surface state scattering and confinement // *Surface Science*. – 1999. – V. 422. – N. 1-3. – P. 95-106.
21. Арсеев П. И., Манцевич В. Н., Маслова Н. С., Панов В. И. Особенности туннельных процессов в полупроводниковых наноструктурах // *Успехи физических наук*. – 2017. – Т. 187. – №. 11. – С. 1147-1168.
22. Ho C. S. et al. Alloy formation and chemisorption at Zn/Pt (111) bimetallic surfaces using alkali ISS, XPD, and TPD // *The Journal of Physical Chemistry A*. – 2013. – V. 117. – N. 46. – P. 11684-11694.