

01;02

©1993 г.

О ВЛИЯНИИ ВИДА ПОТЕНЦИАЛА НА ЭНЕРГИЮ РАССЕЯННЫХ ИОНОВ

В.В.Евстифеев, И.В.Иванов, Н.М.Крылов, Л.Б.Кудряшова, А.С.Мосунов

Проведены компьютерное моделирование рассеяния ионов K^+ низкой энергии моно- и поликристаллом V методом молекулярной динамики с использованием различных потенциалов и экспериментальные исследования энергетических спектров ионов K^+ , рассеянных поликристаллом V. Установлено влияние вида потенциала на энергетические характеристики рассеянных ионов и траекторию их движения.

С целью выяснения влияния вида потенциала на величину энергии, сохраняемой рассеянными ионами при бомбардировке металлической поверхности, проведено компьютерное моделирование отражения ионов K^+ от моно- и поликристалла ванадия методом молекулярной динамики с использованием потенциалов Борна-Майера (BM) [1], Зиглера-Бирсака-Литтмарка (ZBL) [2] и восстановленного из ab initio МОЛ КАО — вычислений (SL) [3] (метод молекулярных орбиталей, построенных в виде линейной комбинации атомных орбиталей [4]). Результаты моделирования сравнивали с экспериментальными данными, полученными при изучении рассеяния ионов K^+ поликристаллической ванадиевой мишенью.

Методы расчета

Расчеты проводились методом молекулярной динамики с использованием потенциалов BM, ZBL и SL по программе, описанной ранее в работе [5]. В качестве мишени ОЦК типа был выбран кластер, состоящий из 9 атомов. Углы падения и рассеяния соответствовали экспериментальным (55 и 70°). Прицельные параметры равномерно распределялись от $-(d/2)$ до $+d/2$ вдоль выбранного кристаллографического направления движения ионов (d — расстояние между атомами данного кристаллографического направления).

Моделирование отражения ионов K^+ от поликристалла V методом молекулярной динамики с учетом взаимодействия с блоком атомов проводили по программе, описанной в [6,7]. Потенциалом взаимодействия в расчете служил потенциал Борна-Майера [1]. Углы падения и рассеяния

были соответственно равны 45 и 70°. Рассеянные частицы анализировались по углу выхода из плоскости падения $\Delta\varphi = 2.5^\circ$ и по углу рассеяния $\Delta\psi = 2.5^\circ$.

Техника эксперимента

Экспериментальные исследования проводили на сверхвысоковакуумной установке с безмаслянной системой откачки, обладающей высоким угловым ($\Delta\psi \cong 1^\circ$) и энергетическим ($\Delta E/E \cong 1/120$) разрешением. Измерения дифференциальных энергетических распределений ионов K^+ , рассеянных нагретой до $T \cong 1200$ К мишенью из поликристаллического ванадия, проводили в режиме счета отдельных импульсов с использованием электростатического энергоанализатора типа сферический дефлектор. Контроль за массовым составом вторичных ионов осуществляли с помощью времяпролетной методики.

Результаты и обсуждение

На рис. 1 и 2 показаны рассчитанные по первой модели [5] с разными потенциалами траектории движения ионов K^+ , рассеянных в направлении $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, для начальной энергии $E_0 = 100$ эВ и угла падения $\varphi = 55^\circ$. Наблюдаемый на рисунке различный ход траекторий движения отраженных частиц обусловлен различным характером рассеяния при использовании соответствующего потенциала. Обращает на себя внимание тот факт, что в случае перехода от менее дальнегодействующего потенциала VM к более дальнегодействующим ZBL и SL наблюдается увеличение расстояния наибольшего сближения налетающих ионов с поверхностью. Так, для VM потенциала при рассеянии в направлении $\langle 110 \rangle$ имеют место проникновение ионов в глубь решетки (рис. 1,а) и отражение от второго слоя, тогда как для ZBL- и SL-потенциалов проникновение отсутствует при любых параметрах удара (рис. 1,б,в).

Моделирование рассеяния для более плотноупакованного направления 100 также выявило сильную зависимость результатов моделирования от потенциала. Хотя проникновения ионов нет для всех потенциалов, использованных в расчетах (рис. 2), характер рассеяния различен. В случае использования восстановленного потенциала отклонение ионов от первоначального направления происходит на больших расстояниях от кластера (рис. 2,в), чем при использовании потенциалов VM и ZBL (рис. 2,а,б). Это указывает на увеличение эффекта многочастичных взаимодействий для дальнегодействующего потенциала, т.е. на существенное влияние соседних атомов на траекторию иона. Как уже отмечалось ранее [8,9], такое влияние особенно сказывается на дифференциальных энергетических характеристиках, приводя к сдвигу энергетических распределений рассеянных ионов в область более высоких значений относительной энергии [10].

В таблице приведены рассчитанные значения относительной энергии рассеянных ионов K^+ в направлении $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ монокристалла ванадия для условия зеркального отражения ($\psi = 70^\circ$, $\varphi = 55^\circ$). В расчетах использованы дальнегодействующие потенциалы ZBL и SL. Результаты расчетов показывают, что энергетические спектры состоят из двух пиков, положения которых на энергетической шкале соответствуют высоким значениям энергии. В ряде случаев для $E_0 < 100$ эВ пики становятся

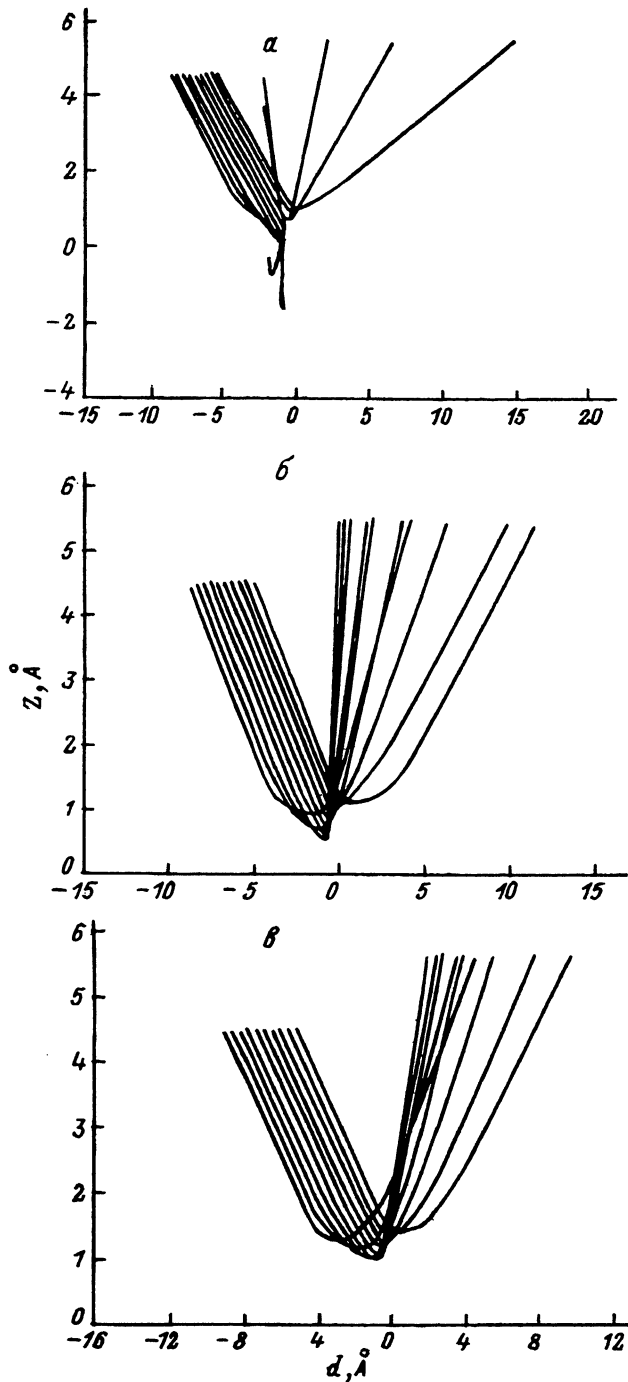


Рис. 1. Траектории движения рассеянных в направлении $\langle 110 \rangle$ ионов K^+ при бомбардировке $(110) V$, рассчитанные по модели [5] с использованием потенциалов BM (а), ZBL (б) и SL (в).

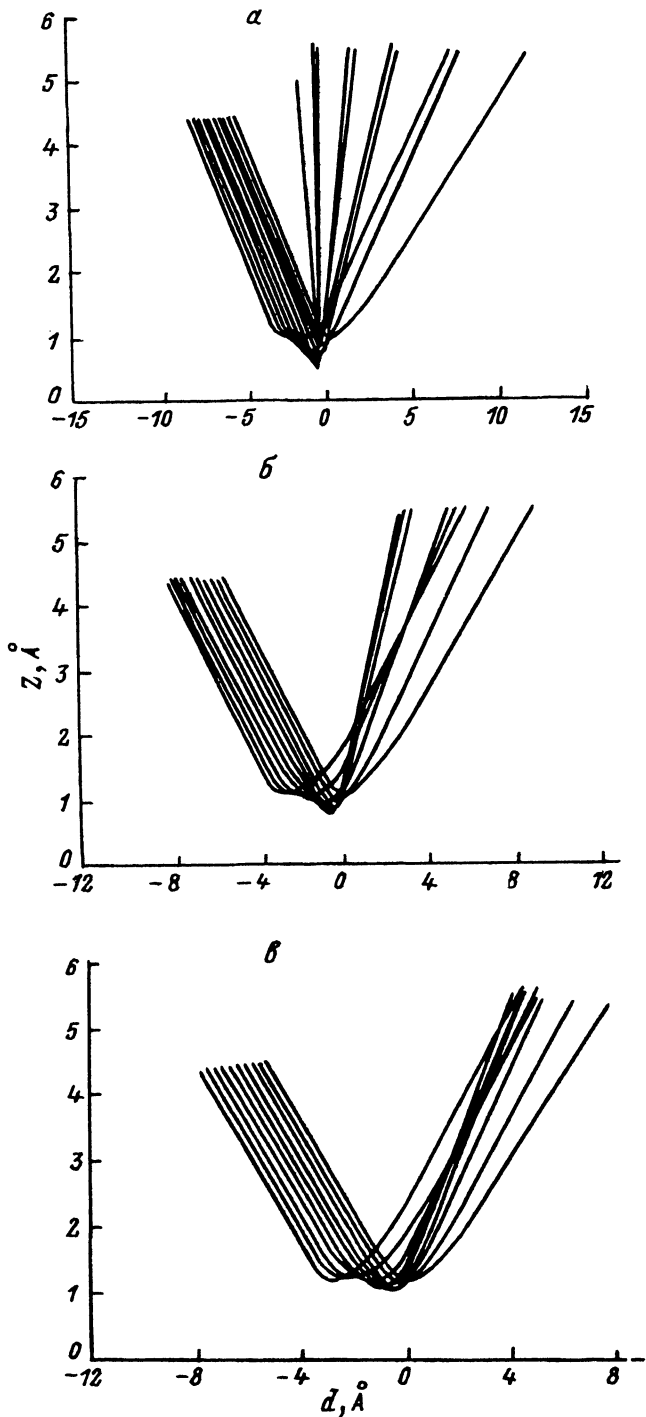


Рис. 2. Траектории движения рассеянных в направлении $\langle 100 \rangle$ ионов K^+ , рассчитанные по модели [5] с использованием потенциалов BM (а), ZBL (б), SL (в).

Расчитанные значения относительной энергии K^+ , рассеянных $V(110)$ в направлении $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, с использованием ZBL- и SL-потенциалов

$E_0, \text{эВ}$	110					
	ZBL			SL		
	E/E_0		интенсивность $I_I : I_{II}$	E/E_0		интенсивность $I_I : I_{II}$
	I пик	II пик		I пик	II пик	
60	0.49	0.68	1:0.8	0.61	0.63	1:1
80	0.46	0.66	1:0.3	0.57	0.68	0.75:1
100	0.44	0.64	1:0.4	0.54	0.69	1:0.83
200	0.35	0.6	1:0.58	0.44	0.65	1:0.5

Продолжение

$E_0, \text{эВ}$	100					
	ZBL			SL		
	E/E_0		интенсивность $I_I : I_{II}$	E/E_0		интенсивность $I_I : I_{II}$
	I пик	II пик		I пик	II пик	
60	0.49	0.62	1:0.67	0.61	-	-
80	0.47	0.61	0.86:1	0.55	-	-
100	0.45	0.6	0.85:1	0.55	0.59	0.43:1
200	0.35	0.56	1:0.5	0.44	0.59	1:1

неразрешенными. Это указывает на сильное влияние соседних атомов решетки на процесс рассеяния и свидетельствует о том, что отражение бомбардирующих ионов от кластера происходит как от единого целого.

Для проверки правильности проведенных расчетов последние сравнивали с экспериментальными данными. На рис. 3 представлены экспериментальные энергетические спектры ионов K^+ , рассеянных поликристаллом ванадия. Несмотря на то что эксперимент проводился с поликристаллической мишенью, имеется определенное согласие расчетных и экспериментальных данных. Как в расчетах, так и в эксперименте для $E_0 > 100$ эВ спектры обладают структурой, состоящей из двух пиков. Наблюдаемый в опытах третий высокоэнергетический пик Se обусловлен однократным рассеянием ионов K^+ на несвязанных атомах церия. Дело в том, что в используемой ванадиевой мишени содержалось некоторое количество ($\sim 0.03\%$) церия, введенного в ванадий для раскисления при его лучевой плавке в процессе технологического производства.

Как показали опыты, длительный прогрев мишени при высокой температуре (~ 1200 К) приводит к сегрегации атомов Se на ее поверхность. С течением времени концентрация атомов Se на поверхность возрастала, о чем свидетельствовал рост интенсивности пика церия в энергетических распределениях. При $E_0 < 100$ эВ структура спектров исчезает и они превращаются в колоколообразные кривые с четко выраженным максимумом, положение которого соответствует аномально высоким значениям энергии рассеянных ионов.

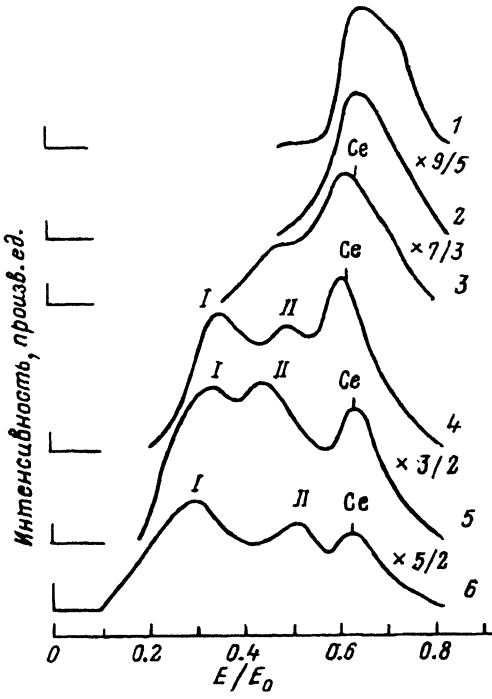


Рис. 3. Экспериментальные энергетические спектры ионов K^+ , рассеянных поликристаллом ванадия, для разных значений энергии бомбардирующих ионов.
 E_0 , эВ: 1 — 60, 2 — 80, 3 — 100, 4 — 150, 5 — 200, 6 — 300.

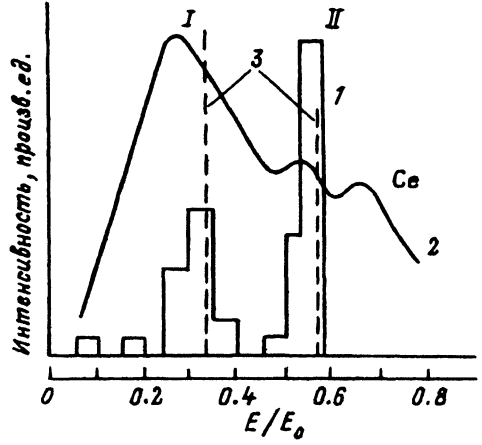


Рис. 4.

На рис. 4 показаны гистограмма энергетического распределения отраженных от поверхности поликристалла ванадия ионов K^+ (кривая 1), рассчитанная по модели [6,7], экспериментальный спектр (кривая 2), измеренный также от поликристалла ванадия для $\varphi = 55^\circ$ и положения пиков квазиоднократного и квазидвукратного рассеяния (кривая 3), рассчитанные по модели [5] для монокристалла V (110) в направлении $(110) \sim$ (энергия бомбардировки $E_0 = 400$ эВ). Видно, что расчеты по модели [5] лучше согласуются с экспериментом, несмотря на то, что эксперимент проводился с поликристаллом [6,7]. Возможно, что это связано с раз-

личием в углах падения в расчете по модели [6,7] и в эксперименте и с использованием более жесткого потенциала взаимодействия.

Таким образом, проведенные экспериментальные и теоретические исследования рассеяния ионов K^+ низкой энергии поверхностью ванадия устанавливают многочастичный характер их взаимодействия с поверхностными атомами решетки. Выбор потенциала взаимодействия и метода расчета энергетических характеристик рассеянных ионов существенно сказывается на рассчитанной величине энергии ионов.

Список литературы

- [1] *Anderson H.H., Sigmund P.* // Danioch Atomic Energy Commission. Rizo Rep., 1965. N 109.
- [2] *Ziegler J.F., Biersack T.P., Littmark K.V.* // The Stopping and Range Ions in Solids. New York: Pergamon Press, 1985. P. 321.
- [3] *Евстифеев В.В., Иванов И.В.* // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. Вып. 18. С. 69.
- [4] *Барановский В.И., Братцев В.Ф., Панин А.И., Третьяк В.М.* Методы расчета электронной структуры атомов и молекул. Л., 1976. 204 с.
- [5] *Евстифеев В.В., Иванов И.В.* // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 12. С. 132.
- [6] *Mosunov A.S., Shelyakin L.B., Yurasova V.E.* // Rad. Eff. 1980. Vol. 52. P. 85.
- [7] *Шелякин Л.Б., Мосунов А.С., Юрасова В.Е.* // Поверхность. Физ., хим., мех. 1983. № 5. С. 37.
- [8] *Евстифеев В.В., Иванов И.В.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1244.
- [9] *Евстифеев В.В., Иванов И.В.* // Поверхность. Физ., хим., мех. 1991. № 5. С. 26.
- [10] *Базарбаев Н.Н., Евстифеев В.В., Крылов Н.М., Кудряшова Л.Б.* // Поверхность. Физ., хим., мех. 1988. № 9. С. 140.

Научно-исследовательский институт
прикладной физики Ташкентского университета
Пензенский политехнический институт

Поступило в Редакцию
12 ноября 1992 г.
В окончательной редакции
6 апреля 1993 г.