

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

05

Журнал технической физики, т. 61, в. 12, 1991

© 1991

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВЛИЯНИЯ ОРИЕНТАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛА Mo
НА РАССЕЯНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ Cs⁺**

В. В. Евстифеев, И. В. Иванов

Введение

Проведенные ранее [1] экспериментальные исследования влияния ориентации кристалла молибдена на рассеяние низкоэнергетических ($E_0 < 200$ эВ) ионов Cs⁺ выявили зависимость энергии, сохраняемой рассеянными частицами, от выбора грани и направления в монокристалле. В данной работе приводятся результаты компьютерного моделирования рассеяния ионов Cs⁺ поверхностными гранями (001) и (110) Mo методом молекулярной динамики с учетом дополнительного отталкивания, введенного в [2, 3].

Описание модели

На рис. 1 представлены модели мишеней, использованные в расчетах для различных граней и направлений монокристалла ОЦК типа. Гамильтониан системы налетающий ион—кластер атомов твердого тела записывается в виде

$$H = H_0 + V_{\text{доп}}, \quad (1)$$

где H_0 — стандартный гамильтониан, используемый в расчетах методом молекулярной динамики и включающий в себя кинетические энергии бомбардирующего иона и атомов мишени и парные ион-атомные потенциалы взаимодействия.

Данные расчеты проводились с потенциалом Зиглера—Бирсака—Литмарка (ZBL) [4]. $V_{\text{доп}}$ — дополнительное взаимодействие, уточняющее расчеты методом молекулярной динамики. В данных расчетах использовались 2 модели дополнительного взаимодействия: I — дополнительное отталкивание от поверхности [2, 5], связанное с обменным и спин-поляризационным взаимодействием налетающего иона и кластера атомов мишени; II — связь атомов твердого тела [3].

Однако предварительные расчеты выявили преимущества I модели, требующей меньших затрат машинного времени и лучше согласующейся с экспериментом. Поэтому $V_{\text{доп}}$ выбиралось также, как и в [2]:

$$V_{\text{доп}} = V(z) = \frac{A}{z^2 + B}, \quad (2)$$

где Z — нормальная к поверхности координата, A — подгоночный параметр. B введено для исключения особенности при $z=0$.

Результаты и обсуждение

Моделирование рассеяния ионов Cs^+ поверхностями (001) и (110) монокристалла Мо для условий, соответствующих экспериментальным [1] (угол падения $\varphi = 55^\circ$, угол рассеяния $\psi = 70^\circ$), выявило качественно различный характер рассеяния в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Энергетические спектры ионов, рассеянных в кристаллографическом направлении $\langle 110 \rangle$, состоят из двух пиков, соответствующих квазиднократному и квазидвукратному рассеянию. Под квазиднократным подразумевается такой акт взаимодействия, при котором

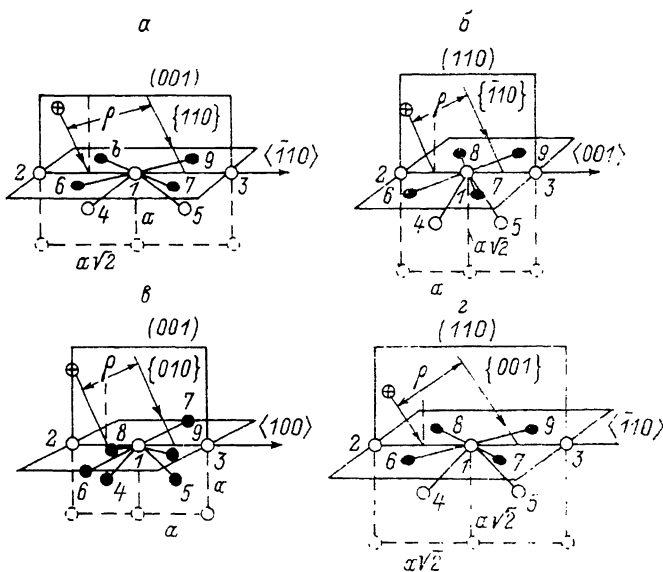


Рис. 1. Схемы расположения атомов в кластере решетки ОЦК типа, используемые в расчетах.

a — грань (001), плоскость падения {110}, кристаллографическое направление $\langle 110 \rangle$; $б$ — (110), $\langle 110 \rangle$, $\langle 001 \rangle$; $в$ — (001), $\langle 010 \rangle$, $\langle 100 \rangle$; $г$ — (110), $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$.

энергия отдачи передается в основном одному атому мишени. Взаимодействие же с остальными атомами позволяет иону рассеяться на угол $\psi > \psi_{\text{пред}} = \arcsin M/m$ (M — масса атома мишени, m — масса иона). Аналогично в случае квазидвукратного рассеяния энергия отдачи распределяется в основном между двумя атомами цепочки $\langle 110 \rangle$.

**Экспериментальные (в максимуме энергетического распределения)
и рассчитанные значения энергии, сохраняемой рассеянным ионом,
и энергии отдачи атомов мишени**

Грань, направление	Эксперимент	Расчет, эВ · Å ²	Энергия, сохраняемая ионом		Энергия отдачи атомов мишени, эВ					
			эВ	отн. ед.	1	2	3	4,5	6,8	7,9
(001), $\langle 100 \rangle$	0.39	$A=0$	26	0.33	12.5	39.5	0.03	0	0	0
		$A=5$	31.4	0.39	10.1	37.4	0.02	0.02	0.02	0.01
(001), $\langle 110 \rangle$	0.49	$A=0$	25	0.31	36	14.5	0	0.02	0.74	0.01
		$A=5$	15	0.19	60	0.14	0.4	0.06	0.24	0.35
		$A=5$	36.9	0.46	23.1	19.1	0	0.1	0.6	0.01
(110), $\langle 001 \rangle$	0.43	$A=0$	22.2	0.28	56.2	0.1	0.16	0.04	0.2	0.2
		$A=5$	30.4	0.38	38.5	10.6	0.3	0.01	0.5	0.11
		$A=5$	34.7	0.43	9.9	34.1	0.02	0	0.47	0.01
(110), $\langle 110 \rangle$	0.35	$A=0$	38.3	0.48	16.8	14.5	0	0	5.1	0.05
		$A=5$	26.8	0.33	48.6	0.1	0.1	0	1.2	0.9
		$A=5$	42.8	0.54	12.6	14.3	0	0	4.5	0.03
			28.8	0.36	45.6	0.13	0.04	0	1.4	0.5

В случае же рассеяния в направлении $\langle 100 \rangle$ энергия отдачи плавно перераспределяется между двумя атомами цепочки в зависимости от параметра удара, что приводит к исчезновению структуры спектра (квазиоднократный и квазидвукратный пики не разрешены, спектр имеет колоколообразный характер). Это отражено в таблице, где приводятся рассчитанные значения энергии рассеянных ионов и энергии отдачи атомов мишени для двух значений параметра A . Из таблицы также видно, что рассеяние при энергии налетающих частиц $E_0 = 80$ эВ происходит исключительно на поверхностных атомах. Нетрудно видеть, что выбранные расчетные модели достаточно точно описывают процесс рассеяния, так как энергия отдачи, получаемая другими атомами мишени, помимо атомов цепочек $\langle 110 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$ пренебрежимо мала, поэтому увеличение числа атомов в кластере существенно не изменит характера рассеяния.

Различный характер рассеяния в направлениях $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ связан, очевидно, с уменьшением межатомного расстояния (от $a\sqrt{2}$ до a , где a — по-

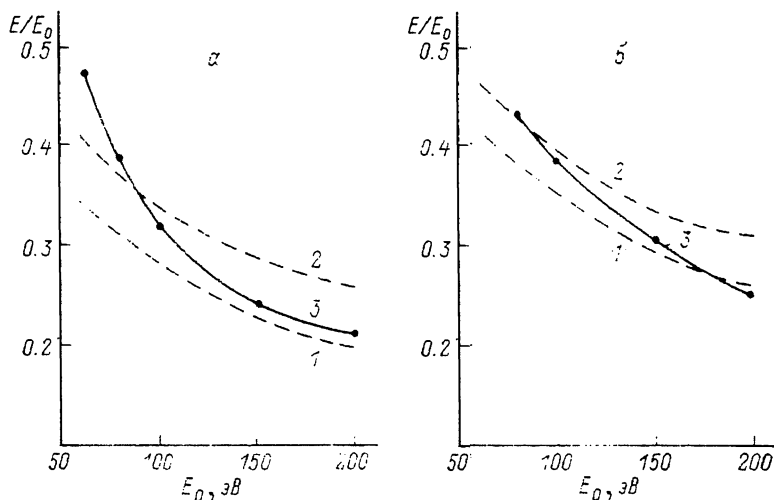


Рис. 2. Зависимость относительной энергии ионов Cs^+ , рассеянных под углом 70° гранями (001) (а) и (110) (б) в направлении $\langle 001 \rangle$, от энергии бомбардирующих ионов.

1 — расчет ($A=0$), 2 — расчет ($A=5 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2$), 3 — эксперимент [1].

стоянная решетки). Это приводит к тому, что влияние соседей настолько велико, что рассеяние в направлении $\langle 100 \rangle$ происходит от кластера как единого целого. Тем не менее экспериментальные спектры имеют колоколообразный вид при $E_0 < 100$ эВ для любых направлений. Это может быть связано с тепловыми колебаниями атомов решетки и со столкновениями с выходом из плоскости падения.

Известно [6], что эти факторы приводят к уширению спектров, особенно в низкоэнергетической области. Помимо этого, как нами уже отмечалось ранее [2], главная причина исчезновения структуры спектров и увеличения доли энергии, сохраняемой рассеянными частицами, — это более плавный характер убывания (дальнодействие) реального ион-атомного потенциала на больших расстояниях ($r > 1.5 \text{ Å}$) по сравнению с потенциалами типа Борна—Майера, ZBL. Тем не менее расчеты по данной модели находятся в достаточно хорошем согласии с экспериментом.

Моделирование рассеяния в направлении $\langle 100 \rangle$ приводит к появлению одного пика в энергетическом спектре, поэтому в этом случае возможно прямое сравнение с экспериментальными зависимостями относительной энергии, сохраняемой рассеянными частицами от начальной энергии E_0 (рис. 2). Видно, что при любых значениях параметра A в феноменологическом потенциале (2) рассеяние на грани (110) дает большие значения сохраняемой энергии по сравнению с рассеянием на (001). Это согласуется с экспериментом и указывает на то, что подобные ориентационные эффекты в области низкой энергии связаны

с многочастичными взаимодействиями. Введение дополнительного отталкивания сдвигает расчетные кривые в область более высоких относительных энергий и улучшает согласованность с экспериментом. Более крутой ход экспериментальной зависимости E/E_0 от E_0 по сравнению с рассчитанной требует изучения функциональной зависимости потенциала дополнительного отталкивания и уточнения потенциала ион-атомного взаимодействия.

Список литературы

- [1] Базарбаев И. Н., Евстифеев В. В., Крылоз Н. М., Кудряшова Л. Б. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. Вып. 7. С. 88—91.
- [2] Evstifeev V. V., Ivanov I. V. // Surf. Sci. 1989. Vol. 219. P. L373—L376.
- [3] Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark V. // The Stopping and Range of Ions in Solids. New York: Pergamon Press, 1985. P. 321.
- [4] Hoek P. J., Tenner A. D., Kleyn A. W. // Phys. Rev. 1986. Vol. B34. P. 5030—5042.
- [5] Евстифеев В. В., Иванов И. В. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1244—1246.
- [6] Парилис Э. С., Тураев Н. Ю., Умаров Ф. Ф., Нижняя С. Л. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. Ташкент, 1987. 210 с.

Научно-исследовательский институт
прикладной физики Ташкентского
университета им. В. И. Ленина

Поступило в Редакцию
13 марта 1991 г.

01; 02
© 1991 г.

Журнал технической физики, т. 61, в. 12, 1991

УЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА ПРИ РАССЕЯНИИ БЕЗ ДИССОЦИАЦИИ НА МАЛЫЕ УГЛЫ

В. Н. Кирикашвили, О. Б. Фирсов

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию процессов, происходящих при бомбардировке твердого тела быстрыми заряженными частицами. Выводы, сделанные при изучении этих процессов, используются для анализа состава и структуры вещества.

В эксперименте [1, 2] обнаружено, что при взаимодействии молекулярных ионов с твердым телом часть молекулярных ионов рассеивается без диссоциации, причем на такие углы, при которых произведение угла рассеяния на энергию иона более чем на два порядка превышает энергию диссоциации (порядка эВ) этого иона.

В [3, 4] проведен теоретический расчет процесса рассеяния ионов без диссоциации. В этих работах учитывается, что вся приобретенная энергия относительного движения атомов иона переходит во вращения.

В работе [3] получена формула вероятности распада молекулярного иона при двукратном рассеянии. Оказалось, что при определенном угле рассеяния вероятность стремится к «бесконечности», т. е. $P=1$, а это в эксперименте не наблюдается. В этой работе этот эффект объясняется, во-первых, тем, что в разложении $\Delta\theta=\theta_1-\theta_2$ (θ_1 и θ_2 — углы рассеяния первого и второго атомов иона) не учитываются члены высшего порядка, и, во-вторых, тем, что при регистрации ионов существует угловая ширина $\pm 1.5^\circ$.

В работе [4] в разложении $\Delta\theta$ учтены члены второго и третьего порядков и получена формула вероятности распада ионов, в котором присутствуют как квадратичный, так и кубический члены. Вероятность, вычисленная по этой формуле, не обращается в «бесконечность», но по соображениям симметрии в этой формуле должен отсутствовать квадратичный член.