

УДК 537.534.9

ВЛИЯНИЕ ГЛУБИНЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ НА ОТРАЖЕНИЕ АТОМОВ ДЕЙТЕРИЯ ОТ ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА

© 2020 г. Д. С. Мелузова^{а, *}, П. Ю. Бабенко^а, А. П. Шергин^а, А. Н. Зиновьев^а

^аФизико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021 Россия

*e-mail: dmeluzova@gmail.com

Поступила в редакцию 20.07.2019 г.

После доработки 15.08.2019 г.

Принята к публикации 18.08.2019 г.

Обнаружена зависимость коэффициента отражения от вида потенциала взаимодействия атом–поверхность для системы D–W. Рассмотрены потенциалы с различной глубиной потенциальной ямы. Расчеты проведены путем моделирования траекторий налетающих частиц и в приближении парных взаимодействий.

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

DOI: 10.31857/S1028096020030115

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование широко применяется для исследования рассеяния атомных частиц на поверхности материалов [1, 2]. Наиболее часто используется известный код SRIM [3], основанный на приближении парных столкновений, которое было предложено в [4]. В этом приближении рассматривается рассеяние налетающей частицы на ближайшем атоме твердого тела, а траектория частицы аппроксимируется ее асимптотами при подлете и отлете частицы от рассеивающего центра. Более точным является метод расчета траекторий частиц, в котором эти упрощающие приближения отсутствуют, и можно учесть одновременное взаимодействие налетающей частицы с множеством атомов мишени. Данный метод требует существенно больших затрат компьютерного времени.

В качестве объекта исследований выбрана система D–W. Как известно, вольфрам используют в качестве материала дивертора в токамаке ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor). Исследуемый диапазон энергии налетающих частиц от 100 эВ до 10 кэВ был выбран исходя из типичных значений энергии частиц, отражающихся от первой стенки в токамаке.

Метод расчета траекторий применялся ранее [5] для моделирования радужного рассеяния и других ориентационных эффектов при поверхностном каналировании. В [6, 7] в приближении парных столкновений были рассчитаны коэффициенты и угловые распределения в случае рассея-

ния атомов дейтерия на различных гранях кристаллического вольфрама для потенциала отталкивания. Влияние ямы в потенциале, вызывающей притяжение частиц на больших межъядерных расстояниях, не рассматривалось.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В качестве основного метода расчета, наиболее точно описывающего рассеяние, был выбран метод расчета траекторий частиц. Векторы x_0 и v описывают положение в пространстве и скорость налетающей частицы, векторы x_j – координаты атомов в кристаллической решетке. Можно записать уравнения движения налетающего атома следующим образом:

$$\frac{dx_0}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = \frac{1}{m} \sum_j F(|x_0 - x_j|) \frac{(x_0 - x_j)}{(|x_0 - x_j|)}, \quad (1)$$

здесь m – масса налетающего атома. Проводится векторное суммирование сил, действующих на налетающую частицу со стороны всех атомов решетки. В вычислениях учитывали атомы, находящиеся на расстоянии $3d$ (d – постоянная решетки) от рассматриваемой точки траектории частицы (примерно учитывали до 80 атомов в зависимости от рассматриваемой грани кристалла). Силу считали зависящей от расстояния между атомами и вычисляли как градиент потенциала. Второй член в сумме позволяет разложить силу на компоненты по трем осям (x , y и z). Точки старта расчета и его окончания лежали на рассто-

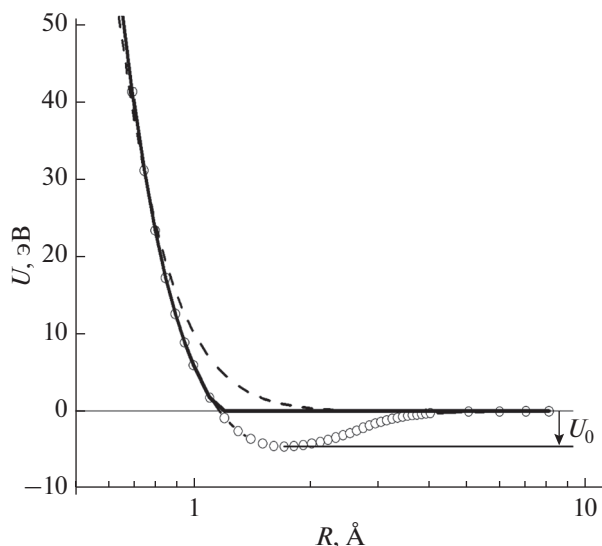


Рис. 1. Сравнение потенциалов, полученных по формуле Зиновьева [12] (штриховая кривая), и расчета [13] (точки) в рамках приближения функционала плотности и пакета для выбора базиса волновых функций DMol. Приведен также модельный потенциал с $U_0 = 0$ эВ (сплошная кривая), который использовался для оценки влияния различных форм потенциала отталкивания.

янии $3d$, если частица покидала твердое тело. Расчет прекращался, если частица теряла 98% энергии. Потери энергии учитывали с использованием базы данных SRIM. Шаг интегрирования и точку старта выбирали из условия, чтобы ошибка в расчете угла вылета частицы была менее 10^{-4} град.

Учитывали тепловые колебания атомов мишени. В связи с тем, что скорость налетающей частицы много больше тепловых скоростей, принимали во внимание только смещение атомов решетки. Колебания атомов считали независимыми, а сдвиг координат по трем направлениям разыгрывался случайно в предположении распределения Гаусса с амплитудой колебаний 0.05 \AA (корень из среднего квадрата амплитуды тепловых колебаний). При вычислениях проводили сканирование пучком вдоль осей x и y в интервале $\pm d$. Расходимость пучка не учитывали. Для проверки результатов в ряде случаев сканирование проводили в более широком интервале $\pm 2d$. Разницу в получаемых результатах не отмечали. Обычно рассчитывали до 40000 траекторий. Коэффициент отражения R_N определяли, как отношение числа вылетевших частиц к числу падающих на поверхность кристалла.

Рассматривали рассеяние на двух гранях кристалла вольфрама (100) и (110). Вольфрам имеет ОЦК-решетку с постоянной $d = 3.16 \text{ \AA}$. В расчетах пучок лежит в плоскости xz , ось x ориентирована вдоль атомной цепочки, а ось z перпендикулярна

поверхности. Угол скольжения α отсчитывается от оси x . В случае ориентации (100) первый слой состоит из атомов, лежащих в вершинах соприкасающихся квадратов с расстояниями между атомами, равными d вдоль осей x и y . Второй слой образуют атомы, лежащие в центре кубов. Расстояние между слоями $d/2$. В случае ориентации (110) элементарная ячейка состоит из пяти атомов, расположенных в вершинах и центре прямоугольника, расстояния между атомами вдоль оси x остаются прежними, а расстояния вдоль оси y и расстояние между слоями возрастают в $\sqrt{2}$ раз. Расчет методом траекторий прерывался при углах α более 20° из-за возрастания его длительности.

Для сопоставления проводили расчеты также с использованием приближения парных столкновений. Методика расчета в этом случае описана в [8].

ВЫБОР ПОТЕНЦИАЛА

В [9] проведено сопоставление потенциалов взаимодействия для 19 комбинаций атомов, полученных из экспериментов по рассеянию частиц в газах, с расчетами в рамках приближения функционала плотности с использованием пакета программ DMol для набора базиса молекулярных волновых функций. Было показано, что этот метод дает лучшее согласие с экспериментом, чем ранее использовавшиеся модели потенциалов [10–12].

Расчет указанным методом потенциала для системы D–W [13] показал наличие ямы в потенциале, что приводит к притяжению частиц на больших расстояниях (рис. 1). Данных об энергии разрыва связи в случае D–W в литературе не найдено. На основе сопоставления расчетных данных с энергией разрыва связи для других систем (D–Pt, D–C, D–Be) была оценена глубина потенциальной ямы для системы D–W: $U_0 = 3.5$ эВ. В ряде случаев для оценки влияния различных форм потенциала отталкивания использовали модельный потенциал с $U_0 = 0$ эВ.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 2 представлены расчеты коэффициентов отражения от поверхности при варьировании глубины потенциальной ямы. Часть потенциала, связанная с отталкиванием, и функциональная зависимость потенциала от межъядерного расстояния в области притяжения были взяты из [13], а глубина потенциальной ямы U_0 варьировалась в пределах 0–5 эВ.

Как видно из рис. 2, притяжение частицы к поверхности при больших межъядерных расстояниях качественно меняет коэффициенты отражения. Если при глубине ямы $U_0 < 2$ эВ на зависимости коэффициента отражения при малых углах

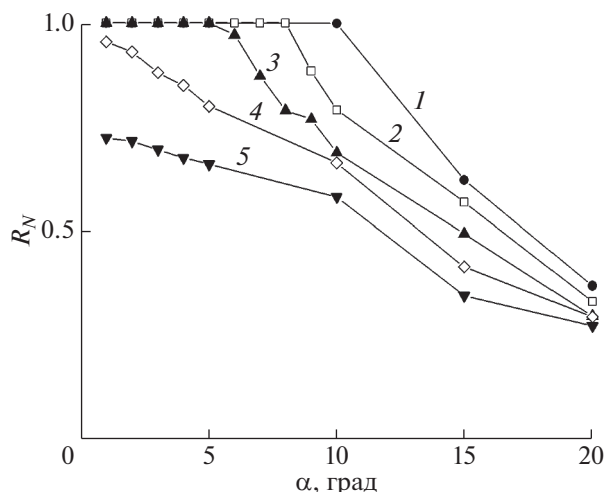


Рис. 2. Коэффициенты отражения при рассеянии атомов D с энергией 400 эВ на кристаллическом W(110) для различной глубины ямы потенциала взаимодействия: 0 (1); 1 (2); 2 (3); 3 (4); 5 эВ (5).

скольжения имеется область, где коэффициент отражения близок к 100%, то при $U_0 > 3$ эВ эта область отсутствует.

В [7] было показано, что для потенциала отталкивания имеется универсальная зависимость коэффициента отражения от перпендикулярной составляющей энергии $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \alpha$. Использовать данный параметр предложил Линдхард [14] при описании каналирования частиц. Как видно из рис. 3, подобие кривых при различной начальной энергии сохраняется, но не столь строго, как в случае только потенциала отталкивания. Это можно объяснить тем, что исчезает полное отражение частиц при малых углах скольжения. Уменьшение коэффициента отражения связано с тем, что из-за наличия ямы в потенциале, обеспечивающей притяжение частиц к поверхности, часть налетающих частиц проникает вглубь кристалла. Это явление напоминает откачку газа металлом-геттером. В рассматриваемом случае падающие частицы имеют значительную начальную энергию и проникают глубже в твердое тело. Эффект проявляется сильнее в случае более плотно упакованной грани (110). Отражение происходит только при пролете частицы вблизи атома решетки.

Для сравнения были проведены также расчеты в приближении парных столкновений. Качественно результаты согласуются, но очевидно, что расчеты методом траекторий более точные. Как видно из сопоставления рис. 3а и 3б, в случае более плотно упакованной грани различие результатов больше, поскольку наличие дополнительного атома на поверхности сильнее влияет на траектории частиц.

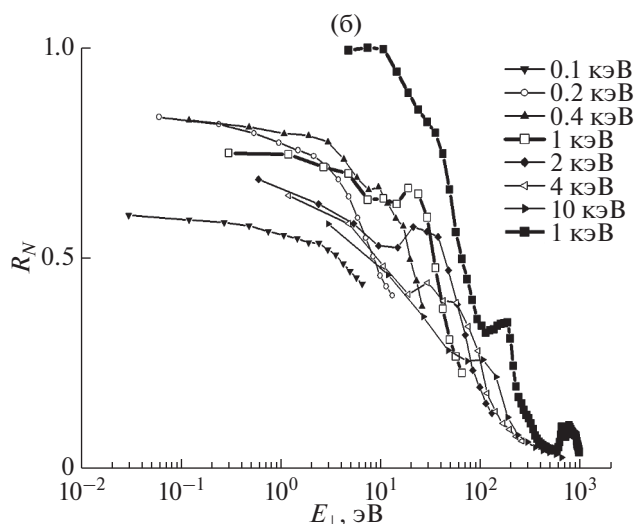
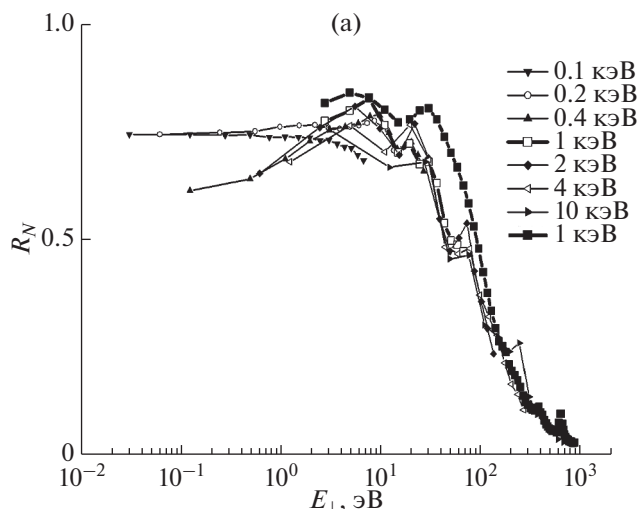


Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения для D–W от перпендикулярной составляющей энергии при различной энергии соударения в случае: а – W(100); б – W(110).

На рис. 4а для сравнения приведены результаты расчета коэффициентов отражения двумя рассматриваемыми методами при использовании потенциалов отталкивания. Оба метода дают близкие результаты. Приведены также для сравнения результаты расчетов в приближении парных столкновений для различных форм потенциала отталкивания: модельного потенциала с $U_0 = 0$ эВ и потенциала, предложенного в [12]. Как видно из рис. 4а, при использовании связанной с отталкиванием части потенциала, рассчитанного в [13], и при отсутствии потенциальной ямы вид зависимости сохраняется, но уменьшается область значений, где R_N близок к 100%.

На рис. 4б представлены результаты расчетов для потенциала с ямой 3.5 эВ и грани (110). Различия, даваемое разными методами, существенно.

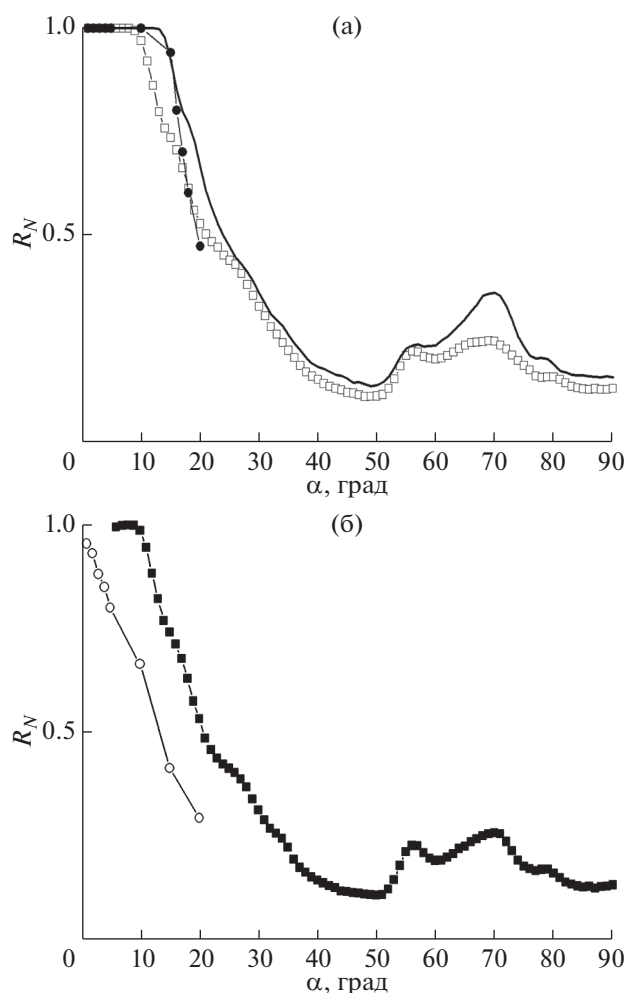


Рис. 4. Сравнение результатов расчета коэффициентов отражения для D–W(110) ($E_0 = 400$ эВ) методом траекторий (квадраты) и в приближении парных столкновений (квадраты): а – потенциал отталкивания [12] (сплошная кривая), метод траекторий [12] и модельный потенциал [13] с $U_0 = 0$ эВ; б – метод траекторий [13] и потенциал [13] с ямой глубиной $U_0 = 3.5$ эВ.

Это означает, что при небольшой энергии соударения при наличии притягивающей ямы в потенциале использовать приближение парных столкновений нужно весьма осторожно.

ВЫВОДЫ

Показана существенная разница в поведении коэффициентов отражения атомов дейтерия при рассеянии на кристаллическом вольфраме при наличии и отсутствии потенциальной ямы. Коэффициент отражения существенно зависит от глубины ямы.

Установленная ранее [7] универсальность поведения коэффициента отражения при изменении параметра $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \alpha$ при наличии потен-

циальной ямы остается, но становится менее выраженной и зависит от рассматриваемой грани.

Метод траекторий, свободный от упрощающих предположений приближения парных столкновений, позволяет более точно учесть влияние связанной с притяжением части потенциала на коэффициенты отражения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эжитайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 321 с.
2. Парилис Э.С., Тураев Н.Ю., Умаров Ф.Ф., Нижняя С.Л. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. Ташкент: ФАН, 1987. 210 с.
3. Ziegler J.F., Biersack J.P. SRIM. <http://www.srim.org>.
4. Robinson M.T., Torrens I.M. // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. Iss. 12. P. 5008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.9.5008>
5. Babenko P.Yu., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 460. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.040>
6. Babenko P.Yu., Deviatkov A.M., Meluzova D.S., Shergin A.P., Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 538. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.12.043>
7. Babenko P.Yu., Zinoviev A.N., Meluzova D.S., Shergin A.P. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2018. V. 12. № 3. P. 520. <https://doi.org/10.1134/S1027451018030230>
8. Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Zinoviev A.N. // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2019. V. 13. № 2. P. 335. <https://doi.org/10.1134/S1027451019020332>
9. Zinoviev A.N., Nordlund K. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.03.047>
10. Moliere G. // Z. Naturforsch. 1947. A. V. 2. P. 133. <https://doi.org/10.1515/zna-1947-0302>
11. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Range of Ions in Matter. V. 1. New York: Pergamon, 1985. 321 p.
12. Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B. 2011. V. 269. P. 829. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.074>
13. Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Nordlund K., Zinoviev A.N. Reflection of Hydrogen and Deuterium Atoms from the Surface of Carbon and Polycrystalline Beryllium and Tungsten // Abstr. 28th Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids (ICACS-2018). Caen, France. 2018. P1-T01-045.
14. Линдхард Й. // УФН. 1969. Т. 99. Вып. 2. С. 249. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0099.196910c.0249>

Influence of the Potential Well Depth on the Reflection of Deuterium Atoms from Tungsten Surface

D. S. Meluzova^{1,*}, P. Yu. Babenko¹, A. P. Shergin¹, A. N. Zinoviev¹

¹Ioffe Institute, St. Petersburg, 194021 Russia

**e-mail: dmeluzova@gmail.com*

The dependence of the reflection coefficient on the form of the atom–surface interaction potential for the D–W system has been found. Potentials with different depths of the potential well have been considered. The calculations have been carried out by modelling the trajectories of the incident particles and using the binary collision approximation.

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