

УДК 537.534

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ОБМЕНА МЕЖДУ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ И АТОМОМ ВОДОРОДА В ВОЗБУЖДЕННОМ $p$ -СОСТОЯНИИ

© 2023 г. С. С. Москаленко<sup>а</sup>, И. К. Гайнуллин<sup>а, \*</sup>

<sup>а</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Москва, 119992 Россия

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

Поступила в редакцию 28.01.2022 г.

После доработки 27.02.2022 г.

Принята к публикации 27.02.2022 г.

Численно изучены некоторые особенности электронного обмена между ионами и поверхностью металлов, обусловленные ее атомной структурой. Моделирование основано на трехмерной реализации метода распространения волновых пакетов. Изученная система состояла из металлической поверхности Al(110) и возбужденного атома водорода с электроном, находящимся в  $p$ -состоянии, которому не свойственна сферическая симметрия. При рассмотрении модельной статической задачи было показано, что электронный обмен более эффективен при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали перпендикулярно поверхности металла, нежели параллельно. Также анализ полученных данных показал, что зависимость заселенности энергетического уровня атома от времени имеет экспоненциальный спад. Рассмотрение динамической задачи показывает, что для движущегося вдоль поверхности металла возбужденного атома водорода электронный обмен не зависит от ориентации  $p$ -орбитали относительно направления движения атома. Исследование динамики электронного обмена с поверхностью позволяет наблюдать для  $p$ -орбиталей, ось симметрии которых направлена параллельно поверхности металла, расхождения двух частей электронной плотности переходящего на поверхность электрона относительно плоскости симметрии  $p$ -орбитали.

**Ключевые слова:** ионные пучки, электронный обмен, трехмерное моделирование, рассеяние медленных ионов.

DOI: 10.31857/S1028096022110152, EDN: BKJIQJ

### ВВЕДЕНИЕ

#### *Актуальность и текущее состояние*

Изучение взаимодействия ионных пучков с поверхностью твердых тел имеет большое значение для фундаментальной и прикладной физики. Эффектам, проявляющимся при таком взаимодействии, найдено широкое применение в диагностике твердых тел, контролируемой модификации свойств поверхности, лечении онкологических заболеваний и создании функциональных покрытий [1–3].

Процессы, происходящие при взаимодействии атомных частиц с поверхностью, можно разделить на упругие и неупругие. В случае первых полная кинетическая энергия системы сохраняется. К ним относятся такие процессы как распыление атомов твердого тела, рассеяние ионов и модификация кристаллической решетки. В свою очередь, к неупругим процессам относятся, например, электронная эмиссия, перестройка электронной подсистемы атомов и электронный обмен.

Среди неупругих процессов, происходящих при взаимодействии иона с поверхностью, рассмотрим зарядовый (электронный) обмен. Изучение механизмов зарядового обмена важно для физики твердого тела, атомной физики и смежных областей, поскольку данный процесс используют при диагностике химического состава поверхности, определении работы выхода металлов, создании газовых сенсоров и высокоэффективных источников отрицательных ионов [4–14].

Процессы электронного обмена бывают трех видов. Первый – это резонансный электронный обмен, то есть процесс обмена электронами, находящимися в зоне проводимости, с сохранением энергии электрона. Второй вид процессов – двухэлектронные оже-процессы. Третий вид – это квазирезонансный электронный обмен с участием электронов внутренней оболочки частиц системы. Последний из упомянутых процессов возможен только для определенной комбинации ионов инертных газов и металлической поверхности. Для него характерна осцилляция зарядового со-

стояния рассеянных ионов, которую можно объяснить с помощью модели Ландау–Зинера [15]. Так как при электронном обмене с металлами одноэлектронные процессы зарядового обмена доминируют над многоэлектронными, резонансный электронный обмен является наиболее важным, и его активно изучают в последнее время [16–41].

Стоит отметить, что резонансный электронный обмен играет немаловажную роль при диагностике состава поверхности методом рассеяния медленных ионов, обладающим наилучшей поверхностной чувствительностью [42–58], что позволяет изучать самый верхний слой поверхности (вплоть до 1–2 атомных слоев). Так как большинство экспериментальных установок регистрирует положительно заряженные ионы, необходимо определять такие характеристики как вероятность их нейтрализации и сечение рассеяния. В противном случае спектральный анализ рассеянных ионов приведет к неточным результатам определения состава поверхности.

Помимо экспериментального изучения зарядового обмена, немаловажно его численное моделирование, так как не все закономерности и физические величины могут быть непосредственно измерены в ходе эксперимента (например, распределение электронной плотности).

В настоящий момент относительно хорошо теоретически изучены закономерности зарядового обмена с участием электронов в состояниях со сферической симметрией (*s*-состояниях). Но большинство внешних орбиталей атомов не обладает сферической симметрией. Поэтому актуально построение расчетно-теоретических моделей электронного обмена и разработка численных методик, которые будут учитывать электронные состояния, не обладающие таким свойством.

#### *Расчетно-теоретическое изучение электронного обмена*

В общем случае электронный обмен описывают многоэлектронным уравнением Шредингера. Однако для его решения необходимы многоэлектронные волновые функции, которые невозможно использовать в силу большого объема требуемых вычислительных мощностей устройства для расчетов [59].

Чтобы численно моделировать физическую задачу необходимо использовать ряд упрощений. Часто применяют приближение Борна–Оппенгеймера, которое основано на том, что масса электрона на несколько порядков меньше массы атомного ядра, а значит, электронные процессы происходят намного быстрее взаимодействий с ядром и практически на них не влияют. Поэтому в данном приближении твердое тело рассматри-

вают как систему неподвижно закрепленных атомов, а движение налетающей частицы происходит по классической траектории. Иначе говоря, электронные переходы не влияют на траекторию частицы.

Также при численном моделировании используют адиабатическое приближение, в рамках которого эффективность электронного перехода не зависит от скорости и текущей заселенности электронного уровня иона или атома [60]. Изменение заселенности уровня иона/атома и вероятность электронного перехода в рамках этой модели можно получить путем интегрирования полуклассического кинетического уравнения.

Относительно строгое квантово-механическое описание резонансного электронного обмена основано на решении уравнения Шредингера с гамильтонианом Андерсона–Ньюнса [61]. Для расчета матричных элементов взаимодействия используют адиабатическое приближение. Несмотря на то, что многие экспериментальные данные и важные закономерности электронного обмена были объяснены с помощью адиабатического приближения и кинетического уравнения, учет неадиабатических эффектов оказывает существенное влияние на конечное зарядовое состояние [62].

Поэтому в последние десятилетия все чаще используют метод распространения волновых пакетов [63], в рамках которого необходимо найти решение нестационарного трехмерного уравнения Шредингера (более подробное описание ниже). И хотя в настоящее время происходит рост вычислительных возможностей современных компьютеров, прямое решение нестационарного уравнения Шредингера для крупных систем остается актуальной проблемой, поскольку моделирование процесса резонансного электронного обмена между атомной частицей и металлической поверхностью основано на численном решении в достаточно большой пространственной области (порядка  $10^3$ – $10^4$  нм<sup>3</sup>).

Для решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера используют несколько подходов. Первый из них основан на спектральном разложении нестационарных волновых функций, но является неточным для некоторых моделируемых систем. Во втором подходе применяют расширение базиса в сферических или сферoidalных координатах. Третий подход заключается в прямых решениях нестационарного уравнения Шредингера в декартовых координатах с использованием метода конечных разностей, метода конечных объемов или метода конечных элементов. Так как реальные трехмерные вычисления весьма ресурсозатратны, необходимо использовать параллельные многопроцессорные вычисления. Такой способ расчета не применим для второго подхода (расширение базиса), но осуществим для методов

конечных разностей, конечных объемов или конечных элементов. Последние два имеют довольно сложную реализацию по сравнению с методом конечных разностей, к тому же недавно появившиеся подходы дают некоторое преимущество для метода конечных разностей, делая его более эффективным при параллельных вычислениях.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

### Постановка задачи

Модельная система состоит из атома Н в возбужденном  $p$ -состоянии и металлической поверхности Al(110) (рис. 1). Рассматриваемый атом Н был помещен в начало координат, ось  $Z$  направлена противоположно нормали к поверхности металла.

Рассмотрим два типа модельных задач: статическую, когда расстояние от атома до поверхности фиксировано, и динамическую, когда атом движется параллельно поверхности. В обоих случаях исследованию подлежит зависимость зарядового обмена от ориентации  $p$ -орбитали атома водорода относительно координатных осей: когда ось симметрии электронной плотности лежит в плоскости  $XY$  и когда направлена вдоль оси  $Z$ . Решение первой задачи, кроме этого, позволяет изучить электронный обмен при разных расстояниях между атомом и поверхностью. При решении динамической задачи разные ориентации  $p$ -орбитали рассмотрены относительно направления скорости движения атома вдоль поверхности.

### Метод распространения волновых пакетов

В настоящей работе использована трехмерная реализация [64–67] метода распространения волновых пакетов, который не опирается на адиабатическое приближение, поэтому позволяет моделировать более сложные системы по сравнению с системами, опирающимися на адиабатическое приближение. Согласно квантовой механике, частицы можно представить в виде волнового пакета, частотные характеристики которого содержат информацию о состоянии частицы, а скорость распространения совпадает со скоростью частицы. В рамках метода распространения волновых пакетов изменение волнового пакета происходит под действием суперпозиции потенциалов частицы и поверхности. Задача заключается в нахождении эволюции волнового пакета, туннелирующего с атома на поверхность электрона  $\psi(\mathbf{r}, t)$  путем численного решения нестационарного трехмерного уравнения Шредингера.

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( \left( -\frac{\Delta}{2} + V_{\text{atom}}(\mathbf{r}, t) + V_{\text{surface}}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \right). \quad (1)$$

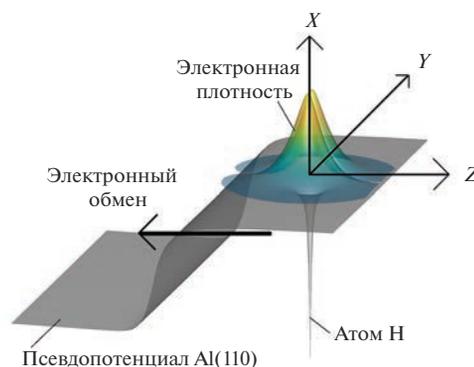


Рис. 1. Иллюстрация задачи электронного обмена между поверхностью металла и частицей.

Движущаяся частица и неподвижная металлическая поверхность могут быть описаны с помощью независимых псевдопотенциалов  $V_{\text{atom}}$  и  $V_{\text{surface}}$  соответственно. Псевдопотенциал металлической поверхности можно найти с помощью аналитического псевдопотенциала (например, Дженнингса [68] или Чулкова [69]), на основе теории функциональной плотности.

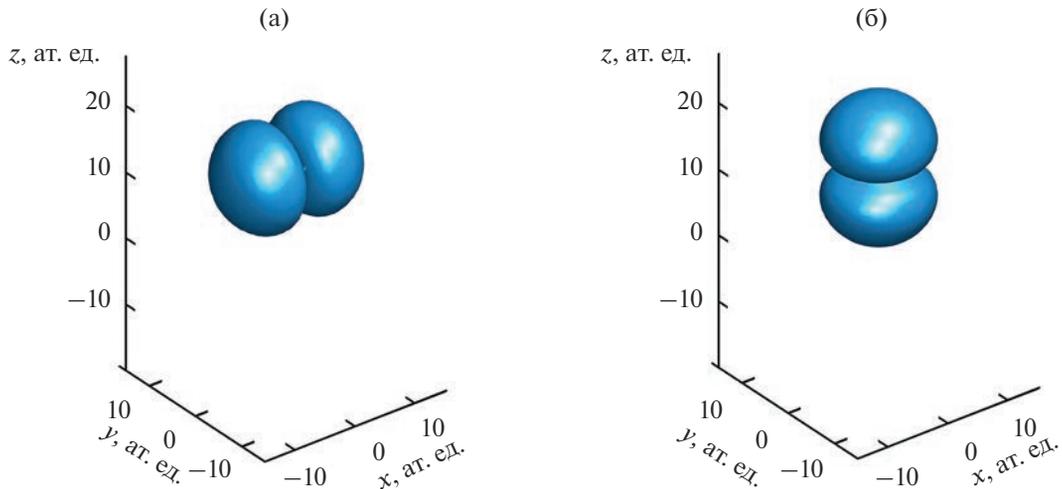
В настоящей работе для проведения вычислительного расчета решена задача Коши для трехмерного нестационарного уравнения Шредингера с нулевыми граничными условиями Дирихле. Размер области расчетов составлял  $150 \times 150 \times 150$  ат. ед. Дополнительно к граничным условиям был введен искусственный потенциал вблизи грани расчетной сетки, необходимый для подавления небольших волн, образующихся при отражении волнового пакета от границ расчетной сетки.

В качестве начальной волновой функции была задана волновая функция возбужденного состояния электрона в атоме. Возбужденное состояние электрона, а также собственные состояния электрона можно определить путем численного решения стационарного уравнения Шредингера с модельным псевдопотенциалом. Для удобства была использована атомная система единиц:  $m_e = \hbar = e = 1$ . Численное решение уравнения Шредингера дает зависимость волновой функции туннелирующего электрона от координат и времени. Проецируя волновую функцию на основное состояние электрона в атоме, получаем автокорреляционную функцию системы:

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

Квадрат ее модуля дает вероятность нахождения в ионе/атоме электрона в основном состоянии (заселенность основного уровня энергии иона/атома).

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



**Рис. 2.** Изоповерхности электронной плотности для  $p$ -орбитали, ось симметрии которой ориентирована вдоль оси  $X$  (а), оси  $Z$  (б).

Кроме того, важной характеристикой электронного обмена является ширина основного уровня энергии ( $\Gamma$ ) иона или атома. Она характеризует эффективность перехода атома или иона в возбужденное состояние, т.е. скорость распада основного состояния. Ширина основного уровня энергии обратно пропорциональна времени жизни электрона в основном состоянии, ее можно найти из приближения:

$$A(t) = \langle \psi_g(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle \approx \exp(-iEt) \exp(-\Gamma t). \quad (4)$$

Из этого выражения можно сделать вывод, что ширина уровня представляет собой показатель степени затухания автокорреляционной функции.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### Статическая задача

В ходе рассмотрения модельной статической задачи возбужденный атом H был фиксирован над поверхностью Al(110). С изменением расстояния  $Z$  до поверхности Al(110) были изучены следующие характеристики резонансного электронного обмена: динамика электронной плотности, ширина уровня  $\Gamma$ , а также зависимость заселенности основного уровня энергии атома от времени  $P(t)$ .

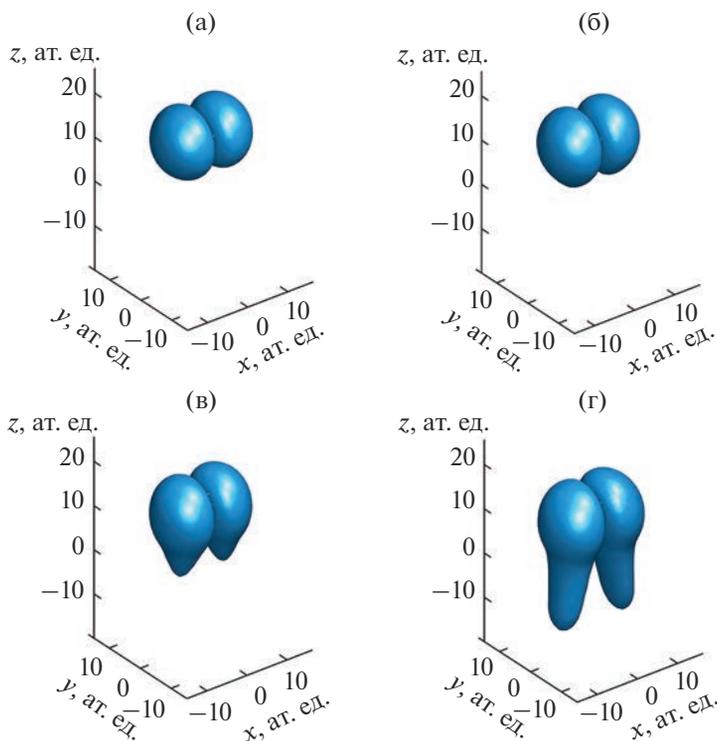
На рис. 2 изображены изоповерхности распределения электронной плотности возбужденного атома водорода и металлическая поверхность в случаях, когда ось симметрии  $p$ -орбитали атома водорода ориентирована вдоль осей  $X$  и  $Z$ . Рис. 3 и 4 представлен результат моделирования динамики электронного обмена при разных ориентациях  $p$ -орбитали водорода. Видно “удлинение” электронной плотности в сторону поверхности металла. Для случая  $p$ -орбитали, ориентирован-

ной параллельно поверхности (рис. 3), электронный обмен проявляется в образовании двух отдельных “хвостов”, расходящихся относительно плоскости симметрии ( $ZX$ ). Для случая  $p$ -орбитали, ориентированной перпендикулярно поверхности металла (рис. 4), результатом моделирования зарядового обмена стало “перетекание” электронной плотности на поверхность металла.

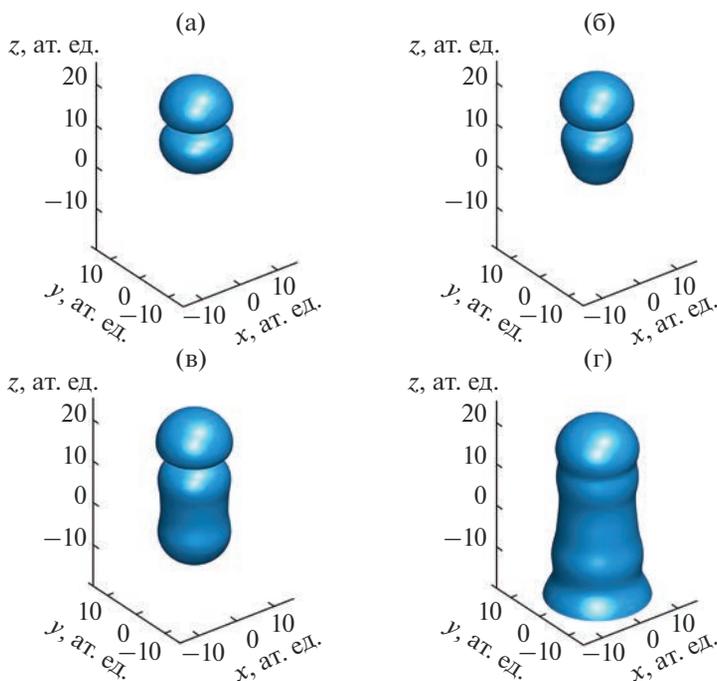
На рис. 5 изображена зависимость заселенности  $P$  от времени при разных расстояниях между H и поверхностью Al. Видно, что электронный обмен более эффективен, если ось симметрии  $p$ -орбитали направлена перпендикулярно к поверхности (рис. 5б), нежели параллельно (рис. 5а). Это объясняется тем, что распределение электронной плотности локализовано ближе к поверхности при нормальной ориентации  $p$ -орбитали, из-за чего потенциальный барьер между атомом и поверхностью меньше и туннелирование происходит более эффективно.

Следует отметить несколько общих закономерностей, справедливых для обеих ориентаций  $p$ -орбитали. Во-первых, выявлено экспоненциальное уменьшение заселенности основного состояния атома со временем. Во-вторых, степень зависимости увеличивается от расстояния между поверхностью и H: чем ближе атом к поверхности металла, тем круче график. Также при ориентации  $p$ -орбитали перпендикулярно поверхности на малых расстояниях (менее 10 ат. ед.) обнаружены осцилляции заселенности  $P(t)$ , которые происходят вследствие циклического перехода электрона с атома H на поверхность Al и в обратном направлении.

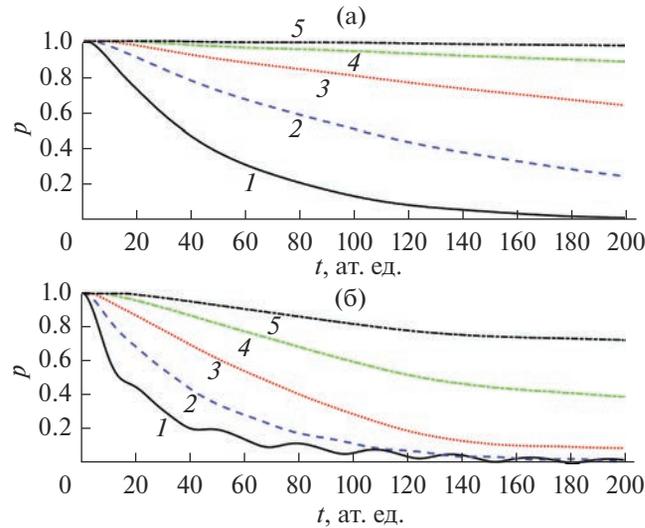
На рис. 6 показана ширина основного атомного уровня  $\Gamma$ , характеризующая эффективность электронного обмена, в зависимости от расстоя-



**Рис. 3.** Изоповерхности электронной плотности во время резонансного электронного обмена при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали атома H вдоль оси X в последовательные моменты времени  $t = 20$  (а); 30 (б); 40 (в); 50 (г) ат. ед. Положение атома H зафиксировано на расстоянии  $Z = 12$  ат. ед. от поверхности Al.



**Рис. 4.** Изоповерхности электронной плотности во время резонансного электронного обмена при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали атома H вдоль оси Z в последовательные моменты времени  $t = 20$  (а); 30 (б); 40 (в); 50 (г) ат. ед. Положение атома H зафиксировано на расстоянии  $Z = 12$  от поверхности Al. Момент времени  $t = 50$  ат. ед. соответствует туннелированию электрона на поверхность металла.

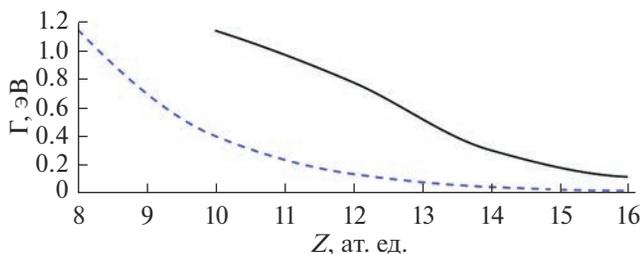


**Рис. 5.** Зависимость от времени заселенности уровня энергии атома H, находящегося на расстоянии  $Z = 8$  (1); 10 (2); 12 (3); 14 (4); 16 ат. ед. (5) от поверхности, при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали параллельно (а) и перпендикулярно (б) поверхности Al.

ния между атомом и поверхностью. Видно, что  $\Gamma$  уменьшается при увеличении расстояния между атомом и поверхностью. Также можно сделать вывод, что более эффективный электронный обмен происходит при нормальной ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали атома H к поверхности Al, чем при параллельной (вдоль оси X).

#### Динамическая задача

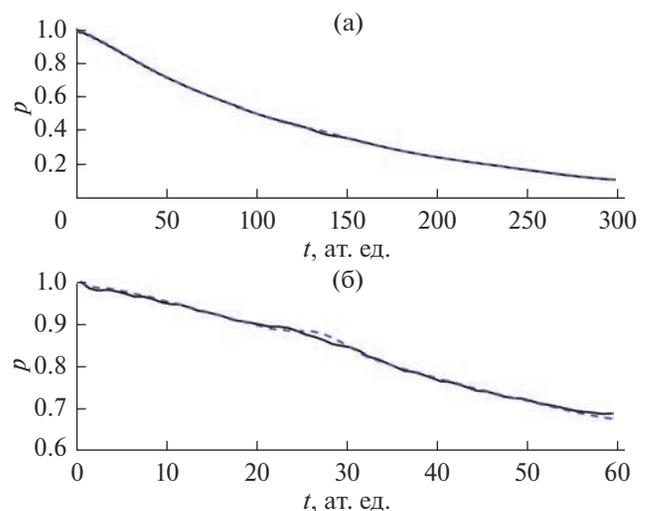
Проанализирована эффективность электронного обмена для атома водорода, движущегося параллельно плоскости поверхности. Из рис. 7 видно, что электронный обмен не отличается при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали вдоль или перпендикулярно направлению движения атома. На рис. 8 и 9 изображены изоповерхности распределения электронной плотности движущегося атома водорода в возбужденном состоянии, с  $p$ -ор-



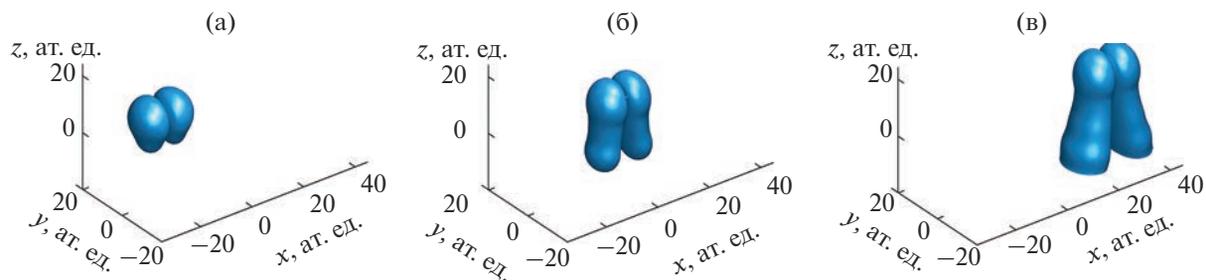
**Рис. 6.** Зависимость ширины уровня  $\Gamma$  от расстояния между атомом H и поверхностью Al при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали перпендикулярно (сплошная линия) или параллельно (штриховая линия) плоскости металла.

биталью, ориентированной осью симметрии вдоль осей X (рис. 8) и Y (рис. 9).

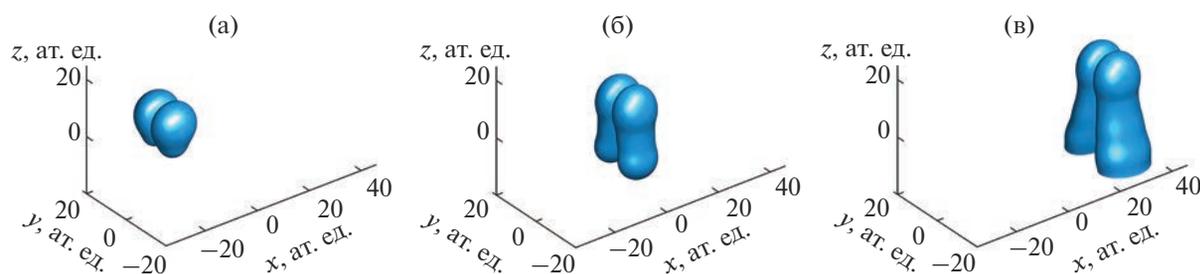
На рис. 10 представлена динамика электронного обмена возбужденного атома водорода с поверхностью. Как и в статическом случае, электронная плотность переходящего на поверхность металла электрона возбужденного атома H имеет две части, которые расходятся относительно плоскости симметрии (ZY). Вероятно, расходящиеся траектории туннелирования электрона, связаны со свойствами поверхности.



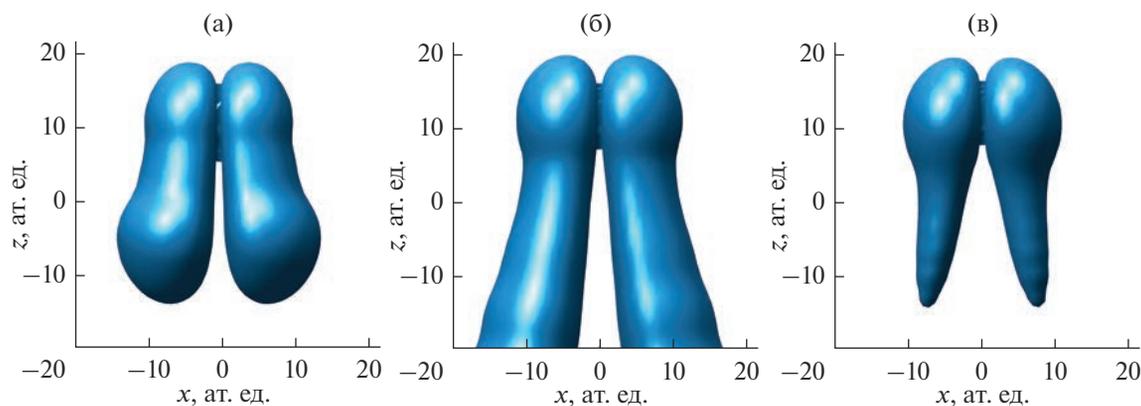
**Рис. 7.** Зависимость от времени заселенности уровня энергии атома H, движущегося со скоростью 0.2 (а); 1.0 ат. ед. (б) при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали вдоль (штриховая линия) или перпендикулярно (сплошная линия) направлению движения атома.



**Рис. 8.** Изоповерхности электронной плотности движущегося атома Н во время резонансного электронного обмена при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали вдоль оси  $X$  в последовательные моменты времени  $t = 10$  (а); 30 (б); 60 (в) ат. ед.



**Рис. 9.** Изоповерхности электронной плотности движущегося атома Н во время резонансного электронного обмена при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали вдоль оси  $Y$  в последовательные моменты времени  $t = 10$  (а); 30 (б); 60 (в) ат. ед.



**Рис. 10.** Динамика электронного обмена возбужденного атома Н с поверхностью Al в моменты времени  $t = 30$  (а); 80 (б); 200 ат. ед. (в).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено моделирование резонансного туннелирования электрона между атомом водорода в возбужденном  $p$ -состоянии (не обладающим сферической симметрией) и металлической поверхностью Al(110). Изучено влияние на электронный обмен ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали относительно поверхности, а также расстояния между атомом и поверхностью.

Из полученных данных можно сделать вывод, что электронный обмен более эффективен при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали перпен-

дикулярно поверхности металла, нежели параллельно. Это объясняется тем, что распределение электронной плотности в  $p$ -состоянии локализовано ближе к поверхности при нормальной ориентации орбитали, поэтому меньше потенциальный барьер и туннелирование происходит более эффективно.

Также анализ полученных данных показывает, что заселенность основного состояния атома экспоненциально спадает со временем тем сильнее, чем ближе расположен атом водорода к поверхности алюминия.

Рассмотрение динамической задачи показало, что для движущегося вдоль поверхности металла возбужденного атома водорода электронный обмен не зависит от ориентации  $p$ -орбитали (параллельно или перпендикулярно вектору скорости движения атома). Исследование динамики электронного обмена с поверхностью показало, что при ориентации оси симметрии  $p$ -орбитали вдоль осей  $X$  и  $Y$  происходит расхождение “лепестков” электронного облака переходящего на поверхность электрона относительно плоскости симметрии.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-02-00577).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hutchings G.J., Haruta M.* // Appl. Catal. A. 2005. V. 291. P. 2.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.apcata.2005.05.044>
2. *Lai X., Clair T.P.St., Valden M., Goodman D.W.* // Prog. Surf. Sci. 1998. V. 59. P. 25.  
[https://www.doi.org/10.1016/S0079-6816\(98\)00034-3](https://www.doi.org/10.1016/S0079-6816(98)00034-3)
3. *Lai X., Clair T.P.St., Goodman D.W.* // Faraday Discuss. 1999. V. 114. P. 279.  
<https://www.doi.org/10.1039/A902795E>
4. *Bacal M., Wada M.* // Appl. Phys. Rev. 2015. V. 2. P. 021305.  
<https://www.doi.org/10.1063/1.4921298>
5. *Gainullin I.K.* // Surf. Sci. 2018. V. 677. P. 324.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.007>
6. *Usman E.Yu., Urazgil'din I.F., Borisov A.G., Gauyacq J.P.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 205405.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.205405>
7. *Amanbaev E.R., Shestakov D.K., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2009. V. 3. P. 865.  
<https://www.doi.org/10.1134/S1027451009060032>
8. *Magunov A.A., Shestakov D.K., Gainullin I.K., Urazgil'din I.F.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2008. V. 2. P. 764.  
<https://www.doi.org/10.1134/S1027451008050170>
9. *Gainullin I.K., Usman E.Yu., Song Y.W., Urazgil'din I.F.* // Vacuum. 2003. V. 72. P. 263.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.vacuum.2003.07.001>
10. *Zykova E.Y., Khaidarov A.A., Ivanenko I.P., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2012. V. 6. P. 877.  
<https://www.doi.org/10.1134/S102745101211016X>
11. *Klavsyuk A.L., Kolesnikov S.V., Gainullin I.K., Saletsky A.M.* // Eur. Phys. J. B. 2012. V. 85. P. 331.  
<https://www.doi.org/10.1140/epjb/e2012-30352-3>
12. *Amanbaev E.R., Gainullin I.K., Zykova E.Yu., Urazgil'din I.F.* // Thin Solid Films. 2011. V. 519. P. 4737.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.tsf.2011.01.026>
13. *Obreshkov B., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 022903.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevA.87.022903>
14. *Bryukvina L.I., Lipko S.V., Martynovich E.F.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2013. V. 7. № 4. P. 617.  
<https://www.doi.org/10.1134/S1027451013040071>
15. *Stueckelberg E.C.G.* // Helvetica Physica Acta. 1932. V. 5. P. 369.
16. *Gainullin I.K.* // UFN. 2020. V. 63. P. 888.  
<https://www.doi.org/10.3367/UFNe.2019.11.038691>
17. *Yin C., Guo Z., Gellman A.J.* // J. Phys. Chem. C. 2020. V. 124. P. 10605.  
<https://www.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c02058>
18. *Bruckner B., Bauer P., Primetzhofer D.* // Surf. Sci. 2020. V. 691. P. 121491.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.susc.2019.121491>
19. *Oohara W., Kaji T., Hirose K. et al.* // AIP Advances. 2020. V. 10. P. 095006.  
<https://www.doi.org/10.1063/5.0020697>
20. *Oohara W., Fujii M., Watai M., Hiraoka Y., Egawa M., Morinaga Y., Takamori S., Yoshida M.* // AIP Advances. 2019. V. 9. P. 085303.  
<https://www.doi.org/10.1063/1.5109805>
21. *Gao L., Zhu Y., Shi Y., Liu P., Xiao Y., Li G., Liu Y., Esaulov V.A., Chen X., Chen L., Guo Y.* // Phys. Rev. A. 2017. V. 96. P. 052705.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevA.96.052705>
22. *Shaw J., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H., Monismith D.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 98. P. 052705.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevA.98.052705>
23. *Shaw J., Monismith D., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H.S.* // Atoms. 2020. V. 7. P. 89.  
<https://www.doi.org/10.3390/atoms7030089>
24. *Iglesias-García A., Romero M.A., García E.A., Goldberg E.C.* // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. P. 115406.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.102.115406>
25. *Liu J. et al.* // Phys. Rev. A. 2020. V. 101. P. 032706.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevA.101.032706>
26. *Xiao Y., Shi Y., Liu P., Zhu Y., Gao L., Guo Y., Chen L., Chen X., Esaulov V.* // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2019. V. 450. P. 73.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.nimb.2018.11.022>
27. *Mamedov N.V., Mamedov I.M.* // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2020. V. 84 P. 713.  
<https://www.doi.org/10.3103/S1062873820060155>
28. *Balakshin Y.V., Kozhemiako A.V., Evseev A.P., Minnebaev D.K., Elsehly E.M.* // Moscow University Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 218.  
<https://www.doi.org/10.3103/S0027134920030030>
29. *Shemukhin A.A., Smirnov A.M., Evseev A.P., Vorobyeva E.A., Kozhemiako A.V., Minnebaev D.K., Balakshin Y.V., Nazarov A.V., Chernysh V.S.* // Moscow University Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 133.  
<https://www.doi.org/10.3103/S0027134920020113>
30. *Sereda I., Tseluyko A., Ryabchikov D., Hrechko Y., Azarenkov N.* // Vacuum. 2019. V. 162. P. 163.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.vacuum.2019.01.046>
31. *Aleksandrov A.F., Gainullin I.K., Sonkin M.A.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2020. V. 14. P. 791.  
<https://www.doi.org/10.1134/S1027451020040205>
32. *Gainullin I.K.* // Moscow University Phys. Bull. 2019. V. 74. P. 585.  
<https://www.doi.org/10.3103/S0027134919060158>
33. *Majorosi S., Czírják A.* // Comp. Phys. Comm. 2016. V. 208. P. 9.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.cpc.2016.07.006>
34. *Fu Y., Zeng J., Yuan J.* // Comp. Phys. Comm. 2017. V. 210. P. 181.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.cpc.2016.09.016>

35. Lüdde H.J., Horbatsch M., Kirchner T. // Eur. Phys. J. B. 2018. V. 91. P. 99.  
<https://www.doi.org/10.1140/epjb/e2018-90165-x>
36. Zhou S.P., Liu A.H., Liu F.C., Wang C.C., Ding D.J. // Chinese Phys. B. 2019. V. 28. P. 083101.  
<https://www.doi.org/10.1088/1674-1056/28/8/083101>
37. Liu Q., Liu F., Hou C. // Procedia Computer Sci. 2020. V. 171. P. 312.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.procs.2020.04.032>
38. Gainullin I.K., Klavsyuk A.L. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2012. V. 76. P. 542.  
<https://www.doi.org/10.3103/S1062873812050115>
39. Riascos V.Q. et al. // Phys. Rev. A. 2021. V. 103. № 6. P. 062805.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevA.103.062805>
40. Fu-Ming T. et al. // Acta Physica Sinica. 2020. V. 69. № 23. P. 234202.  
<https://www.doi.org/10.7498/aps.69.20200700>
41. Wang L., Sun G., Liu X. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2021. V. 497. P. 10.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.nimb.2021.03.022>
42. Salvo C., Karmakar P., Yarmoff J. // Phys. Rev. B. 2018. V. 98. P. 035437.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.98.035437>
43. Urazgil'din I.F. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 4139.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.47.4139>
44. Tolstogouзов A., Daolio S., Pagura C. // Surf. Sci. 1999. V. 441. P. 213.  
[https://www.doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00881-X](https://www.doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00881-X)
45. Elovikov S.S., Zykova E.Yu., Mosunov A.S. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2002. V. 66. P. 558.
46. Mashkova E.S. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 212. P. 164.
47. Zinoviev A.N., Babenko P.Y., Meluzova D.S., Shergin A.P. // JETP Letters. 2018. V. 108. P. 633.
48. Brongersma H.H., Draxler M., de Ridder M., Bauer P. // Surf. Sci. 2007. V. 62. P. 63.
49. He X., Zhou W., Wang Z.Y., Zhang Y.N., Shi J., Wu R.Q., Yarmoff J.A. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 156101.
50. Souda R., Ayzawa T., Hayami W., Otani S., Ishizawa Y. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 7761.  
<https://www.doi.org/10.1103/PhysRevB.42.7761>
51. Gainullin I.K., Usman E.Yu., Song Y.W., Urazgil'din I.F. // Vacuum. 2004. V. 72. P. 263.
52. Gainullin I.K., Usman E.Y., Urazgil'din I.F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 232. P. 22.
53. Gainullin I.K., Urazgil'din I.F. // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. № 20. P. 205403.
54. Shestakov D.K., Polivnikova T.Yu., Gainullin I.K., Urazgil'din I.F. // Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 2596.
55. Gainullin I.K. // Surf. Sci. 2019. V. 681. P. 158.
56. Гайнуллин И.К. // Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2019. № 5. С. 67.
57. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. P. 032712.
58. Гайнуллин И.К. // Успехи физических наук. Т. 190. С. 950.  
<https://www.doi.org/10.3367/UFNr.2019.11.038691>
59. Martynenko Yu.V. // Rad. Eff. Defects. Solids. 1973. V. 20. P. 211.
60. Winter H. // Phys. Rep. 2002. V. 367. P. 387.
61. Los J., Geerlings J.J.C. // Phys. Rep. 1990. V. 190. P. 133.
62. Canario A.R. et al. // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. № 12. P. 121401.
63. Ermoshin V.A., Kazansky A.K. // Phys. Lett. A. 1996. V. 218. P. 99.
64. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. P. 022710.
65. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // Computer Phys. Commun. 2015. V. 188. P. 68.
66. Gainullin I.K. // Computer Phys. Commun. 2017. V. 210. P. 72.
67. Gainullin I.K. // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. № 5. P. 052705.
68. Jennings P.J., Jones R.O., Weinert M. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 6113.
69. Chulkov E.V., Silkin V.M., Echenique P.M. // Surf. Sci. 1999. V. 437. P. 330.

## Theoretical Study of Charge Transfer between a Metal Surface and a Hydrogen Atom in the Excited $p$ -State

S. S. Moskalenko<sup>1</sup>, I. K. Gainullin<sup>1</sup>, \*

<sup>1</sup>Moscow State University, Moscow, 119992 Russia

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

Some features of the charge transfer between ions and the metal surface, which are due to its atomic structure, were numerically investigated. The simulation was based on a three-dimensional implementation of the wave packet propagation method. The studied system consisted of an Al(110) metal surface and an excited hydrogen atom with an electron in the  $p$ -state, which does not have spherical symmetry. When considering a model static problem, it was shown that electron exchange is more efficient when the symmetry axis of the  $p$ -orbital was oriented perpendicular to the Al surface, rather than parallel. Also, analysis of the obtained data showed that the time dependence of the atomic population function has an exponential decay. The solution of the “dynamic” problem showed that for an excited hydrogen atom moving along the metal surface, the electron exchange does not depend on the orientation of the  $p$ -orbital symmetry axis with respect to the direction of motion of the atom. The study of the dynamics of the charge transfer with a metal surface made it possible to observe for  $p$ -orbitals, the symmetry axis of which was directed parallel to the metal surface, the separation of the electron density passing to the surface into two parts, which diverge relative to the  $p$ -orbital symmetry plane.

**Keywords:** ion beams, charge transfer, three-dimensional simulation, low energy ion scattering.