

УДК 539.186.3

В.А. Саблин

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНА ГИПЕРТЕРМАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ С ТЕПЛОВОМ АТОМОМ. ПРИБЛИЖЕНИЕ СВОБОДНОГО АТОМА

Рассмотрено взаимодействие иона с движущимся атомом в приближении свободного парного взаимодействия в случае регистрирующего цилиндрического зеркального анализатора. Установлено влияние теплового движения атома на сечение рассеяния иона с гипертермальной энергией. В первом приближении рассчитана форма пика рассеяния иона на движущемся атоме, обладающем тепловой энергией.

Ключевые слова: рассеяние, тепловое движение, пик парного рассеяния, гипертермальные энергии.

Введение. Реальные спектры рассеяния частиц (ионов) отличаются от теоретических так называемым уширением пиков. Одним из факторов, приводящих к уширению пиков рассеяния, является тепловое движение атомов.

Целью данной работы является изучение влияния теплового движения атомов на изменение ширины пика рассеяния иона с энергиями до 100 эВ в рамках модели отдельного парного взаимодействия.

Для решения поставленной задачи использовался пакет программ, позволяющий исследовать парное взаимодействие динамическим методом (методом молекулярной динамики) [1].

В работе исследовались изменения как дифференциального сечения рассеяния, так и конечных энергий движения иона при рассеянии на движущемся атоме по сравнению с рассеянием на неподвижном атоме.

Методика расчетов. Для определения дифференциального сечения рассеяния использовался следующий метод (рисунок 1).

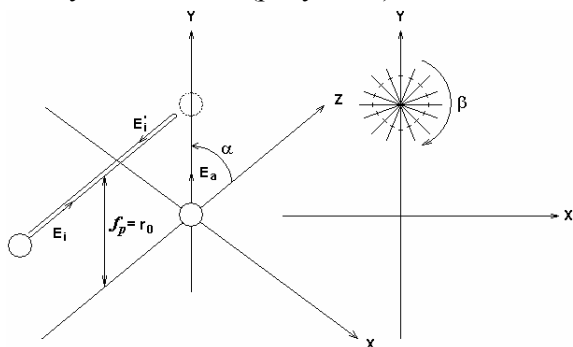


Рисунок 1 - Методика определения дифференциального сечения рассеяния в случае двигающегося в плоскости YZ (под произвольным углом α) атома. Здесь f_p – «прицельное расстояние», r_0 – расстояние, на котором ион рассеивается под углом 180° , т.е. положение точки обратного рассеяния

На первом этапе определяется расстояние $f_p = r_0$, при движении на котором ион отражается на 180° , что соответствует ситуации лобового столкновения в случае взаимодействия с неподвижным атомом. Из найденной точки обратного рассеяния r_0 в плоскости, перпендикулярной к оси движения иона, проводятся виртуальные лучи, на каждом из которых определяется расстояние r (от точки обратного отражения) рассеяния на заданный угол. Координаты точки, из которой должен двигаться ион, чтобы рассеяться на заданный угол, в лабораторной системе определяются как:

$$x = r \cdot \sin \beta,$$

$$y = r_0 + r \cdot \cos \beta,$$

где r_0 – расстояние от нуля координат до точки рассеяния иона на 180° , r – расстояние от точки обратного рассеяния до точки рассеяния на заданный угол по данному лучу, β – угол поворота луча относительно оси Y.

Таким образом, определив на каждом из лучей расстояния, соответствующие рассеянию иона на заданные минимальный и максимальный углы, получим как дифференциальное сечение рассеяния, так и конечные энергии движения иона и атома.

Самым простым методом для определения положения точки обратного рассеяния является двухшаговый алгоритм (рисунок 2).

Так как зависимость угла рассеяния от величины f_p имеет максимум, то приходится учитывать ситуацию, изображенную на рисунке: на каждом шаге (точки 1, 2 и 3) угол рассеяния увеличивается, однако дальнейшие расчеты при использовании одношагового метода из точки 3 бессмысленны. Особенность двухшагового алгоритма заключается в том, что расчет значения

угла рассеяния ведется из точки 1 сначала с одинарным шагом (точка 2), затем с удвоенным (точка 3):

$$\theta_1 = \theta(y), \theta_2 = \theta(y+\Delta y), \theta_3 = \theta(y+2\Delta y).$$

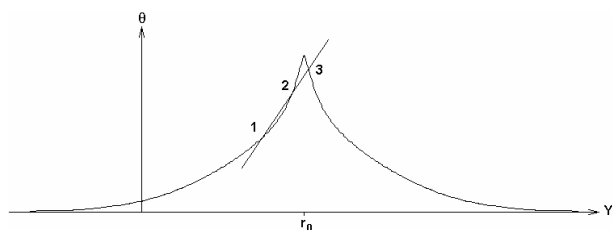


Рисунок 2 - К методике определения точки обратного рассеяния

Если оба значения (в точках 2 и 3) приводят к возрастанию угла, то исходная точка (точка 1) смещается в точку 2 и следующий расчет ведется опять с удвоенным шагом (так как значение в точке 3, ставшей новой точкой 2, известно). То есть, если $\theta_3 > \theta_2 > \theta_1$, то $y = y + \Delta y$, $\theta_1 = \theta_2$, $\theta_2 = \theta_3$, $\theta_3 = \theta(y+2\Delta y)$.

Если же значение угла в точке 2 или 3 становится меньше, то расчет повторяется из точки 1 с уменьшенным шагом. То есть, если $\theta_2 < \theta_1$ или $\theta_3 < \theta_2$, то $\Delta y = \Delta y/n$, $\theta_2 = \theta(y+\Delta y)$, $\theta_3 = \theta(y+2\Delta y)$.

Это позволяет определить положение точки обратного рассеяния с любой точностью.

Для определения расстояния рассеяния на заданный угол используется обычный алгоритм последовательного приближения (одношаговый метод) с уменьшением шага расчета.

Результаты и их обсуждение. Расчеты производились исходя из схемы эксперимента, представленной на рисунке 3 и соответствующей рассеянию в цилиндрическом зеркальном анализаторе.

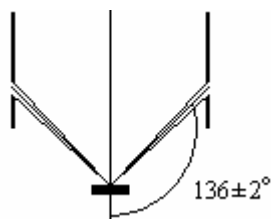


Рисунок 3 - К выбору углов рассеяния при расчетах

Движение атома приводит к изменению формы и площади области отражения в заданном диапазоне углов. Наиболее искаженной форма будет при перпендикулярном движении атома (рисунок 4), однако при этом площадь равна дифференциальному сечению рассеяния для изначально неподвижного атома. Если атом движется от иона ($0^\circ < \alpha < 90^\circ$), то дифференциальное сечение будет меньше, чем у неподвижного атома, если атом

движется навстречу ($90^\circ < \alpha < 180^\circ$), то больше (рисунок 5). С увеличением энергии иона изменение дифференциального сечения рассеяния становится меньше.

Минимальная энергия рассеяния иона во всем диапазоне углов достигается при отражении на верхний угол (138°) при значении угла движения атома по отношению к начальному вектору движения иона α , зависящем от взаимодействующей пары (для Ne-Si около 1° , для Ne-Au около 9°), т.е. при однонаправленном движении частиц. Максимальная же при встречном движении и рассеянии на нижний угол (134°). Величина α также отличается у разных пар (Ne-Si около 177° , для Ne-Au около 167°).

Это позволяет определить ширину пика рассеяния по основанию в приближении свободного парного взаимодействия.

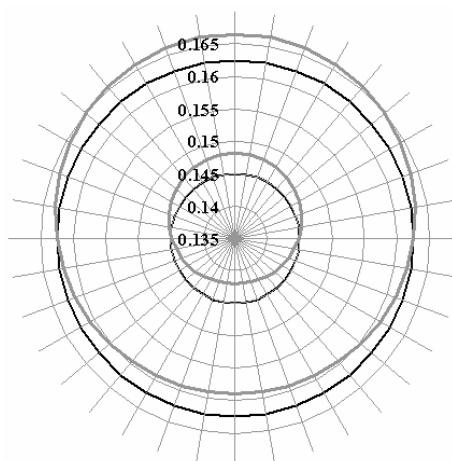


Рисунок 4 - Форма области отражения в диапазоне углов $134^\circ - 138^\circ$ иона Ne с энергией 20 эВ от изначально неподвижного атома Si (черные линии) и от атома Si с энергией 0.03 эВ (серые линии), движущегося перпендикулярно к оси движения иона ($\alpha = 90^\circ$). Потенциал взаимодействия в приближении Мольера

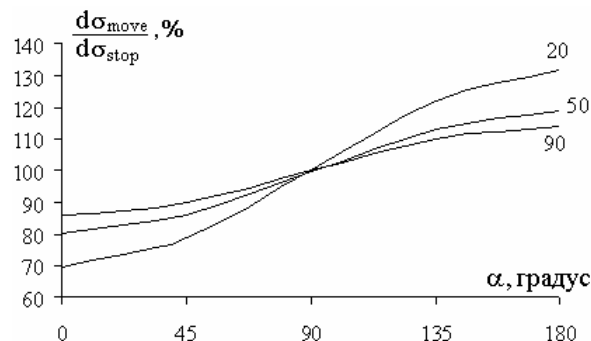


Рисунок 5 - Изменение дифференциального сечения рассеяния относительно сечения неподвижного атома в зависимости от угла движения атома для разных энергий иона (эВ). Энергия атома 0.03 эВ, потенциал взаимодействия в приближении Мольера

Так, для пары Ne-Si максимальные отклонения в энергии пика от теоретической энергии рассеяния на угол 136° в зависимости от энергии иона приведены на рисунке 6.

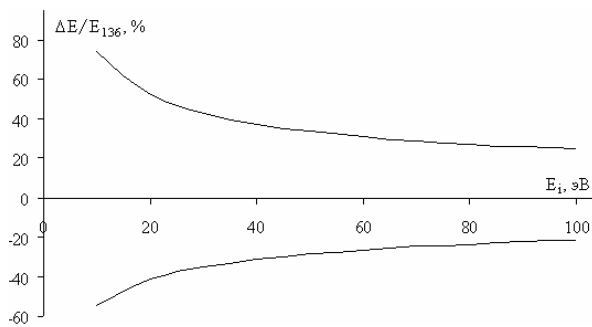


Рисунок 6 - Зависимость изменения энергии рассеяния иона Ne на атоме Si при рассеянии на угол 136° и движении атома соосно односторонне (нижняя) и соосно встречно (верхняя) относительно рассеяния на неподвижном атоме от энергии иона

Рассмотрим различия в конечных энергиях движения иона и атома при рассеянии на неподвижном и движущемся атомах. Так, если запускать ион на расстоянии $f_p = b$, которое соответствует прицельному расстоянию, на котором происходит рассеяние на 136 градусов на неподвижном атоме, то получится, что одностороннее движение приводит к уменьшению угла и энергии рассеяния, в то время как встречное движение – к увеличению (рисунок 7, таблица 1).

Таблица 1 – Результаты рассеяния при одном значении f_p

Вид движения атома	Угол рассеяния, градусы	Угол отдачи, градусы	Энергия рассеяния, эВ	Энергия отдачи, эВ
Неподвижный	136	7	2.07	47.93
Одностороннее	131.83	6.77	1.7	48.33
Встречное	139.42	7.27	2.5	47.53

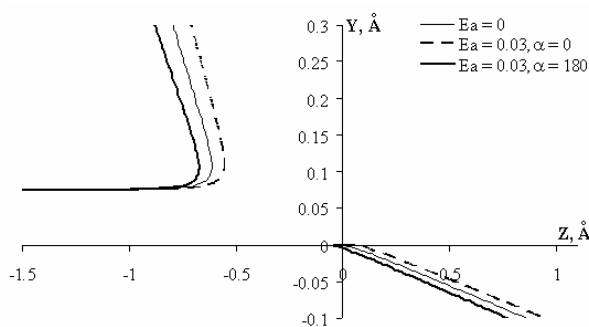


Рисунок 7 - Траектории движения иона Ne и атома Si при движении иона под расстоянием, приводящем к рассеянию на угол 136° на неподвижном атоме. Энергия иона 50 эВ. Потенциал взаимодействия в приближении Бора

Энергия и угол рассеяния и отдачи изменяются аналогичным образом и при рассеянии иона на угол 136° (рисунок 8, таблица 2).

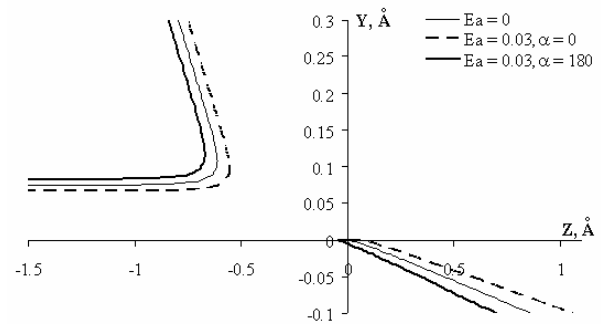


Рисунок 8 - Траектории движения иона Ne и атома Si при рассеянии на угол 136° . Энергия иона 50 эВ. Потенциал взаимодействия в приближении Бора

Таблица 2 – Рассеяние на угол 136°

Вид движения атома	Угол рассеяния, градусы	Угол отдачи, градусы	Энергия рассеяния, эВ	Энергия отдачи, эВ
Неподвижный	136	7	2.07	47.93
Одностороннее	136	6.03	1.54	48.49
Встречное	136	8.02	2.66	47.38

Рассчитав дифференциальное сечение рассеяния для углов α с определенным шагом, получим значения максимальной и минимальной энергии рассеяния иона для данных α .

Форма пика рассеяния определяется суммированием полученных энергетических диапазонов для каждого учтенного угла движения атома α с учетом количественной вероятности движения атома под данным углом (рисунок 9).

Считаем в первом приближении что пик, формируемый ионами, рассеянными от всех атомов, двигающихся под данным углом α , имеет прямоугольную форму, а относительная высота его равна вероятности движения атома под данным углом. В таком случае суммирование таких пиков во всем диапазоне углов α дает общий пик рассеяния на движущемся атоме.

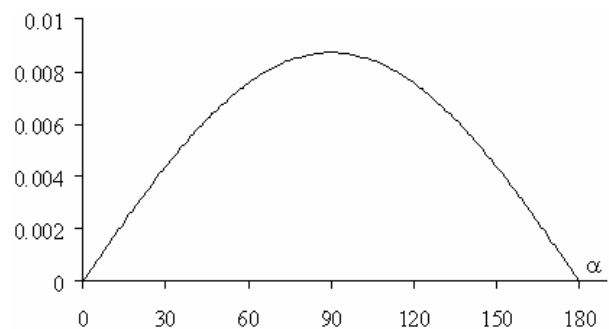


Рисунок 9 - Зависимость вероятности движения свободного атома от угла α

Если за центральное значение считать энергию рассеяния иона на 136° на неподвижном атоме E_{136} , то можно наглядно представить изменение ширины и формы пика рассеяния на движущемся атоме для разных энергий рассеиваемого иона (рисунок 10).

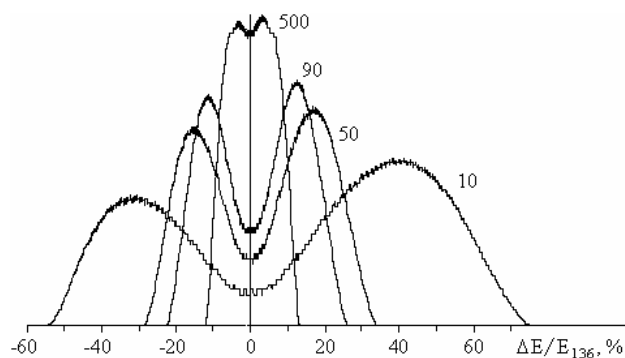


Рисунок 10 - Форма пика рассеяния иона Ne с энергиями 10, 50, 90 и 500 эВ на движущемся атоме Si (энергия 0.03 эВ) в зависимости от разницы энергии пика и энергии рассеяния на неподвижном атоме на угол 136°

Так как рассеяние происходит в диапазоне углов ($136 \pm 2^\circ$), то и при рассеянии на неподвижном атоме пик будет иметь определенную ширину. Сравнение полуширин на полувысоте пиков рассеяния на неподвижном и на движущемся атомах приведено в таблице 3.

Таблица 3 – Полуширина на полувысоте пиков рассеяния пары Ne-Si

Энергия иона, эВ	Рассеяние от неподвижного атома		Рассеяние от движущегося с энергией 0.03 эВ атома	
	ΔE , эВ	$\Delta E/E_{136}$, %	ΔE , эВ	$\Delta E/E_{136}$, %
10	0.016673	4.026	0.216049	52.171
50	0.083363		0.504411	24.361
90	0.150053		0.697217	18.707
500	0.83363		2.002719	9.672

Неожиданной является форма пика. Левая часть соответствует однонаправленному движению частиц, правая – встречному. Правый пик

выше и шире левого. Тем не менее, как и ожидалось, с увеличением энергии иона разница между рассеянием на неподвижном и движущемся атоме становится всё меньше и при значениях энергии иона в несколько тысяч эВ пропадает совсем.

Таким образом, в диапазоне гипертермальных энергий и в приближении свободного атома наличие у атомов тепловых энергий приводит к значительному изменению как формы, так и ширины пика рассеяния.

Закключение. Моделирование рассеяния иона на движущемся с тепловыми скоростями атоме позволило определить влияние теплового движения атомов на форму пика рассеяния в приближении свободного атома для ионов с гипертермальными энергиями в случае регистрирующего цилиндрического зеркального анализатора. В процессе работы были получены следующие результаты.

1. Рассчитаны дифференциальные сечения рассеяния для разных значений энергии иона на движущемся под разными углами к начальному вектору движения иона атоме.

2. Изучено влияние направления движения атома с тепловой энергией на углы и энергии рассеяния иона.

3. В первом приближении получена форма пика рассеяния на движущемся атоме для разных энергий иона.

Существенное изменение формы пика показывает важность учета тепловых колебаний при анализе реальных спектров рассеяния ионов гипертермальных энергий и при моделировании взаимодействия частиц с поверхностью.

Библиографический список

1. Саблин В.А. Взаимодействие частиц, пакет прикладных программ "Эврика" // Электроника. Сборник научных трудов. Рязань, 2005. С. 97-100.