

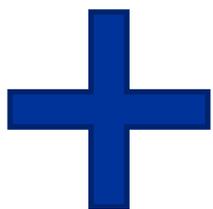
И.К. Гайнуллин

Физический факультет МГУ

Трёхмерное моделирование зарядового
обмена между ионными пучками и
поверхностью металлов

Аннотация

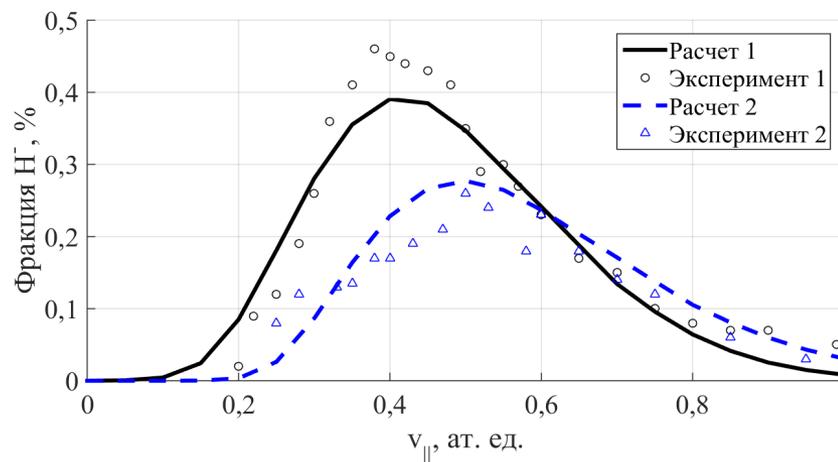
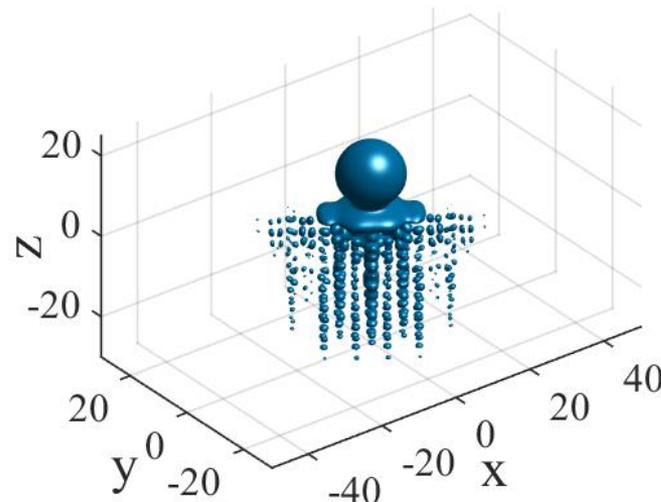
3D TDSE
GPU Solver



3D DFT
Potentials



$t = 100$

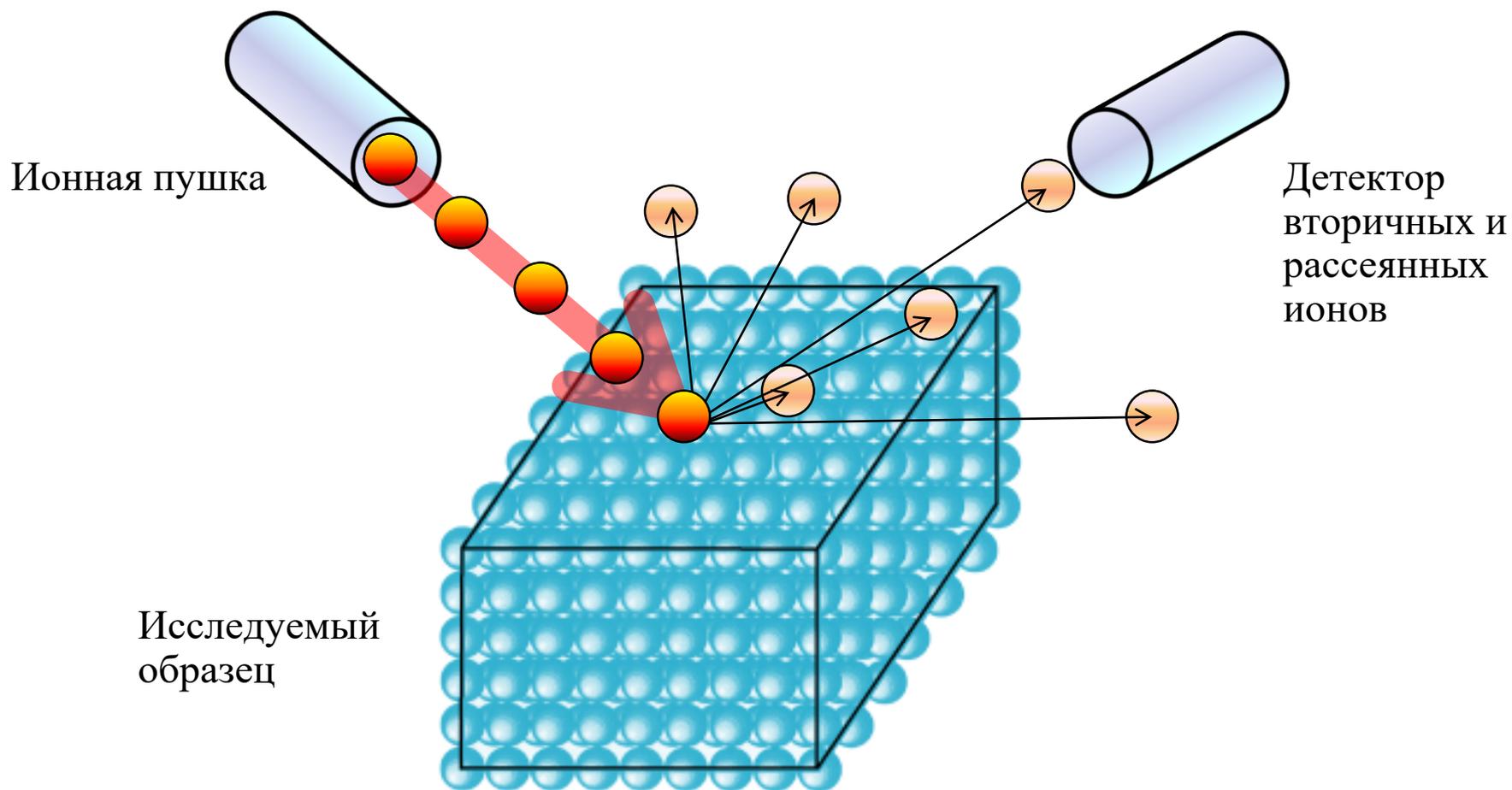




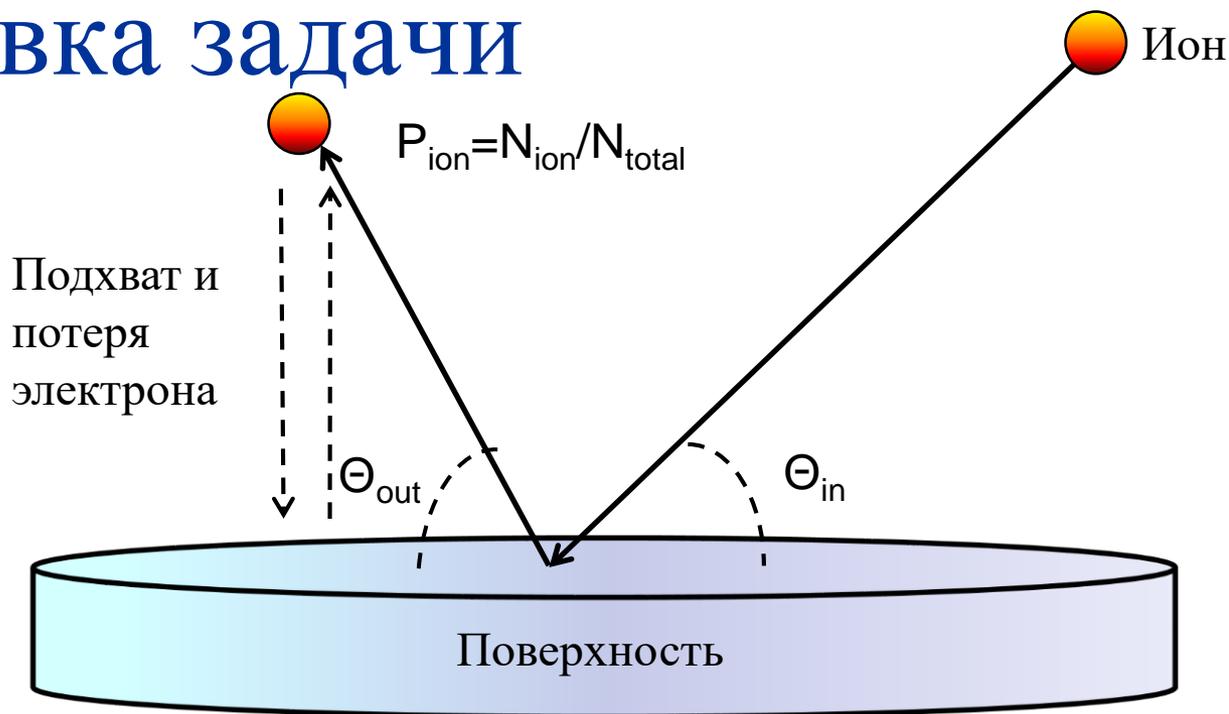
Содержание

- **Состояние проблемы**
- **Методы и подходы**
- **Трехмерные эффекты зарядового обмена**
- **Моделирование экспериментальных данных**
- **Заключение**

Модификация поверхности и диагностика Твердых тел ионными пучками



Постановка задачи



- Ион, поверхность, один активный электрон
- Туннелирование электрона с иона на поверхность описывается нестационарным уравнением Шредингера

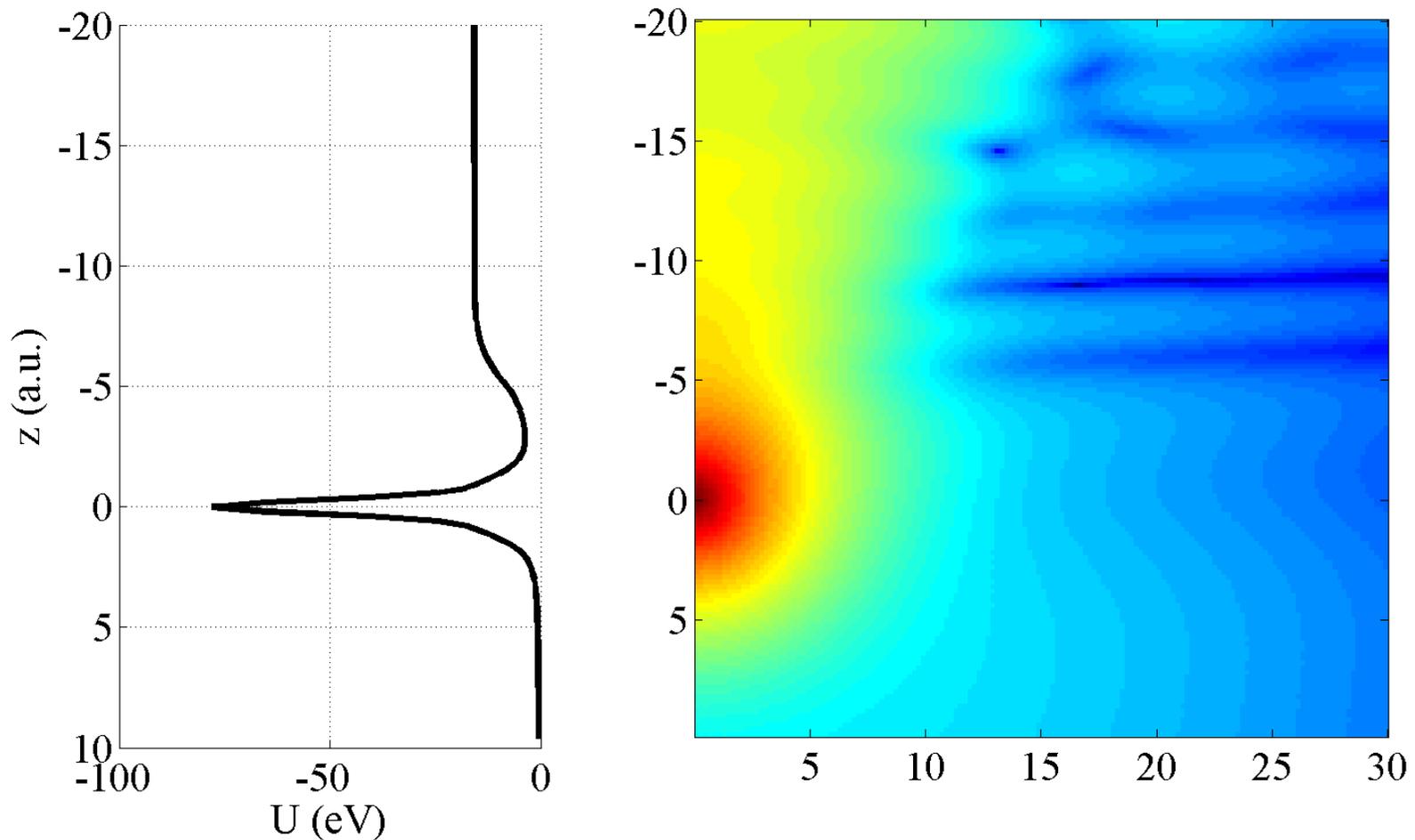


Исследуемые системы

- Ионы/атомы с одним активным электроном (H^0/H^- , Li^0/Li^+ , Na^+ , K^+)
- Металлы в приближении свободных электронов (модель «желе»)
- Металлы с запрещенной зоной (projected band gap)
- Наносистемы (тонкие пленки, островковые пленки)

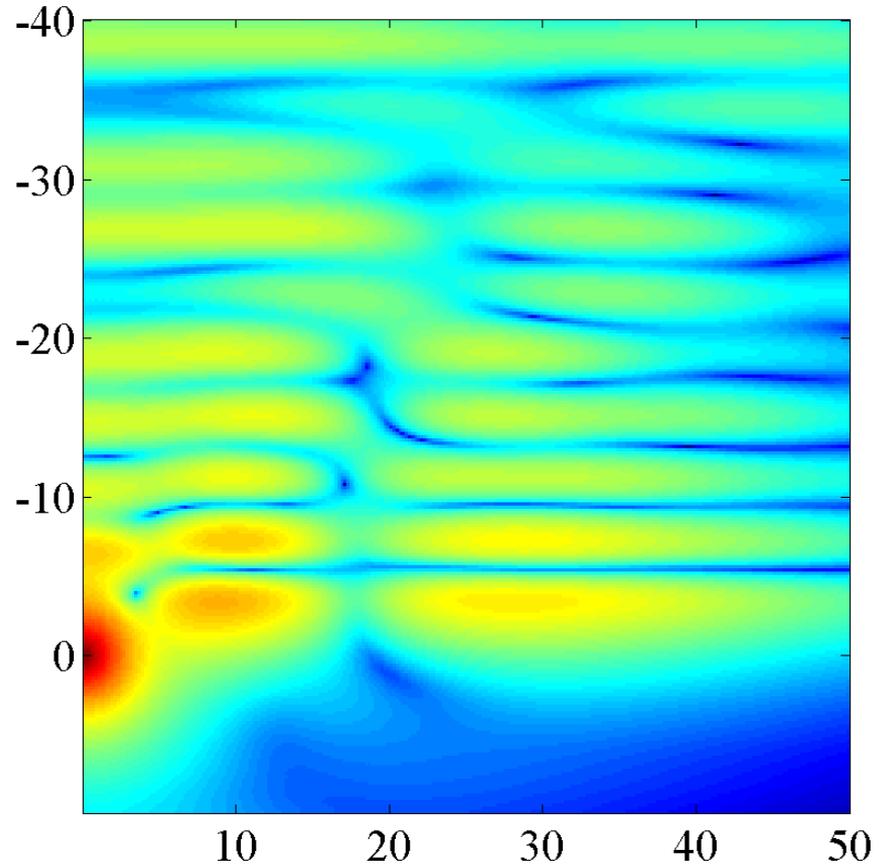
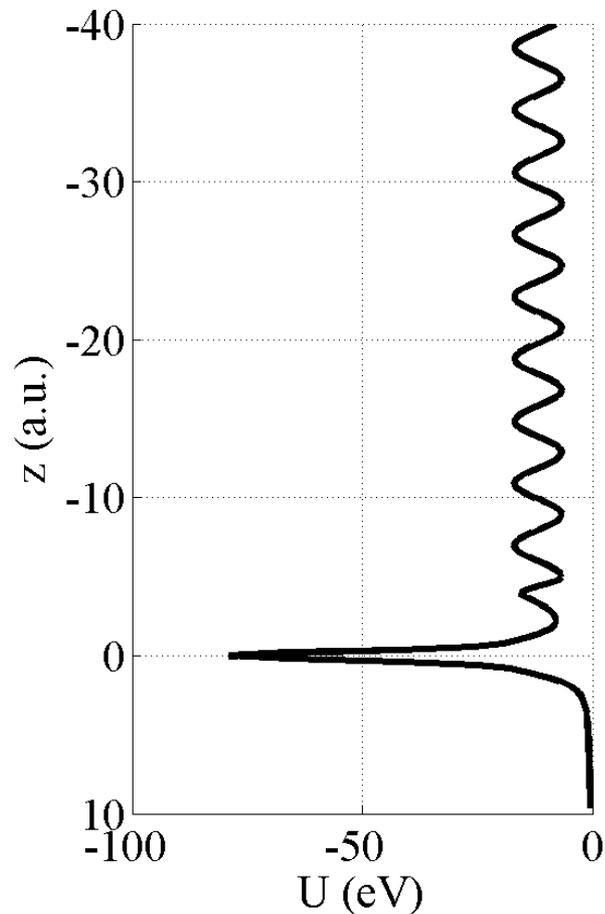


Модель желе – неограниченное распространение электрона - (110)



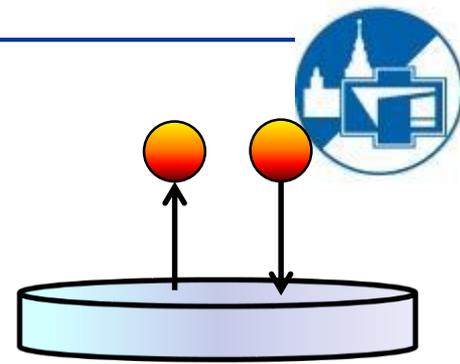


Projected band gap – формирование мнимых и поверхностных состояний - (100), (111)



Подходы к моделированию 3D задач

- Объем области моделирования $20 \times 20 \times 50 \text{ \AA}^3$
- Дискретная сетка $10^7 - 10^9$ точек
- Двумерная задача в координатах (z, x)
- Адиабатическое приближение
 - Двумерная статическая задача $(z, \rho) \rightarrow \Gamma(Z)$
 - Кинетическое уравнение $dP/dt = -P(t) * \Gamma(Z)$
- Включение трансляционного фактора
 - Двумерная динамическая задача $(z, \rho) \rightarrow \sigma(\theta, z)$
 - $$\Gamma(z) = 2\pi \int d\theta \cdot \sin \theta \int d\varphi \cdot \sigma(\theta, z) \cdot f\left(E_f - \frac{(k + v_{\parallel})^2}{2}\right)$$



Необъясненные эксперименты

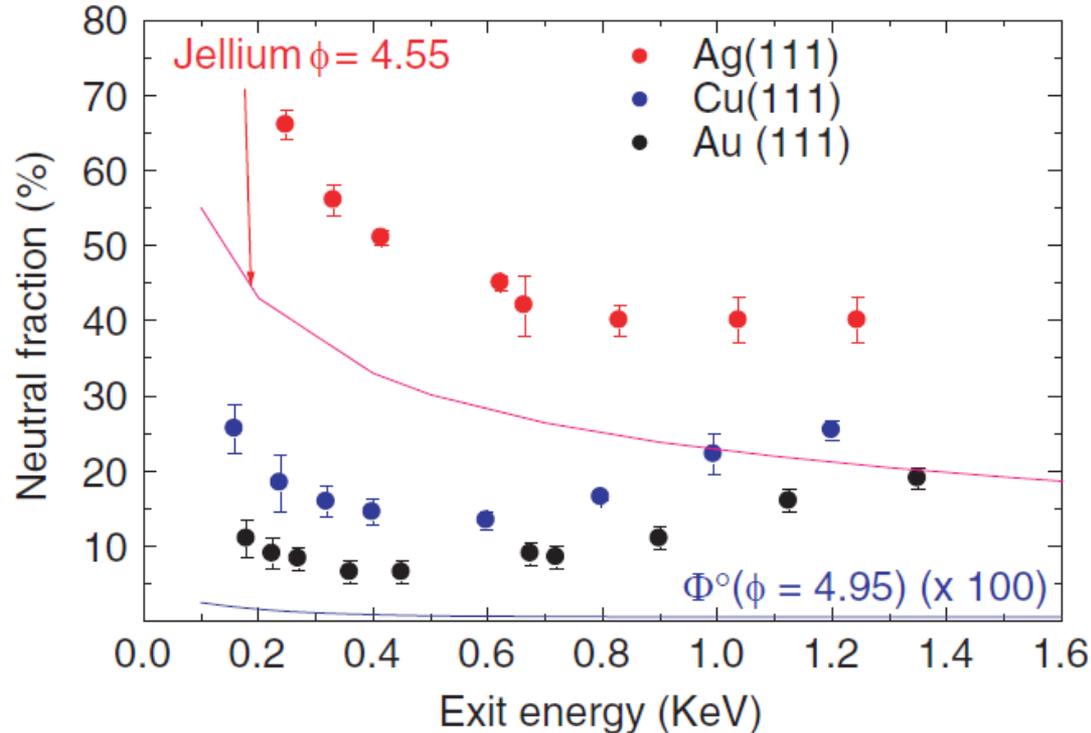


Figure 2. Li neutral fraction (Φ^0) obtained in scattering on Cu(111), Ag(111) and Au(111) surfaces as a function of exit energy. The lines correspond to a calculation within the jellium model (see text).

Необъясненные эксперименты

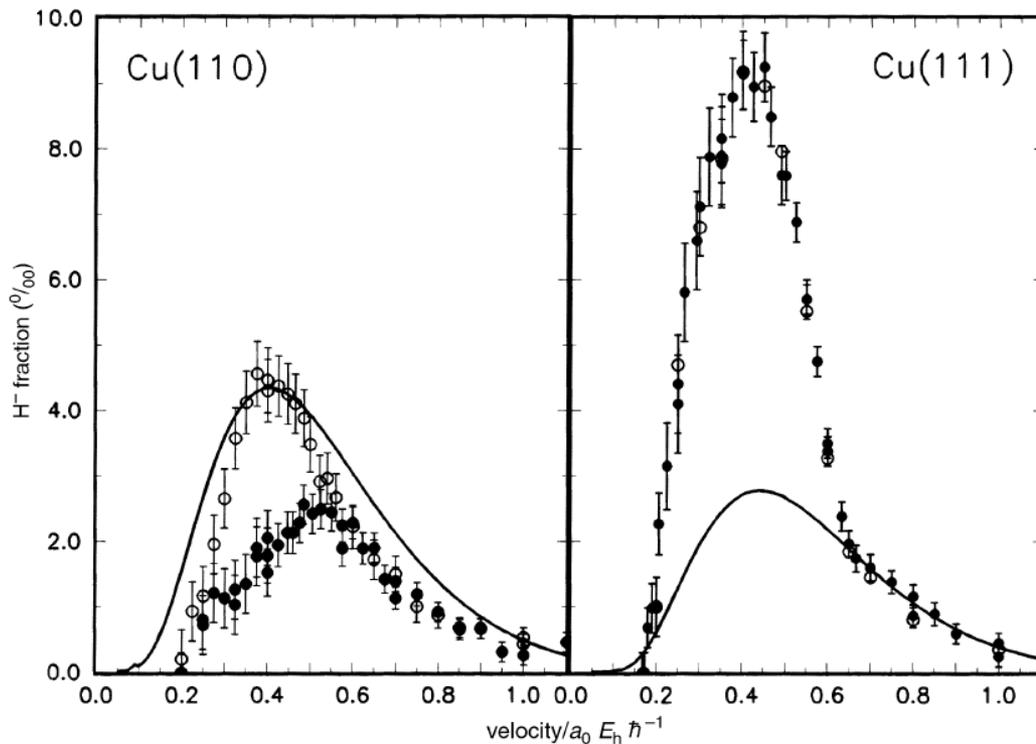
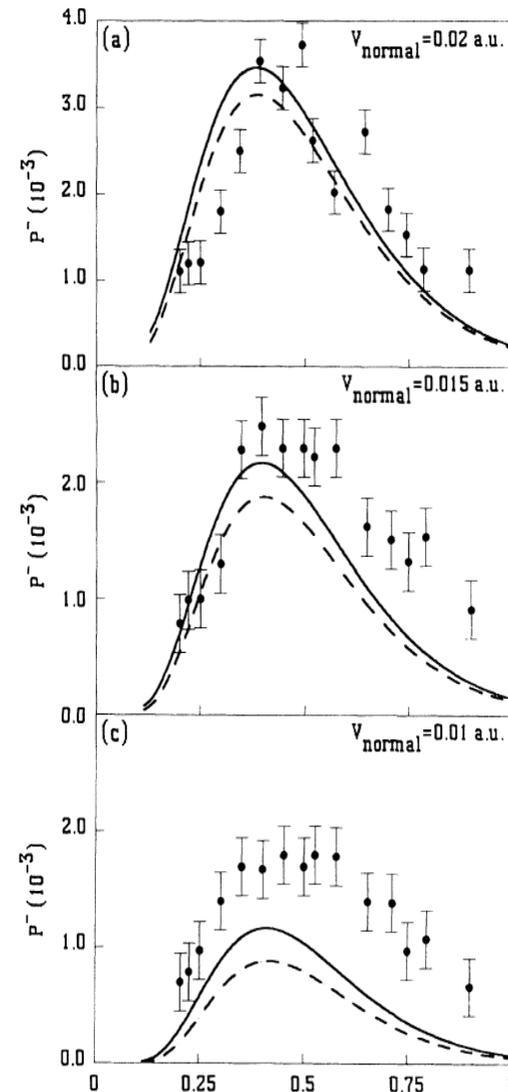


Fig. 5 Left panel: H^- fraction as function of parallel velocity for scattering from Cu(110) surface with a normal velocity component of $0.02 a_0 E_h \hbar^{-1}$. Calculations within the jellium model, (●) and (○) experimental data for azimuthal settings close to $\langle 001 \rangle$ and $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ directions, respectively. Right panel: Same as left panel, but for Cu(111) surface. (—) Calculations within the jellium model, (●) and (○) experimental data for azimuthal settings close to $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ and $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ directions, respectively.





Содержание

- Состояние проблемы
- **Методы и подходы**
 - **Численное решение TDSE**
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- Моделирование экспериментальных данных
- Заключение



Численная схема

$$i \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} = H(t)\psi(\vec{r}, t)$$

$$H = -\frac{\Delta}{2} - U(\vec{r}, t) \quad \phi^{n+1} = -2i\tau [H\phi^n] + \phi^{n-1}$$

$$\phi^0 = \phi + \frac{i}{2} \left[H\left(\frac{\tau}{2}\right)\phi \right] \quad \phi^1 = \phi - \frac{i}{2} \left[H\left(\frac{\tau}{2}\right)\phi \right]$$

$$\phi^{n+1} = -2i\tau e^{-i\tau V} [H\phi^n] + e^{-2i\tau V} \phi^{n-1}$$

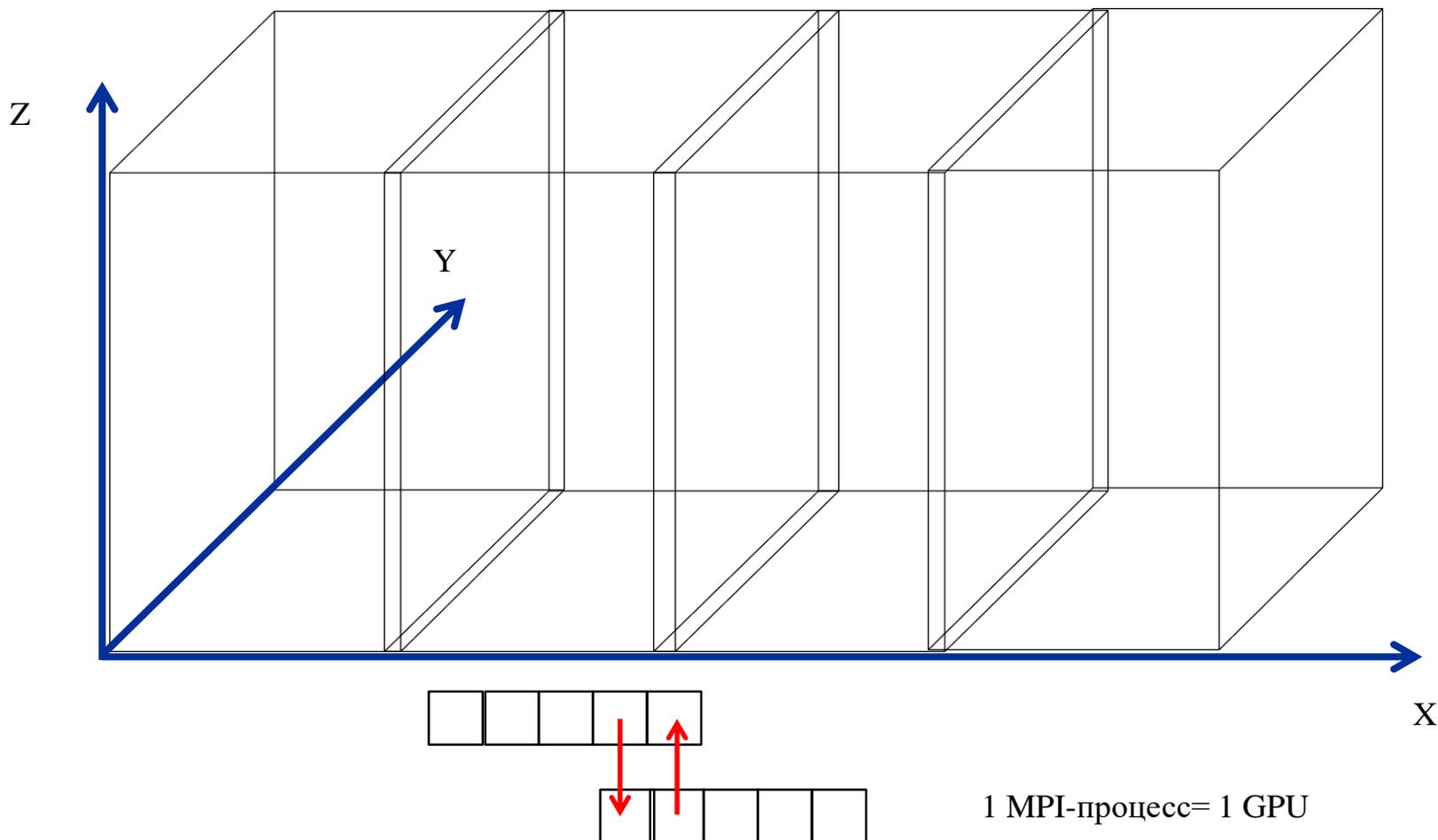


Параллельная реализация

- Архитектура MPI
- Оптимизация доступа к памяти
- Асинхронная передача данных (одновременный расчет основной области и обмен граничными значениями)
- Выравнивание расчетной сетки
- Минимизация передачи данных (нормировка волновой функции и вычисление статистики на GPU)
- Хранение значений в float, промежуточные расчеты в double



Параллельная реализация





Высокая производительность

TDSE Solver	Calculations facilities, used number of processing units and its price	Problem size, 10 ⁹ points	Number of steps	Calculatio n time, sec.	Time for 1 step, sec.	Normalized calculation time, sec.
TDSE GPU Solver (cylindrical coordinates)	GSRV MSU, 1 Tesla K20m * 2700 USD	0.0108	1000	4.7	0,0047	0.17
TDSE GPU Solver	Lomonosov MSU, 16 Tesla M2090 * 1600 USD	1	1000	59	0,0590	1.51
TDSE GPU Solver	GSRV MSU, 1 Tesla K20m * 2700 USD	0.016	1000	8.7	0,0087	1.47
CPU version of TDSE Solver (this article, the numerical scheme equal to GPU version)	GSRV MSU, 1 Xeon E5-2670 8C * 1500 USD [49]	0.125	1000	800	0,8000	9.60
Y.-M. Lee, J.-S. Wu, T.-F. Jiang, Y.-S. Chen, Phys. Rev. A 77 (2008) 013414	Taiwan Center for HPC, 128 Itanium-2, 1C, 1.5 GHz * 900 USD	0.0025	400	9,5	0,0238	5.47
Y.-M. Lee, J.-S. Wu, T.-F. Jiang, Y.-S. Chen, Phys. Rev. A 77 (2008) 013414	Taiwan Center for HPC, 32 Itanium-2, 1C, 1.5 GHz * 900 USD	0.007	100000	45000	0,4500	9.26
S.X. Hu, L.A. Collins, B.I. Schneider, Phys. Rev. A 80 (2009) 023426	Coyote supercomputer 480 Opteron 2.6 GHz, Infiniband * 1000 USD	3	8264	54000	6,5340	5.23
B.I. Schneider, L.A. Collins, S.X. Hu, Phys. Rev. E 73 (2006) 036708; 1D MPI decomposition	LANL QSC, 128 EV68 CB, 1.25GHz * 650 USD	0.027	1	0.46	0,4600	7.09
B.I. Schneider, L.A. Collins, S.X. Hu, Phys. Rev. E 73 (2006) 036708; 2D MPI decomposition	LANL Flash Supercomputer 256 AMD, 2.0 GHz * 250 USD	0.54	1	7.6	7,6000	4.50

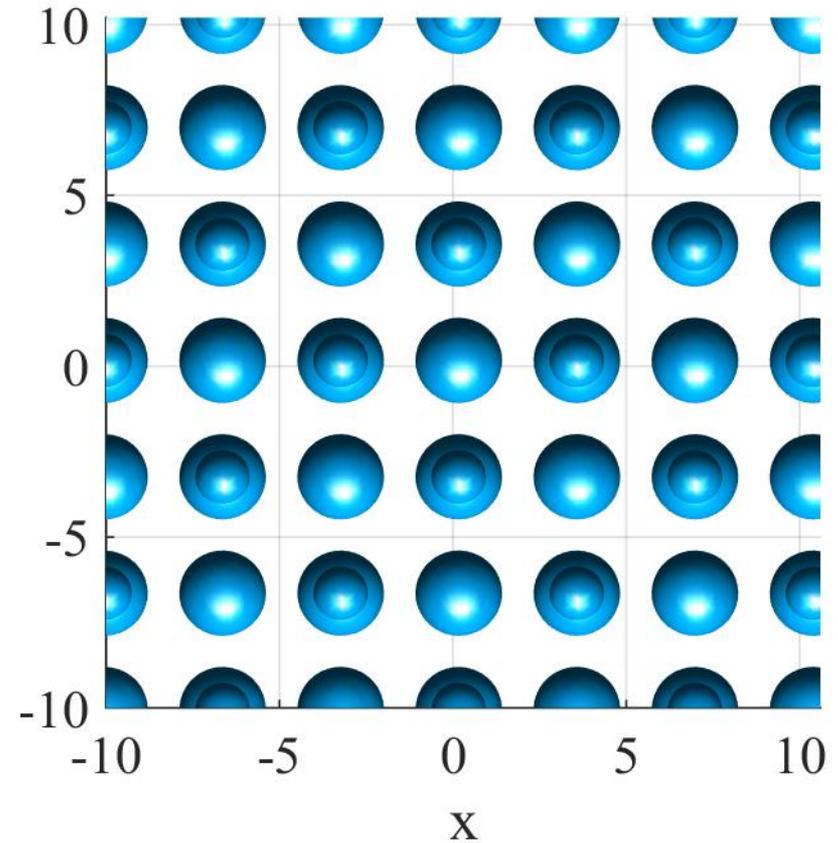
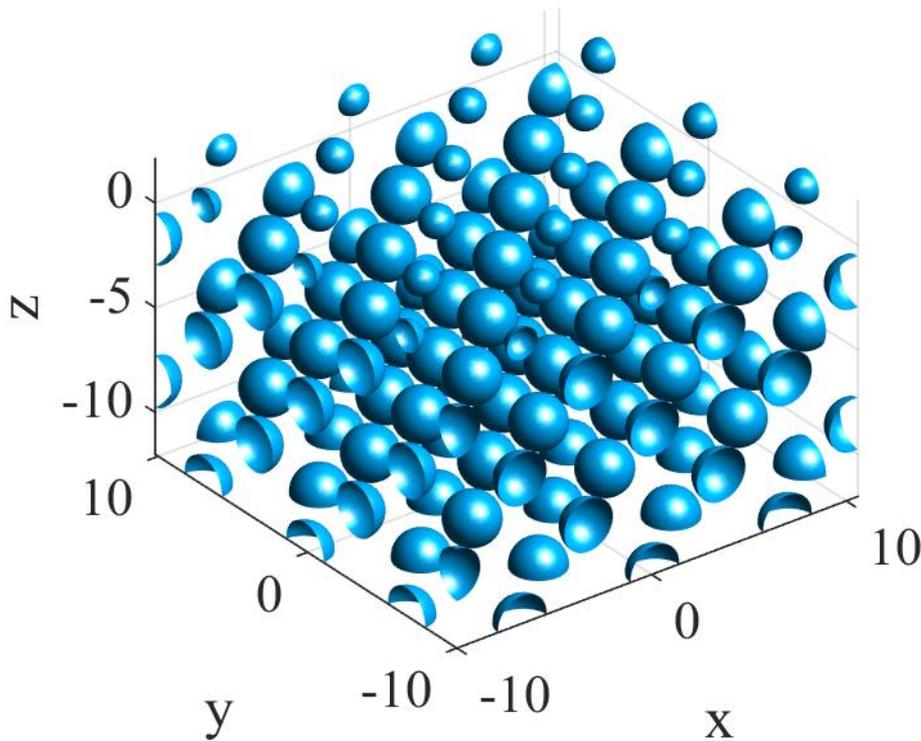
$$NCT = t \cdot \frac{Price}{GridFactor \cdot ProblemSize}$$



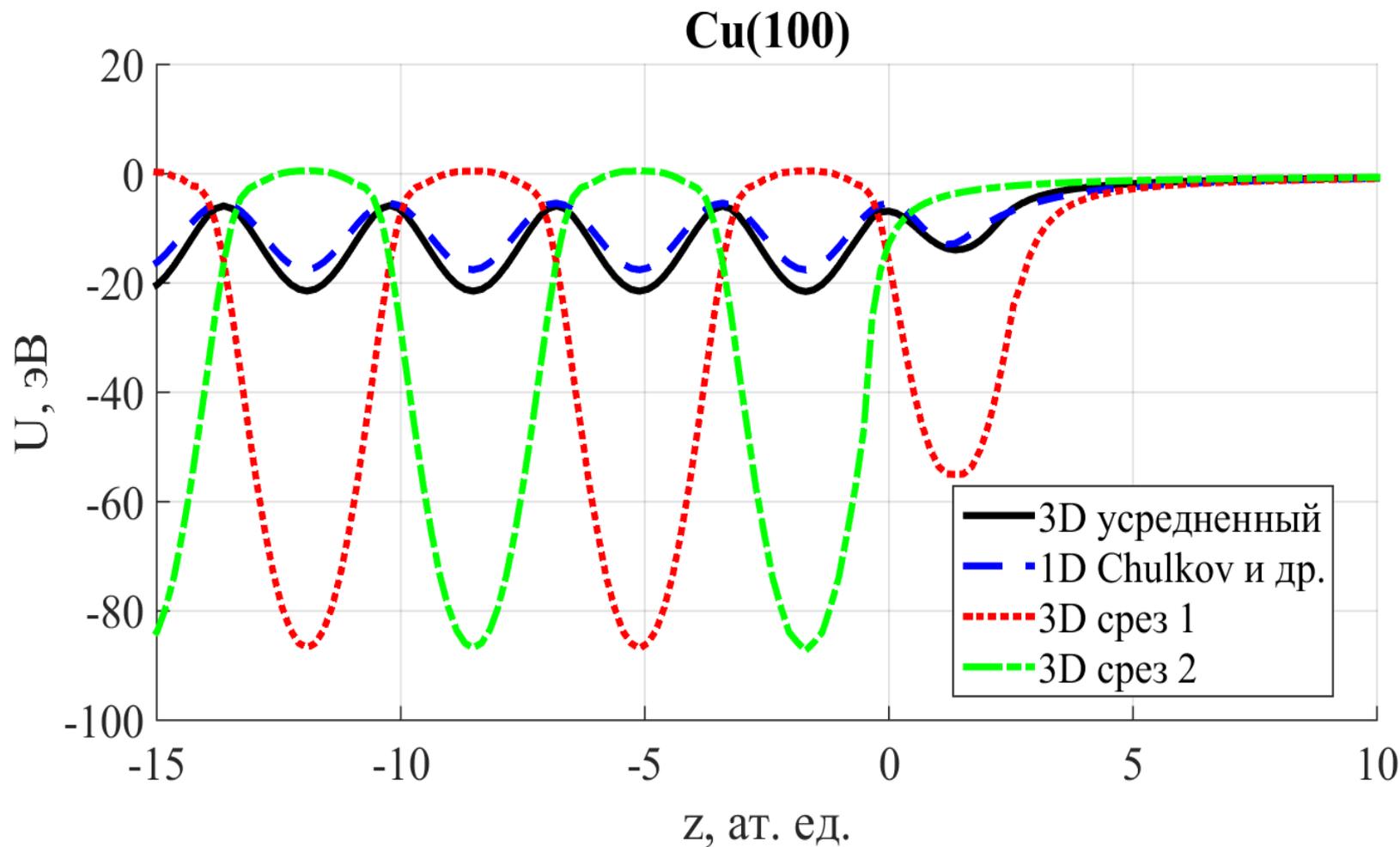
Содержание

- Состояние проблемы
- **Методы и подходы**
 - **Трехмерные потенциалы**
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- Моделирование экспериментальных данных
- Заключение

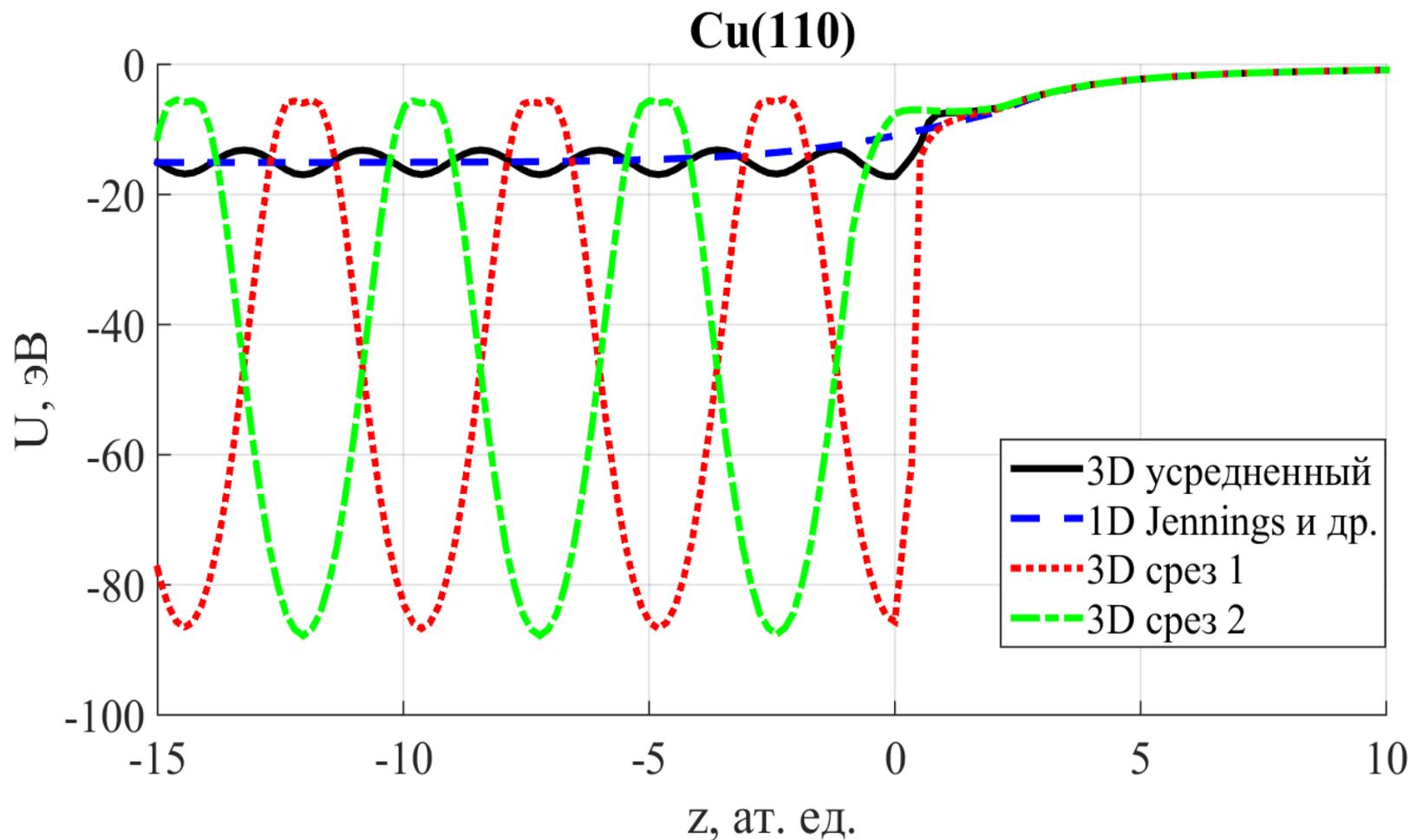
Трёхмерные потенциалы



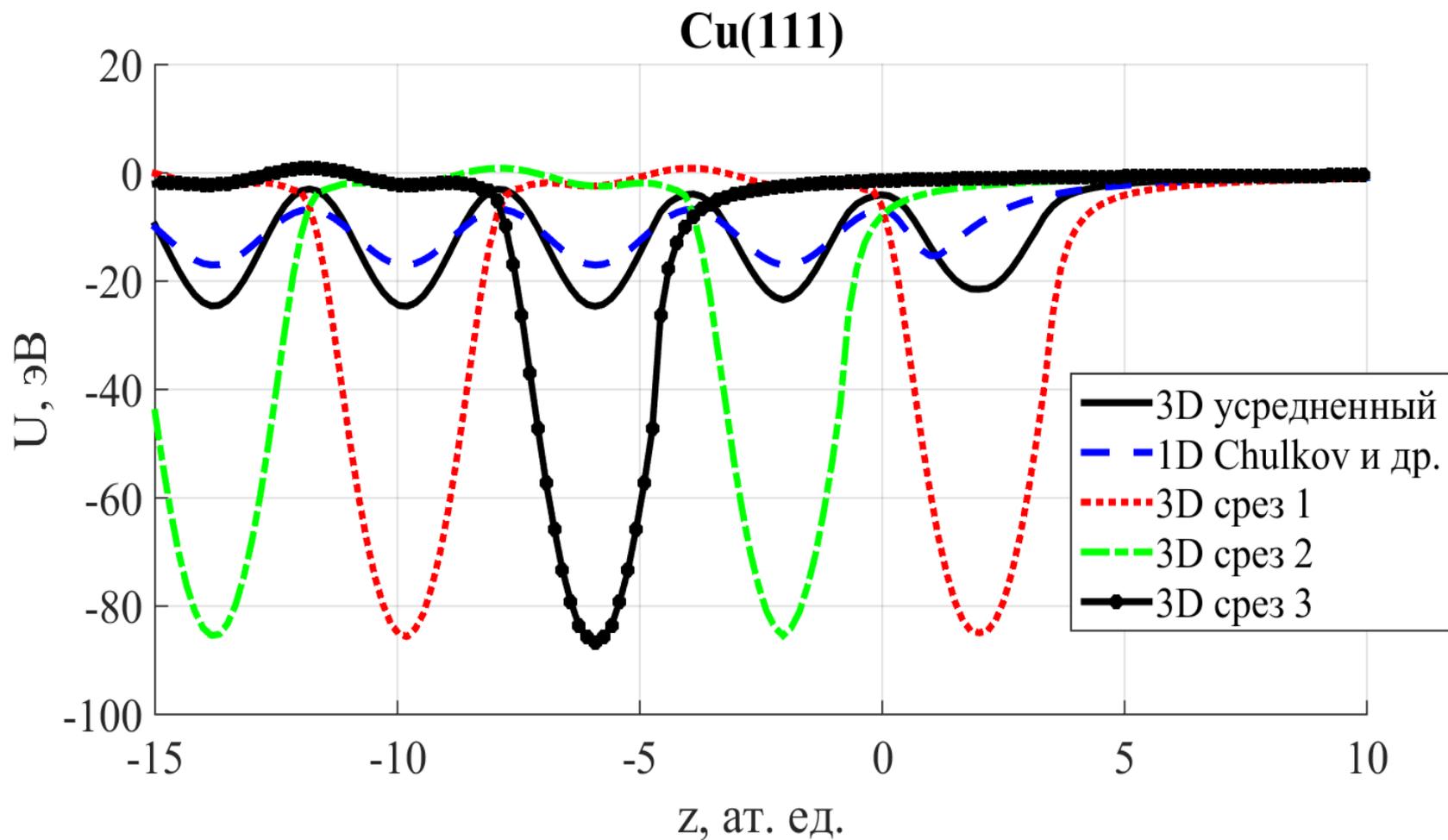
Сопоставление 1D и 3D потенциалов



Сопоставление 1D и 3D потенциалов



Сопоставление 1D и 3D потенциалов



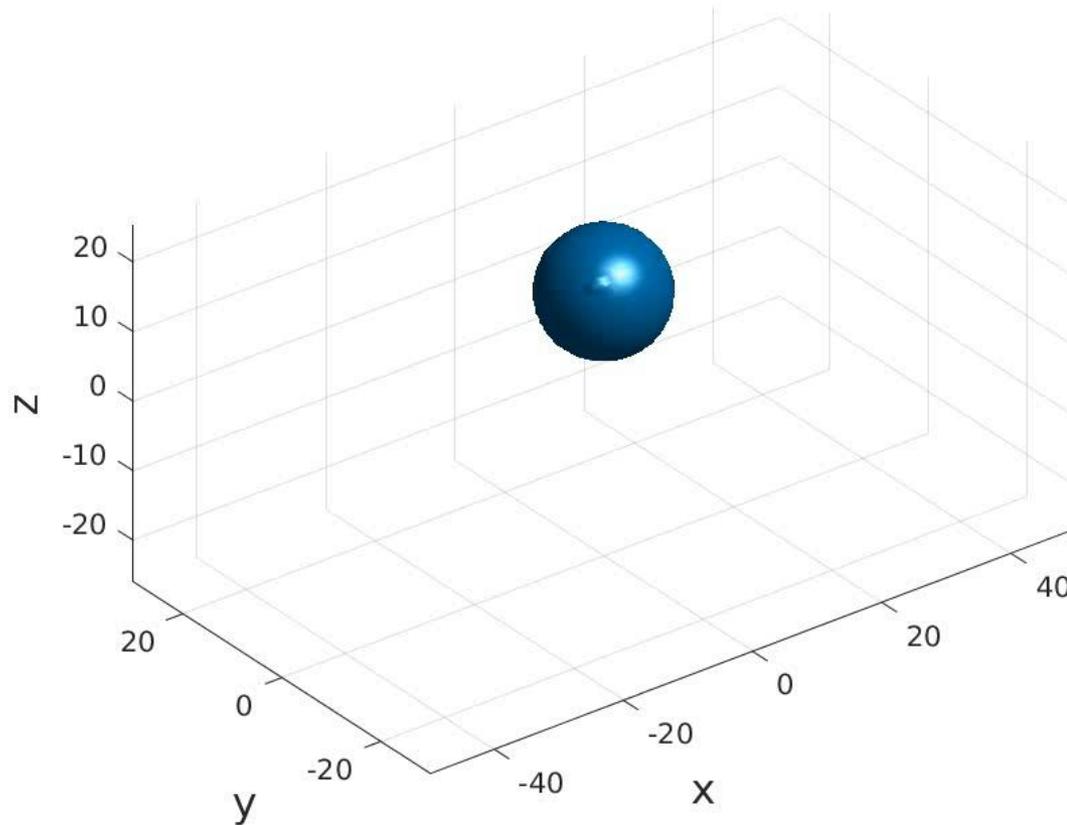


Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- **Трехмерные эффекты зарядового обмена**
 - **Общие закономерности**
- Моделирование экспериментальных данных
- Заключение

Эволюция электронной плотности

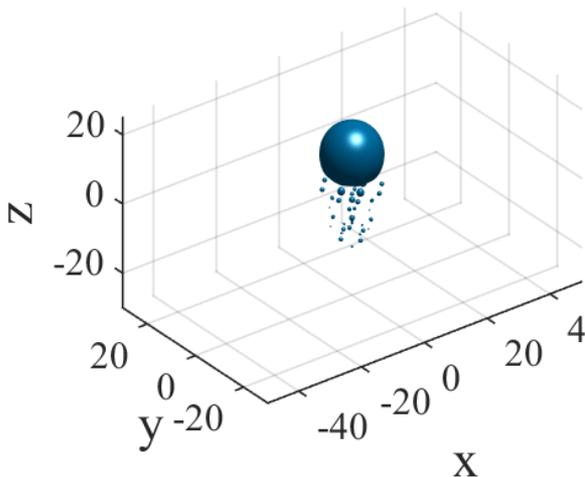
$t = 1$



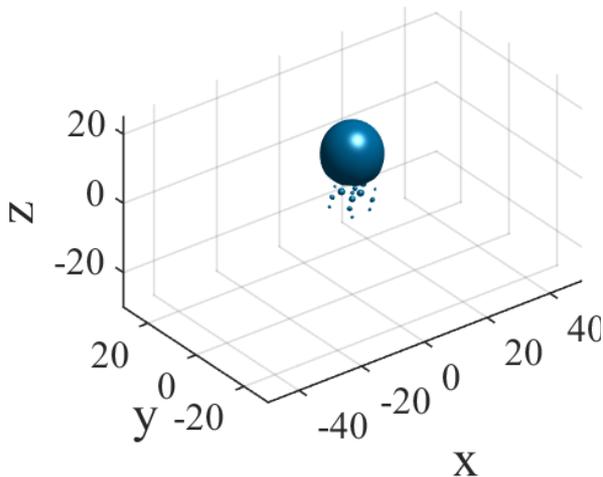


Эволюция электронной плотности

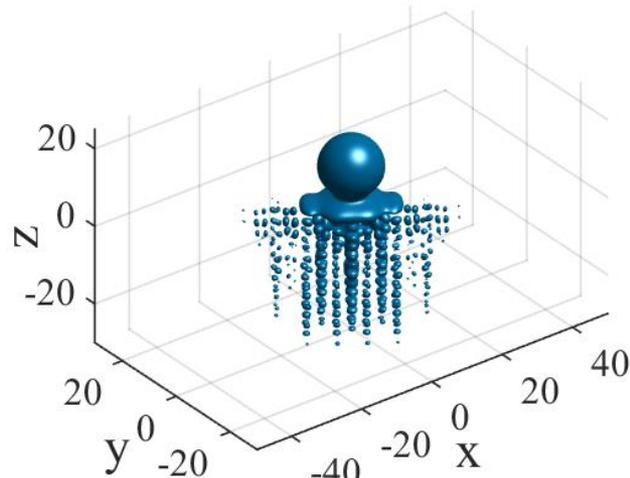
$t = 100$



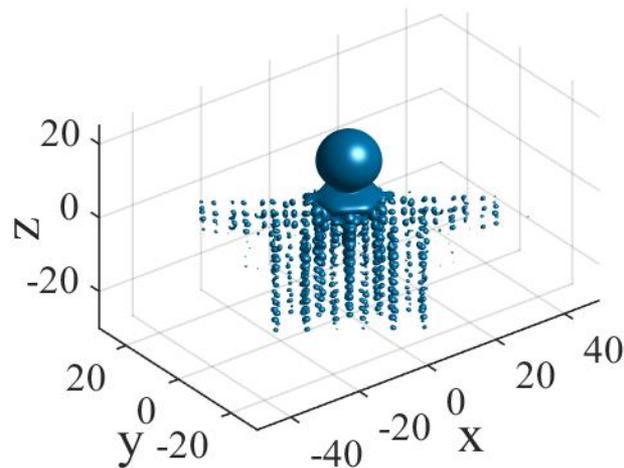
$t = 500$



$t = 100$



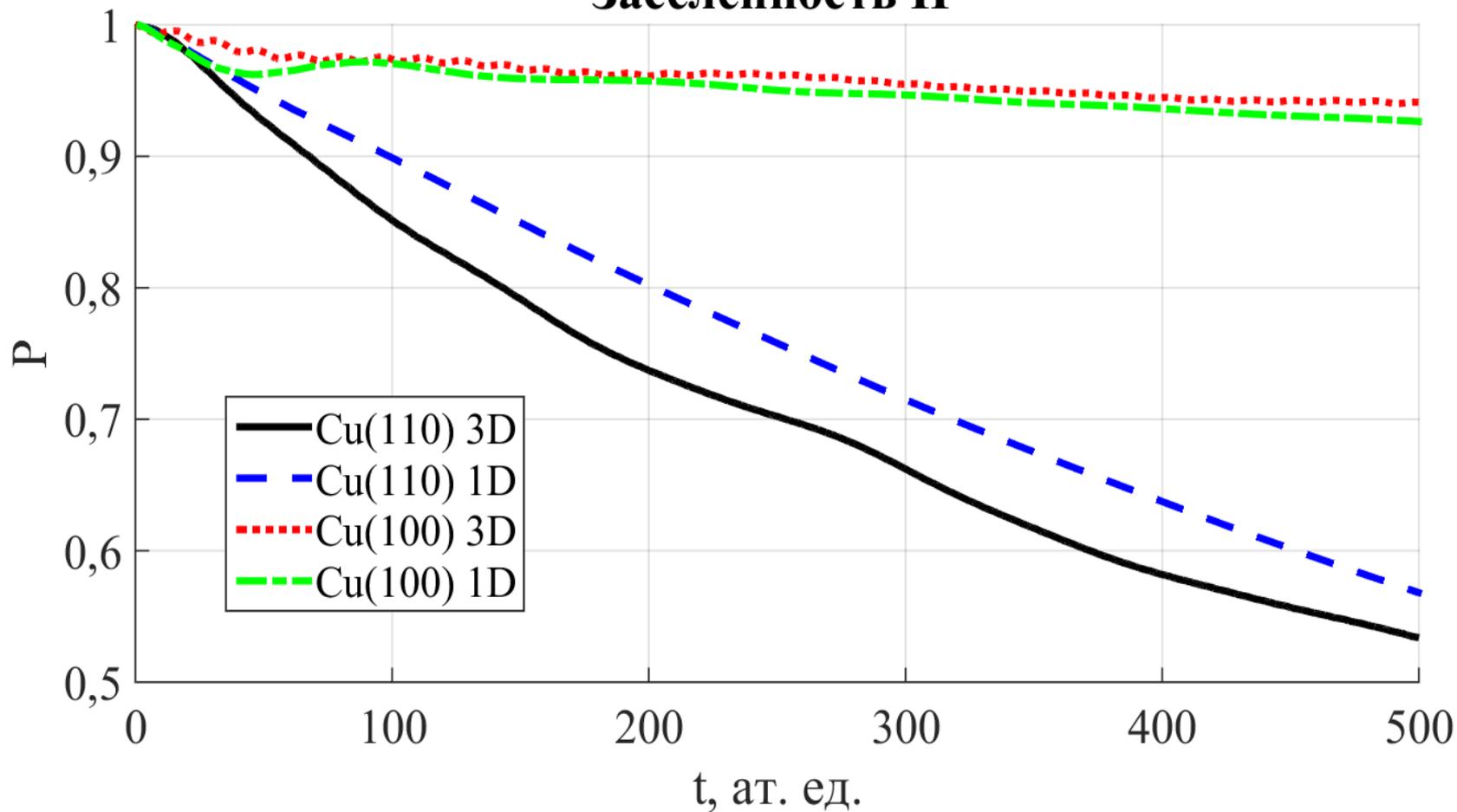
$t = 500$



Эффективность электронного перехода



Заселенность H

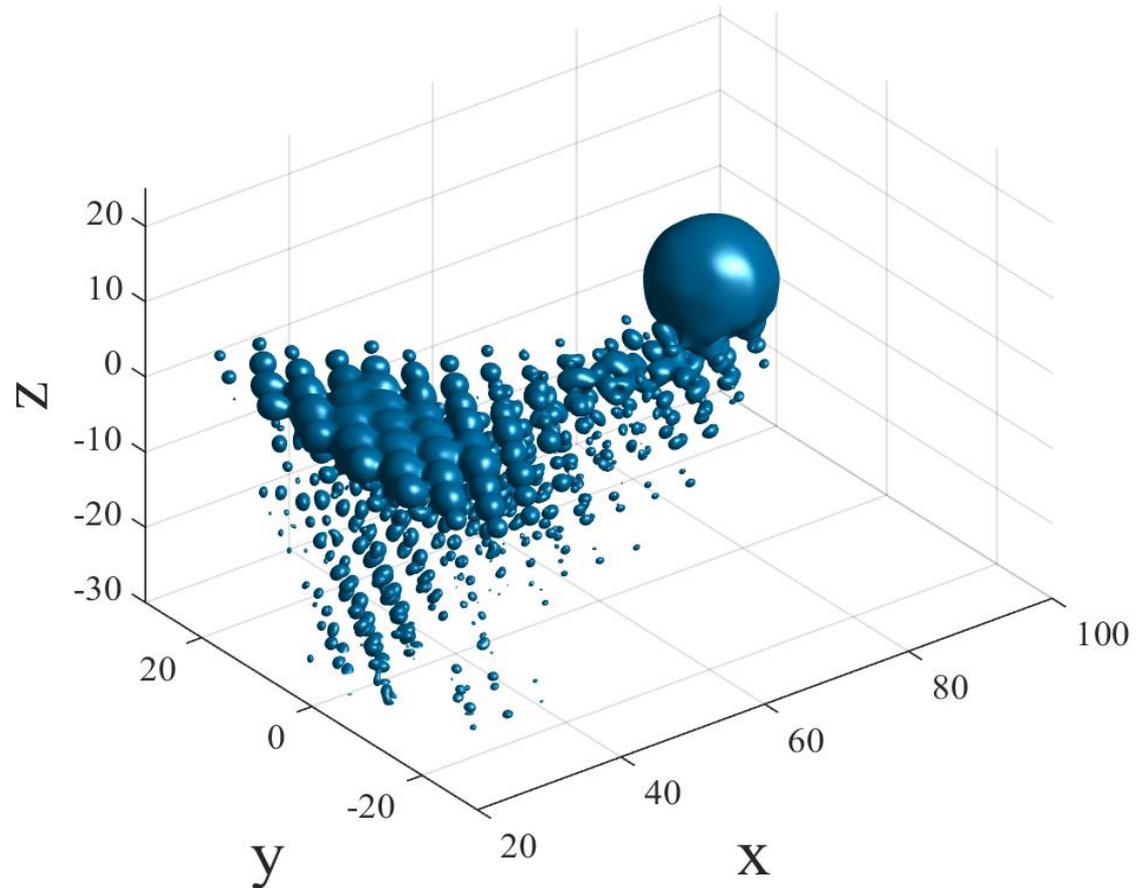




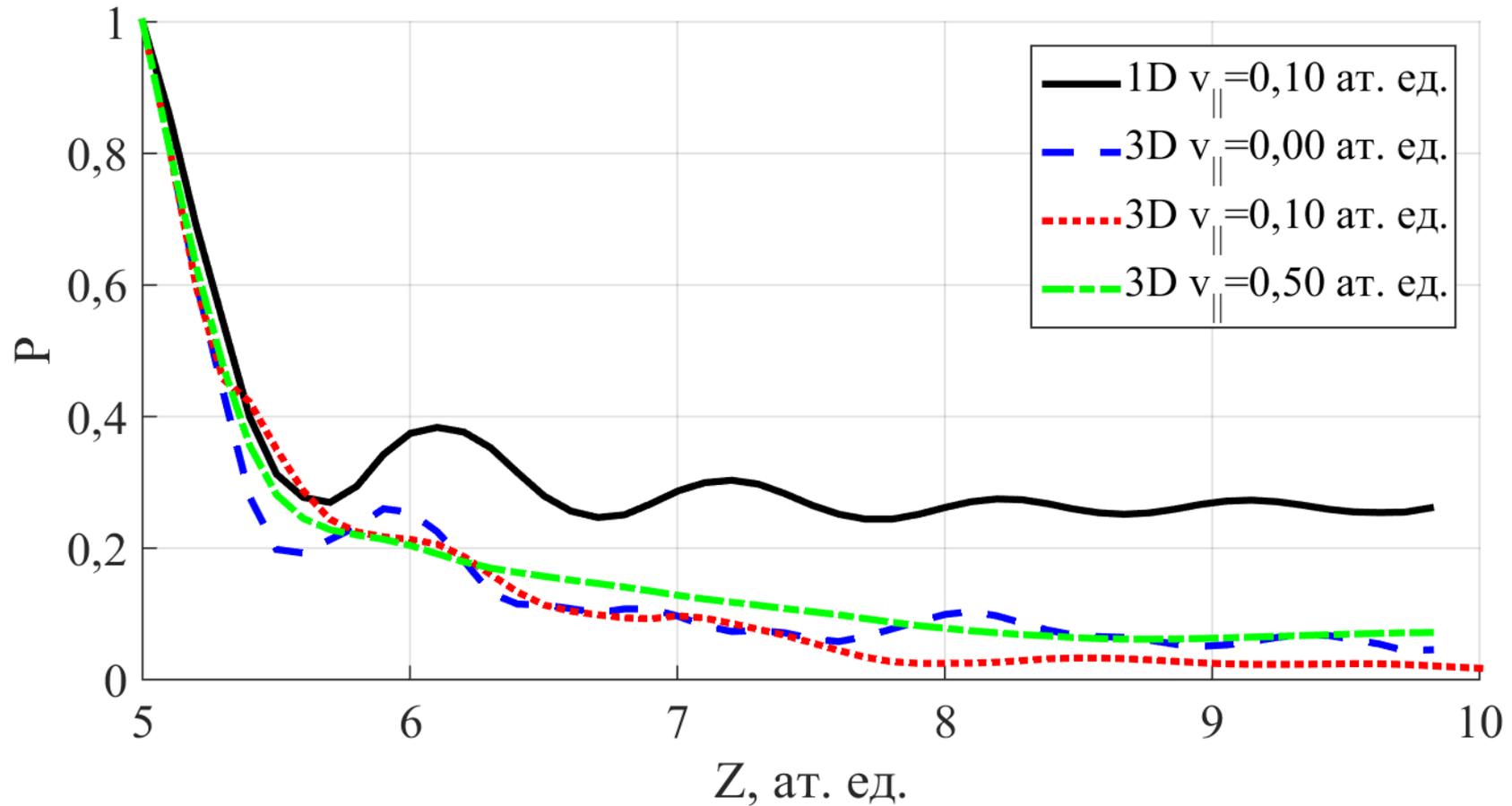
Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- **Трехмерные эффекты зарядового обмена**
 - **Эффект «торможения» электрона**
- Моделирование экспериментальных данных
- Заключение

Эффект торможения электрона



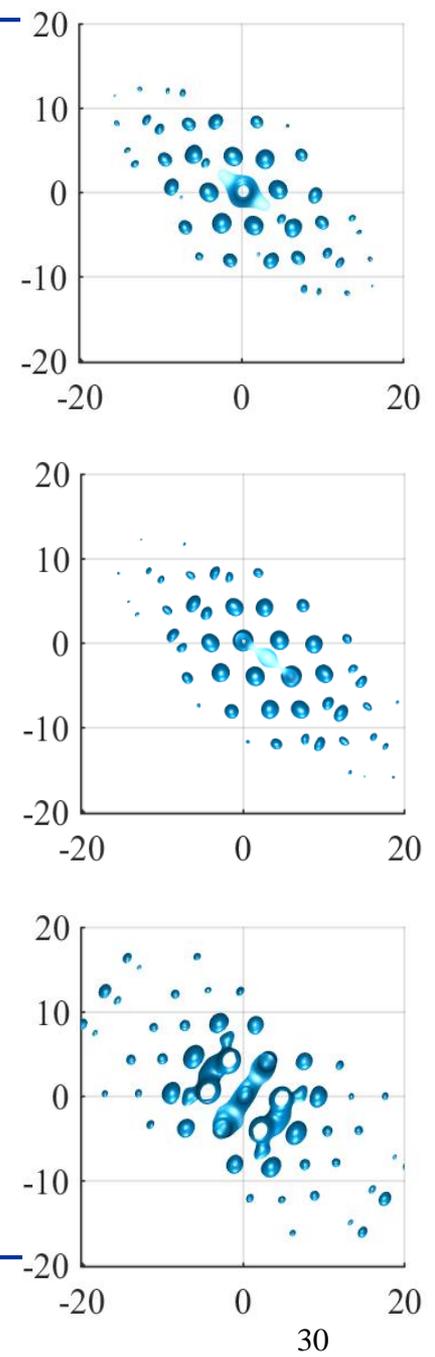
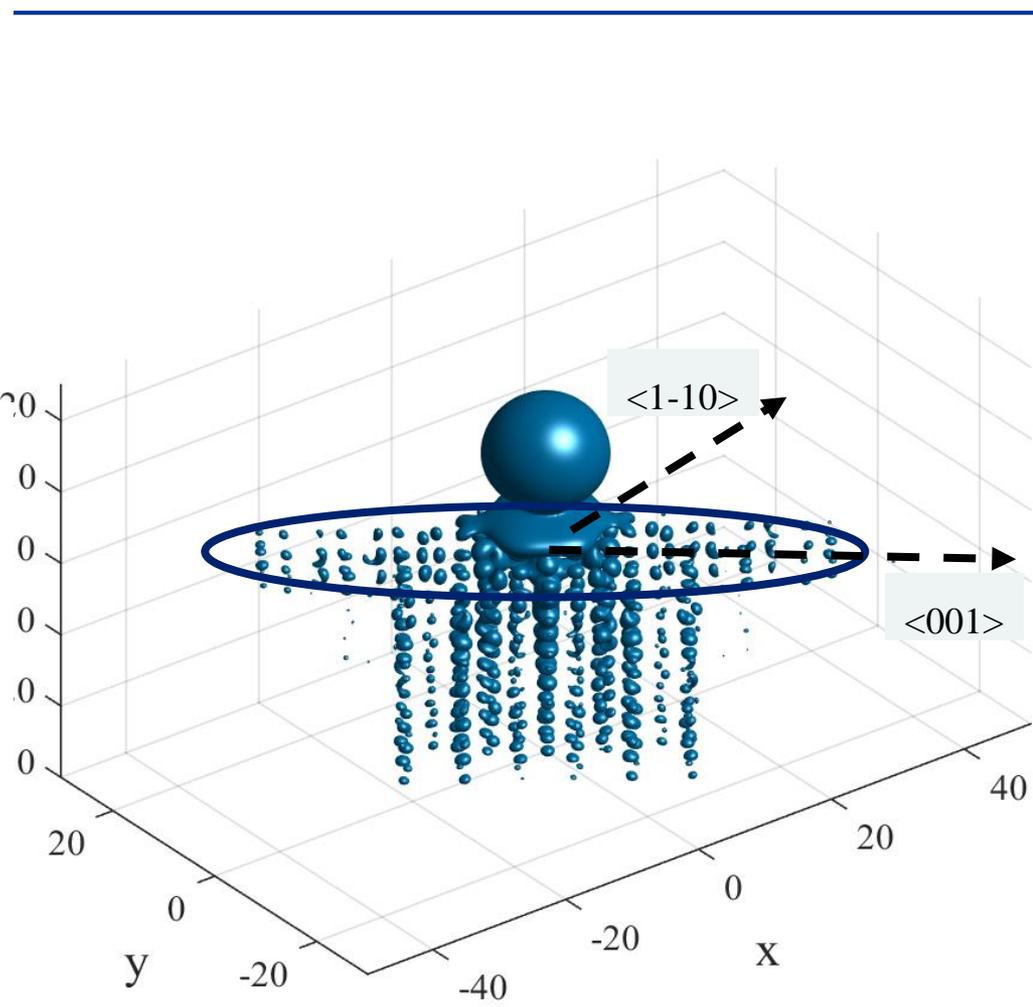
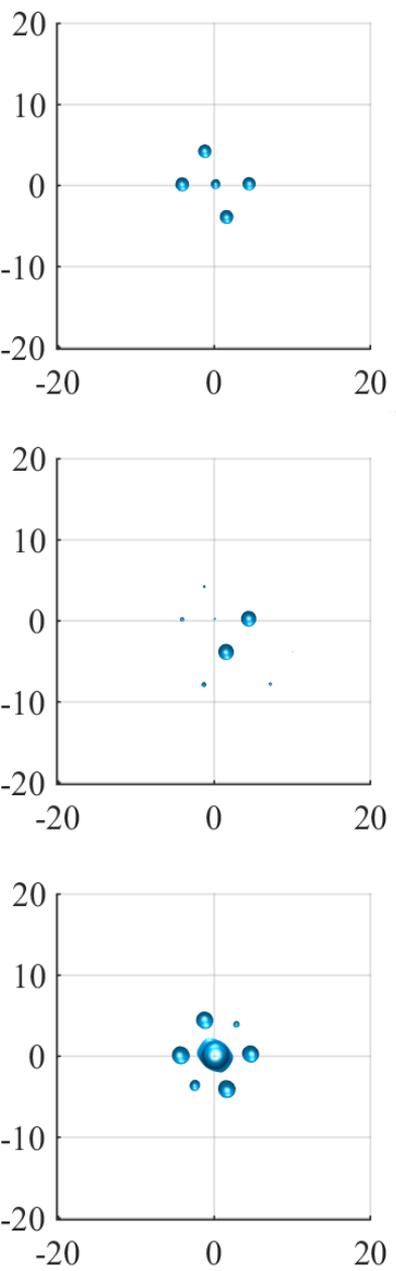
Cu(111) – projected band gap

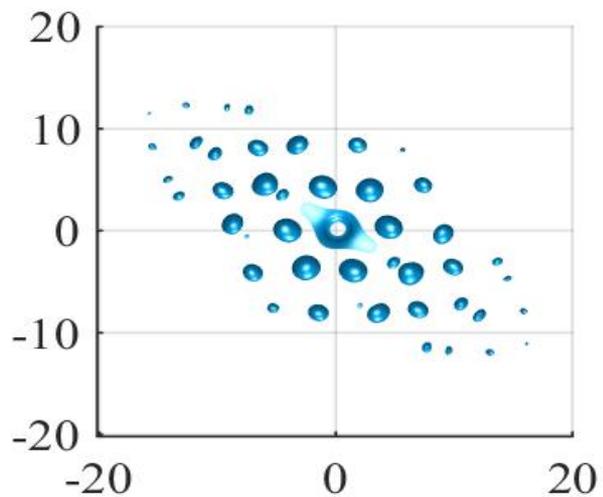
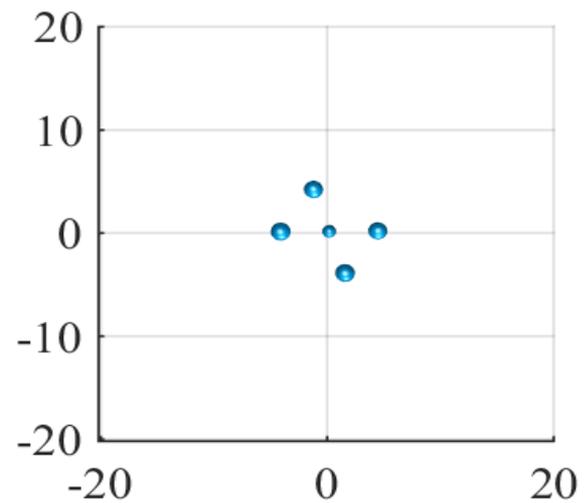
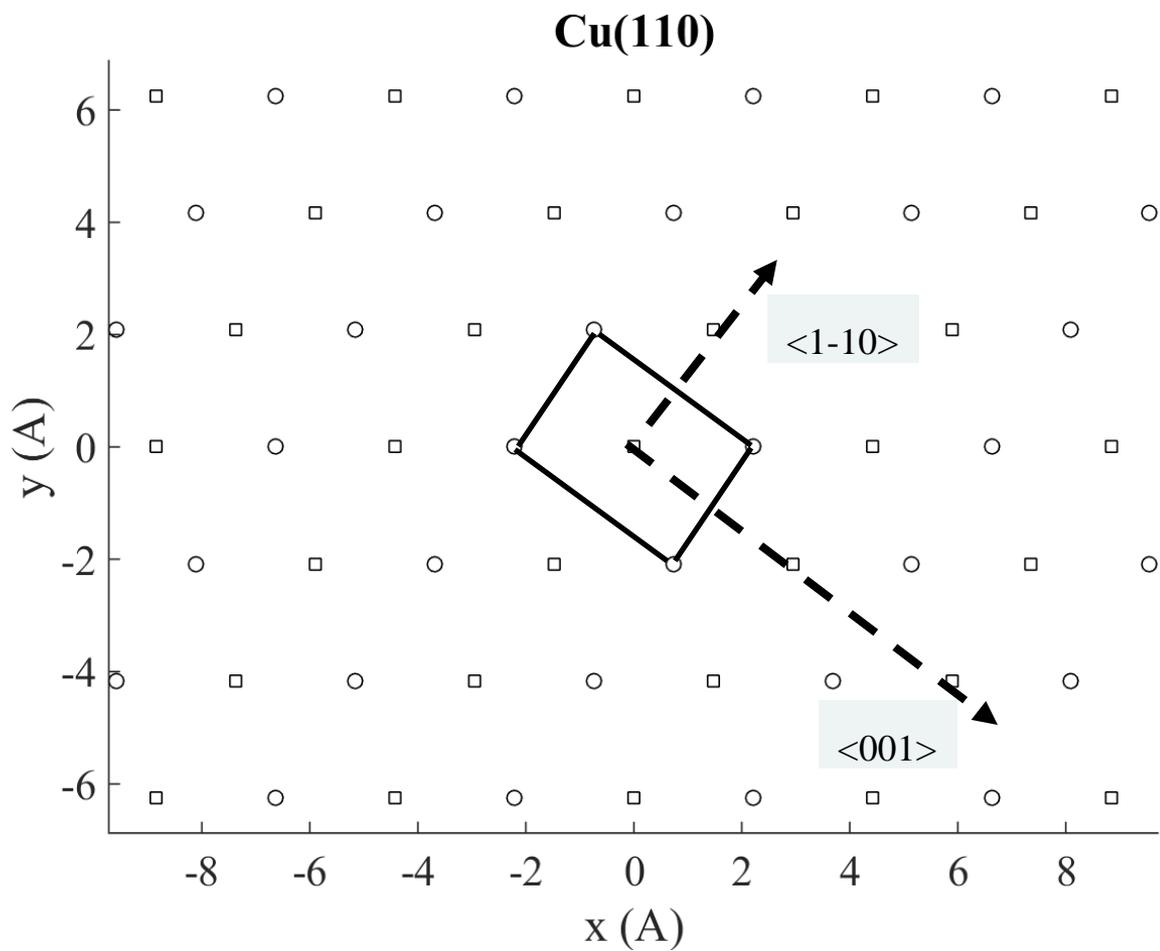




Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- **Трехмерные эффекты зарядового обмена**
 - **Анизотропия и азимутальная зависимость**
- Моделирование экспериментальных данных
- Заключение





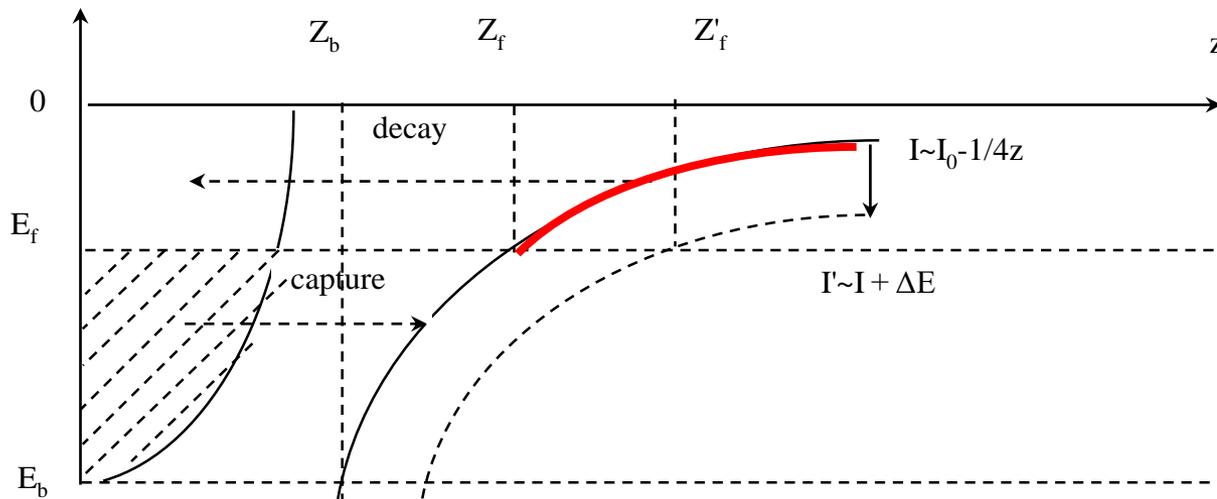


Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- **Моделирование экспериментальных данных**
 - **Физическая модель вероятности электронного перехода**
- Заключение



Расчет зарядового обмена

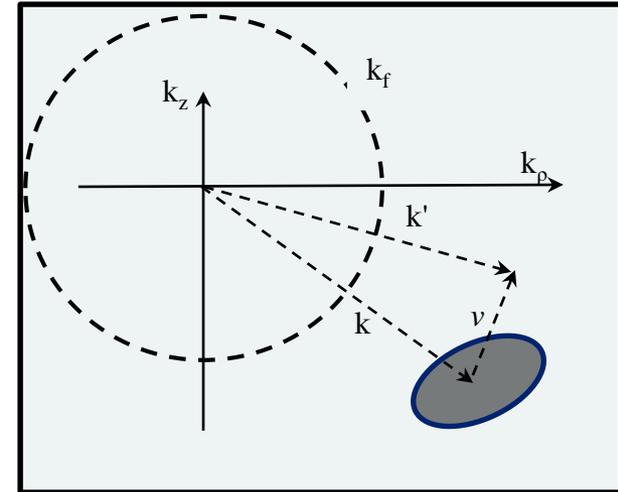
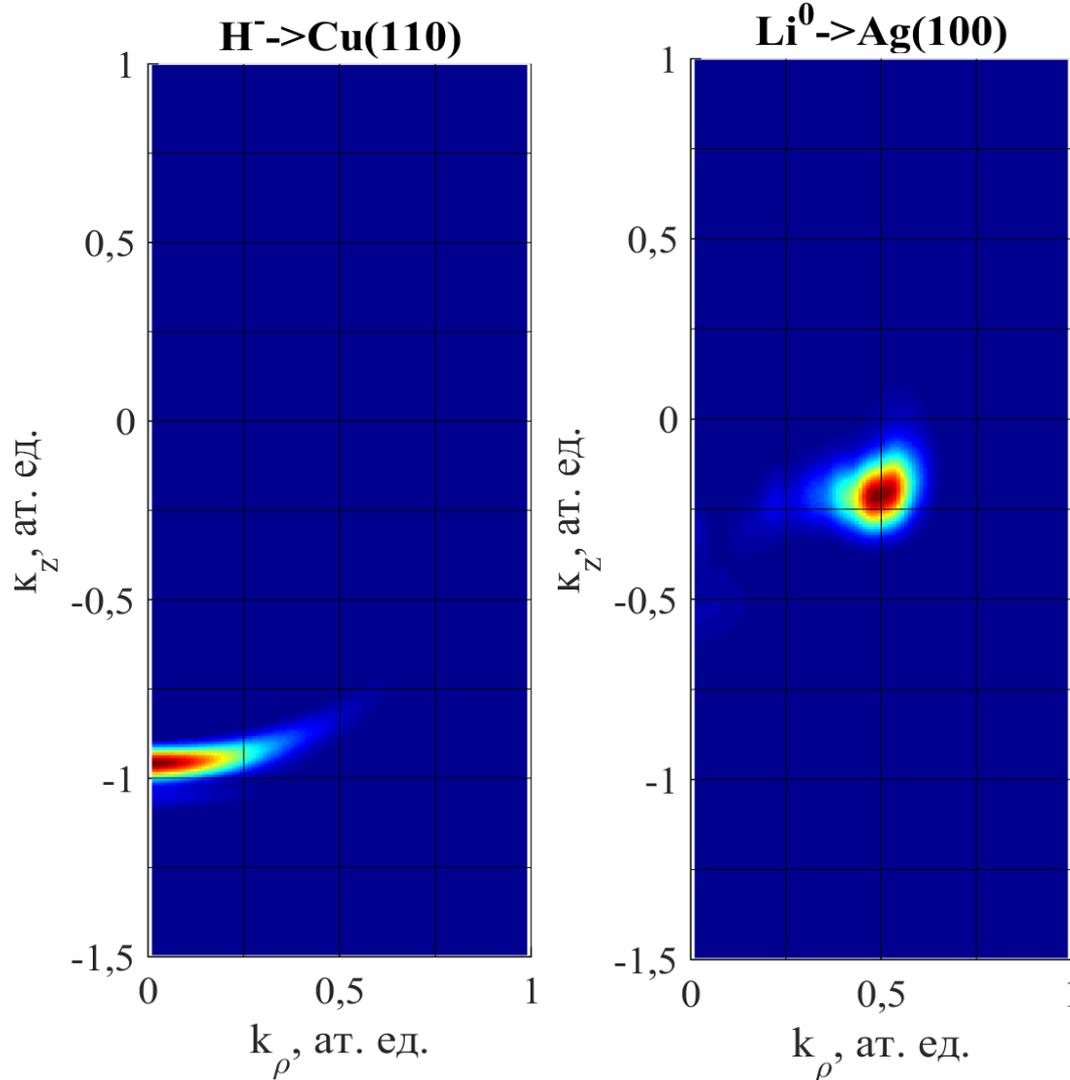


$$P_{\text{final}} = P(Z_f) * P_{\text{loss}}(Z > Z_f)$$

- Направление туннелирования электрона определяется энергетическим положением иона
- Учитывается только отлет иона (эффект «потери памяти»)
- Классическая траектория (отличие менее 10%)
- Учет модуля скорости - Doppler-Fermi-Dirac distribution



Учет направления скорости иона



$$f(\vec{k}, t) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{z < 0} d\vec{r}^3 \cdot \psi(\vec{r}, t) \cdot \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$\Delta E(z_{ion-surface}) = |k'|^2/2 - |k|^2/2 = |v|^2/2 - \vec{v} \cdot \vec{k}$$

$$E_f = I(z_f) + \Delta E(z_f)$$

$$P^- = P^-(z_f) \cdot P_{loss}(z > z_f)$$



Скользящее рассеяние

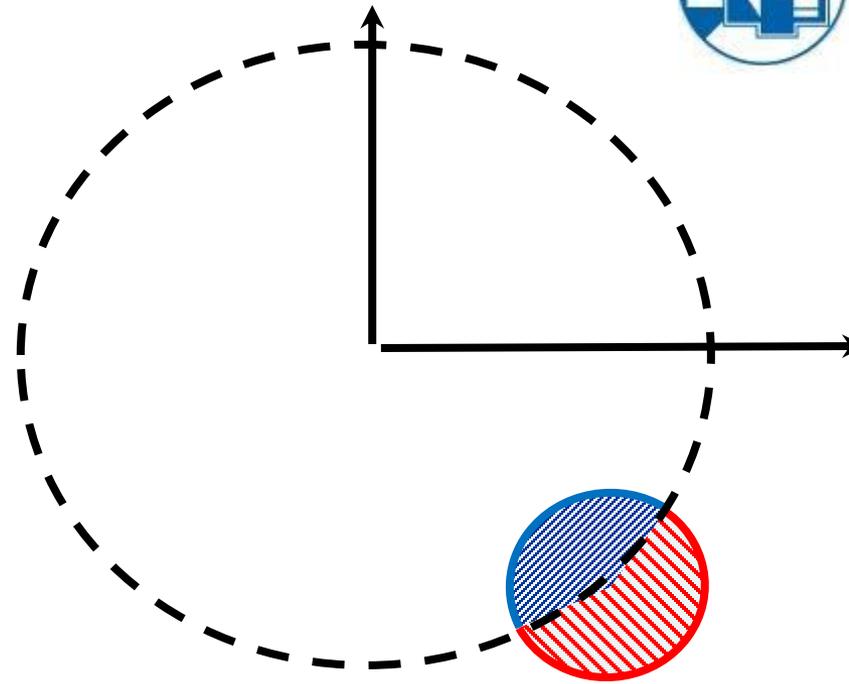
$$\frac{dP^-}{dt} = -\Gamma_{loss} \cdot P^- + \Gamma_{capture} \cdot (1 - P^-)$$

$$\Gamma_{loss}(z) = g_{loss} \cdot \Gamma(z) \cdot F_{loss}$$

$$\Gamma_{capture}(z) = g_{capture} \cdot \Gamma(z) \cdot F_{capture}$$

$$F_{loss} = \int_{|\vec{k}'| > k_f} d\vec{k}'^3 \cdot |f(\vec{k}')|^2$$

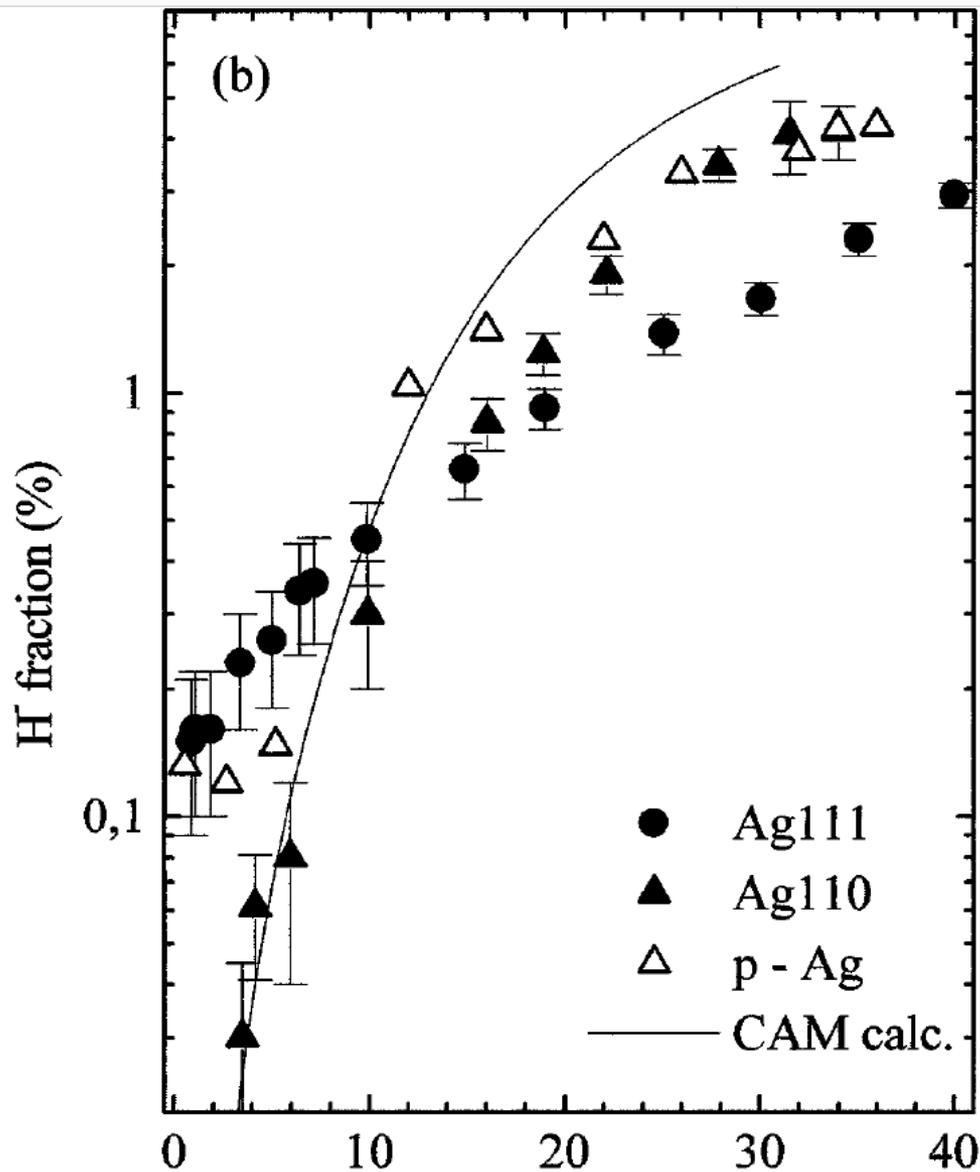
$$F_{capture} = \int_{|\vec{k}'| < k_f} d\vec{k}'^3 \cdot |f(\vec{k}')|^2$$



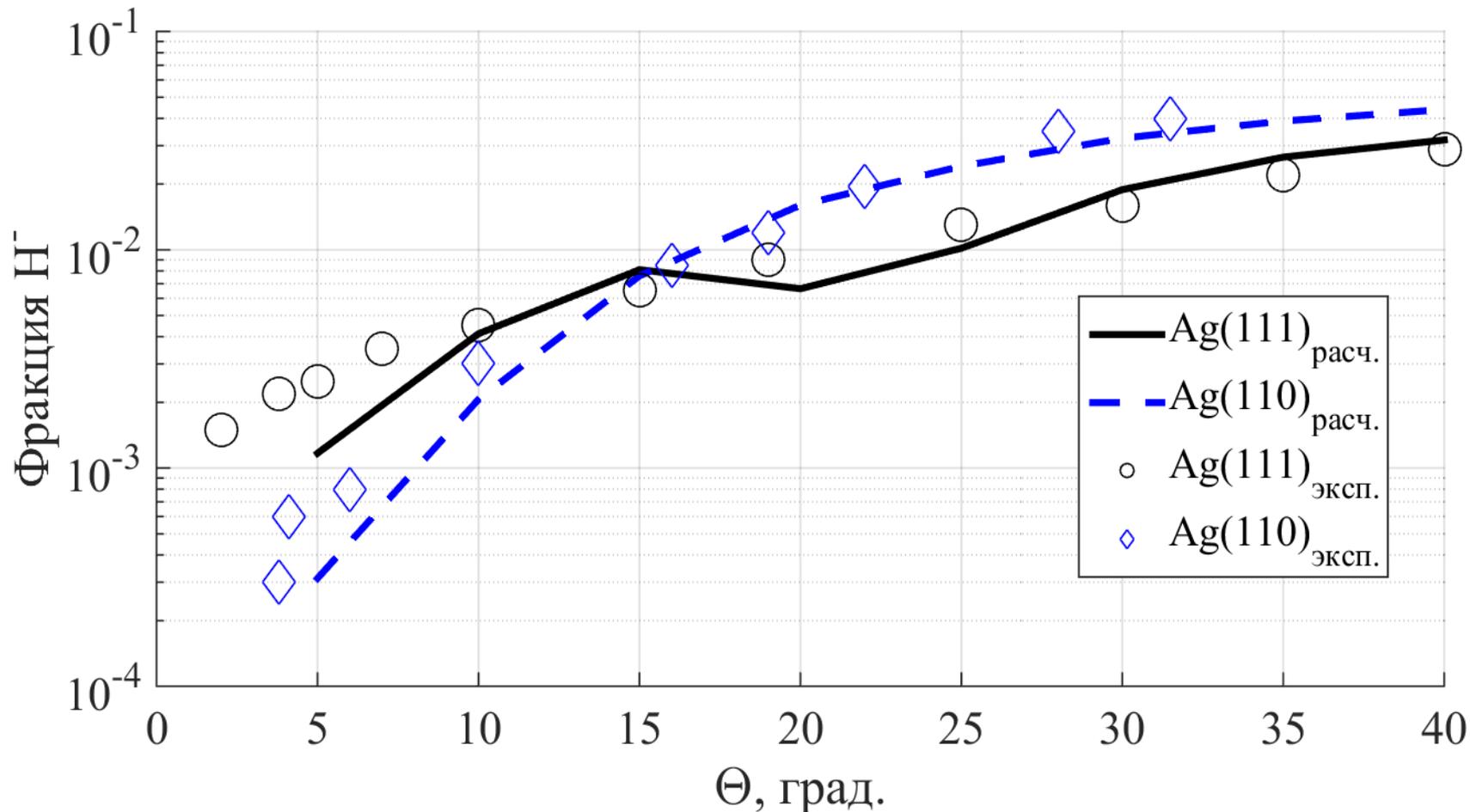


Содержание

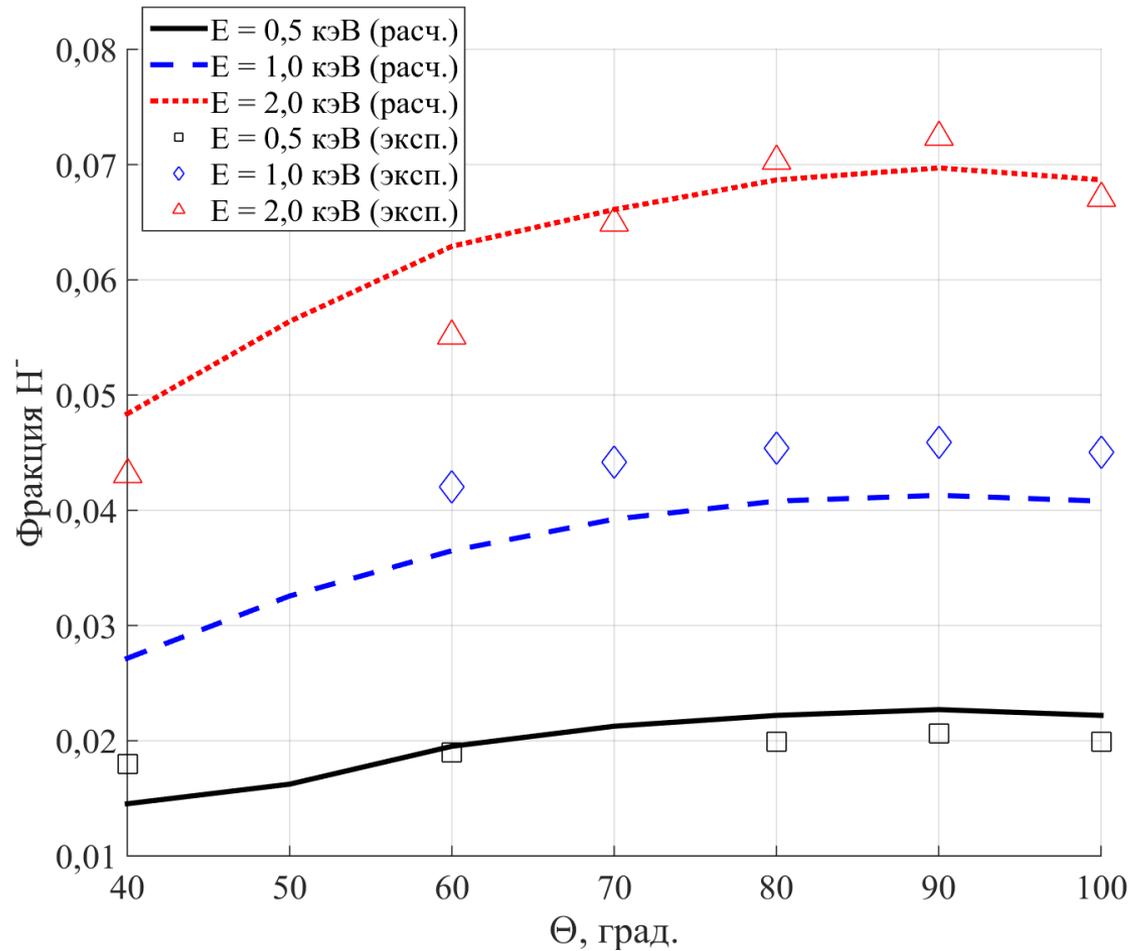
- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- **Моделирование экспериментальных данных**
 - **Зависимость от угла выхода**
- Заключение



1 keV H⁺ -> Ag(111)/Ag(110)



H^+ ($\Theta_{in} = 40^\circ$) \rightarrow Si поликристалл

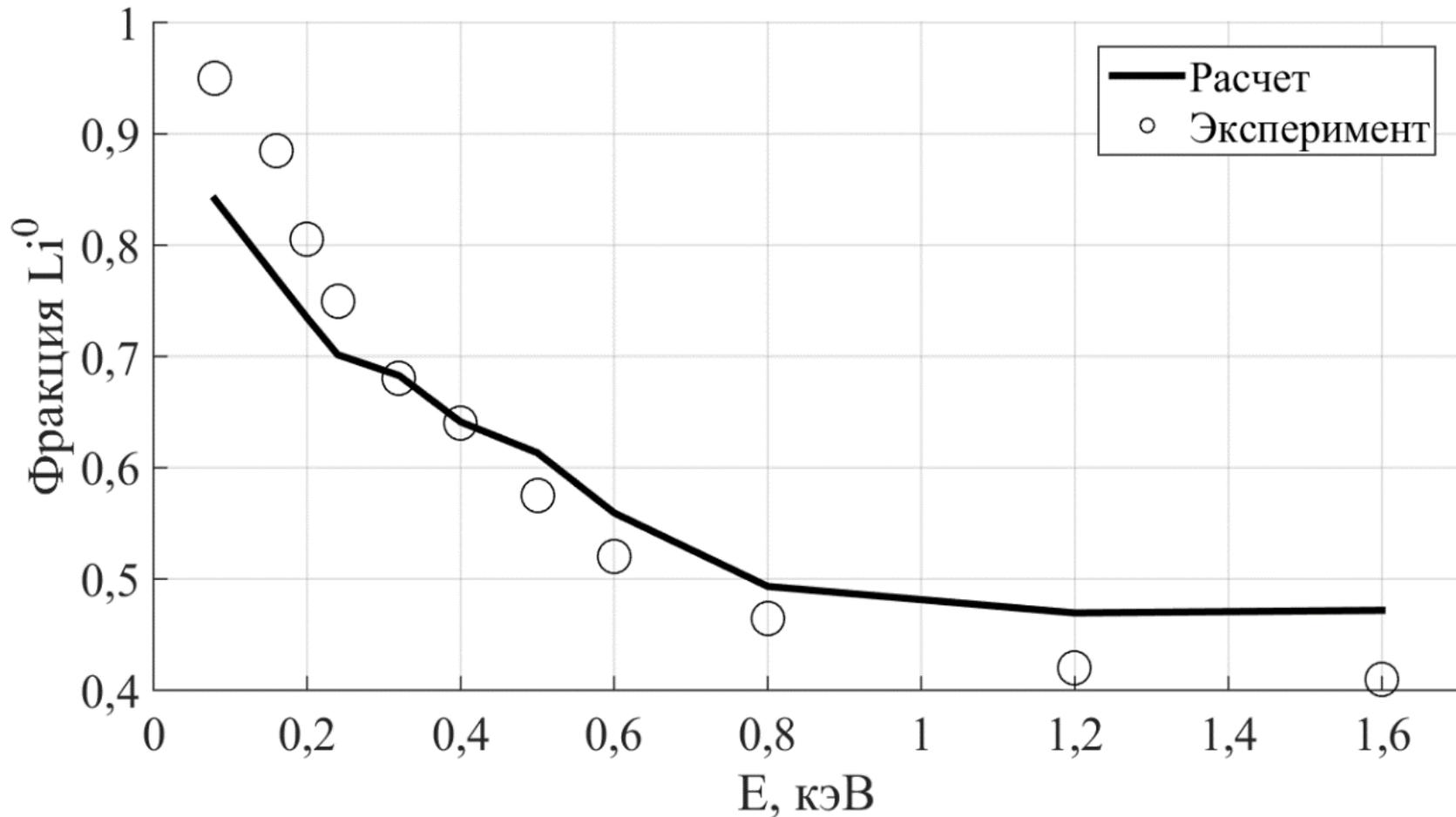




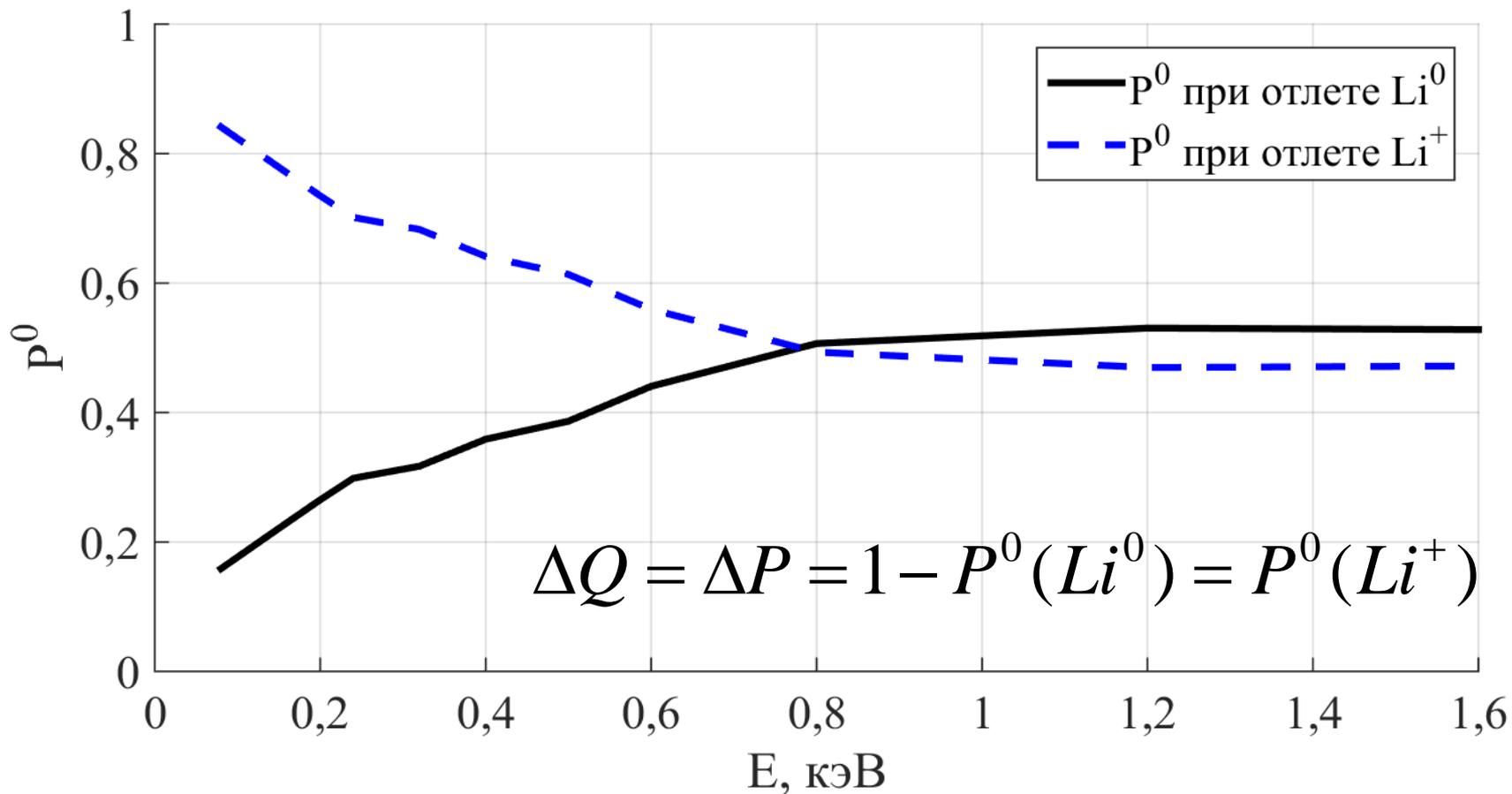
Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- **Моделирование экспериментальных данных**
 - **Зависимость от энергии иона**
- Заключение

$\text{Li}^+ \rightarrow \text{Ag}(100); \Theta_{\text{in}} = 45^\circ, \Theta_{\text{out}} = 90^\circ$



Комментарий к расчетам



Необъясненные эксперименты

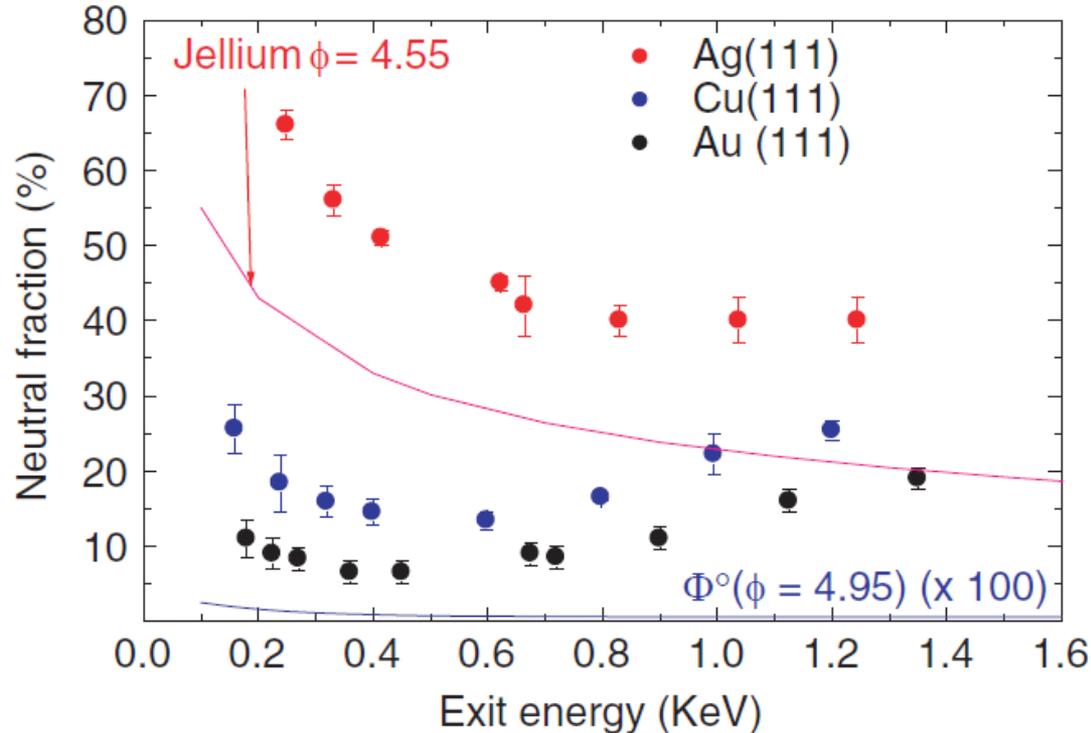
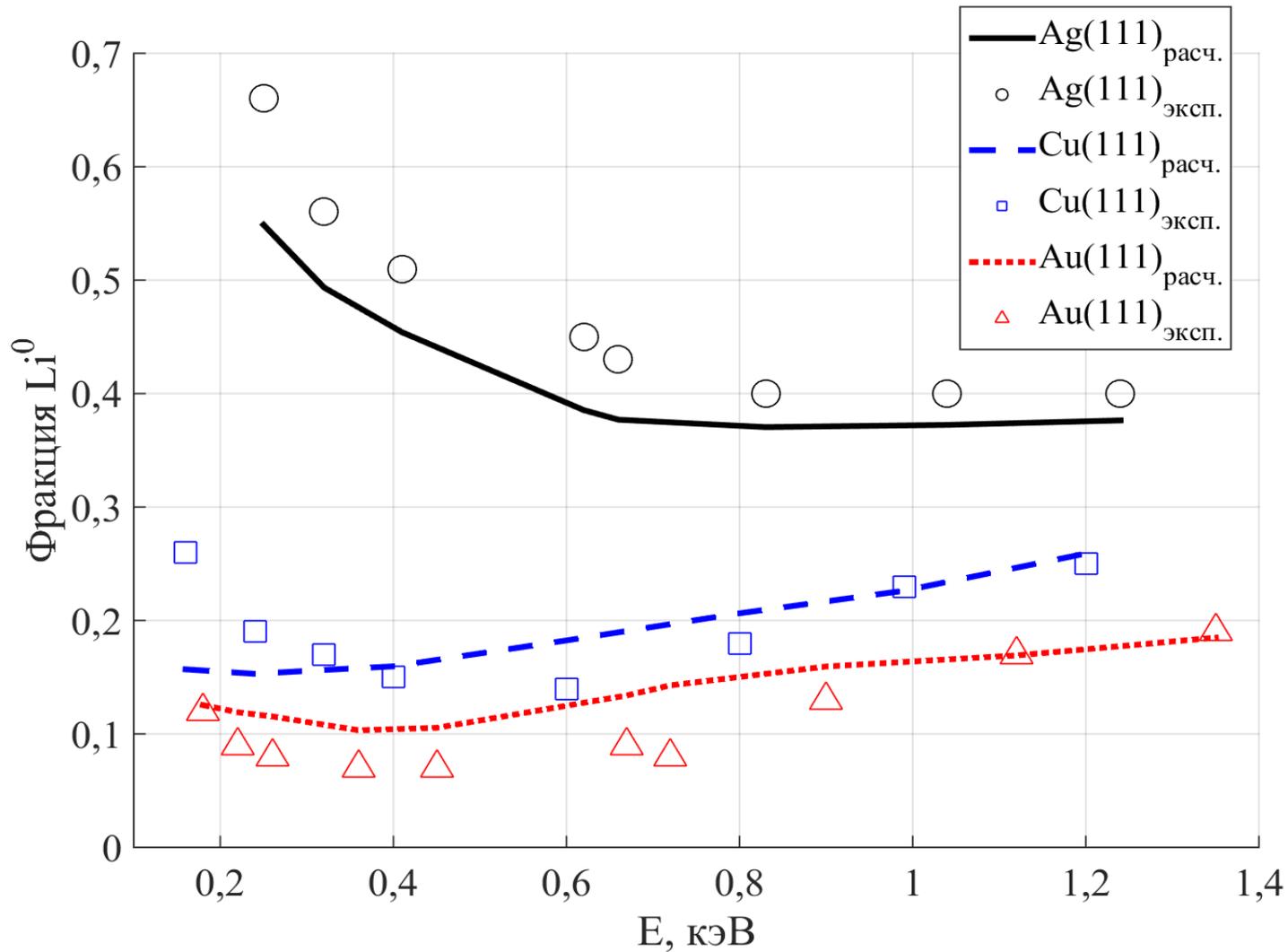


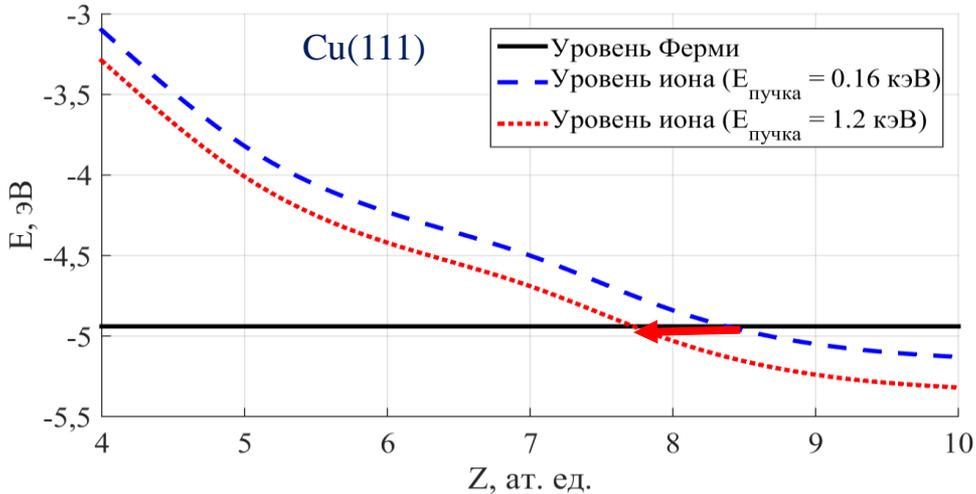
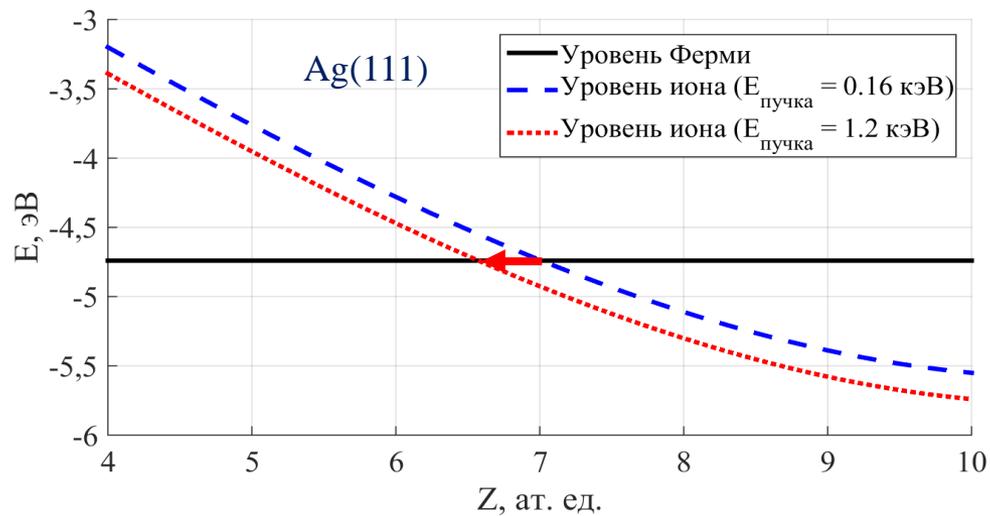
Figure 2. Li neutral fraction (Φ^0) obtained in scattering on Cu(111), Ag(111) and Au(111) surfaces as a function of exit energy. The lines correspond to a calculation within the jellium model (see text).

$\text{Li}^+ \rightarrow \text{Ag}(111)/\text{Cu}(111)/\text{Au}(111); \Theta_{\text{in}} = 45^\circ, \Theta_{\text{out}} = 90^\circ$

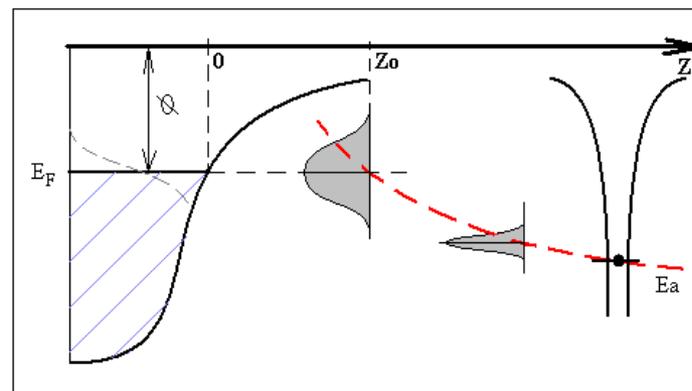




Немонотонность $P(E)$



$$\Delta E(v) \sim 0.05 - 0.2 \text{ эВ}$$



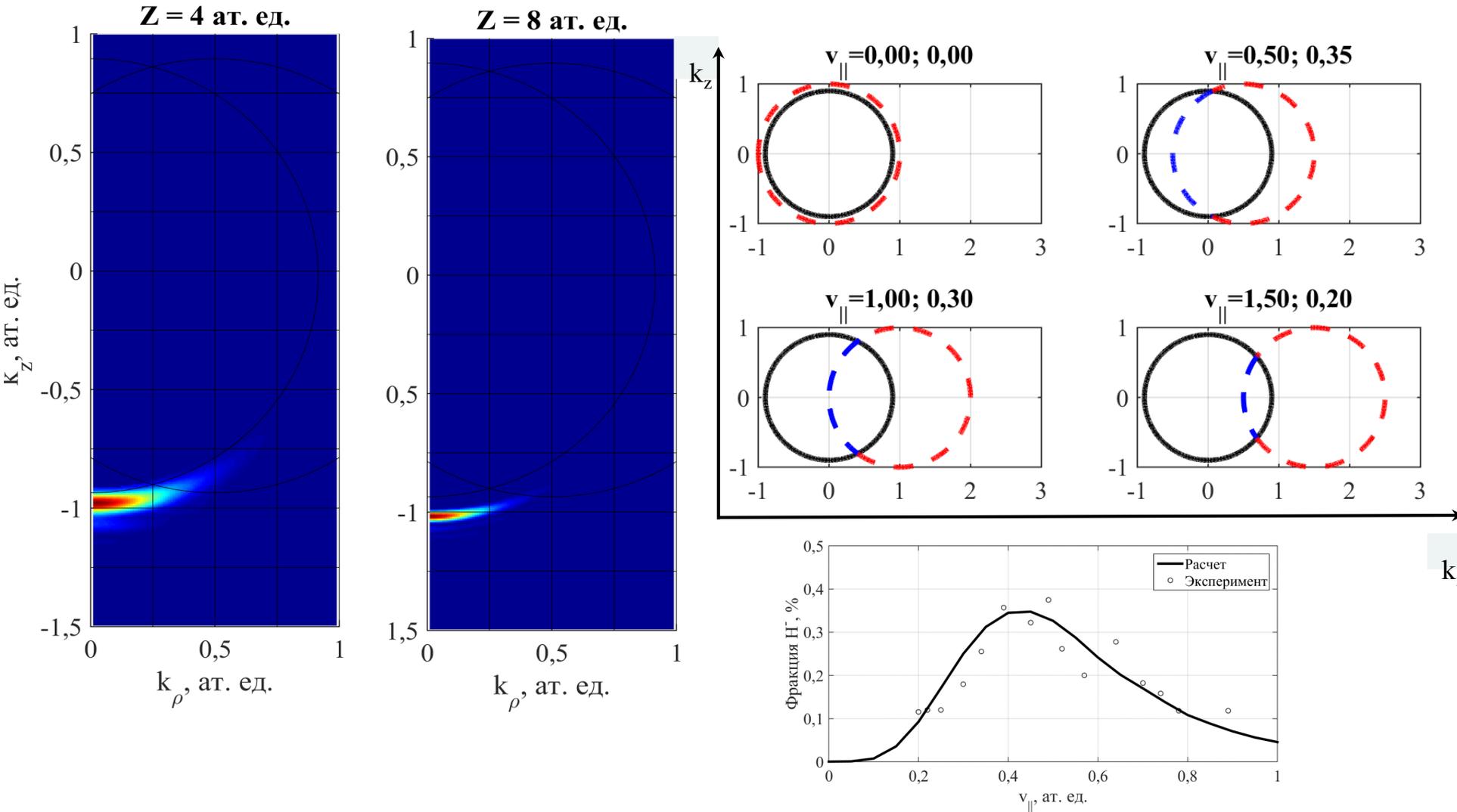
Пов-ть	E_f , эВ	Z_f , ат. ед.
Ag(111)	-4,74	6,5 – 7,0
Cu(111)	-4,94	7,7 – 8,4
Au(111)	-5,31	7,8 – 9,1



Содержание

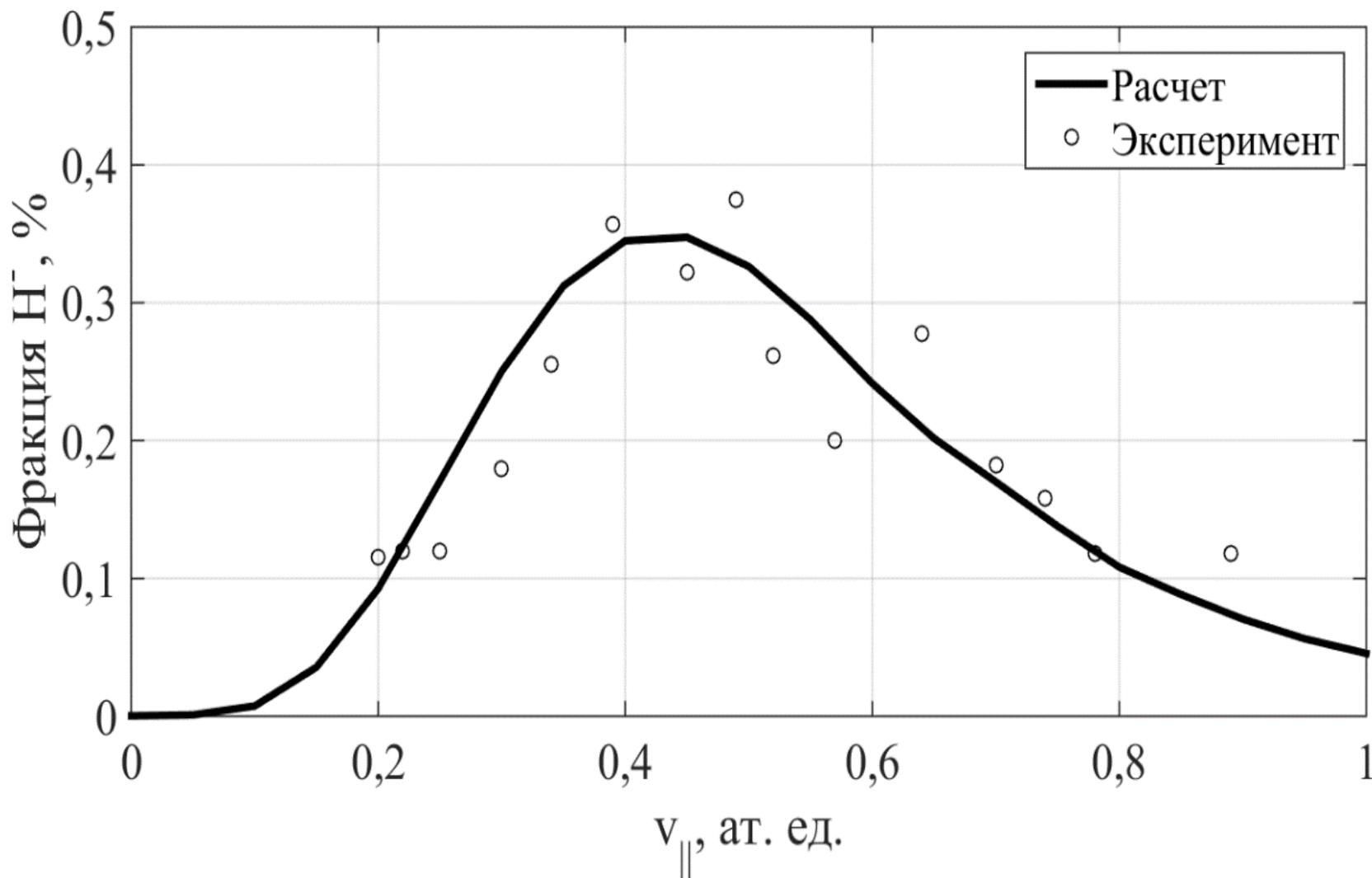
- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- **Моделирование экспериментальных данных**
 - Скользящее рассеяние и азимутальная зависимость
- Заключение

Модель пересекающихся сфер Ферми

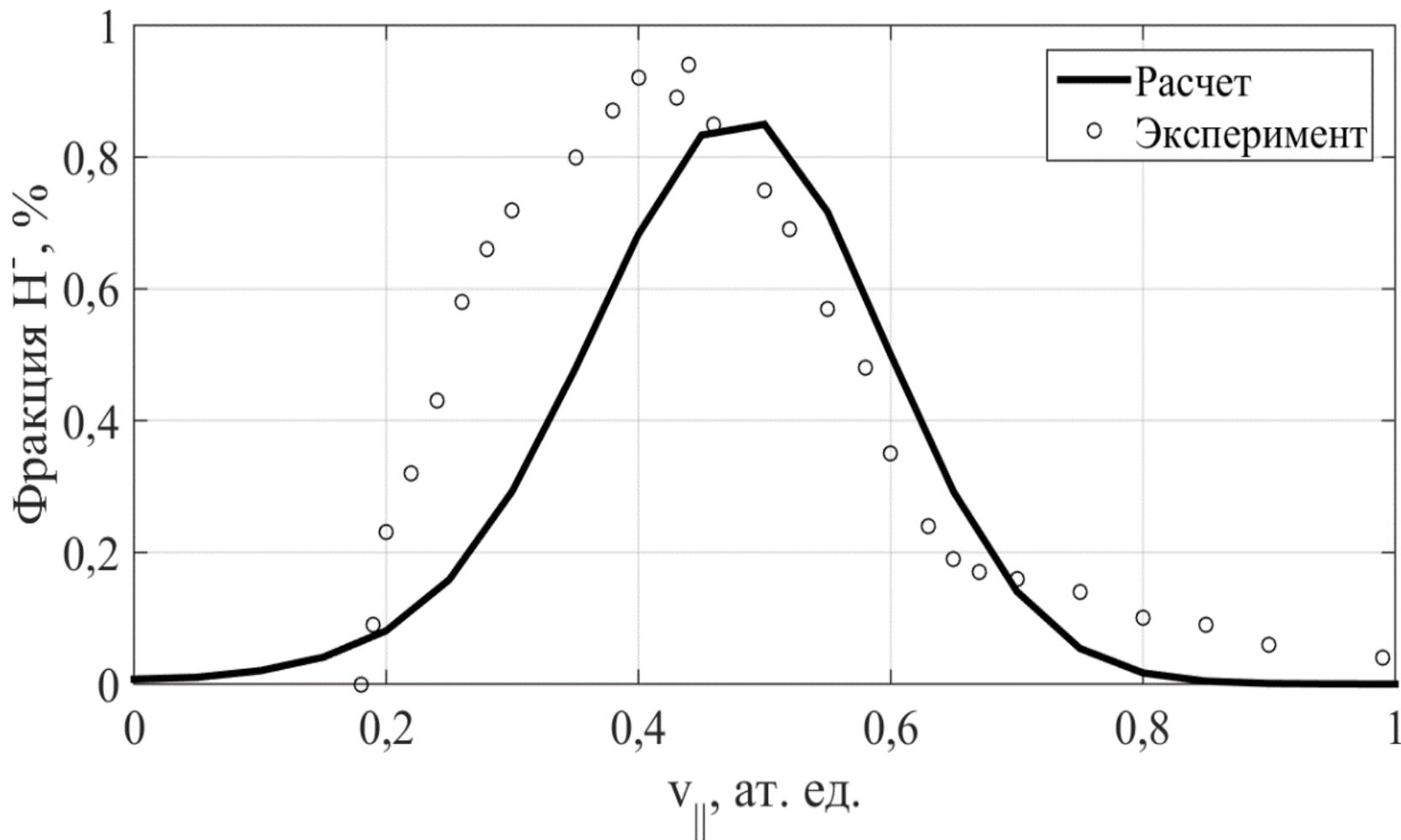




$H^+ \rightarrow Al(111); v_{norm} = 0,02$ ат. ед.



$\text{H}^+ \rightarrow \text{Cu}(111); v_{\text{norm}} = 0,02 \text{ ат. ед.}$



Азимутальная зависимость для Cu(110)

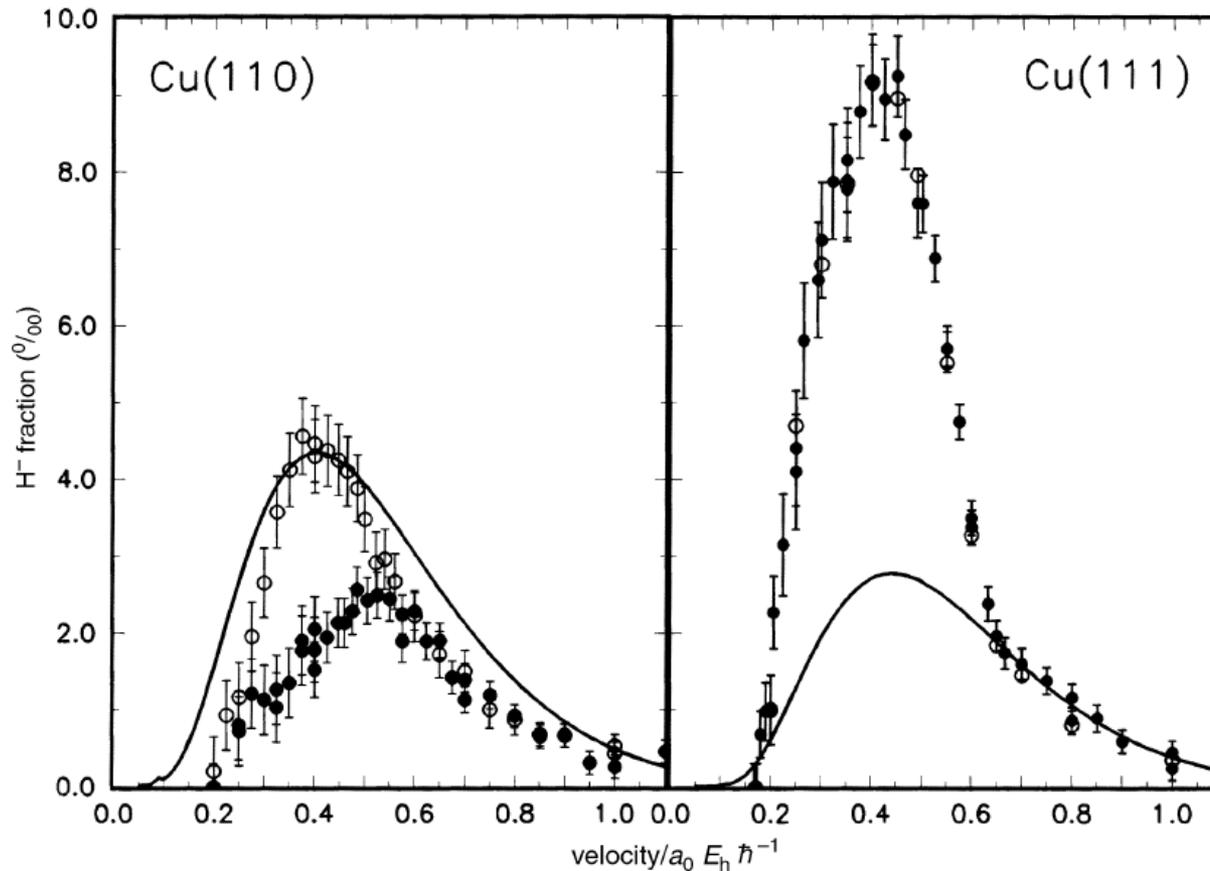
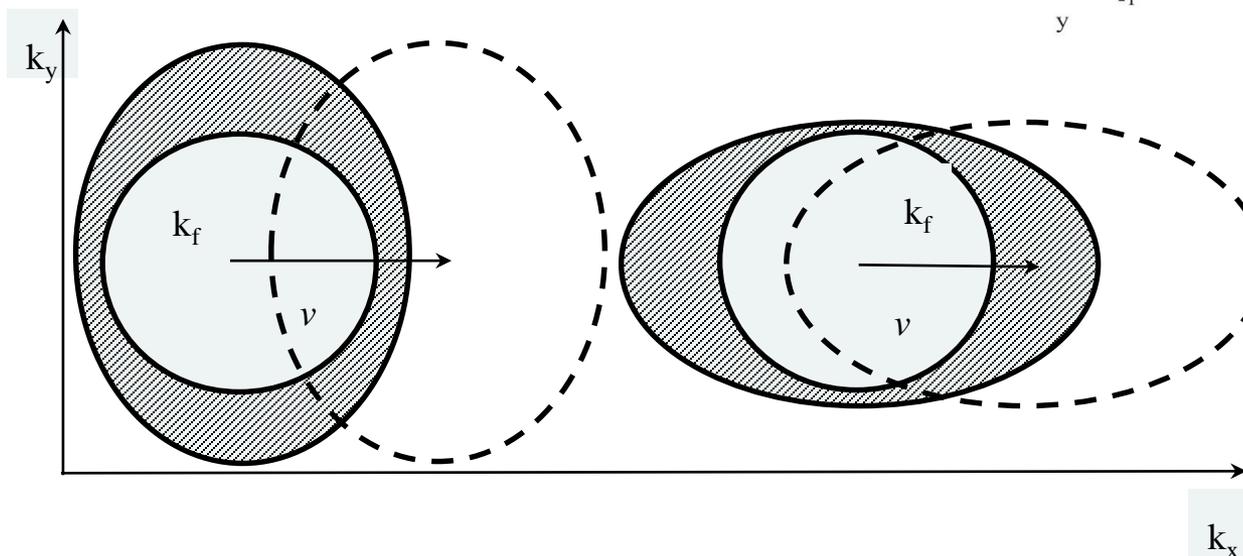
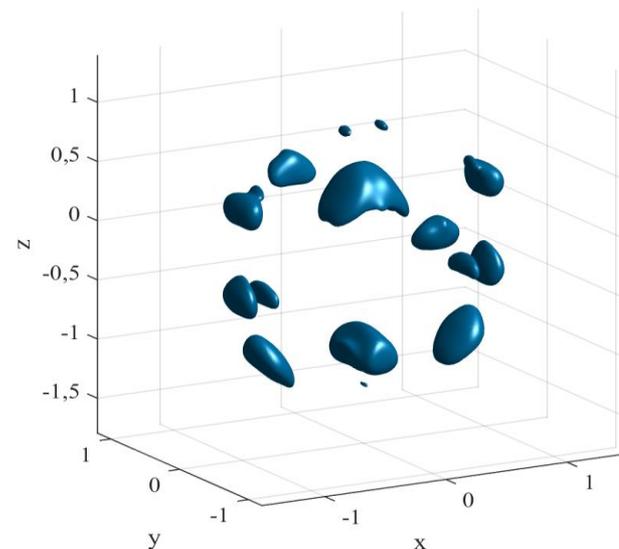


Fig. 5 Left panel: H^- fraction as function of parallel velocity for scattering from Cu(110) surface with a normal velocity component of $0.02 a_0 E_h \hbar^{-1}$. Calculations within the jellium model, (●) and (○) experimental data for azimuthal settings close to $\langle 001 \rangle$ and $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ directions, respectively. Right panel: Same as left panel, but for Cu(111) surface. (—) Calculations within the jellium model, (●) and (○) experimental data for azimuthal settings close to $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ and $\langle 121 \rangle$ directions, respectively.

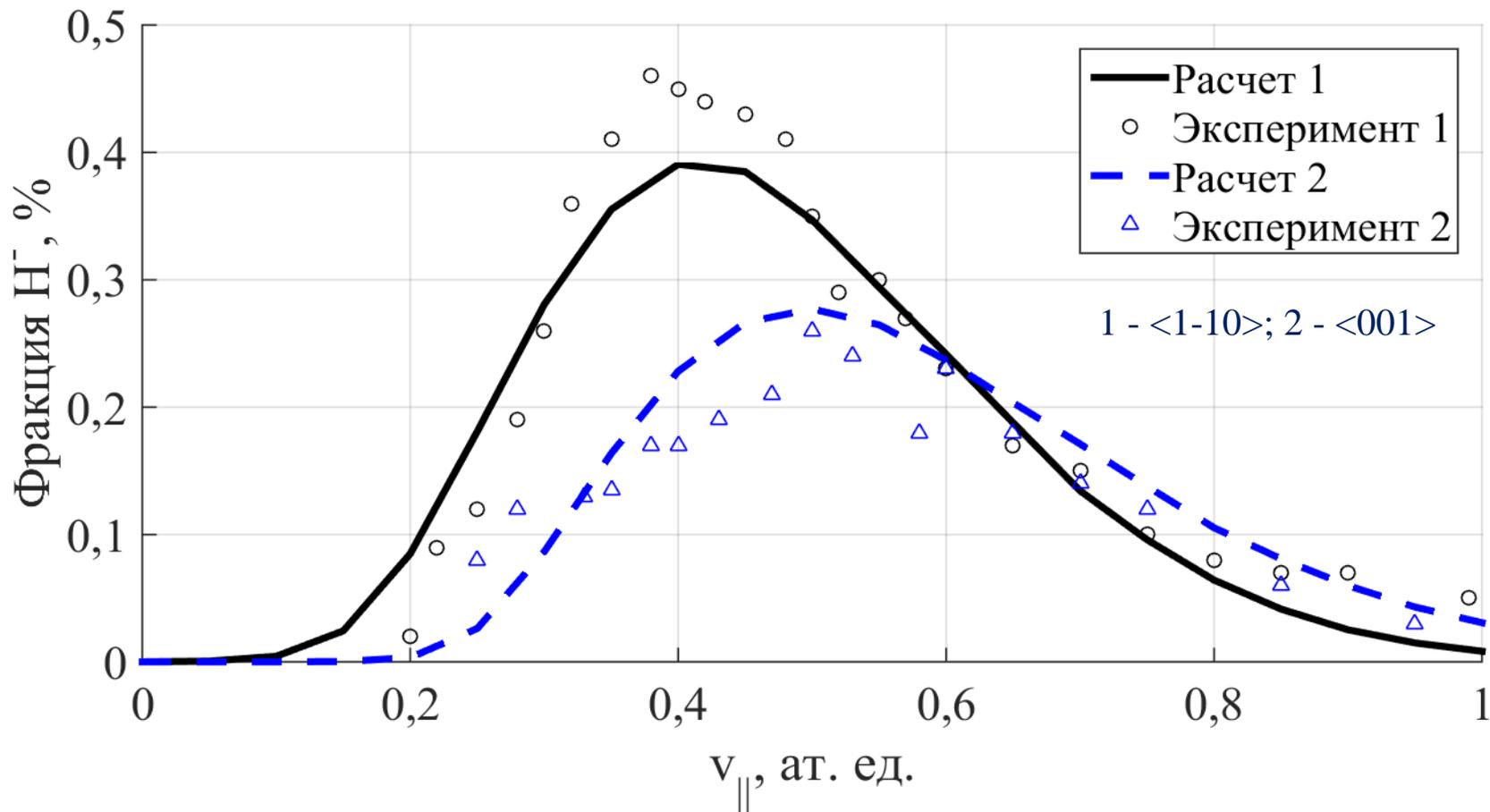


Учитывая анизотропию распространения электрона, получаем модель сдвига эллипсоида Ферми





$H^+ \rightarrow Cu(110); v_{norm} = 0,02$ ат. ед.





Содержание

- Состояние проблемы
- Методы и подходы
- Трехмерные эффекты зарядового обмена
- Моделирование экспериментальных данных
- **Заключение**



Основные результаты

- Методология прямого трехмерного моделирования зарядового обмена
- 3D потенциалы для Cu(100), Cu(110), Cu(111)
 - Эффект торможения/задержки электрона
 - Анизотропия распространения электрона в Cu(110)
- Физическая модель расчета вероятности электронного перехода расчета зарядового обмена с учетом направления скорости иона
- Количественное совпадение с широким спектром экспериментов
 - Объяснение немонотонной зависимости перезарядки Li на поверхности Cu(111), Au(111) от энергии иона
 - Объяснение азимутальной зависимости перезарядки H на поверхности Cu(110)



Спасибо за внимание