

УДК 537.534

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ОБМЕНА ПРИ СКОЛЬЗЯЩЕМ РАССЕЯНИИ НА ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

© 2024 г. И. К. Гайнуллин*

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

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

Поступила в редакцию 12.01.2024 г.

После доработки 22.03.2024 г.

Принята к публикации 22.03.2024 г.

Рассмотрен электронный обмен при скользящем рассеянии ионов водорода на тонких металлических пленках. Основной исследуемой величиной является фракция выхода, т.е. вероятность формирования определенного зарядового состояния рассеянной частицы (в рассматриваемом случае H^-) как функция компоненты скорости, параллельной поверхности образца. На основе анализа распределения электрона в пространстве волновых векторов с использованием общепринятой модели смещения сфер Ферми было показано, что зависимость вероятности формирования отрицательного иона водорода от параллельной компоненты скорости должна быть монотонно убывающей.

Ключевые слова: взаимодействие ионов с поверхностью, скользящее рассеяние, электронный обмен, компьютерное моделирование, трехмерные расчеты.

DOI: 10.31857/S1028096024100116, **EDN:** SGYOKN

ВВЕДЕНИЕ

Изучение электронного обмена при взаимодействии атомов с поверхностью твердого тела представляет как фундаментальный, так и прикладной интерес при решении определенного спектра задач физики и химии. Для фундаментальной науки электронный обмен интересен при изучении таких процессов, как распыление, рассеяние, адсорбция и диссоциация молекул [1–10]. С практической точки зрения важно правильно учитывать влияние электронного обмена при напылении тонких пленок, реактивном ионном травлении, катализе, в некоторых экспериментах по модификации и анализу поверхности [11–15]. Ввиду того, что в большинстве экспериментальных методик регистрируют пространственные и энергетические спектры заряженных частиц, зарядовый обмен является одним из важнейших факторов для количественной диагностики элементного

состава и структуры твердых тел с помощью ионных пучков в условиях сверхвысокого вакуума [16]. Так, например, электронный обмен является важным фактором при диагностике состава поверхности методом рассеяния медленных ионов [17]. Поскольку этот метод обладает наилучшей поверхностной чувствительностью, с его помощью возможно наиболее эффективное изучение верхнего слоя поверхности. В условиях проведения экспериментов важнейшими характеристиками, определяющими спектры ионов, являются вероятность нейтрализации и сечение рассеяния или распыления, ведь в большинстве экспериментальных установок регистрируют положительно заряженные ионы. При неправильном расчете этих характеристик анализ спектров рассеянных ионов будет давать неточный состав поверхности.

Так называемый эффект параллельной скорости и аспекты электронного обмена ионных

пучков с поверхностью металлов при скользящем рассеянии достаточно подробно рассмотрены в обзоре [18]. Основной исследуемой величиной является фракция выхода, т.е. вероятность формирования определенного зарядового состояния рассеянной частицы (например, H^- , O^- , F^- , Li^0 , Na^0 , K^0) как функция компоненты скорости, параллельной поверхности образца [19, 20]. В некоторых случаях эта функция имеет максимум в нуле и монотонно убывает с увеличением параллельной скорости (например, формирование Na^0 при рассеянии Na^+ на поверхности $Al(111)$). В других случаях график функции имеет колоколообразный вид с максимумом в районе ~ 0.2 – 0.7 ат. ед. скорости и приближается к нулю при скоростях меньше ~ 0.1 и свыше 1.0 ат. ед. (например, формирование H^- при рассеянии на поверхности $Al(111)$). Общий вид зависимости хорошо объясняется с помощью модели относительного смещения сфер Ферми металла и активного электрона, происходящего вследствие преобразования системы координат [21].

Электронный обмен и формирование ионов H^- при скользящем рассеянии на тонких пленках Al теоретически рассмотрены в [2–26]. Существующие расчетно-теоретические модели достаточно хорошо описывают электронный обмен с металлическими поверхностями [27–42]. Для расчета вероятности формирования ионов H^- применяли теорию возмущения и аппроксимацию волновой функции электрона с помощью специальных функций. В настоящей работе рассмотрен электронный обмен при скользящем рассеянии на тонких пленках в аспекте распределения электрона в k -пространстве. Для удобства использована атомная система единиц, в которой $m_e = e = \hbar = 1$.

ПОСТАНОВКА И МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Кинетическое уравнение для расчета вероятности отрицательной ионизации

Рассмотрим одноэлектронный процесс отрицательной ионизации водородоподобного нейтрального атома с помощью резонансного электронного обмена. Так как при скользящем рассеянии типичные значения кинетической энергии в направлении нормали составляют 10 – 100 эВ, применяется адиабатическое приближение. В этом случае резонансный электронный обмен рассчитывают с помощью кинетического уравнения. Чтобы найти заселенность атомного состояния, интегрируем кинетическое уравнение вдоль траектории движения иона [18]:

$$\frac{dP^-}{dt} = -\Gamma_{\text{loss}}(z)P^- + \Gamma_{\text{capture}}(z)(1 - P^-), \quad (1)$$

где z — расстояние до поверхности, $\Gamma_{\text{loss}}(z) = g_{\text{loss}}\Gamma(z)$, $F_{\text{loss}}(z)$, $\Gamma_{\text{capture}}(z) = g_{\text{capture}}\Gamma(z)F_{\text{capture}}(z)$, $\Gamma(z)$ — ширина уровня иона, $F_{\text{loss}}(z)$ и $F_{\text{capture}}(z)$ — коэффициенты потери и захвата электрона соответственно. Статистические факторы обычно принимают за $g_{\text{loss}} = 1$ и $g_{\text{capture}} = 0.5$ для учета спина электрона [18].

Процедура расчета $\Gamma(z)$ как функции расстояния ион–поверхность подробно описана в [43, 44]. Вкратце проведем серию вспомогательных расчетов распада отрицательного иона вблизи металлической поверхности при фиксированном расстоянии ион–поверхность. Отрицательный ион считаем водородоподобным атомом, состоящим из одного активного электрона и нейтрального атомного ядра. Используем трехмерную реализацию метода распространения волновых пакетов [45–48]. Таким образом, численно решаем нестационарное уравнение Шредингера с заданными начальными условиями [49–56]:

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

где $U(\mathbf{r}, t) = V_{e-\text{ion}}(\mathbf{r}, t) + V_{e-\text{surf}}(\mathbf{r})$ — зависящий от времени потенциал, действующий на активный электрон. Здесь $V_{e-\text{ion}}(\mathbf{r}, t)$ — потенциал частицы, $V_{e-\text{surf}}(\mathbf{r})$ — потенциал металлической поверхности. Следует отметить, что потенциал $U(\mathbf{r}, t)$ учитывает движение частицы, так как $V_{e-\text{ion}}(\mathbf{r}, t)$ зависит от расположения ионов. Для отрицательного иона [57] и некоторых металлических поверхностей [58] разработаны потенциалы, имеющие аналитический вид.

Численное решение нестационарного уравнения Шредингера дает эволюцию волнового пакета системы $\psi(\mathbf{r}, t)$ во времени. Проекция текущей волновой функции на основное состояние $\psi_0(\mathbf{r})$ отвечает амплитуде выживания электрона в исходном состоянии:

$$A(t) = \psi_0(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Это сложная функция, квадрат модуля которой соответствует вероятности сохранения электрона на частице, т.е. вероятности того, что частица является отрицательным ионом:

$$P^-(t) = |A(t)|^2. \quad (4)$$

Ширину уровня иона $\Gamma(z)$, которая характеризует эффективность резонансного электронного обмена, рассчитывают из следующего приближения:

$$P^-(t) = \exp(-\Gamma t). \quad (5)$$

Следует отметить, что в большинстве случаев происходит так называемый “экспоненциальный распад” [26]. Следовательно, $\Gamma(z)$ можно легко вычислить из линейного приближения $\ln P(t)$. Наконец, чтобы найти отрицательную вероятность ионизации P^- , проинтегрируем кинетическое уравнение (1) вдоль исходящей ионной траектории на расстоянии $3 < z < 20$ ат. ед.

Расчет коэффициентов потери и подхвата электрона

Традиционный подход к расчету коэффициентов потери и подхвата электрона $F_{\text{loss}}(z)$ и $F_{\text{capture}}(z)$ основан на анализе проекции плотности электронных состояний. Весовой коэффициент подхвата электрона пропорционален части электронной плотности $f_e(E, z)$, расположенной ниже уровня Ферми:

$$F_{\text{loss}}(z) = \int_{E < E_f} f_e(E, z) dE.$$

И, наоборот, весовой коэффициент потери электрона пропорционален части электронной плотности выше уровня Ферми: $F_{\text{capture}}(z) = \int_{E \geq E_f} f_e(E, z) dE$. Обычно используют

лоренцево уширение атомного уровня:

$$f_e(E, z) = (0.5\Gamma(z)) / \left((0.5\Gamma(z))^2 + (E - E_a(z))^2 \right),$$

где $E_a(z)$ — уровень сродства. Для удобства обозначим этот подход как традиционный.

Следует отметить, что традиционный подход не учитывает параллельную скорость иона. Для этого нужно учитывать распределение электронов в пространстве волновых векторов (k -пространство), как было предложено в [21]. Чтобы рассчитать коэффициенты потери и подхвата электрона $F_{\text{loss}}(z)$ и $F_{\text{capture}}(z)$, проанализируем распределение активного электрона в k -пространстве. Распределение активного электрона внутри металла в k -пространстве получается с помощью фурье-преобразования волновой функции электрона.

Важно отметить, что распределение электронов в k -пространстве становится квазистационарным после времени ~ 100 ат. ед. от начала взаимо-

действия. Пример распределения активного электрона в k -пространство представлен на рис. 1. Можно заметить, что плотность распределения электрона $f(\mathbf{k})$ локализована вокруг сферы определенного радиуса k_a , который зависит от расстояния ион–поверхность (рис. 1, затененная область). Выражение $k_a^2/2$ дает энергию электрона E_a относительно дна зоны проводимости. Значение E_a уменьшается с уменьшением расстояния ион–поверхность вследствие взаимодействия с индуцированным зарядом, который описывается зарядом изображения [18]. Потеря электрона возможна, когда его плотность $f(\mathbf{k})$ находится за пределами сферы Ферми металла — это означает, что энергетический уровень активного электрона находится выше уровня Ферми. Следовательно, возможна только резонансная потеря электрона, потому что внутри металла нет занятых электронных состояний выше уровня Ферми. И, наоборот, если распределение активного электрона $f(\mathbf{k})$ находится внутри сферы Ферми, то возможен подхват электрона.

Таким образом, коэффициенты потери и подхвата электрона (F_{loss} и F_{capture}) пропорциональны части электронной плотности, расположенной снаружи и внутри сферы Ферми соответственно. Следует отметить, что в случае нулевой параллельной скорости представленная модель и традиционный подход дают одинаковые коэффициенты потери и подхвата электрона.

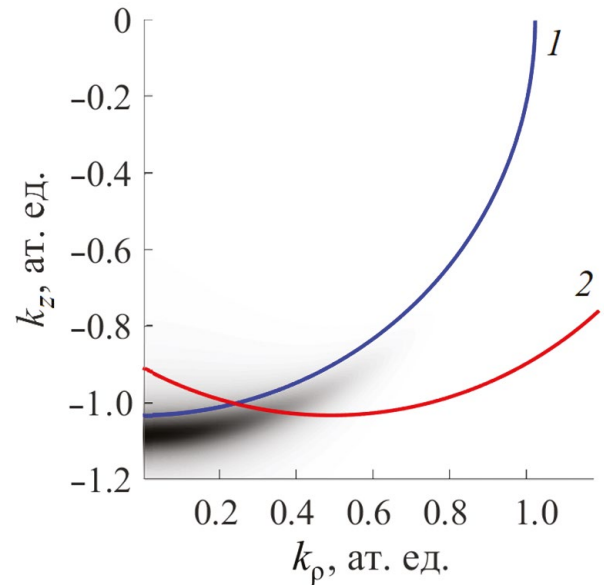


Рис. 1. Иллюстрация расчета коэффициентов потери и захвата электрона, сфера Ферми: для W(110) в статическом случае (1); для $v_{\text{par}} = 0.5$ ат. ед. (2). Затененная область показывает плотность распределения активного электрона в k -пространстве $f(k)$.

Иллюстрация модели смещения сфер Ферми

Иллюстрация модели смещения сфер Ферми приведена на рис. 2. Считают, что вероятность подхвата электрона пропорциональна плотности распределения активного электрона внутри сферы Ферми металла, а вероятность потери электрона — вне сферы. Таким образом, если сфера распределения активного электрона меньше сферы Ферми металла, то имеем монотонно убывающую зависимость формирования определенного зарядового состояния от параллельной скорости. И, наоборот, если сфера распределения активного электрона больше сферы Ферми металла, то зависимость вероятности формирования определенного зарядового состояния от параллельной скорости будет иметь колоколообразную форму.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 показано распределение электрона в k -пространстве при взаимодействии иона H^- с пленками Al различной толщины. Видно, что в случае пленки толщиной 150 ат. ед. (~30 монослоев) распределение электрона практически совпадает с распределением в массивном образце, т.е. электрон распределен по сфере и локализован вблизи нормали. Как было показано выше, подобное распределение приводит к колоколообразной зависимости вероятности формирования иона H^- от величины параллельной скорости. При уменьшении толщины пленки до 50 ат. ед. (~11 монослоев) появляются максимумы электронной плотности по оси k_z , а форма распределения крайних максимумов “размывается” (т.е. электрон распределяется не строго по сфере, но и в ее окрестностях). Этот эффект четко виден в случае пленки толщиной 15 ат. ед. (~3 монослоя): имеются шесть максимумов электронной плотности, форма которых в трехмерном пространстве соответствует не полую сферу, а набору заполненных шарообразных тел.

В силу свойства преобразования Фурье количество максимумов распределения электрона в k -пространстве соответствует количеству максимумов волновой функции в реальном пространстве (рис. 4, шесть максимумов по оси z для пленки толщиной 15 ат. ед.). В отличие от случая макроскопического образца в тонкой пленке максимумы распределения электрона в k -пространстве соответствуют различной энергии. Положение электрона в k -пространстве (модуль вектора $\mathbf{k}$) определяется как корень из разности энергетических положений иона и дна зоны проводимости. В случае макроскопического образца псевдопотенциал (практически) постоянен

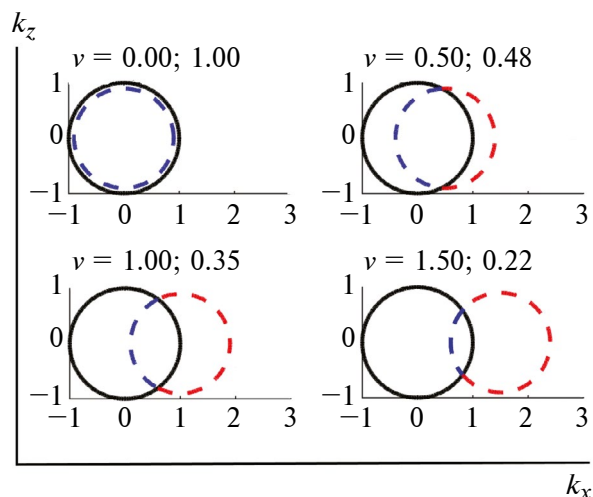


Рис. 2. Иллюстрация модели смещения сфер Ферми при скользящем рассеянии: радиус сферы Ферми металла равен 1.0 ат. ед. (сплошная линия), радиус сферы распределения активного электрона равен 0.9 ат. ед. (штриховая линия). Указаны параллельная компонента скорости и доля плотности распределения активного электрона, находящаяся внутри сферы Ферми металла.

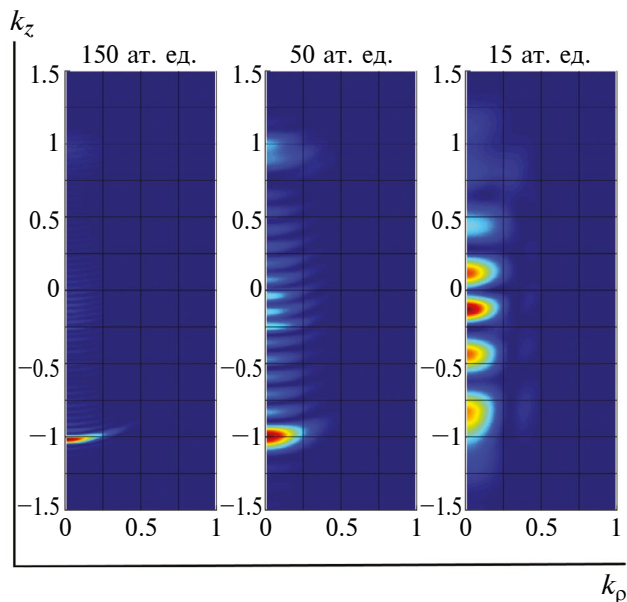


Рис. 3. Влияние толщины пленки Al на распределение активного электрона в двумерном k -пространстве. Ион H^- находится на расстоянии 8 ат. ед. от поверхности пленки.

внутри металла, поэтому электрон локализуется на поверхности сферы Ферми. В случае тонкой пленки псевдопотенциал зависит от расстояния до поверхности, поэтому различные максимумы в распределении электрона соответствуют различным значениям кинетической энергии.

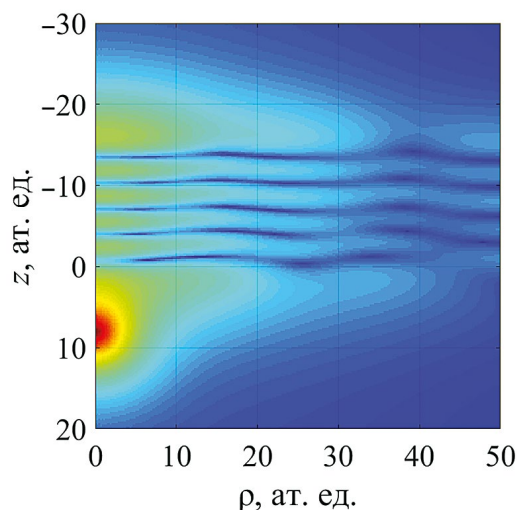


Рис. 4. Плотность распределения волновой функции активного электрона иона H^- , находящегося на расстоянии 8 ат. ед. от поверхности пленки Al толщиной 15 ат. ед.

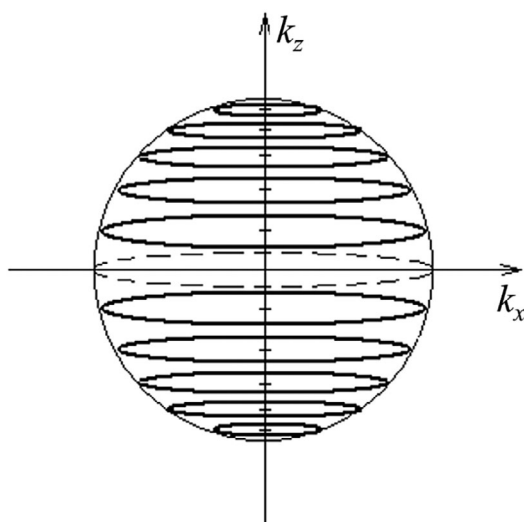


Рис. 5. Набор дисков Ферми для тонкой пленки.

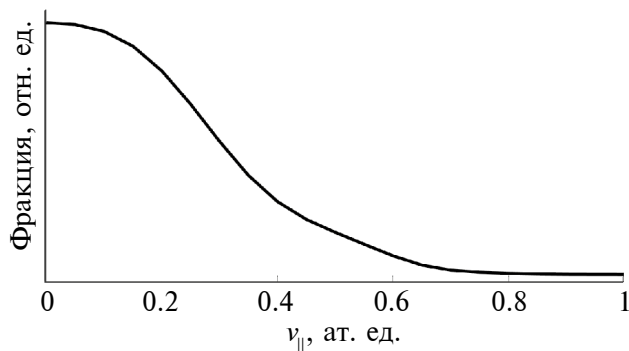


Рис. 6. Модельный расчет зависимости фракции выхода ионов H^- от параллельной скорости при рассеянии на пленке Al толщиной 15 ат. ед.

Можно провести параллель с задачей о движении частицы в потенциальной яме: кинетическая энергия частицы максимальна в центре и обращается в ноль на границах ямы.

В силу квантования движения электрона в тонкой пленке вдоль нормали к поверхности электроны будут распределены не внутри сферы Ферми, а по нескольким дискам Ферми (рис. 5). Каждый диск соответствует определенному дискретному уровню энергии. Поэтому при расчете весовых коэффициентов подхвата и потери электрона следует рассматривать пересечение дисков Ферми с “кольцеобразными” максимумами распределения активного электрона (рис. 2, толщина пленки 15 ат. ед.). Из геометрических соображений их функция пересечения будет максимальной при нулевой параллельной скорости.

На рис. 6 представлены результаты модельного расчета фракции выхода ионов H^- при рассеянии на пленке Al толщиной 15 ат. ед. от величины параллельной скорости. В расчете учитывали пересечение одного диска Ферми с одним “шарообразным” распределением активного электрона. Точный расчет с учетом нескольких дисков Ферми и полного распределения активного электрона не актуален по причине отсутствия экспериментальных данных. Как видно из рис. 6, фракция выхода ионов H^- — монотонно убывающая функция параллельной скорости. Этот результат качественно отличается от теоретических данных, приведенных в [22, 23], где рассматриваемая зависимость имеет колоколообразную форму. Существенным аргументом в пользу представленных результатов является то, что техника анализа распределения электрона в k -пространстве успешно зарекомендовала себя при моделировании экспериментов по электронному обмену с металлами. Однако окончательный вывод о правомерности того или иного подхода корректно делать после появления экспериментальных результатов по электронному обмену при скользящем рассеянии на тонких пленках.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрен электронный обмен при скользящем рассеянии ионов водорода на тонких пленках Al. На основе анализа распределения электрона в пространстве волновых векторов и применения общепринятой модели смещения сфер Ферми было показано, что зависимость вероятности формирования отрицательного иона водорода от параллельной компоненты скорости должна быть монотонно убывающей.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Martynenko Yu. V.* // Sov. Phys. Solid State. 1964. V. 3529. P. 2003.
2. *Yurasova V.E., Chernysh V.S., Kuvakin M.V., Shelyakin L.B.* // JETP Lett. 1975. V. 21. № 3. P. 79.
3. *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.
<http://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.11.022>
4. *Mamedov N.V., Mamedov I.M.* // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. 2020. V. 84. P. 713.
<http://doi.org/10.3103/S1062873820060155>
5. *Balakshin Y.V., Kozhemiako A.V., Evseev A.P., Minnebaev D.K., Elsehly E.M.* // Moscow University Phys. Bull. 2020. V. 75. P. 218.
<http://doi.org/10.3103/S0027134920030030>
6. *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.
<http://doi.org/10.3103/S0027134920020113>
7. *Tolstogousov A., Daolio S., Pagura C.* // Surf. Sci. 1999. V. 441. P. 213.
[http://doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00881-X](http://doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00881-X)
8. *Elovikov S.S., Zyкова E.Yu., Mosunov A.S. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2002. V. 66. P. 558.
9. *Bogomolova L.D., Borisov A.M., Kurnaev V.A., Mashkova E.S.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 212. P. 164.
[http://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)01730-0](http://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)01730-0)
10. *Zinoviev A.N., Babenko P.Y., Meluzova D.S., Shergin A.P.* // JETP Lett. 2018. V. 108. P. 633.
<http://doi.org/10.1134/S0021364018210154>
11. *Los J., Geerlings J.J.C.* // Phys. Rep. 1990. V. 190. P. 133.
12. *Karaseov P.A., Karabeshkin K.V., Titov A.I., Shilov V.B., Ermolaeva G.M., Maslov V.G., Orlova A.O.* // Semiconductors. 2014. V. 48. № 4. P. 446.
<http://doi.org/10.1134/S1063782614040125>
13. *Andrianova N.N., Borisov A.M., Mashkova E.S., Shulga V.I.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2016. V. 10. P. 412.
<http://doi.org/10.1134/S1027451016020233>
14. *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.
<http://doi.org/10.1134/S102745101211016X>
15. *Gainullin I.K.* // Surf. Sci. 2019. V. 681. P. 158.
<http://doi.org/10.1016/j.susc.2018.11.003>
16. *Gainullin I.K.* // Physics-Uspekhi. 2020. V. 63. № 9.
<http://doi.org/10.3367/UFNe.2019.11.038691>
17. *Gainullin I. K.* // Surf. Sci. 2018. V. 677. P. 324.
<http://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.007>
18. *Winter H.* // Phys. Rep. 2002. V. 367. P. 387.
[http://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00010-8](http://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00010-8)
19. *Liu P., Gainullin I.K., Esaulov V.A. et al.* // Phys. Rev. A. 2020. V. 101. P. 032706.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.032706>
20. *Shi Y., Yin L., Ding B. et al.* // Phys. Rev. A. 2022. V. 105. P. 042807.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.105.042807>
21. *Van Wunnik J.N.M., Brako R., Makoshi K., Newns D.M.* // Surf. Sci. 1983. V. 126. № 1–3. P. 618.
22. *Borisov A.G., Winter H.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 115. № 1–4. P. 1425.
[http://doi.org/10.1016/0168-583X\(96\)01518-2](http://doi.org/10.1016/0168-583X(96)01518-2)
23. *Усман Е.Ю., Гайнуллин И.К., Уразгильдин И.Ф.* // Вестн. Моск. ун-та. 2005. № 2. С. 23.
24. *Amanbaev E.R., Shestakov D.K., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2009. V. 3. P. 865.
<http://doi.org/10.1134/S1027451009060032>
25. *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.
<http://doi.org/10.1134/S1027451008050170>
26. *Shestakov D.K., Polivnikova T.Yu., Gainullin I.K., Urazgil'din I.F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 2596.
<http://doi.org/10.1016/j.nimb.2009.05.043>
27. *Gainullin I.K., Urazgil'din I.F.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 205403.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.205403>
28. *Souda R., Ayzawa T., Hayami W., Otani S., Ishizawa Y.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 7761.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.7761>
29. *Amanbaev E.R., Gainullin I.K., Zyкова E.Yu., Urazgil'din I.F.* // Thin Solid Films. 2011. V. 519. P. 4737.
<http://doi.org/10.1016/j.tsf.2011.01.026>
30. *Gainullin I.K.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. P. 032712.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.100.032712>
31. *Canário, Borisov, Gauyacq, Esaulov* // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. № 12. P. 121401.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.121401>
32. *Gainullin I.K., Usman E.Yu., Song Y.W., Urazgil'din I.F.* // Vacuum. 2003. V. 72. P. 263.
<http://doi.org/10.1016/j.vacuum.2003.07.001>
33. *Usman E.Yu., Urazgil'din I.F., Borisov A.G., Gauyacq J.P.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 205405.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.64.205405>
34. *Gainullin I.K., Usman E.Y., Urazgil'din I.F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 232. P. 22.
<http://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.03.019>
35. *Moskalenko S.S., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2023. V. 17. P. 299.
<http://doi.org/10.1134/S1027451022060155>
36. *Obreshkov B., Thumm U.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 022903.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.022903>
37. *Melkozerova J.A., Gainullin I.K.* // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2023. V. 12. P. 1175.

- <http://doi.org/10.1134/S1027451022060143>
38. 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.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.052705>
 39. Klimov N.E., Gainullin I.K. // *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 2023. V. 17. № 1. P. 72.
<http://doi.org/10.1134/S1027451023010123>
 40. Shaw J., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H., Monismith D. // *Phys. Rev. A*. 2019. V. 98. P. 052705.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.052705>
 41. Shaw J., Monismith D., Zhang Y., Doerr D., Chakraborty H.S. // *Atoms*. 2020. V. 7. P. 89.
<http://doi.org/10.3390/atoms7030089>
 42. Iglesias-García A., Romero M.A., García E.A., Goldberg E.C. // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 102. P. 115406.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.115406>
 43. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // *Phys. Rev. A*. 2015. V. 92. P. 022710.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.022710>
 44. Gainullin I.K. // *Moscow University Phys. Bull.* 2019. V. 74. P. 585.
<http://doi.org/10.3103/S0027134919060158>
 45. Gainullin I.K. // *Comp. Phys. Commun.* 2017. V. 210. P. 72.
<http://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.09.021>
 46. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // *Comp. Phys. Commun.* 2015. V. 188. P. 68.
<http://doi.org/10.1016/j.cpc.2014.11.005>
 47. Gainullin I.K. // *Phys. Rev. A*. 2017. V. 95. P. 052705.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.052705>
 48. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // *Phys. Rev. A*. 2015. V. 92. P. 022710.
<http://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.022710>
 49. Aleksandrov A.F., Gainullin I.K., Sonkin M.A. // *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* 2020. V. 14. P. 791.
<http://doi.org/10.1134/S1027451020040205>
 50. Majorosi S., Cziráj A. // *Comp. Phys. Comm.* 2016. V. 208. P. 9.
<http://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.07.006>
 51. Gainullin I.K., Klavysuk A.L. // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2012. V. 76. P. 542.
<http://doi.org/10.3103/S1062873812050115>
 52. Fu Y., Zeng J., Yuan J. // *Comp. Phys. Commun.* 2017. V. 210. P. 181.
<http://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.09.016>
 53. Gainullin I.K., Sonkin M.A. // *Math. Models Comput. Simulations*. 2019. V. 11. P. 964.
<http://doi.org/10.1134/S2070048219060048>
 54. Lüdde H.J., Horbatsch M., Kirchner T. // *Eur. Phys.* 2018. V. 91. P. 99.
<http://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90165-x>
 55. Zhou S.P., Liu A.H., Liu F.C., Wang C.C., Ding D.J. // *Chin. Phys. B*. 2019. V. 28. P. 083101.
<http://doi.org/10.1088/1674-1056/28/8/083101>
 56. Liu Q., Liu F., Hou C. // *Proc. Comput. Sci.* 2020. V. 171. P. 312.
<http://doi.org/10.1016/j.procs.2020.04.032>
 57. Cohen J.S., Fiorentini G. // *Phys. Rev. A*. 1986. V. 33. P. 1590.
 58. Jennings P.J., Jones R.O., Weinert M. // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. P. 6113.

Theoretical Study of Electron Exchange under Grazing Scattering on Thin Metal Films

I. K. Gainullin*

Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119992 Russia

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

Electron exchange during grazing scattering of hydrogen ions on thin metal films is considered. The main characteristic being studied is the yield fraction, i.e. the probability of the formation of a certain charge state of a scattered particle (in the case under consideration, H^-) as a function of the velocity component parallel to the surface of the sample. Based on an analysis of the electron distribution in the space of wave vectors, using the generally accepted model of displacement of Fermi spheres, it was shown that the dependence of the probability of the formation of a negative hydrogen ion on the parallel velocity component should decrease monotonically.

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