

УДК 539.12.05.072

## ДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НЕЙТРАЛЬНЫХ АТОМОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ КРИСТАЛЛА

© 2019 г. Е. В. Дергачева<sup>1</sup>, В. С. Мальшевский<sup>1</sup>, \*, Г. В. Фомин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южный Федеральный университет, 344006 Ростов-на-Дону, Россия

\*E-mail: vsmalyshevsky@sfedu.ru

Поступила в редакцию 14.06.2018 г.

После доработки 05.07.2018 г.

Принята к публикации 05.07.2018 г.

Определены параметры динамического потенциала ионно-атомного взаимодействия в аналитическом виде для N–Al в диапазоне значений энергии 10–35 кэВ. Параметры рассчитаны из зависимости угла радужного рассеяния от энергии частиц, падающих на поверхность (111) кристалла алюминия в направлении [110]. Результаты расчета согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** радужное рассеяние, поверхность, динамический потенциал.

**DOI:** 10.1134/S0207352819040073

### ВВЕДЕНИЕ

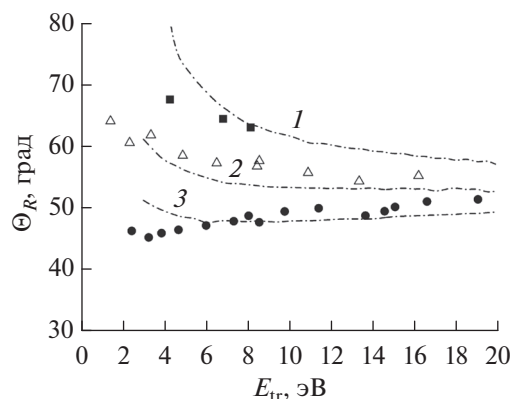
Эффект радужного рассеяния при скользящем падении частиц на поверхность кристалла исследуется достаточно давно [1–7]. Это явление возникает при направленном движении частиц под малым углом вдоль атомных цепочек, когда зависимость азимутального угла рассеяния (т.е. угла в плоскости, расположенной перпендикулярно атомным цепочкам) от прицельного параметра относительно выбранной атомной цепочки имеет экстремумы. Величину угла рассеяния  $\Theta_R$ , соответствующую максимуму углового распределения рассеянных частиц, называют радужным углом. Интерес к этому эффекту объясняется тем, что по угловым распределениям рассеянных частиц можно судить о структуре поверхности и характере потенциала взаимодействия между рассеиваемыми атомами и поверхностью кристаллов. Следует отметить, что эффекты радужного рассеяния наблюдаются и в экспериментах на прохождении заряженных частиц через кристаллы [8]. Как и при скользящем падении на поверхность кристалла, радужный эффект в этом случае обусловлен немонотонной зависимостью угла рассеяния от прицельного параметра.

В экспериментальных работах [1–3] выявлен различный характер зависимости углов радужного рассеяния нейтральных атомов поверхностью металлов и диэлектриков от начальной полной энергии. В частности, в [2, 3] установлено, что для атомов азота и кислорода зависимость угла радужного рассеяния от начальной поперечной энергии (или, иначе, от поперечной компоненты скорости, т.е. нормальной к поверхности кри-

сталла) может быть как монотонной при больших энергиях частиц, так и немонотонной при малых энергиях. В случае рассеяния поверхностью кристалла Al увеличение полной кинетической энергии частиц сопровождается уменьшением радужного угла при фиксированном значении начальной поперечной энергии. В случае же рассеяния атомов поверхностью диэлектрика LiF при таких же условиях величина радужного угла не зависит от полной кинетической энергии частиц [2].

### О РОЛИ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ

Наблюдаемые динамические явления в рассеянии могут быть связаны с диссипативными процессами, а именно с зависимостью от кинетической энергии взаимодействия погруженного в электронный газ атома с поверхностью металла. Описанные закономерности можно объяснить влиянием торможения медленных атомных частиц электронами вблизи поверхности металла. Действительно, в цитированных экспериментальных работах скорость рассеиваемых атомных частиц не превышает фермиевскую скорость. В этом случае на характер взаимодействия медленной атомной частицы с электронной подсистемой существенную роль оказывает статистика Ферми электронного газа и величина скорости частицы. При скоростях намного меньше фермиевской передача импульса электронам настолько мала, что только электроны из небольшого слоя вблизи поверхности Ферми могут перейти в свободные состояния. Увеличение скорости и, соответственно, переданного импульса, приводит к



**Рис. 1.** Зависимость угла радужного рассеяния  $\Theta_R$  нейтральных атомов азота от поперечной энергии  $E_{tr}$  при падении налетающих частиц с энергией 10 (1), 20 (2) и 35 кэВ (3) на поверхность (111) кристалла Al в направлении [110]: штрихпунктирные линии – результаты моделирования; символы – соответствующие экспериментальные данные [3].

увеличению толщины этого слоя и, следовательно, к увеличению числа электронов, вовлеченных в процесс передачи импульса. Поэтому тормозное сечение возрастает вместе со скоростью частицы [9, 10]. Как показано в [4, 5], именно это обстоятельство является причиной уменьшения радужного угла с увеличением скорости налетающей частицы. Атомные столкновения при малых скоростях сталкивающихся частиц можно описывать иным способом, используя зависящие от скорости парные потенциалы [11]. Зависимость потенциалов от скорости появляется при учете в уравнениях Томаса–Ферми–Дирака передачи кинетической энергии электронам сталкивающимся атомов. В этом случае статистика Ферми также определяет доступное число состояний электронной подсистемы, вовлеченной в передачу энергии. Оба подхода в определенной степени эквивалентны, поскольку и в том и другом случае речь идет о передаче энергии электронной подсистеме, а область разрешенных начальных состояний определяется скоростью относительного движения сталкивающихся атомных частиц.

**Таблица 1.** Константы аналитической аппроксимации потенциала (1) формулами (2) в диапазоне значений энергии 10–35 кэВ ( $\alpha = 1.0 \text{ \AA}^{-1}$ )

$i$	1	2	3
$\epsilon_i$	0.189 эВ	0.276 эВ	45.74 кэВ
$\sigma_i$	3.616 $\text{\AA}$	–1.016 $\text{\AA}$	59.74 кэВ

## РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Процесс рассеяния пучка моделировали путем численного интегрирования методом Дормана–Принса [12] классических нерелятивистских уравнений движения каждой отдельной частицы в поле поверхности кристалла алюминия с учетом двухчастичных потенциалов взаимодействия. Учитывали поле, созданное ближайшим окружением, при выбранном числе атомов и слоев кристаллической поверхности. Положения атомов кристалла соответствовали известной структуре алюминия и дисперсии нормального распределения тепловых смещений. Каждая отдельная частица пучка на протяжении всего пробега (порядка нескольких постоянных решетки) испытывала влияние поля неподвижных атомов, находящихся в случайно смещенных положениях. Потенциал взаимодействия налетающего атома с ориентированной кристаллической поверхностью определяли как суперпозицию потенциалов взаимодействия с отдельными атомами (ионами) поверхности в первом и последующих слоях. Взаимодействие нейтральных атомов N с ионами кристалла Al описывали потенциалом Морзе, который является известной аналитической трехпараметрической аппроксимацией [13]:

$$V_a(r) = \epsilon \{ \exp[-2\alpha(r - \sigma)] - 2 \exp[-\alpha(r - \sigma)] \}. \quad (1)$$

Как показано в [6], аппроксимация Морзе (1) хорошо описывает рассчитанный на основе теории функционала электронной плотности статический потенциал в широком диапазоне прицельных параметров.

На угловое распределение радужного рассеяния влияют структурные особенности, связанные с релаксацией и реконструкцией поверхности. Нормальная релаксация наблюдается в металлах, и в большинстве случаев имеет место уменьшение первого межслоевого расстояния. Это обстоятельство приводит к изменению потенциально го рельефа, на котором рассеиваются падающие на поверхность частицы, и к изменению формы их траекторий и угловых распределений. Эти и другие особенности учтены при построении модели взаимодействия и рассеяния атомных частиц поверхностью кристалла [6].

Для фиксации выходных параметров рассеянных частиц использовали полярные координаты в соответствии с [3]. Разработанное приложение позволяет проследить отдельные траектории рассеиваемых частиц, а также зависимость выходных параметров от прицельного параметра. Для набора достаточной статистики накапливали данные для 20000 траекторий.

Таким образом, путем моделирования траекторий частиц изучены особенности отражения нейтральных атомов азота от поверхности (111) кристалла Al при скользящем падении вдоль оси

[110]. Зависимость угла радужного рассеяния от начальной поперечной энергии для атомов азота принципиально отличается от зависимости от полной кинетической энергии атомов. Угол радужного рассеяния при увеличении энергии уменьшается. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными позволило уточнить параметры аналитической аппроксимации парного потенциала взаимодействия атомных частиц. Зависимость параметров потенциала (1) от полной кинетической энергии  $E$  (кэВ) может быть аппроксимирована следующими формулами:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \exp(-E/\varepsilon_3), \\ \sigma &= \sigma_1 + \sigma_2 \exp(-E/\sigma_3).\end{aligned}\quad (2)$$

Наилучшее согласие с экспериментальными данными [3] достигается при динамических параметрах потенциала Морзе (1), выраженного в эВ, которые приведены в табл. 1. Для сравнения на рис. 1 представлены результаты моделирования зависимости радужного угла от поперечной энергии при различных значениях полной энергии и экспериментальные данные [3].

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показана возможность описания особенностей радужного рассеяния атомных частиц поверхностью металлов при скользящем падении с использованием динамического потенциала в аппроксимации Морзе. С помощью компьютерного моделирования рассчитаны параметры парного потенциала взаимодействия ускоренных нейтральных атомов азота из зависимости угла радужного рассеяния от энергии падающих на

поверхность кристалла алюминия частиц. Результаты расчета согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schuller A., Winter H. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2007. V. 256. P. 122. doi 10.1016/j.nimb.2006.11.133
2. Schuller A., Winter H. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 2621. doi 10.1016/j.nimb.2009.05.058
3. Tiwald P., Lemell C., Schuller A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2011. V. 269. P. 1221. doi 10.1016/j.nimb.2010.11.090
4. Малышевский В.С., Казаков А.В. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. Вып. 17. С. 98.
5. Malyshevsky V.S. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2013. V. 309. P. 151. doi 10.1016/j.nimb.2013.01.026
6. Авакян Л.А., Жилина Т.И., Малышевский В.С., Фомин Г.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2016. № 1. С. 80.
7. Babenko P.Yu., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 460. doi 10.1016/j.nimb.2016.12.040
8. Cosic M., Petrovic S., Neskovic N. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2018. V. 422. P. 54. doi 10.1016/j.nimb.2018.02.028
9. Fermi E., Teller E. // Phys. Rev. 1947. V. 72. P. 399. doi 10.1103/PhysRev.72.399
10. Ахиезер И.А., Давыдов Л.Н. // УФН. 1979. Т. 129. С. 239. doi 10.3367/UFNr.0129.197910c.0239
11. Дедков Г.В. // УФН. 1995. Т. 165. С. 919. doi 10.3367/UFNr.0165.199508c.0919
12. Dormand J.R., Prince P.J. // J. Comp. Appl. Math. 1980. V. 6. № 1. P. 19.
13. Girifalco L.A., Weizer V.G. // Phys. Rev. 1959. V. 114. P. 687. doi 10.1103/PhysRev.114.687

## Dynamic Potential of Interaction between Neutral Atoms and Crystal Surface

E. V. Dergacheva, V. S. Malyshevsky, G. V. Fomin

Parameters of the dynamic ion-atom interaction potential for N–Al in an energy range 10–35 keV were determined in an analytical form. The parameters were obtained from the dependence of the rainbow angle on the energy of the particles impacting on the (111) surface of the aluminum crystal in the [110] direction. The calculation results were in agreement with the available experimental data.

**Keywords:** rainbow scattering, surface, dynamic potential.