

УДК 537.534.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ЧАСТИЦ НА АМОРФНЫХ И ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МИШЕНЯХ

© 2019 г. Д. С. Мелузова¹, *, П. Ю. Бабенко¹, А. П. Шергин¹, А. Н. Зиновьев¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступила в редакцию 02.07.2018 г.

После доработки 28.07.2018 г.

Принята к публикации 30.07.2018 г.

Описывается методика моделирования рассеяния атомных частиц на поверхности аморфных и кристаллических мишеней в приближении бинарных соударений. Анализируется влияние тепловых колебаний, выбора потенциала, учета неупругих потерь энергии на примере моделирования рассеяния атомов водорода на поверхности вольфрама. Сопоставляются коэффициенты отражения от кристаллической, поликристаллической и аморфной мишеней.

Ключевые слова: рассеяние, поверхность, коэффициент отражения, приближение парных столкновений, численное моделирование, вольфрам.

DOI: 10.1134/S0207352819040127

ВВЕДЕНИЕ

Моделирование рассеяния частиц на поверхности является важным инструментом для проверки моделей взаимодействия частиц с твердым телом, развития диагностики поверхности, модификации материалов с использованием ионной имплантации. Расчет отражения частиц от поверхности также важен для моделирования воздействия солнечного ветра на космические аппараты и процессов взаимодействия плазма–стенка в токамаке-реакторе.

Метод приближения парных соударений для ускорения счета был предложен в [1]. Значительный вклад в развитие моделирования рассеяния частиц на поверхности внесли отечественные авторы [2–4]. Наиболее подробно различные методики моделирования поверхности описаны в монографии [5].

Широко используется популярный код SRIM [6], который основывается на использовании так называемого универсального потенциала. К недостаткам кода можно отнести отсутствие возможности расчета рассеяния на кристаллических и поликристаллических мишенях, а также отсутствие возможности свободно менять рассеивающий потенциал и модель, учитывать неупругие потери энергии при торможении на электронах. Для моделирования расчета на кристаллической мишени следует отметить программу MARLOWE [7], которая имеется в свободном доступе. Был сделан ряд попыток создать программы для поликристаллической мишени, которые до сих пор не

получили широкого распространения [8–10]. Настоящая работа мотивирована необходимостью создать код, который свободен от перечисленных недостатков.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В приближении бинарных соударений рассеяние атомных частиц в твердом теле рассматривается как последовательность парных соударений с атомами твердого тела. Траектория движения частицы заменяется асимптотами траектории. При энергии соударения ниже 50 эВ применимость приближения нарушается.

Выбор прицельных параметров производится путем сканирования по площадке на поверхности твердого тела со сторонами длиной $2d$ (d – постоянная решетки). При моделировании рассеяния на кристалле расположение атомов в пространстве задается кристаллической решеткой, поверхность – выбранной гранью кристалла. При моделировании рассеяния на поликристаллической поверхности ориентация поверхностной грани кристалла задается случайным образом. Размеры кристаллита являются параметром задачи. Поверхность становится шероховатой с величиной неровности порядка постоянной решетки d . При моделировании рассеяния на аморфной мишени учитывается ближний порядок. Расстояние между атомами определяется из плотности мишени. Задается плотно упакованный кластер атомов, случайно ориентированный в пространстве.

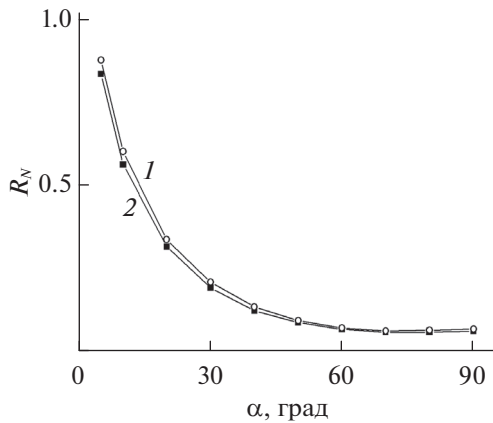


Рис. 1. Зависимость рассчитанных коэффициентов отражения R_N от угла скольжения α для системы D–W для двух потенциалов: Зиновьева [11] (1) и Зиновьева–Нордлунда [12] (2). Энергия соударения 1 кэВ.

Поверхность определяется как случайный срез данного кластера.

Угол рассеяния атомной частицы определяется известным выражением:

$$\theta = \pi - 2p \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}}}, \quad (1)$$

где r – расстояние между частицами, $U(r)$ – потенциал взаимодействия, p – прицельный параметр, E – энергия налетающей частицы, r_0 – расстояние наибольшего сближения, корень уравнения $U_{\text{eff}} = U(r_0) + Ep^2/r_0^2 = E$. При расчете на поиск корня r_0 тратится значительное время. Можно воспользоваться тем, что потенциал близок к зависимости $U(r) = A/r^2$. Тогда последующую итерацию $r_0(n + 1)$ можно искать по формуле:

$$r_0(n + 1) = \frac{r_0(n)}{\left(\frac{U(r_0)}{E} + \frac{p^2}{r_0^2}\right)^{0.5}}, \quad (2)$$

что значительно ускоряет поиск значения r_0 . Данный алгоритм применим при $U_{\text{eff}} > 5$ эВ. Замена $r = r_0/\cos x$ устраняет особенность в знаменателе подынтегрального выражения, и формула (1) преобразуется к виду:

$$\theta = \pi - 2 \int_0^{\pi/2} \frac{\frac{p}{r_0} \sin x dx}{\sqrt{1 - U(x)/E - p^2 \left(\frac{\cos x}{r_0}\right)^2}}. \quad (3)$$

Проводится численное интегрирование с использованием разложения по полиномам Гаусса с количеством узлов до 20 и точностью $10^{-8}\%$ от значения интеграла.

Далее выбирается следующий рассеивающий атом исходя из критерия минимума прицельного параметра и ограничения сферы, в которой происходит поиск, расстоянием, меньшим, чем d . При рассеянии над поверхностью учитывается отсутствие атомов в верхней полусфере. Энергия атома после соударения рассчитывается по известным формулам, полученным из законов сохранения энергии и импульса. Координата частицы после соударения пересчитывается по формулам [1]. Счет заканчивается, если атом потерял более 98% энергии или отлетел от поверхности на расстояние больше $3d$. Число обрабатываемых траекторий для получения достаточной статистики достигало 4×10^6 . Имеется возможность построения карты поверхности для анализа области, приводящей к отражению частиц от поверхности. Также фиксируется слой, до которого дошла частица.

ВЫБОР ПОТЕНЦИАЛА

В отличие от известного кода SRIM методика позволяет производить вычисления для потенциалов любого типа. В [11] проводили сравнение различных теоретических моделей потенциалов с экспериментальными данными. Для потенциала, наилучшим образом описывающего эксперимент, была предложена функциональная форма:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 a_f}{x} \exp\left\{\frac{-1.575x}{1 + 0.719x^{0.5} - 0.010x}\right\}, \quad (4)$$

где Z_1 и Z_2 – заряды ядер сталкивающихся атомных частиц, R – межъядерное расстояние, $x = R/a_f$, $a_f = 0.8853 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ – длина экранирования Фирсова. Используются атомные единицы.

Позднее в [12] было показано, что имеющиеся экспериментальные данные хорошо описываются расчетами в рамках приближения функционала плотности с использованием пакета программ DMol с расширенным набором хартри-фоковских волновых функций. В случаях, когда имеются расчеты по данной модели, рекомендуется использовать их, а в остальных случаях использовать формулу (4).

На рис. 1 представлены коэффициенты отражения R_N в системе D–W для двух различных потенциалов [11]. Различия в результатах невелико, что объясняется близостью потенциалов, предложенных в работах Зиновьева [11] и Зиновьева–Нордлунда [12].

НЕУПРУГИЕ ПОТЕРИ

При энергии соударения менее 10 кэВ важно учитывать неупругие потери энергии. На рис. 2

приведены значения неупругих потерь в случае рассеяния изотопов водорода на вольфраме, угле-роде и бериллии. Они хорошо описываются зави-симостью от энергии соударения:

$$\frac{dE}{dx} = A(E/M)^n (1 + B E/M). \quad (5)$$

Параметры аппроксимации для указанных вы-ше систем приведены в табл. 1. При использо-вании формулы (5) начальная энергия E выражена в кэВ, а dE/dx — в эВ/Å, M — масса изотопа водорода в а.е.м.

На рис. 3 представлены коэффициенты отра-жения с учетом и без учета неупругих потерь энергии для системы D–W. В рассматриваемом случае доминируют потери энергии, связанные с торможением на ядрах. С ростом энергии налета-ющей частицы роль торможения на электронах сильно возрастает.

ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ

При сканировании в заданном диапазоне при-цельных параметров в начале каждого расчета смещения атомов (координаты), обусловленные тепловыми колебаниями, задаются случайным образом для каждого атома решетки. Смещения $s_{x, y, z}$ подчиняются распределению Гаусса и нахо-дятся из равномерно распределенных случайных величин p_{1-4} следующим образом:

$$\begin{aligned} s_x &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \cos(2\pi p_2), \\ s_y &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_1} \sin(2\pi p_2), \\ s_z &= \sigma \sqrt{-2 \ln p_3} \sin(2\pi p_4), \end{aligned} \quad (6)$$

где σ — амплитуда тепловых колебаний атомов мишени. На рис. 4 приведены результаты расчета коэффициентов отражения для столкновений D–W при отсутствии ($\sigma = 0$) и с учетом тепловых колебаний. Для вольфрама использовано значе-ние амплитуды $\sigma = 0.05$ Å. Учет тепловых колеба-ний важен при расчете угловых зависимостей при рассеянии атомов поверхностью [13, 14].

СОПОСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МИШЕНЕЙ ИЗ W

На рис. 5 представлено сравнение данных рас-четов для кристаллического и аморфного воль-фрама. Приведены также данные измерений для поликристаллического вольфрама [15]. Выбрана начальная энергия $E = 400$ эВ, типичная для ча-стиц в пристеночной области больших токама-ков. Данные для кристаллической и аморфной мишеней существенно различаются (рис. 5). До углов падения $\alpha = 20^\circ$ в случае кристаллической мишени имеет место коэффициент отражения, близкий к единице. В [16] было показано, что зави-симость коэффициента отражения от парамет-

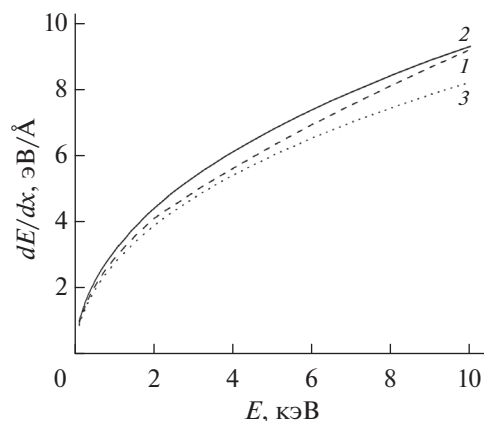


Рис. 2. Зависимость тормозных способностей от энергии при рассеянии изотопов водорода на вольфраме (1), угле-роде (2) и бериллии (3).

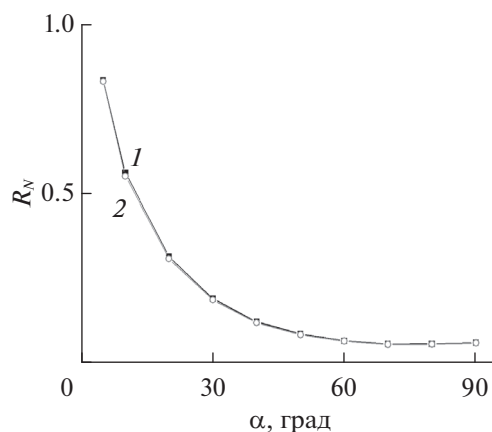


Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения от угла скольжения с учетом (1) и без учета (2) неупругих потерь энергии.

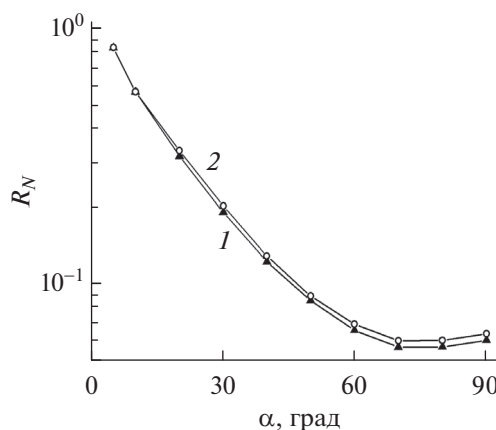


Рис. 4. Зависимость коэффициентов отражения от угла скольжения с учетом (1) и без учета (2) тепловых колебаний атомов мишени.

Таблица 1. Параметры аппроксимации тормозной способности dE/dx для различных систем

Система	A	n	B
H–Be	2.78	0.50	–0.0072
H–C	3.15	0.50	–0.0071
H–W	2.86	0.48	0.0067

ра $E\sin^2\alpha$ носит универсальный характер. При больших углах коэффициент отражения на кристалле падает резче, чем в случае аморфной мишени, что связано с каналированием частиц в веществе. Наблюдаются также пик, связанный с каналированием обратно рассеянных частиц.

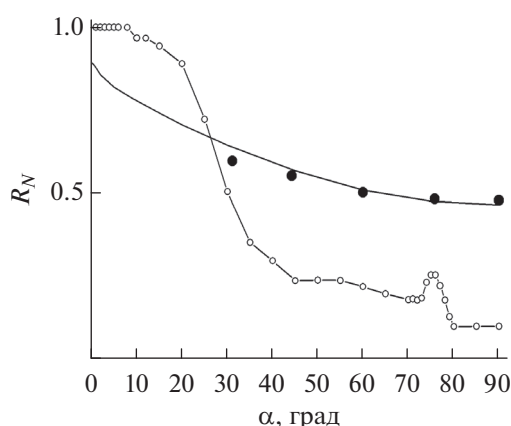


Рис. 5. Коэффициенты отражения в случае взаимодействия атомов дейтерия с мишенью из вольфрама: закрашенные символы – экспериментальные данные [15]; открытые символы – расчеты с использованием предложенного программного кода; сплошная линия – расчеты с помощью SRIM. Энергия соударения 400 эВ.

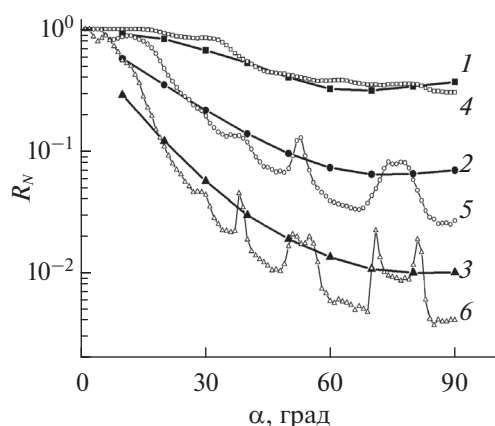


Рис. 6. Зависимость коэффициентов отражения R_N атомов D от угла скольжения α для поликристаллического (1–3) и кристаллического W(100) вольфрама (4–6) и начальной энергии: 0.1 (1); 1 (2); 5 (3); 0.1 (4); 1 (5); 4 кэВ (6).

Данные измерений для поликристаллической мишени [15] находятся в согласии с расчетом для аморфной мишени.

На рис. 6 сопоставлены коэффициенты отражения от кристаллической и поликристаллической мишеней. В расчете предполагалось, что размеры кристаллита превышают пробег атомов дейтерия в мишени. Из-за произвольной ориентации кристаллита в пространстве пики, обусловленные каналированием обратно рассеянных частиц, в случае поликристаллической мишени отсутствуют.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан пакет программ для численного моделирования рассеяния частиц на кристаллах, поликристаллах и аморфных материалах. Учитывается тепловое движение атомов мишени. Пакет позволяет варьировать потенциал и модель неупругих потерь энергии.

Продемонстрировано различие в поведении коэффициентов отражения дейтерия при рассеянии на кристаллическом, поликристаллическом и аморфном вольфраме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Robinson M.T., Torrens I.M.* // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. Iss. 12. P. 5008. doi 10.1103/PhysRevB.9.5008
2. *Кивилис В.М., Парилус Э.С., Тураев Н.Ю.* // ДАН. 1967. Т. 173. № 4. С. 805.
3. *Yurasova V.E., Shulga V.I., Karpuzov D.S.* // Can. J. Phys. 1968. V. 46. Iss. 6. P. 759. doi 10.1139/p68-094
4. *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. 176 с.
5. *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 321 с.
6. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* SRIM. <http://www.srim.org>.
7. <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/psr-0137>.
8. *Thomas G.E., Beckers L.J., Vrakking J.J., Koning B.R.* // J. Cryst. Growth. 1982. V. 56. Iss. 3. P. 557. doi 10.1016/0022-0248(82)90039-2
9. *Hautala M.* // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. Iss. 9. P. 5010. doi 10.1103/PhysRevB.30.5010
10. *Koponen I., Hautala M.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1988. V. 33. Iss. 1–4. P. 112. doi 10.1016/0168-583X(88)90525-3
11. *Zinoviev A.N.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2011. V. 269. Iss. 9. P. 829. doi 10.1016/j.nimb.2010.11.074
12. *Zinoviev A.N., Norlund K.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511. doi 10.1016/j.nimb.2017.03.047

13. Babenko P.Yu., Deviatkov A.M., Meluzova D.S. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2017. doi 10.1016/j.nimb.2016.12.043
14. Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Шергин А.П. // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101. Вып. 12. С. 940. doi 10.7868/S0370274X15120139
15. Bandurko V.V., Koborov N.N., Kurnaev V.A. et al. // J. Nucl. Mater. 1990. V. 176–177. P. 630. doi 10.1016/0022-3115(90)90118-7
16. Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н., Мелузова Д.С., Шергин А.П. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 6. С. 1.

Simulation of Particles Scattering from Amorphous and Polycrystalline Targets

D. S. Meluzova, P. Yu. Babenko, A. P. Shergin, A. N. Zinoviev

A technique for simulating scattering of particles from amorphous and polycrystalline targets using the binary collision approximation is described. The influence of thermal vibrations, choice of the potential and accounting of inelastic energy loss is analyzed by example of simulation of scattering of hydrogen atoms on the tungsten surface. A comparison of reflection coefficients for crystalline, polycrystalline, and amorphous targets is given.

Keywords: scattering, reflection coefficient, binary collision approximation, numerical simulation, tungsten.