

УДК 539.121.7+621.38

ФИЗИКА

Н. С. БЕСПАЛОВА, Л. Г. ГУРВИЧ

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ВЫХОДА АТОМОВ ИЗ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ КРИСТАЛЛА

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 14 V 1971)

При радиационном распылении в поле ядерных излучений поверхности твердого тела наблюдается выход первичного атома и выбитых им на пути к поверхности атомов, что приводит к эрозии поверхности (¹⁻³).

Для расчета выхода из поверхностных слоев монокристалла первичного атома и смещенных им атомов можно использовать метод моделирования этого процесса на ЭВМ, развитый в (^{4, 5}) для рассмотрения радиационных нарушений. В настоящей работе с целью оценки возможностей использования ЭВМ для решения задач радиационной эрозии поверхностей была рассмотрена модель объемноцентрированной кубической решетки объемом $5 \times 5 \times 4 a^3$, охватывающая 148 атомов, взаимодействие между которыми описывается потенциалом типа Морзе

$$\Phi(r_{ij}) = D[\exp(-2\alpha_0(r_{ij} - r_0)) - 2\exp(-\alpha_0(r_{ij} - r_0))], \quad (1)$$

константы выбраны в соответствии с работой (⁶).

Моделирование выхода атома из поверхностных слоев заключается в решении системы уравнений

$$\begin{aligned} m dv_{ai} / dt &= F_{ai}(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N), \\ da_i / dt &= v_{ai}, \quad a = x, y, z, \quad N = 1, 148, \end{aligned} \quad (2)$$

в которых начальными условиями для координат являются положения узлов атомов моделируемого кристаллита, а также равенство всех скоростей, кроме скорости инцидентного атома, нулю.

Решение системы (2) выполнялось на ЭВМ БЭСМ-2М по методу конечных разностей, для чего система была представлена в виде

$$\begin{aligned} v_{a,i,n+1} &= v_{ai,n} + h[H^0 \exp(-2\alpha' R_{ij}) - H^n \exp(-\alpha' R_{ij})] \frac{\tilde{a}_i - \tilde{a}_j}{R_{ij}}; \\ \tilde{a}_{i,n+1} &= \tilde{a}_{i,n} + h H_0 v_{ai,n+1}, \quad \tilde{a} = \frac{\alpha}{1/2 a}, \\ R_{ij} &= \frac{r}{1/2 a}, \quad H^n = \frac{2\alpha_0 D}{m} \exp(\alpha_0 r_0), \quad H^0 = H^n \exp(\alpha_0 r_0), \quad H_0 = \frac{2\tau_0}{a}, \\ \tau &= \frac{t}{\tau_0}. \end{aligned} \quad (3)$$

Была рассмотрена устойчивость модели. (Здесь под устойчивостью подразумевается, что смещения атомов, возникшие вследствие нескомпенсированных сил на свободных поверхностях, за время, необходимое для осуществления моделируемых процессов, не превысят некоторой наперед заданной величины, например, $0,1 a$.) Результаты интегрирования системы (3) показывают, что за время порядка $(3-4) \cdot 10^{-13}$ сек., при соответствующем потенциале смещения атомов, представляющих интерес для моделирования, не превышают $0,15 a$.

При отсутствии притяжения модель решетки неустойчива и практически каждый атом приобретает энергию не менее 1 эв за время порядка

10^{-13} сек., причем направления разлета атомов симметричны. Смещения атомов, лежащих в центре грани (1), внутри моделируемого объема (2), на ребре (14) и вершине (15) для случая притяжения и при отсутствии притяжения представлены на рис. 1а, где видно, что при наличии притяжения движение атомов носит колебательный характер.

Моделирование выхода атомов производилось, как указано выше, путем решения системы уравнений (3). На рис. 1б представлены смещения

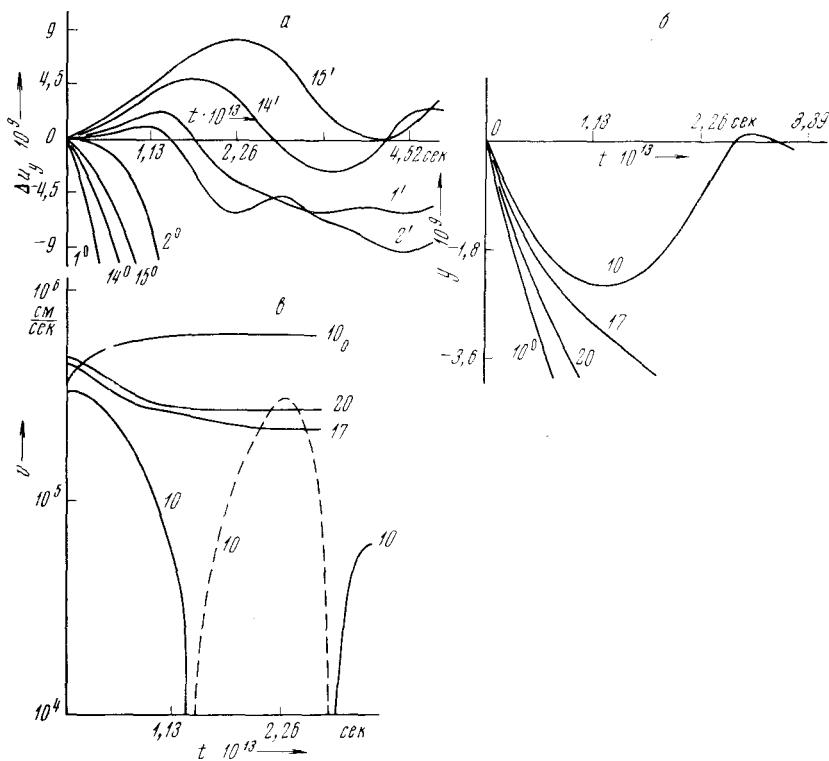


Рис. 1. а — смещения Δu_y из положения равновесия атомов 1, 2, 14, 15 модели для случаев только отталкивания между атомами (индекс 0) и отталкивания и притяжения (индекс '); б — изменение положения поверхностного атома 1 при начальной энергии в 10, 17, 20 эв. Индекс (0) означает отсутствие сил притяжения; в — изменения скорости поверхностного атома 1 для энергий в 10, 17 и 20 эв

1-атома, т. е. атома первого поверхностного слоя, когда он имел первоначальный импульс, соответствующий энергии 10, 17 и 20 эв. Изменения скорости 1-атома для этих же случаев приведены на рис. 1в. При энергиях 17 и 20 эв 1-атом отрывается от моделируемого микрокристалла и уходит, унося энергию 4,5 и 7,5 эв соответственно. При энергии в 10 эв атом не может покинуть поверхность и начинает совершать колебательное движение. Таким образом, энергия связи на поверхности оказывается $\sim 12,5$ эв, что согласуется с величиной энергии сублимации, использованной при вычислении констант потенциала взаимодействия. Для сравнения на рис. 1б и 1в приведены смещения и эволюция скорости 1-атома для энергии 10 эв, когда в потенциале исключено притяжение (кривые 10_0). В этом случае при отрыве от микрокристалла атом не только не теряет, но даже приобретает энергию около 20 эв.

Выход к поверхности и отрыв от нее атомов второго, третьего и более глубоких слоев существенно зависит от энергии и от направления первоначального импульса.

Атомы третьего слоя ($y = 2$) заведомо выходят из поверхности кристалла при энергиях, превосходящих сотни электронвольт.

Для вырывания из слоя $y = 4$ не будет наблюдаться выхода атомов в направлении, совпадающем с направлением от инцидентного атома в сторону ближайших соседей. Если ввести систему углов θ и φ , характеризующих направление скорости относительно оси Y (угол θ) и в плоскости XZ (угол φ), то в этой системе направлению на атом — ближайший сосед соответствуют углы θ и φ , равные 45° . Расчетные данные моделирования указывают, что направления, соответствующие углам $\theta = 30^\circ$ при $\varphi = 60-75^\circ$ и $\varphi = 15-30^\circ$ и $\theta = 45^\circ$ при $\varphi = 60-75^\circ$ и $15-30^\circ$ благоприятны для выхода атомов с энергией $\sim 800-1000$ эв.

Подводя итоги проделанным расчетам, следует отметить резкое возрастание энергии, необходимой для выхода атома из третьего и более глубоких слоев о.ц.к.-решетки (сотни и тысячи электронвольт) по сравнению с энергией, необходимой для выхода поверхностных атомов, которая близка к энергии связи. Выход атомов из глубинных слоев сопровождается в большинстве случаев одновременным выбиванием атомов из поверхностного слоя. При достаточно больших энергиях, но неблагоприятных для выхода направления скорости внутреннего атома его энергия может передаваться поверхностному атому, который легко покидает поверхность. Это означает, что основную массу вышедших атомов составляют атомы первого поверхностного слоя.

Институт ядерной физики
Академии наук УзССР
пос. Улугбек Ташкентской обл.

Поступило
14 IV 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Р. И. Гарбер, В. С. Карасев и др., ЖЭТФ, 57, № 4 (10), 1081 (1969).
² Р. И. Гарбер, В. С. Карасев и др., Атомная энергия, 28, в. 5, 400 (1970).
³ Р. И. Гарбер, В. С. Карасев и др., Атомная энергия, 28, в. 5, 406 (1970).
⁴ Л. Г. Гурвич, Т. В. Курият, У. Яркуллов, Сборн. Действие радиоактивных излучений на вещество, Ташкент, 1970. ⁵ J. B. Gibson, A. W. Golland et al., Phys. Rev., 120, № 4, 1229 (1960). ⁶ L. A. Girifalko, W. G. Weizer, Phys. Rev., 114, № 3, 693 (1959).