

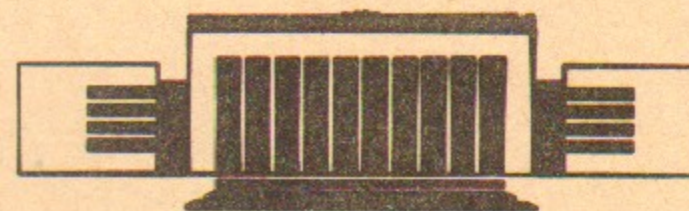


17  
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ  
им. Г.И. Будкера СО РАН

А.С. Куприянов

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРЫХ  
АТОМОВ ВОДОРОДА С СОДЕРЖАЩИМ  
СОРБИРОВАННЫЙ ВОДОРОД МОЛИБДЕНОМ

ИЯФ 92-23



НОВОСИБИРСК



Численное моделирование взаимодействия быстрых атомов водорода с содержащим сорбированный водород молибденом

Куприянов А. С.

Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера  
630090, Новосибирск, Россия

АННОТАЦИЯ

Описана расчётная программа МОДА, позволяющая моделировать взаимодействие легких атомных частиц с твёрдым телом в приближении парных столкновений при энергиях бомбардировки от 50 до 10000 эВ. Ряд свободных параметров модели определялся на основе анализа экспериментальных данных. Представлены результаты расчётов по отражению и распылению водорода при взаимодействии атомов Н энергией 50 - 500 эВ с молибденом, содержащим как адсорбированный, так и внедрённый водород. Расчёты проводились для поликристаллического и аморфного молибдена.

Computer simulation of the interaction of fast hydrogen atoms with a molybdenum containing sorbed hydrogen

A.S. Kupriyanov

Budker Institute of Nuclear Physics  
630090, Novosibirsk, Russia

ABSTRACT

The general principles of computer program MODA have been described allowing Monte Carlo simulation of an atom-solid interaction for incident energies from 50 eV to 10 keV. It is shown that the special selection of some model parameters with an using of experimental data permits satisfactorily to simulate a reflection of primary particles, a sputtering of metal and a desorption of adsorbed layers on surfaces. It is reported calculation data of hydrogen reflection and sputtering at an interaction of hydrogen atoms at initial energies from 50 to 500 eV with polycrystalline and amorphous molybdenum, containing adsorbed and penetrated hydrogen.

© Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера, СО РАН

СОДЕРЖАНИЕ

	стр.
Введение .....	5
§ 1. Модель взаимодействия атомных частиц с твёрдым телом.	
1.1 Столкновение двух частиц .....	6
1.2 Потенциал взаимодействия .....	7
1.3 Неупругие потери энергии .....	8
1.4 Модель мишени. Учёт тепловых колебаний атомов решетки	9
1.5 Моделирование адсорбированных и внедрённых атомов ..	10
1.6 Алгоритм счёта .....	11
1.7 Возможности программы .....	14
§ 2. Расчёт элементарных процессов.	
2.1 Отражение протонов: $H \rightarrow Mo(\text{поли})$ .....	16
2.2 Распыление молибдена: ${}^4He \rightarrow Mo(\text{поли})$ .....	18
2.3 Распыление адсорбата: ${}^4He \rightarrow Mo(011) + H(\text{адс})$ .....	20
§ 3. Моделирование взаимодействия атомов водорода с молибденом, содержащим адсорбированный и внедрённый водород.	
3.1 Моделирование сложных структур мишени .....	22
3.2 Отражение водорода .....	23
3.3 Распыление водорода .....	30
Заключение .....	34
Литература .....	35



## ВВЕДЕНИЕ

Информация о взаимодействии изотопов водорода и гелия с поверхностями твёрдых тел необходима как для расчёта энергобаланса плазмы в термоядерных установках [1], так и для понимания физики процессов в газоразрядных устройствах, в том числе в ионных источниках [2, 3]. В последнее время наряду с данными экспериментов значительный объем сведений о взаимодействии атомных частиц с твёрдым телом при энергиях бомбардировки 50 - 1000 эВ получен с использованием машинного моделирования [4, 5]. Такие известные программы, как MARLOWE [6], TRIM [7] и другие [8, 9], позволяют адекватно моделировать процессы рассеяния первичных ионов, распыления подложки и адсорбированных слоев.

Ниже приведено описание программы, используемой для моделирования процессов распыления атомов из внедрённой фазы, в основу которой положена физическая модель, использованная в хорошо апробированной программе MARLOWE [10]. Программа была разработана для анализа физических процессов при взаимодействии плазмы со сложными мишенями в поверхностно-плазменных источниках [3].

В первой главе данной работы изложены основные физические принципы, положенные в основу модели, описан алгоритм работы программы. Вторая глава посвящена моделированию элементарных процессов и определению свободных параметров модели на базе этих процессов. В третьей главе приведены данные расчёта коэффициентов отражения и распыления для более сложных структур, содержащих адсорбированный и внедрённый водород. Представлены энергетические и угловые спектры уходящих с поверхности потоков атомов водорода. Прослежено влияние состояния поверхности молибдена на характеристики процессов отражения и распыления. Проведено сравнение интегральных и дифференциальных характеристик отражения и распыления для поликристаллического и аморфного молибдена.



1.1. Столкновение двух частиц

В основу модели взаимодействия движущегося атома с твердым телом положено приближение парных столкновений. Это означает, что использованный в расчетах алгоритм построения траекторий атомов основан на двух допущениях: 1) рассматриваются только парные столкновения движущегося атома с атомом мишени; 2) предполагается, что частицы, участвующие в столкновении, начинают и кончат двигаться на большом расстоянии друг от друга, так что можно рассматривать их движение по асимптотам траекторий в лабораторной системе координат (ЛСК).

Столкновение двух частиц рассматривается в рамках классической теории рассеяния. На рис. 1 представлена схема рассеяния при столкновении в ЛСК и приведены используемые далее обозначения.

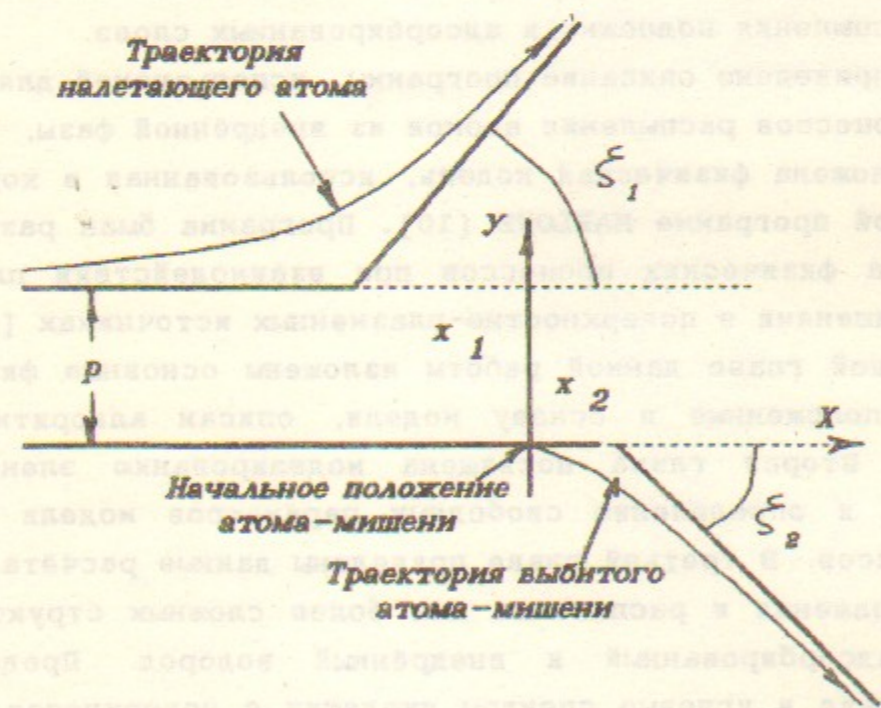


Рис. 1. Схема рассеяния при упругом столкновении налетающего атома с первоначально покоящимся атомом-мишенью.  $p$  - прицельный параметр,  $\xi_1$  - угол рассеяния налетающего атома,  $\xi_2$  - угол вылета выбитого атома-мишени,  $x_1, x_2$  - точки пересечения асимптот с осью X.

При упругом столкновении угол рассеяния в системе центра масс определяется интегралом [11]:

$$\chi = \pi - 2p \int_{R_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \left( 1 - \frac{V(r)}{E_r} - \left( \frac{p}{r} \right)^2 \right)^{1/2}}, \quad (1)$$

где  $r$  - межатомное расстояние,  $V(r)$  - межатомный потенциал,  $R_{\min}$  - расстояние наибольшего сближения сталкивающихся частиц,  $E_r$  - кинетическая энергия частицы с приведенной массой

$$E_r = E(\mu/(1 + \mu)),$$

$E$  - энергия налетающей частицы, а  $\mu$  - отношение массы атома мишени  $m_2$  к массе налетающего атома  $m_1$ .

Передаваемая атому мишени энергия равна

$$E_2 = E_{\max} \sin^2(\chi/2), \quad (2)$$

где  $E_{\max} = 4E \frac{\mu}{(1 + \mu)^2}$  - максимальная переданная энергия в лобовом столкновении.

Связь между углом  $\chi$  и углами  $\xi_1$  и  $\xi_2$  в ЛСК дается выражениями:

$$\operatorname{tg}(\xi_1) = \mu \sin(\chi)/(1 + \mu \cos(\chi)), \quad (3)$$

$$\xi_2 = (\pi - \chi)/2. \quad (4)$$

Координаты точек пересечения асимптот с первоначальным направлением движения налетающей частицы относительно положения частицы-мишени могут быть представлены в следующем виде:

$$x_1 = [2S + (\mu - 1)p \operatorname{tg}(\chi/2)] / (1 + \mu), \quad (5)$$

$$x_2 = p \operatorname{tg}(\chi/2) - x_1, \quad (6)$$

$$S = (R_{\min}^2 - p^2)^{1/2} -$$

$$\int_{R_{\min}}^{\infty} dr \left[ \frac{1}{\left( 1 - \left( \frac{p}{r} \right)^2 - \frac{V(r)}{E_r} \right)^{1/2}} - \frac{1}{\left( 1 - \left( \frac{p}{r} \right)^2 \right)^{1/2}} \right]$$

1.2. Потенциал взаимодействия

Процесс атомного столкновения определяется потенциалом  $V(r)$ . В данной модели использовался экранированный кулоновский потенциал Томаса - Ферми в аппроксимации Мольера [5]:



$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} F(r/a); \quad (7)$$

$$F(x) = 0.35 e^{-0.3x} + 0.55 e^{-1.2x} + 0.1 e^{-6x},$$

где  $a = \frac{0.8853 a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}}$  - радиус экранирования Фирсова [12],

$a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  - борковский радиус, а  $Z_1$  и  $Z_2$  - заряды движущейся частицы и атома - мишени.

### 1.3. Неупругие потери энергии

Часть кинетической энергии налетающей частицы расходуется на возбуждение и ионизацию электронных оболочек сталкивающихся атомов. Для расчёта подобных неупругих потерь энергии для легких атомов (H, He) в элементарном акте столкновения использовалась формула, предложенная Озном и Робинсоном [10]:

$$E_{e1} = \frac{0.045}{\pi N a^2} k_{e1} E^{1/2} e^{-0.3R_{\min}/a}, \quad (8)$$

где  $N$  - плотность атомов решетки,  $k_{e1}$  - коэффициент пропорциональности в выражении  $(\frac{dE}{dx})_{e1} = k_{e1} E^{1/2}$ , хорошо аппроксимирующем скорость неупругих потерь при энергии ионов более 1 кэВ [13]. Обычно в расчётах параметр  $k_{e1}$  представляют в виде  $k_{e1} = C k_{LSS}$  [9], где  $k_{LSS}$  - константа Линдхарда - Шарффа [14]:

$$k_{LSS} = 8 \pi e^2 a_0 Z_1^{1/6} \frac{Z_1 Z_2 N}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \left(\frac{2}{m_1}\right)^{1/2} \frac{1}{v_0}, \quad (9)$$

где  $v_0 = e^2 / \hbar$ .

Формула (9) с хорошей точностью даёт скорость неупругих потерь энергии при  $Z_2 < 10$ , однако она не учитывает  $Z_2$  - осцилляций  $k_{e1}$ , наблюдаемых экспериментально при больших значениях  $Z_2$  [13]. Так теоретическое значение  $k_{LSS}$  для металлов с  $Z_2 > 35$  ниже экспериментального примерно в 2 раза. Для учета такого различия используется корректирующий фактор  $C$ .

Исследование влияния корректирующего фактора на отражение атомов H и He от W показало [9], что согласие между расчётными данными и экспериментальными результатами достигается при  $C = 1.75$  для водорода и при  $C = 2.7$  для гелия. Коэффициенты отражения становятся нечувствительны к  $C$  при  $E < 100 \text{ эВ}$ .

Для расчёта неупругих потерь энергии при столкновении возникающих в каскаде тяжёлых частиц с  $Z_1, Z_2 \gg 1$  использовалась формула Фирсова [15]

$$E_{e1} = \frac{4.8 \cdot 10^{-8} (Z_1 + Z_2)^{5/3} v}{[1 + 3.1 \cdot 10^7 (Z_1 + Z_2)^{1/3} R_{\min}]^5}, \quad (10)$$

где  $v$  - скорость налетающей частицы в см/с,  $R_{\min}$  - в см, а  $E_{e1}$  - в кэВ. Данная формула применима при  $1/4 < Z_1/Z_2 < 4$ .

### 1.4. Модель мишени. Учёт тепловых колебаний атомов решетки

Для описания мишени в программе применена схема, использующая трансляционную симметрию кристалла. В память ЭВМ вводился список положений атомов, определяющих базовый блок кристалла. В состав этого блока входят атомы, являющиеся ближайшими соседями для выделенного атома и расположенные на первых двух координационных сферах. Для ОЦК металлов (Mo, W) число атомов в блоке равно 14. Для ГЦК металлов (Cu, Au, Ag) блок формируется из 12 атомов. Положения атомов решетки в любом месте мишени вычислялись с использованием этого списка и координат движущегося атома.

Для проведения расчётов с поликристаллическими и аморфными твердыми телами в программе использовалась процедура разупорядочения кристаллической структуры мишени. С этой целью с помощью датчика случайных чисел строилась матрица вращений. Комбинированные случайные вращения блока кристалла по трем осям давали в результате мишень, плотность атомов решетки которой сохранялась, но отсутствовали корреляции, связанные с направлением.

Моделирование поликристаллов проводилось в предположении, что размеры кристаллических зерен металла превышают максимальные пробеги бомбардирующих частиц. Поэтому, поликристаллическая мишень задавалась однократным вращением базового блока перед каждым новым пуском пробной частицы. Переход к аморфной структуре осуществлялся путем случайного вращения решетки перед каждым актом столкновения.

Тепловые колебания атомов кристалла могут влиять на динамику процессов рассеяния и распыления [5, 16]. В частности, такие колебания уменьшают эффекты каналирования частиц в монокристаллических и поликристаллических мишенях [6]. Учет тепловых эффектов в программе проводился следующим образом.

Предполагалось, что атомы решетки колеблются независимо



друг от друга и их отклонения от положения равновесия для каждой координаты определяются распределением Гаусса [17]:

$$\rho(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2\sigma^2}\right), \quad (11)$$

где  $\sigma^2$  - дисперсия распределения,  $\Delta x$  - смещение от узла решетки. Дисперсия распределения рассчитывалась в приближении Дебая - Уоллера [18]

$$\sigma^2 = \frac{3h}{m_2 k \theta_D \omega^2} \int_0^\omega \frac{t dt}{e^{-t} - 1}; \quad \omega = \theta_D / T_K, \quad (12)$$

где  $\theta_D$  - температура Дебая кристалла,  $k$  - постоянная Больцмана, а  $T_K$  - температура кристалла. Нулевые колебания атомов при расчетах для  $T_K = 0$  не учитывались.

Так как время развития каскада столкновений ( $10^{-14}$  -  $10^{-13}$  с) меньше периода тепловых колебаний решетки ( $10^{-12}$  с), то в программе предполагалось, что развитие каскада происходит в кристалле с неподвижными, но смещенными из положений равновесия атомами решетки.

#### 1.5. Моделирование адсорбированных и внедренных атомов

При моделировании процессов отражения и распыления от структур, содержащих адсорбированные и внедренные атомы использовались следующие процедуры построения мишени.

В случае адсорбированного слоя принималось, что в приповерхностном слое толщиной  $a_k/2$  атомы кристаллической решетки заменены атомами адсорбата. Сравнение результатов данной модели и модели, в которой строилась реальная структура атомов адсорбата на монокристаллической подложке, показало, что сечения десорбции, рассчитанные на основе модельных коэффициентов десорбции  $S_d$

$$\sigma_d = S_d / N_{surf},$$

где  $N_{surf}$  - поверхностная плотность атомов адсорбата, для обеих моделей совпадают с точностью до 10%.

При моделировании внедренной фазы атомы решетки с некоторой вероятностью  $p$  замещались внедренными частицами. Величина  $p(z)$  определяла относительную концентрацию внедренных атомов по глубине мишени. Подобная модель адекватно описывает наблюдаемые экспериментально структуры при захвате лёгких примесных атомов точечными дефектами вакансионного типа. Междоузельное расположение внедренных примесных атомов не рассматривалось.

Описанные схемы построения сложных мишеней существенно упростили моделирование различных адсорбированных и внедренных слоёв.

#### 1.6. Алгоритм счёта

На рис. 2 приведена блок-схема алгоритма программы МОДА.

Моделирование взаимодействия первичного атома с верхним монослоем (первое столкновение) проводилось следующим образом.

Пробная частица с заданной энергией  $E_0$  направлялась с расстояния  $z = a_k$ , где  $a_k$  - постоянная кристаллической решетки, на участок поверхности кристалла с одним выделенным атомом мишени с координатами  $x = y = z = 0$  (область занимаемая кристаллом  $z \leq 0$ ). Начальные координаты  $x$  и  $y$  первичной частицы задавались датчиком случайных чисел и ограничивались выбранным прицельным параметром столкновения. Форма прицельного участка для монокристалла выбиралась так, чтобы его трансляцией можно было покрыть всю поверхность кристалла. Для поликристалла и аморфной мишени прицельный участок ограничивался условиями  $-0.5 < x/a_k < 0.5$  и  $-0.5 < y/a_k < 0.5$ .

В результате парного столкновения первичная частица теряла часть кинетической энергии и изменяла направление движения (блоки 28, 29, 30, рис. 2). Изменение энергии и вектора скорости частицы производилось в точке пересечения асимптот  $x_1$  (рис. 1). При этом сама частица после столкновения устанавливалась в эту же точку. (Соответственно, расчётная траектория движущейся частицы представляла собой ломаную линию, состоящую из участков асимптот). В элементарном акте столкновения учитывались энергетические потери движущегося атома в результате упругого взаимодействия с атомом мишени и в результате возбуждения электронных оболочек обеих частиц (формулы (2) и (8)).

После пересчёта направления движения и координат частицы вокруг неё строилась матрица базового блока кристалла. Далее по условиям отбора на прицельный параметр и межатомное расстояние выбирался один из атомов базового блока, с которым рассматривалось следующее столкновение (цикл 22 - 27, рис. 2).

Если после серии столкновений в кристалле энергия первичной частицы становилась меньше заданной минимальной энергии движения  $E_{min}$  ( $z < 0$ ), то расчёт движения частицы прекращался и она считалась захваченной мишенью (блоки 31, 32). Расчёт взаимодействия с кристаллом также прекращался, если частица удалялась от поверхности ( $z > 0$ ) на расстояние большее, чем половина постоян-



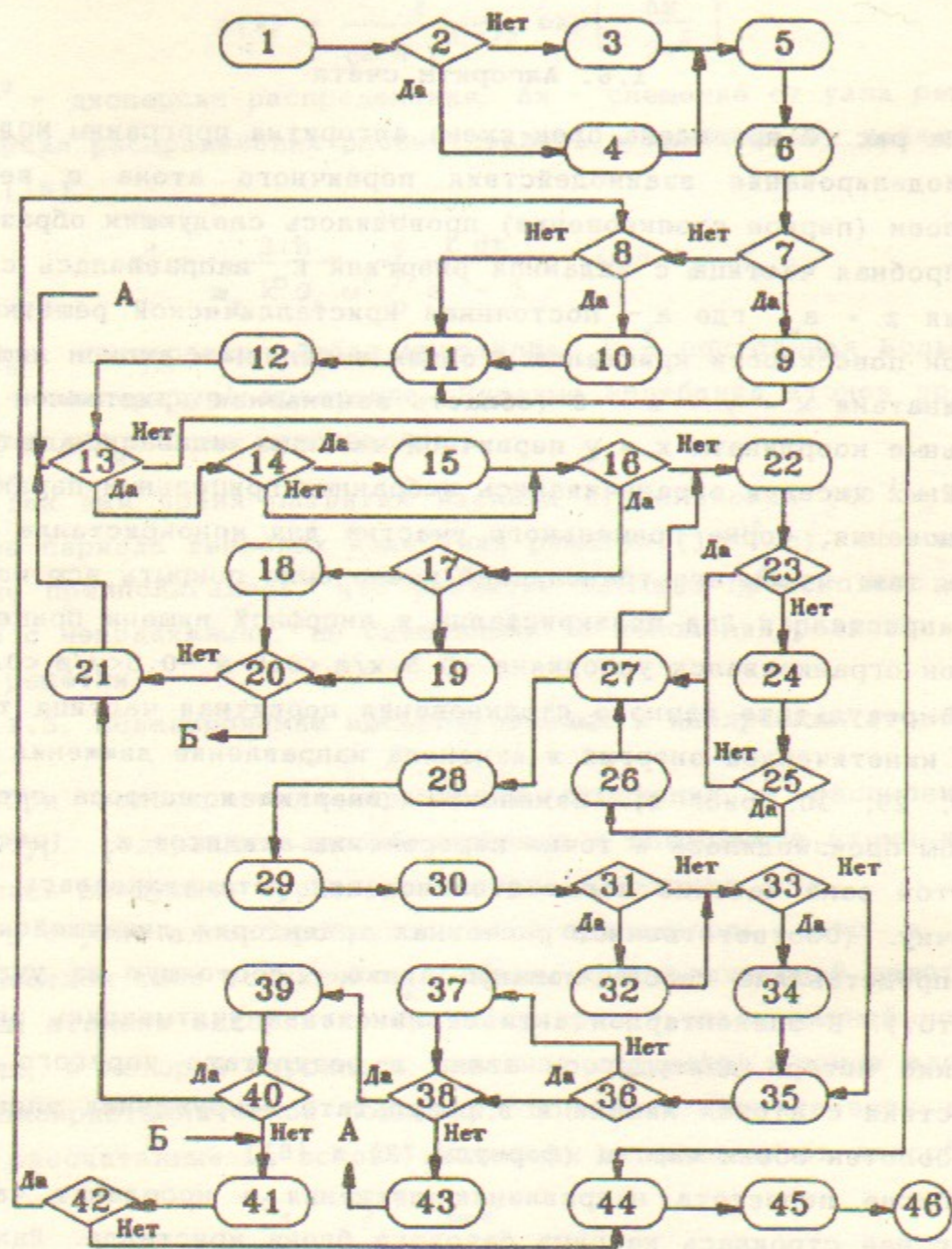


Рис. 2. Схема алгоритма программы МОА: 1 - ввод исходных данных; 2 - читать промежуточные результаты с МЛ?; 3 - подготовка гистограммных массивов; 4 - чтение с МЛ результатов; 5 - расчет тепловой дисперсии при  $T_k > 0$ ; 6 - построение базового блока кристалла, п/п CRYSTL; 7 - мишень - монокристалл; 8 - мишень - поликристалл; 9 - задание ориентации кристалла и размеров прицельной площадки для монокристалла, п/п SRFC; 10, 15 - случайное вращение кристалла; 11 - задание начальных координат пробной частицы,

п/п INCID; 12 -  $i=1$ ,  $NP=1$ , ( $i$  - номер движущейся частицы в мишени,  $NP$  - количество частиц в каскаде); 13 - имеется ли время для продолжения счёта?; 14 - мишень - аморфная структура; 16 - проверка на выход частицы из мишени ( $z_i > a_k/2$ ,  $v_{z,i} > 0$ ); 17 - частица преодолевает поверхностный барьер  $U_s$ ?; 18 -  $v_i = 0$ , частица захвачена кристаллом, запись координат частицы; 19 - пересчёт энергии  $E_1$  и угла выхода  $\alpha$ , запись параметров частицы, п/п EXIT; 20 -  $NP=i$ , просмотрены все частицы из каскада?; 21 -  $i = i + 1$ , запуск очередного вторичного атома из каскада; 22 - расчёт координат  $j$ -го атома-мишени; 23 - проверка на нахождение атома-мишени внутри кристалла,  $z_i < 0$ ; 24 - расчёт прицельного параметра  $\rho_{ij}$  и расстояния между атомами  $s_{ij}$ ; 25 - условия отбора на  $\rho_{ij}$  и  $s_{ij}$ ; 26 - запись координат атома-мишени; 27 - цикл по числу атомов базового блока мишени; 28 - столкновение: расчёт  $\chi$ ,  $R_{min}$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ ; 29 - расчёт  $E_2$  и  $E_{el}$ ; 30 -  $E_1 = E_1 - E_2 - E_{el}$ ,  $E_{NP+1} = E_2 - E_3$ ; 31 - проверка на  $E_{min,i}$ ; 32 - частица остановилась; 33 - проверка на  $E_{min,NP+1}$ ; 34 - атом-мишень остался на месте; 35 - вычисление  $\xi_1$  и  $\xi_2$ ; 36 -  $v_{NP+1} = 0$ ?; 37 - частица  $NP+1$  включена в каскад столкновений; 38 -  $v_i = 0$ ?; 39 -  $i$ -частица остановилась; 40 - проверка на наличие частиц в каскаде; 41 - запуск очередной пробной частицы; 42 - проверка на число пробных частиц; 43 - расчёт новых координат и направления движущейся частицы; 44 - запись результатов счёта на МЛ; 45 - вывод результатов счёта на печать; 46 - останов.



ной решётки (блок 16). Такая частица считалась покинувшей кристалл, если нормальной компоненты скорости  $v_z$  хватало для преодоления плоского потенциального барьера высотой  $U_S$  (блоки 17, 19). В противном случае она считалась отраженной от потенциального барьера и захваченной мишенью (блок 18).

В результате взаимодействия пробной частицы с мишенью также формировался поток вторичных атомов, выбитых из узлов кристаллической решётки. Вторичный атом добавлялся в каскад столкновений (блок 37), если переданная ему энергия превышала энергию связи атома с занимаемым им узлом решётки  $E_B$  (блок 30). Выбитый атом, получивший в столкновении энергию  $E_2$ , начинал двигаться с расстояния  $x_2$  от узла кристаллической решётки (рис. 1) и энергией  $E_2 - E_B$ . Движение вторичного атома прекращалось, если его энергия становилась меньше  $E_{min}$  (блоки 33, 34).

Движение атомов каскада в кристалле рассматривалось после остановки пробной частицы.

После расчёта движения всех вторичных частиц запускалась новая пробная частица. Для каждой начальной энергии  $E_0$  моделировалось движение от 1000 до 50000 первичных частиц.

### 1.7. Возможности программы

Аналогично программе MARLOWE, созданная программа позволяет проводить моделирование следующих процессов, представляющих интерес для физики и технологии плазменно-вакуумных устройств:

- отражение атомов от твердого тела;
- распыление металлов;
- распыление частиц из адсорбированных слоев и из фаз внедрения;
- дефектообразование в кристаллах.

Программа работает с двумя типами кристаллов: ОЦК (Mo, W, Nb и др.) и ГЦК (Cu, Ni, Al и др.).

Для легких бомбардирующих частиц (изотопы водорода, гелий) модель применима в диапазоне энергий от 30 эВ до 10 кэВ.

Верхний предел по энергии первичных частиц вызван изменением характера неупругих потерь энергии при движении атома в веществе [13]. В частности, при  $E > 10$  кэВ необходимо учитывать вклад в  $E_{e1}$  электронных потерь, описываемых формулой Бете [13]. Кроме того, данная программа становится малоэффективной по времени счёта из-за большой длины пробега пробных первичных частиц.

Для уменьшения затрат машинного времени более эффективно использовать приближение малоуглового рассеяния и газовую модель твердого тела, как в [7].

Нижний предел энергии бомбардирующих частиц обусловлен применимостью модели парных столкновений [7, 10, 19]. При малых энергиях (20 - 30 эВ) необходимо учитывать взаимодействие частицы сразу с несколькими атомами кристалла [19], так как рассеяние на угол  $\theta \sim 1$  осуществляется при прицельных параметрах  $\rho \sim 0.3 - 0.4 a_k$ . При движении атома внутри кристалла с энергией  $< 5$  эВ во всех парных столкновениях он должен испытывать рассеяние на угол  $\theta \sim 1$  и поэтому использование ППС также становится некорректным [20]. Кроме того, анализ движения протона в кристалле Mo показал, что при уменьшении его кинетической энергии с 5 до 1 эВ он удаляется на среднее расстояние  $2 \text{ \AA} (0.6 a_{Mo})$  от некоторой стартовой точки. Максимальный проективный пробег протона от стартовой точки не превышал постоянной решётки  $a_{Mo}$  (3.147 \text{ \AA}). Таким образом, частица оказывалась запертой в элементарной решётке кристалла. Поэтому, величина  $E = 5$  эВ была принята за минимальную энергию движения  $E_{min}$  (при которой происходит остановка частицы внутри твердого тела). Аналогичные значения  $E_{min} = 2-10$  эВ были использованы в программах MARLOWE [19], TRIM [7] и др. [8].

Для тяжёлых частиц нижний предел по энергии ограничен 10 эВ при движении внутри кристалла [16].

### § 2. РАСЧЁТ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Модель взаимодействия атомных частиц с веществом содержит ряд параметров, значения которых определяют сравнением данных расчёта с экспериментом. Например, при расчёте взаимодействия водорода со сложной структурой  $Mo + H(\text{адс.}) + H(\text{внедр.})$ , представляющей интерес для физики поверхностно-плазменных источников, требуется определить 6 параметров:  $C(H-Mo)$ ,  $U_S(Mo)$ ,  $E_B(Mo)$ ,  $U_S(H[\text{адс.]})$ ,  $E_B(H[\text{адс.]})$ ,  $U_S(H[\text{внедр.]})$ ,  $E_B(H[\text{внедр.]})$ . В настоящей главе приведены данные расчётов процессов отражения и распыления для простейших структур, на основе которых и были определены большинство свободных параметров модели.

Фиксированные параметры модели, использованные в этих и последующих расчётах, представлены в табл. 1.



Таблица 1. Фиксированные параметры модели

Постоянная решётки $a_{Mo}$	3.147 Å	[21]
Температура Дебая $\theta_D$	375 К	[21]
Температура кристалла	300 К	
Минимальная кинетическая энергия движения частицы $E_{min}$	5 эВ	
Максимальный параметр столкновения $P_{max}$	2.23 Å	

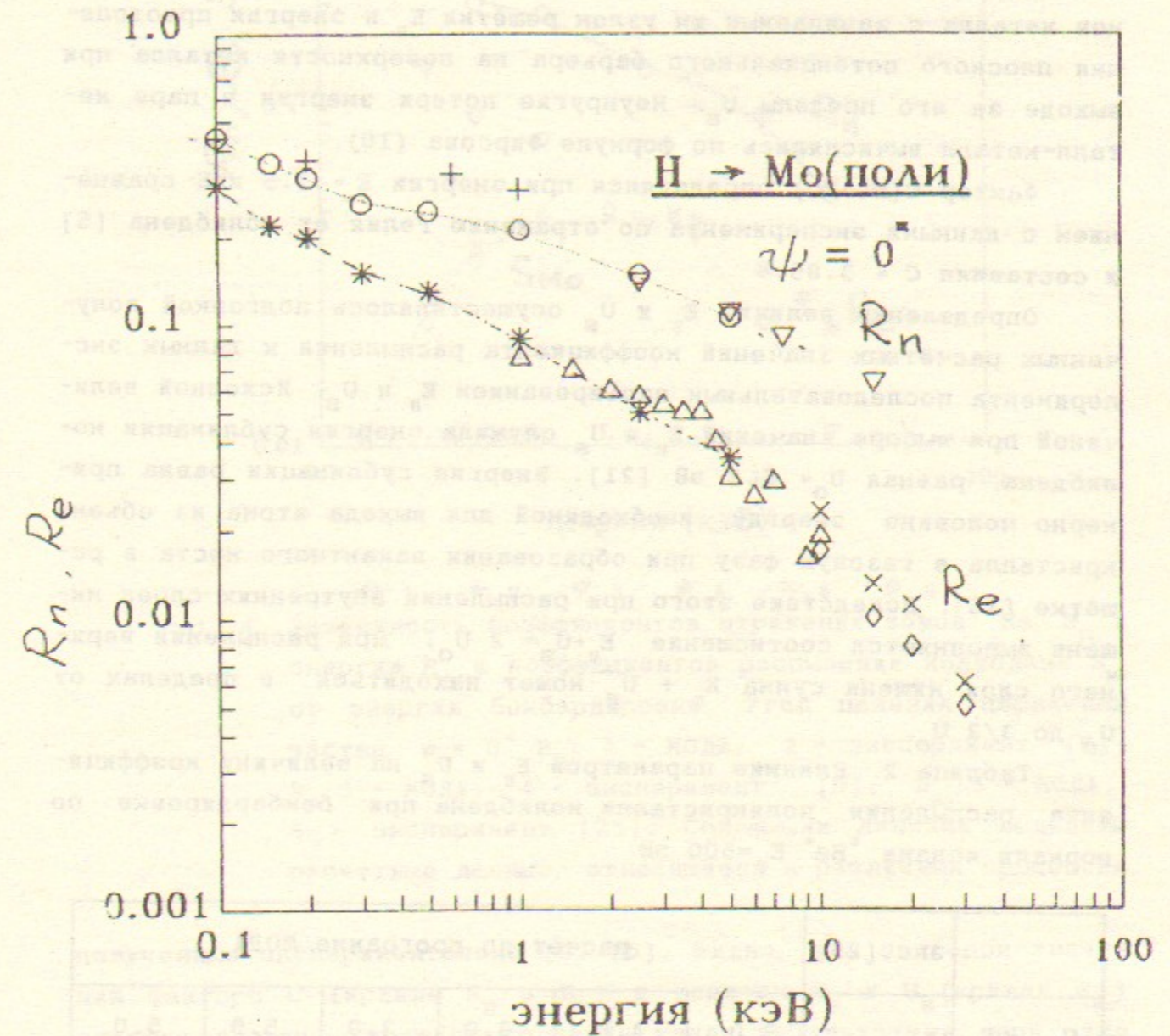
2.1. Отражение протонов:  $H \rightarrow Mo(\text{поли})$

Значение корректирующего фактора для расчёта потерь энергии в элементарном акте столкновения  $H - Mo$  было выбрано при анализе процесса  $H \rightarrow Mo$ . Для ускорения счёта движение вторичных частиц в мишени не рассматривалось.

На рис. 3 представлены зависимости коэффициентов отражения частиц  $R_n$  и энергии  $R_e$  от энергии падающих протонов, рассчитанные по данной программе. Для сравнения приведены данные расчётов по программе MARLOWE [22] и данные экспериментов для Nb и Mo [5, 23, 24].

Величина  $C(H-Mo)$  определялась сравнением расчётных и экспериментальных [5] значений величины  $R_n$  при энергии протонов 2.5 кэВ. Соответствие между ними было достигнуто при  $C = 2.5$ . Как видно из рис. 3 расчёты с этим значением корректирующего фактора дают совпадение в пределах 20% с экспериментом как для величины  $R_n$ , так и для  $R_e$ , при энергиях бомбардировки 1 - 5 кэВ. В диапазоне энергий 200 - 1000 эВ коэффициент отражения, полученный по программе МОДА, примерно на 30% меньше данных программы MARLOWE [22]. По-видимому, это вызвано разным выбором величины корректирующего фактора в неупругих потерях энергии. К сожалению, в работе [22] не указана его величина. При  $E < 200$  эВ наблюдается хорошее согласие между результатами счёта по различным программам, так как при этих энергиях  $R_n$  становится мало чувствителен к величине  $C$ , что уже отмечалось ранее в §1.

При расчёте отражения протонов от поликристаллического молибдена при энергии 100 эВ на 1000 частиц расходовалось около 20 минут машинного времени ЭВМ ЕС-1061. Время счёта возрастало примерно пропорционально энергии первичных частиц.



○	1	+	2	▽	3	*	4
×	5	◇	6	△	7		

Рис. 3. Зависимость коэффициентов отражения атомов водорода  $R_n$  и энергии  $R_e$  от Mo (1,2,3,4,5) и Nb (6,7) от энергии бомбардировки. Угол падения первичных частиц  $\psi = 0^\circ$ .  $R_n$ : 1 - МОДА; 2 - MARLOWE [22]; 3 - эксперимент [5];  $R_e$ : 4 - МОДА; 5, 6 - эксперимент [24]; 7 - эксперимент [23].



## 2.2. Распыление молибдена: ${}^4\text{He} \rightarrow \text{Mo}(\text{поли})$

При моделировании распыления, кроме определения корректирующего фактора в неупругих потерях энергии для пары  ${}^4\text{He} - \text{Mo}$ , необходимо знание величин еще двух параметров: энергии связи атомов металла с занимаемым им узлом решётки  $E_B$  и энергии преодоления плоского потенциального барьера на поверхности металла при выходе за его пределы  $U_S$ . Неупругие потери энергии в паре металл-металл вычислялись по формуле Фирсова (10).

Фактор  $C(\text{He-Mo})$  определялся при энергии  $E_0 = 2.5$  кэВ сравнением с данными эксперимента по отражению гелия от молибдена [5] и составлял  $C = 3.85$ .

Определение величин  $E_B$  и  $U_S$  осуществлялось подгонкой полученных расчётных значений коэффициента распыления к данным эксперимента последовательным варьированием  $E_B$  и  $U_S$ . Исходной величиной при выборе значений  $E_B$  и  $U_S$  служила энергия сублимации молибдена, равная  $U_0 = 6.8$  эВ [21]. Энергия сублимации равна примерно половине энергии, необходимой для выхода атома из объема кристалла в газовую фазу при образовании вакантного места в решётке [16]. Вследствие этого при распылении внутренних слоев мишени выполняется соотношение  $E_B + U_S = 2 U_0$ . При распылении верхнего слоя мишени сумма  $E_B + U_S$  может находиться в пределах от  $U_0$  до  $3/2 U_0$ .

Таблица 2. Влияние параметров  $E_B$  и  $U_S$  на величину коэффициента распыления поликристалла молибдена при бомбардировке по нормали ионами  ${}^4\text{He}^+$ .  $E_0 = 500$  эВ

	экс. [25]	расчёт по программе МОДА					
$U_S$ , эВ		5.0	4.0	3.0	2.0	5.0	5.0
$E_B$ , эВ		1.8	2.8	3.8	4.8	4.0	5.0
$S_{\text{Mo}}$	0.035	0.078	0.067	0.07	0.08	0.04	0.035

Влияние параметров  $U_S$  и  $E_B$  на величину  $S_{\text{Mo}}$  представлены в табл. 2. Как видно из таблицы, суммарная энергия выхода  $E_B + U_S$ , при которой данные расчёта совпадают с данными эксперимента, равна 10 эВ и близка к величине  $3/2 U_0$ .

На рис. 4 представлены зависимости коэффициентов отражения атомов  ${}^4\text{He}$   $R_{\text{He}}$  и коэффициентов распыления молибдена  $S_{\text{Mo}}$  от энергии бомбардировки ионов  ${}^4\text{He}^+$ , рассчитанные по данной программе и

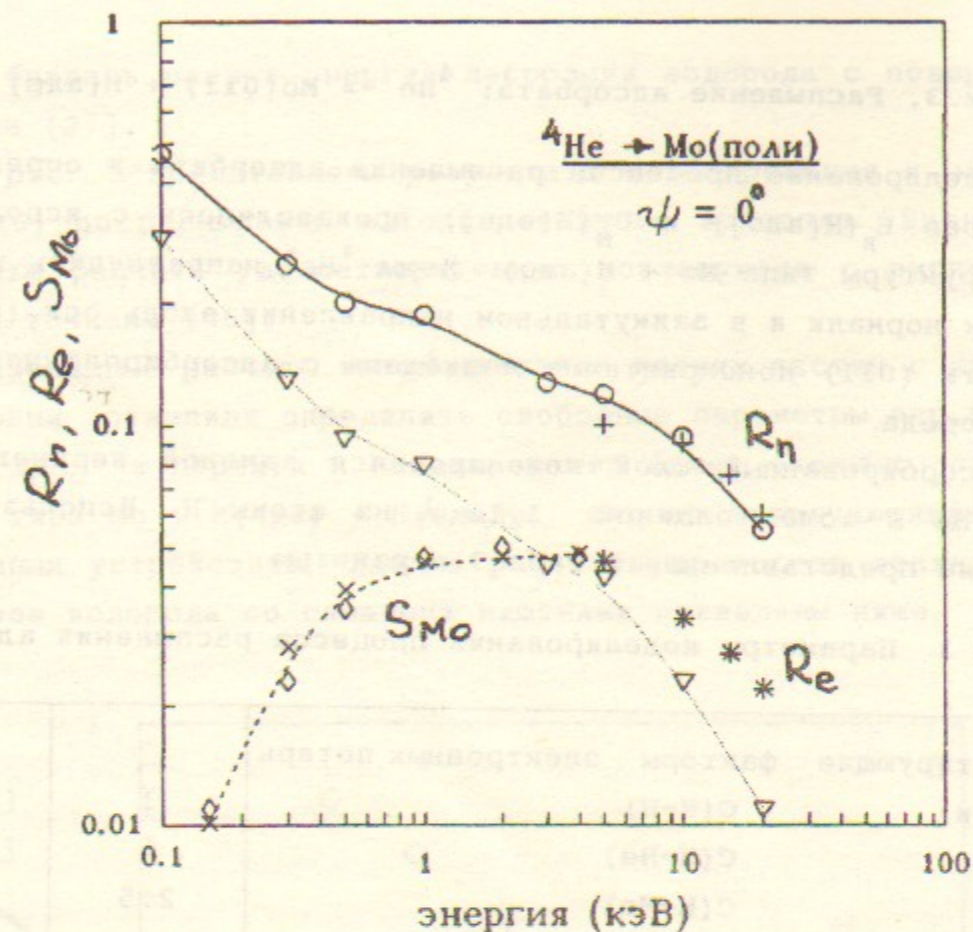


Рис. 4. Зависимость коэффициентов отражения ионов  ${}^4\text{He}^+$   $R_n$  и энергии  $R_e$  и коэффициентов распыления молибдена  $S_{\text{Mo}}$  от энергии бомбардировки. Угол падения первичных частиц  $\psi = 0^\circ$ .  $R_n$ : 1 - МОДА; 2 - эксперимент [5];  $R_e$ : 3 - МОДА; 4 - эксперимент [5];  $S_{\text{Mo}}$ : 5 - МОДА; 6 - эксперимент [25]. Сплошными линиями выделены расчётные данные, относящиеся к различным процессам.

полученные экспериментально [5, 25]. Видно, что подбором значений фактора  $C$  (кривые  $R_n$  и  $R_e$ ) и величин  $E_B$  и  $U_S$  (кривая  $S_{\text{Mo}}$ ) удается достичь хорошего согласия между результатами, при этом различие между экспериментом и расчётом не превышает 25% для любой точки сравнения при энергиях бомбардировки до 10 кэВ.

Отметим следующий факт, косвенно подтверждающий правильность выбора величины  $C$ . Определенные по программе МОДА корректирующие факторы для отражения  $\text{H}$  и  ${}^4\text{He}$  от молибдена различаются было получено Джексоном и Экштейном [9] для процессов отражения  $\text{H} \rightarrow \text{W}$  и  ${}^4\text{He} \rightarrow \text{W}$   $C(\text{He-W})/C(\text{H-W}) = 1.54$ .



### 2.3. Распыление адсорбата: ${}^4\text{He} \rightarrow \text{Mo}(011) + \text{H}(\text{адс})$

Моделирование процессов распыления адсорбата и определение параметров  $E_B(\text{H}[\text{адс}])$  и  $U_S(\text{H}[\text{адс}])$  производилось с использованием структуры типа  $\text{Mo} + \text{H}(\text{адс})$ . Ионы  ${}^4\text{He}^+$  направлялись под углом  $45^\circ$  к нормали и в азимутальном направлении вдоль оси  $(001)$  на плоскость  $(011)$  монокристалла молибдена с адсорбированной пленкой водорода.

Адсорбированный слой моделировался заменой верхнего слоя атомов  $\text{Mo}$  в зоне толщиной  $1.11 \text{ \AA}$  на атомы  $\text{H}$ . Использовались следующие представленные в табл. 3 параметры.

Таблица 3. Параметры моделирования процесса распыления адсорбата

Корректирующие факторы электронных потерь энергии:	$\text{C}(\text{H}-\text{H})$	1	[13]
	$\text{C}(\text{H}-\text{He})$	1	[13]
	$\text{C}(\text{H}-\text{Mo})$	2.5	
	$\text{C}(\text{He}-\text{Mo})$	3.85	
	$\text{C}(\text{Mo}-\text{Mo})$	1	
Энергия смещения атома $\text{Mo}$ $E_B(\text{Mo})$		5 эВ	
Поверхностная энергия выхода $U_S(\text{Mo})$		5 эВ	
$E_B(\text{H}) + U_S(\text{H})$		0.7 эВ	
Энергия остановки атома водорода $E_{\text{min}}$		0.7 эВ	

На основе расчётных значений коэффициентов распыления водорода  $S_H$  вычислялось сечение десорбции  $\sigma_H = S_H/n_H$  (для  $n_H = N_{\text{Mo}(011)} = 1.4 \cdot 10^{15} \text{ ат/см}^2$ ). Параметры  $U_S(\text{H}[\text{адс}]) = 0.3 \text{ эВ}$  и  $E_B(\text{H}[\text{адс}]) = 0.4 \text{ эВ}$  были определены для энергии первичных ионов  $E_0 = 300 \text{ эВ}$  при сравнении расчётных и экспериментальных данных.

Большинство ( $>80\%$ ) десорбированных частиц с энергией  $< 5 \text{ эВ}$  при  $E_0 = 300 \text{ эВ}$  выбиваются атомами  $\text{He}$  в прямом ударе или на их обратном пути при выходе из мишени (при отражении) [28]. При этом около  $80\%$  десорбированных атомов водорода не проникают внутрь кристалла, отражаясь от его поверхности. Для учёта вклада этих частиц в уходящий с поверхности десорбционный поток энергия остановки атомов водорода  $E_{\text{min}}$  была понижена до уровня суммарной энергии выхода адсорбированного водородного атома. Сама величина

$E_B + U_S$  бралась равной энергии десорбции водорода с поверхности молибдена [27].

На рис. 5 представлены результаты моделирования и эксперимента [26] по распылению адсорбированного водорода. Видно, что результаты расчёта удовлетворительно согласуются с экспериментальными точками [26].

Приведенные расчёты взаимодействия легких частиц с простыми структурами позволили определить свободные параметры пар  $\text{H} - \text{Mo}$ ,  $\text{Mo}-\text{Mo}$  и др., и перейти к моделированию более сложных структур мишеней типа  $\text{Mo} + \text{H}(\text{адс}) + \text{H}(\text{внедр})$ , широко встречающихся в газоразрядных устройствах. Данные расчётов процессов взаимодействия атомов водорода со сложными мишенями приведены ниже.

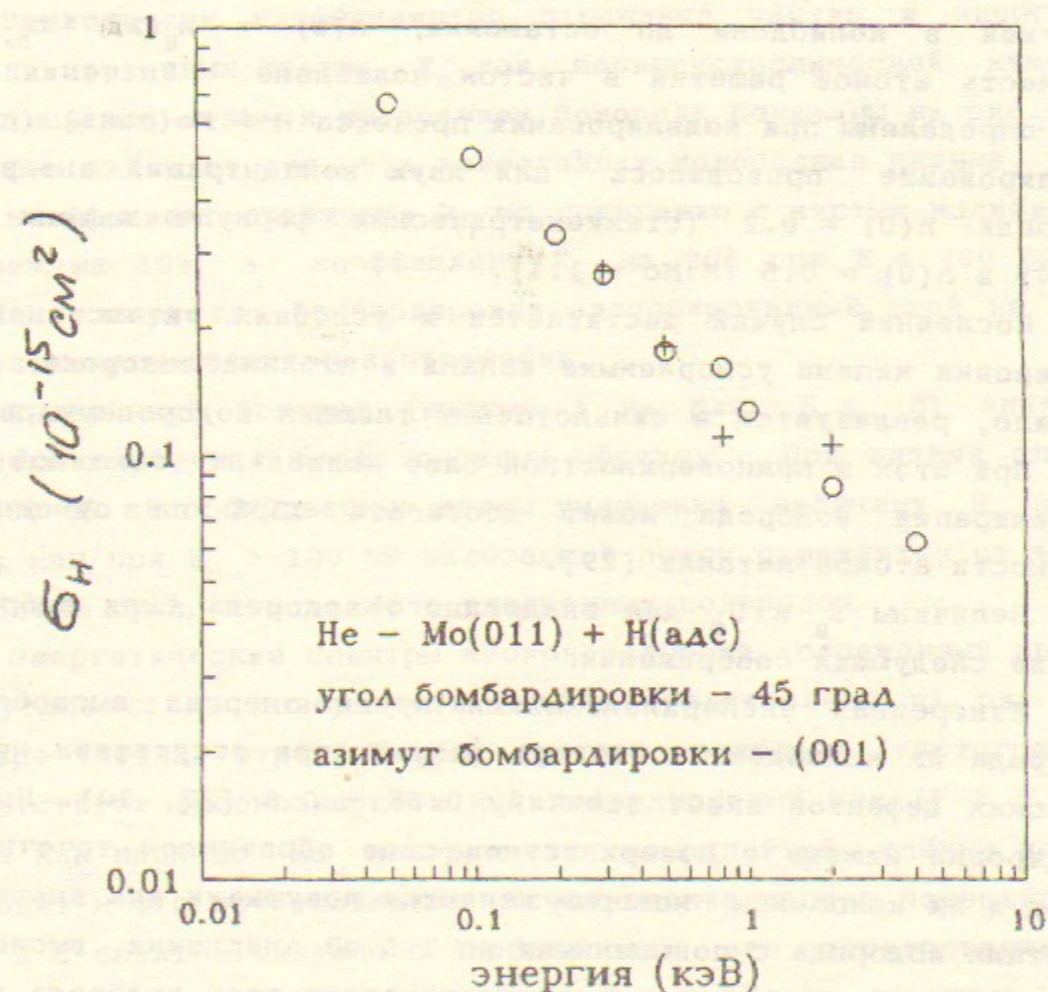


Рис. 5. Зависимость сечения распыления адсорбированного водорода  $\sigma$  с поверхности  $\text{Mo}(011)$  при бомбардировке ионами  ${}^4\text{He}^+$  под углом  $\psi = 45^\circ$  в направлении оси  $[001]$  от энергии бомбардировки  $E_0$ .  $\circ$  - МОДА;  $+$  - эксперимент [26].



### § 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С МОЛИБДЕНОМ, СОДЕРЖАЩИМ АДСОРБИРОВАННЫЙ И ВНЕДРЕННЫЙ ВОДОРОД

#### 3.1. Моделирование сложных структур

Как и в §2 адсорбированный слой водорода моделировался заменой атомов молибдена в приповерхностном слое толщиной  $\delta = 1.57 \text{ \AA}$  на атомы водорода. Это соответствовало усредненной поверхностной плотности водорода  $\bar{n}_H \approx 10^{15} \text{ см}^{-2}$  и было эквивалентно монослойному водородному покрытию  $\theta_H \approx 1$ .

Профиль внедренного водорода по глубине описывался распределением Гаусса [29]:

$$n(z) = n(0) \exp\left(-\frac{z^2}{2 R_p^2}\right), \quad (13)$$

где  $R_p$  - средний проективный пробег атомов водорода с заданной энергией в молибдене до остановки,  $n(z) = n_H(z)/n_{Mo}$ ,  $n_{Mo}$  - плотность атомов решетки в чистом молибдене. Значения  $R_p(E_0)$  были определены при моделировании процесса  $H \rightarrow Mo(\text{поли})$  (п. 2.1). Моделирование проводилось для двух концентраций внедренного водорода:  $n(0) = 0.2$  (стехиометрическая формула мишени  $H:Mo = 1:4$ ) и  $n(0) = 0.5$  ( $H:Mo = 1:1$ ).

Последний случай достигается в условиях интенсивной бомбардировки мишени ускоряемыми ионами и атомами водорода, и, как правило, реализуется в сильноточных тлеющих водородных разрядах [3]. При этом в приповерхностном слое молибдена толщиной  $\sim 2 R_p$  концентрация водорода может достигать 150% по отношению к плотности атомов металла [29].

Величины  $E_B$  и  $U_S$  для внедренного водорода были выбраны на основе следующих соображений.

Измеренная экспериментальным путем энергия высвобождения водорода из молибдена в газовую фазу  $E_d$  при отсутствии кристаллических дефектов имеет величину  $0.65 - 0.8$  [27, 30]. При бомбардировке мишени в поверхностном слое образуются точечные дефекты и их комплексы, которые являются ловушками для внедренного в металл водорода с повышенными до 1.5 эВ энергиями высвобождения [30]. В частности, комплекс вакансия-атом водорода (VH) в молибдене имеет энергию высвобождения  $E_d = 1.2$  эВ [27]. Для того, чтобы не детализировать статус конкретного внедренного атома H была использована "средняя" энергия высвобождения  $E_d = U_S + E_B = 1.0$  эВ. По аналогии с п. 2.2 и 2.3 параметры  $U_S$  и  $E_B$  полагались равными  $1/2 E_d = 0.5$  эВ.

Остальные параметры модели были взяты из результатов счёта, изложенных в §2, и приведены в таблицах 1 и 3.

Ниже представлены результаты моделирования взаимодействия атомов водорода с энергиями в диапазоне от 50 до 500 эВ, падающих по нормали к поверхности мишеней со следующими структурами:

- а)  $Mo(\text{поли}) + H(\text{адс})$ ;
- б)  $Mo(\text{поли}) + H(\text{внедр, } 20\%)$ ;
- в)  $Mo(\text{аморф}) + H(\text{адс})$ ;
- г)  $Mo(\text{аморф}) + H(\text{внедр, } 20\%)$ ;
- д)  $Mo(\text{аморф}) + H(\text{внедр, } 50\%)$ .

#### 3.2. Отражение водорода

Поликристаллическая мишень ( $T_K = 300 \text{ K}$ ).

Зависимости коэффициентов отражения частиц и энергии от энергии первичных частиц  $E_0$  для поликристаллической мишени с различным покрытием и внедрением водорода показаны на рис. 6, а и 6, б. Как видно из рис. 6, а монослойная водородная пленка уменьшает коэффициент отражения  $R_n$  по сравнению с чистым молибденом в среднем на 10%, а коэффициент  $R_e$  на 20% при  $E_0 \leq 200$  эВ. При больших энергиях бомбардировки адсорбированный слой не влияет на величину коэффициента отражения.

Внедренный водород (кривые 3 на рис. 6, а, б) влияет на процессы отражения более сложным образом. При низких энергиях  $E_0 \leq 100$  эВ абсорбированные атомы уменьшают величину  $R_n$  на 10%, тогда как при  $E_0 > 100$  эВ налетающий поток отражается от чистого молибдена хуже, чем от  $Mo$  с внедренным водородом.

Энергетические спектры атомов водорода, отраженных при разных условиях на поверхности мишени представлены на рис. 7. В спектре частиц, отраженных от чистого молибдена (гистограмма 1) присутствует высокоэнергетичный поверхностный пик ( $E \approx 0.9 E_0$ ), тогда как наличие на поверхности монослойной пленки водорода приводит к его исчезновению. Исчезновение частиц поверхностного пика в E-спектре связано с особенностью его формирования. Поверхностный пик образуется из отраженных частиц, которые испытали 1-2-кратное рассеяние на поверхностных атомах мишени. Упругие потери энергии этих частиц равны примерно  $2-4 E_0 m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2$ . Если для чистого молибдена их величина не превышает 5 эВ при  $E_0 = 100$  эВ, то поверхностная водородная пленка значительно увеличивает эти потери. Внедренные атомы уменьшают высоту куполообразного распределения и сдвигают его максимум в область более



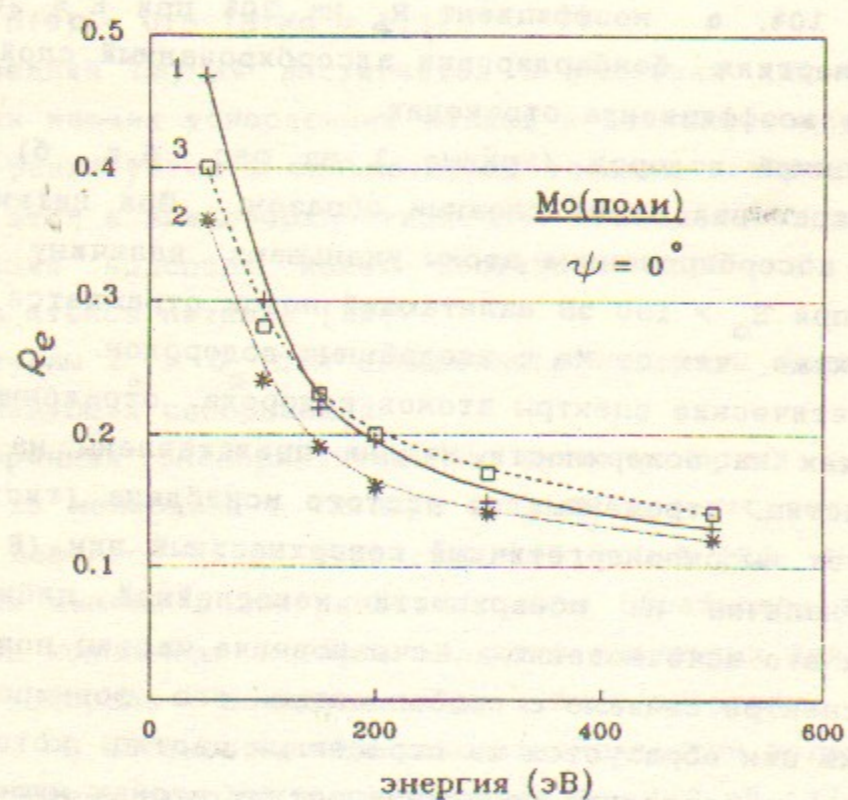
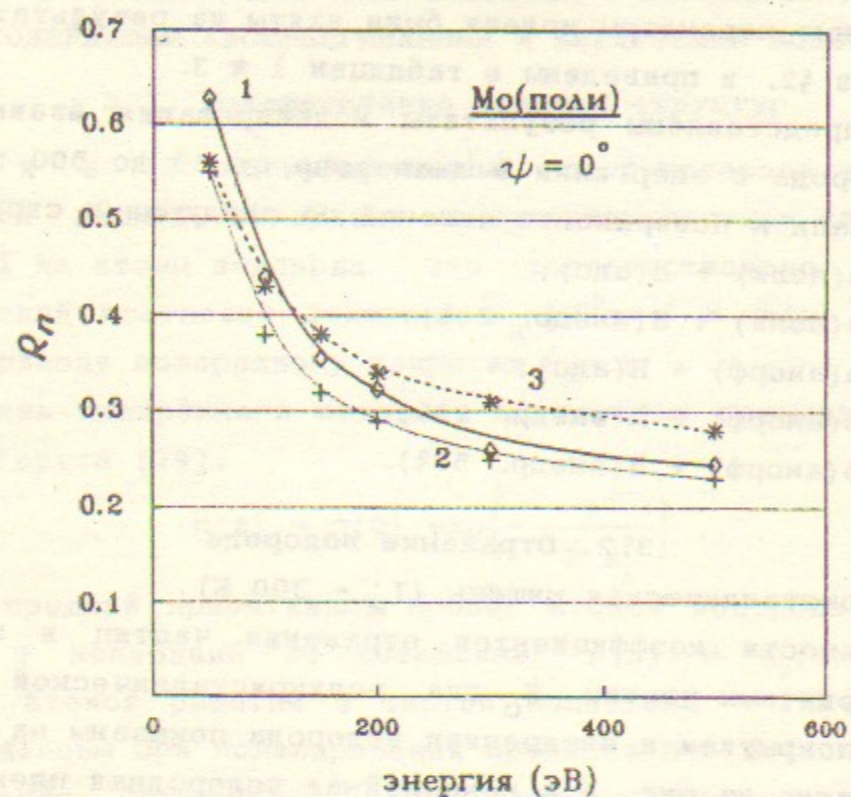


Рис. 6. Зависимость коэффициентов отражения частиц  $R_n$  (а) и энергии  $R_e$  (б) от энергии атомов водорода  $E_0$  при взаимодействии с поликристаллическими мишенями: 1 - Мо; 2 - Мо + Н(адс); 3 - Мо + Н(внедр, 20%). Угол падения  $\psi = 0^\circ$ .

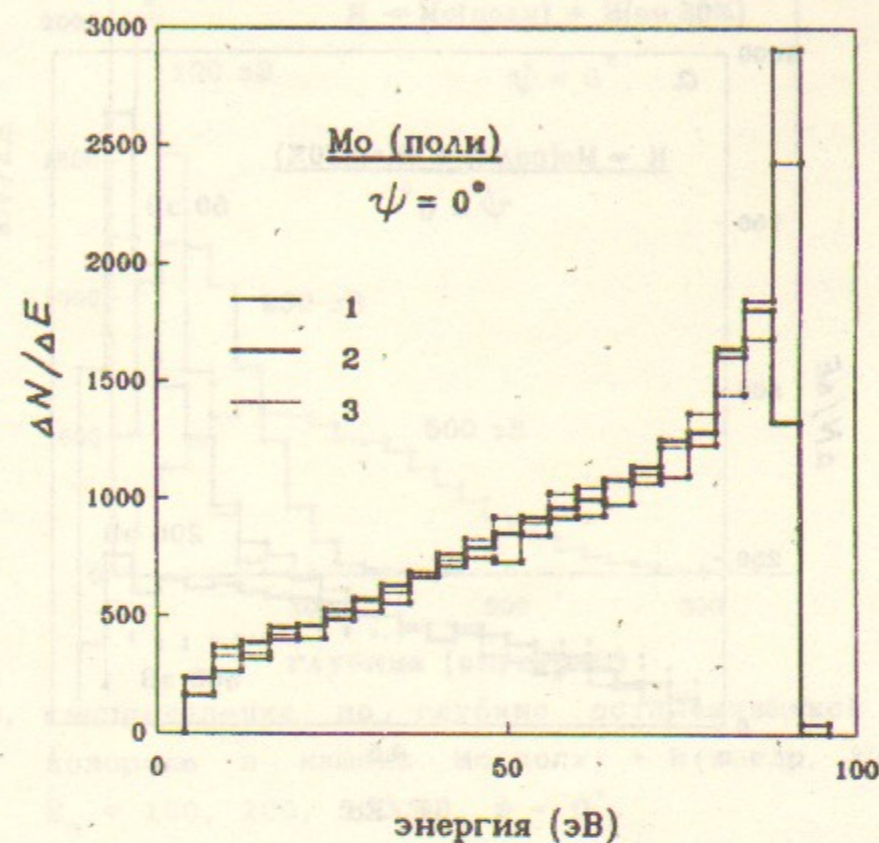


Рис. 7. Энергетические спектры атомов водорода, отраженных от поликристаллических мишеней: 1 - Мо; 2 - Мо + Н(адс); 3 - Мо + Н(внедр, 20%).  $E_0 = 100$  эВ. Угол падения  $\psi = 0^\circ$ .

низких энергий, что вызвано более эффективной передачей энергии в столкновениях водород-водород. В этом случае в спектре так же наблюдается поверхностный пик.

Влияние энергии бомбардировки на энергетические и угловые спектры атомов, отраженных от содержащего внедренный водород молибдена, показано на рис. 8, а, б. Увеличение энергии первичных частиц приводит к снижению поверхностного пика и уширению энергетического спектра отраженных частиц. Угловые спектры отраженных атомов при всех энергиях бомбардировки близки к косинусоидальному распределению (рис. 8, б) и практически не зависят от условий на поверхности мишени.

На рис. 9 представлены расчетные распределения остановившихся атомов водорода по глубине в процессе взаимодействия протонов с мишенью Мо(поли) + Н(внедр, 20%). Как видно из рис. 9, максимум распределения остановившихся частиц смещается вглубь мишени пропорционально росту энергии бомбардировки. Рис. 10 пока-



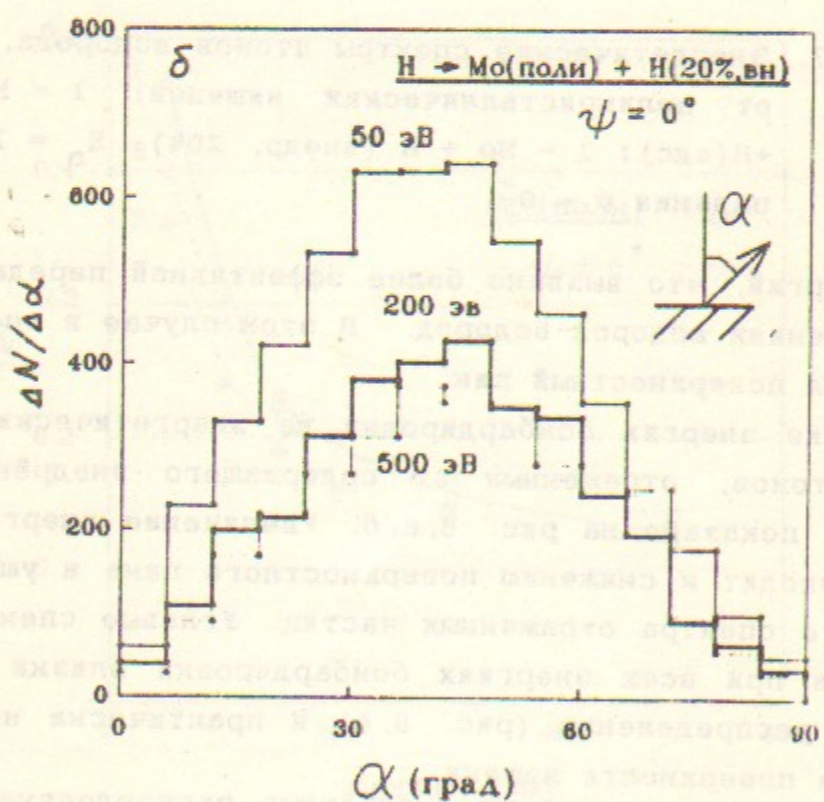
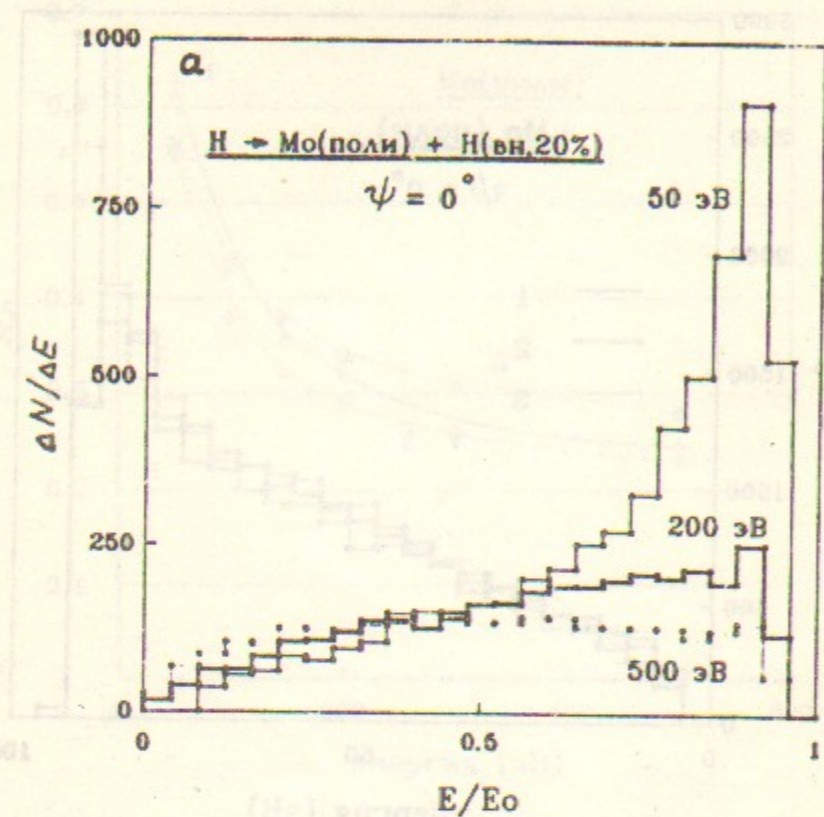


Рис. 8. Энергетические (а) и угловые (б) спектры атомов водорода, отражённых от мишени Мо(поли)+Н(внедр, 20%) при различных энергиях бомбардировки  $E_0 = 50, 200, 500$  эВ. Угол падения  $\psi = 0^\circ$ .

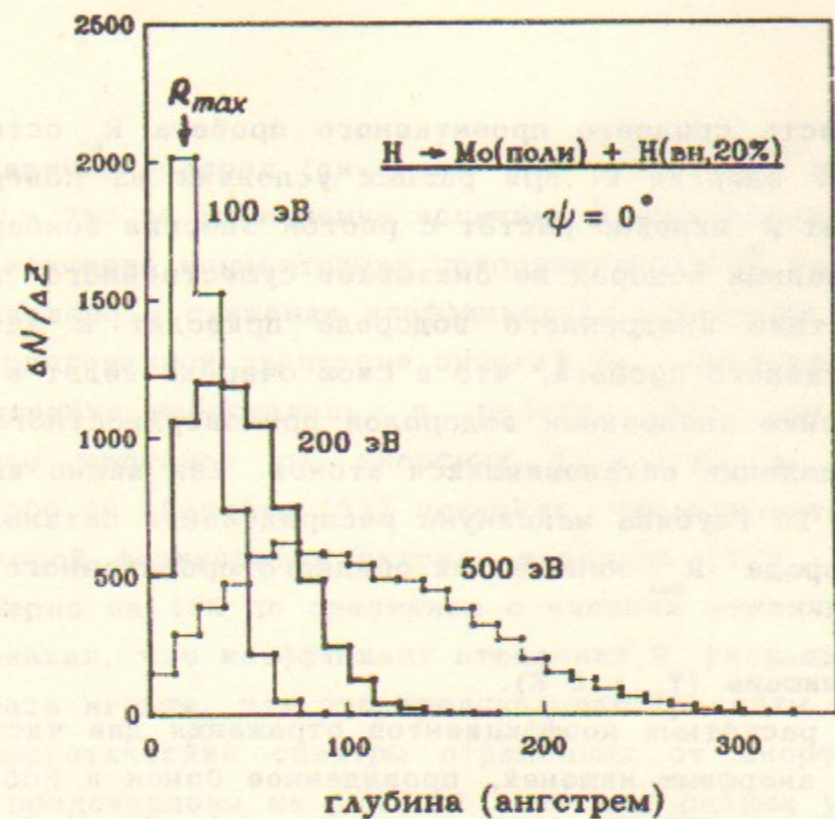


Рис. 9. Распределение по глубине остановившихся атомов водорода в мишени Мо(поли) + Н(внедр, 20%) при  $E_0 = 100, 200, 500$  эВ.  $\psi = 0^\circ$ .

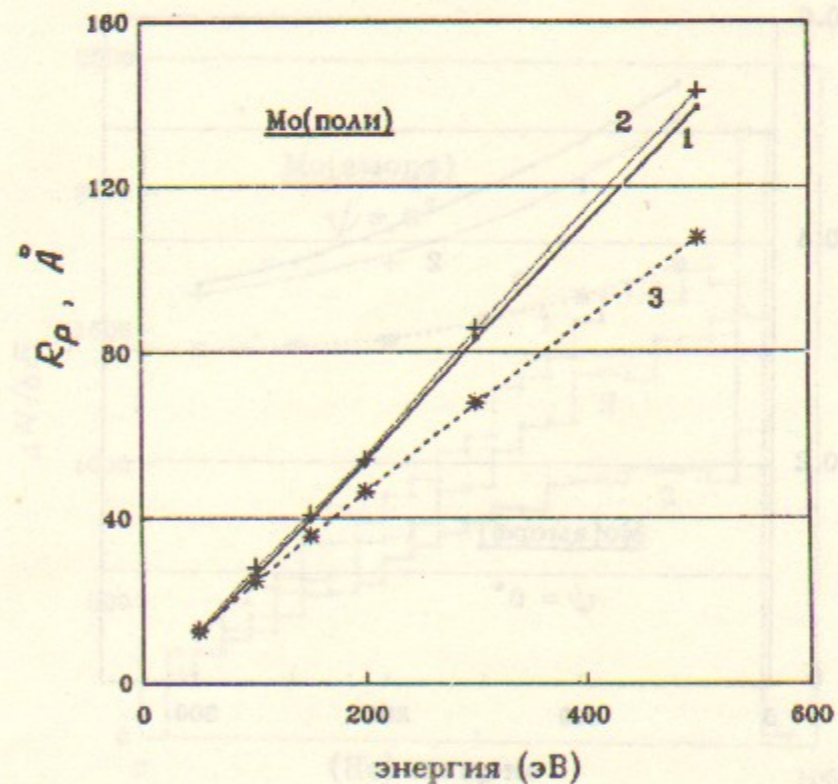


Рис. 10. Зависимость проективного пробега атомов водорода до остановки  $R_p$  от энергии бомбардировки протонов  $E_0$  в поликристаллических мишенях: 1 - Мо; 2 - Мо + Н(адс); 3 - Мо + Н(внедр, 20%).



зывает зависимость среднего проективного пробега  $R_p$  остановившихся атомов от энергии  $E_0$  при разных условиях на поверхности мишени. Величина  $R_p$  линейно растёт с ростом энергии бомбардировки. Адсорбированный водород не оказывает существенного влияния на  $R_p$ . Присутствие внедренного водорода приводит к заметному снижению проективного пробега, что в свою очередь ведет к постепенному заполнению внедренным водородом приповерхностного "провала" в распределении остановившихся атомов. Как видно из сравнения рис. 9 и 10 глубина максимума распределения остановившихся атомов водорода  $R_{max}$  меньше их среднего проективного пробега  $R_p$ .

Аморфная мишень ( $T_K = 0$  K).

Сравнение расчётных коэффициентов отражения для чистых поликристаллов и аморфных мишеней, проведенное Оэном и Робинсоном с помощью программы MARLOWE [31], показало, что эффект поликристаллической структуры сводится к уменьшению  $R_n$  по сравнению с аморфной мишенью примерно на 20 - 25%. Аналогичный эффект наблюдался в расчётах по программе МОДА для молибдена, содержащего

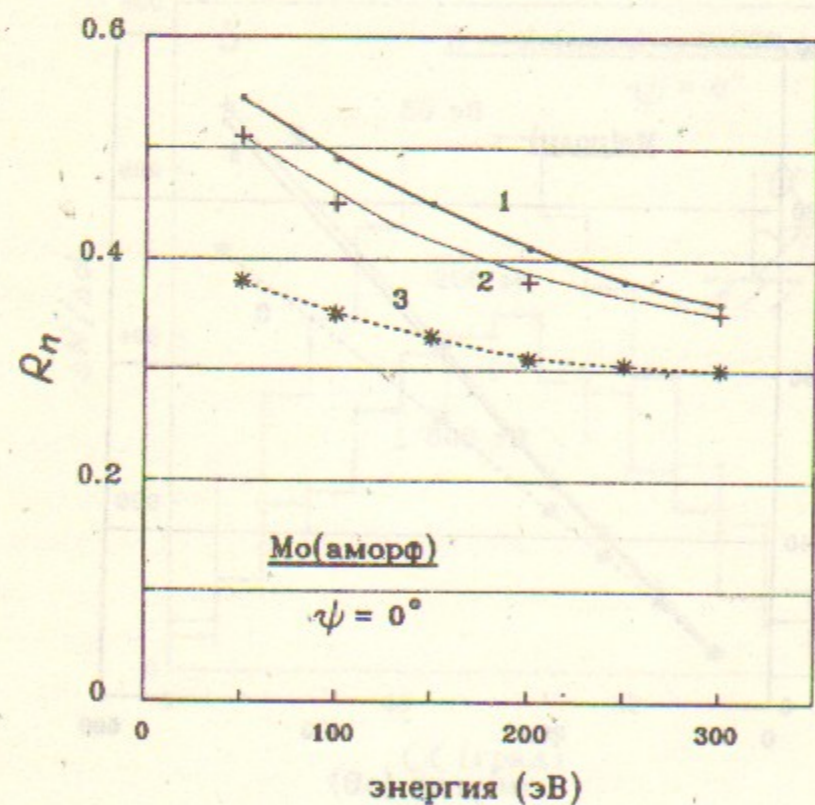


Рис. 11. Зависимость коэффициентов отражения атомов водорода  $R_n$  от энергии бомбардировки  $E_0$  от аморфных мишеней: 1 - Mo + H(адс); 2 - Mo + H(внедр, 20%); 3 - Mo + H(внедр, 50%).  $\psi = 0^\circ$ .

сорбированный водород (см., рис. 6, а и 11). При энергиях бомбардировки  $> 200$  эВ уменьшение величины  $R_n$  составляло  $\sim 10 - 15\%$ .

Увеличение концентрации приповерхностного водорода с 20% до 50% приводило к снижению коэффициентов отражения на 15 - 25% во всем исследованном диапазоне энергий  $E_0$ . Отметим, что аналогичная тенденция наблюдалась в работе [32], где моделировалось отражение протонов от аморфных Ti и  $\alpha$ -Fe в области энергий 100 - 2000 эВ. Расчёты [32] показали, что концентрация водорода, при которой формируются гидриды металлов ( $TiH_2$ , FeH) уменьшает  $R_n$  примерно на 40% по сравнению с чистыми мишенями. Эксперимент [33] показал, что коэффициент отражения  $R_n$  уменьшается примерно в два раза меньше, чем это предсказывают расчёты [32].

Энергетические спектры отражённых от аморфного молибдена атомов представлены на рис. 12 и 13 при разных условиях на поверхности и энергиях бомбардировки. Как и в случае поликристалла, адсорбированный водород убирает в спектре поверхностный пик,

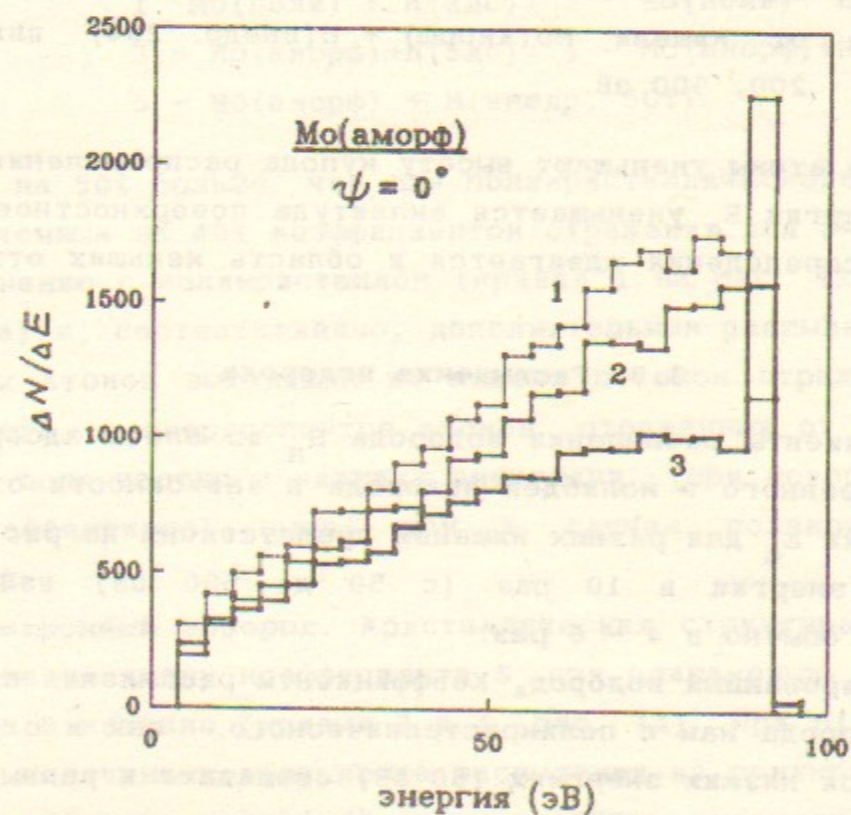


Рис. 12. Энергетические спектры атомов водорода, отражённых от аморфных мишеней: 1 - Mo + H(адс); 2 - Mo + H(внедр, 20%); 3 - Mo + H(внедр, 50%).  $E=100$  эВ.  $\psi = 0^\circ$ .



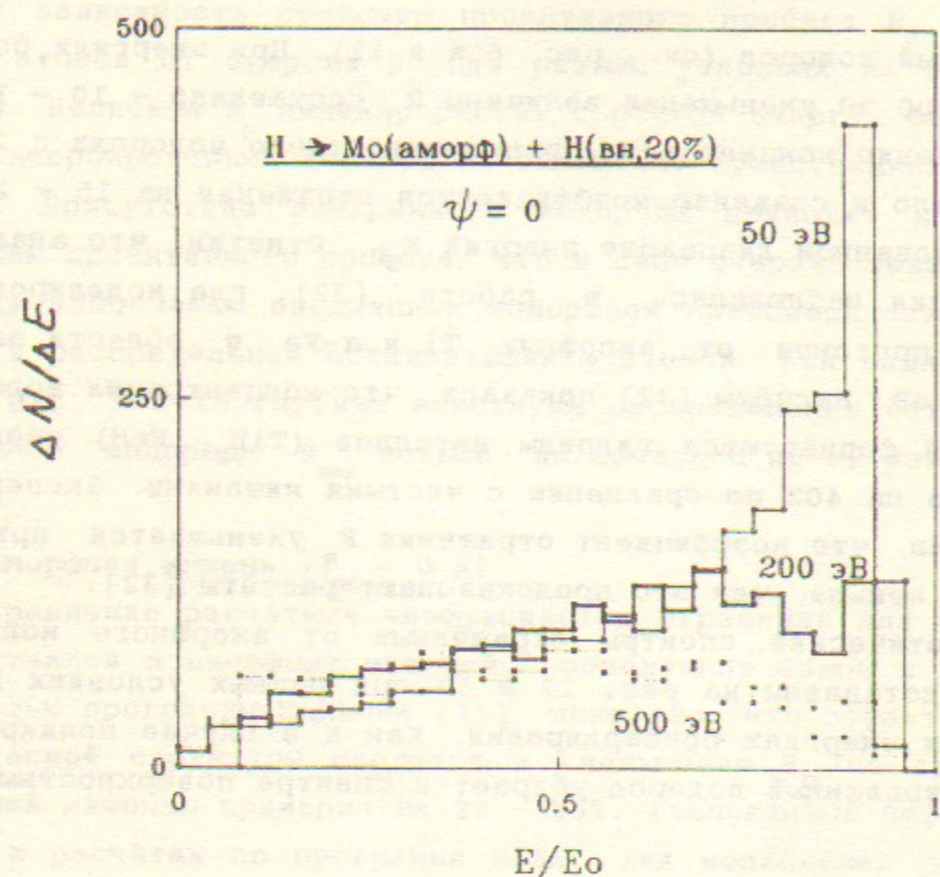


Рис. 13. Энергетические спектры атомов водорода, отражённые от мишени Mo(аморф) + H(внедр, 20%) для  $E_0 = 50, 200, 500$  эВ.

а внедренные атомы уменьшают высоту купола распределения. С увеличением энергии  $E_0$  уменьшается амплитуда поверхностного пика а максимум распределения сдвигается в область меньших относительных энергий.

### 3.3. Распыление водорода

Коэффициенты распыления водорода  $S_H$  из слоев адсорбированного и внедренного в молибден водорода в зависимости от энергии бомбардировки  $E_0$  для разных мишеней представлены на рис. 14. При увеличении энергии в 10 раз (с 50 до 500 эВ) величина  $S_H$  уменьшается обычно в 4 - 6 раз.

**Адсорбированный водород.** Коэффициенты распыления адсорбированного водорода как с поликристаллического, так и с аморфного молибдена при низких энергиях (50 эВ) совпадают и равны примерно 0.45 (кривые 1 и 3, рис. 14). С увеличением энергии первичных частиц  $E_0$  распыление водородной пленки с аморфной структуры идет эффективнее. Так, при  $E_0 = 300$  эВ величина  $S_H$  для аморфного мо-

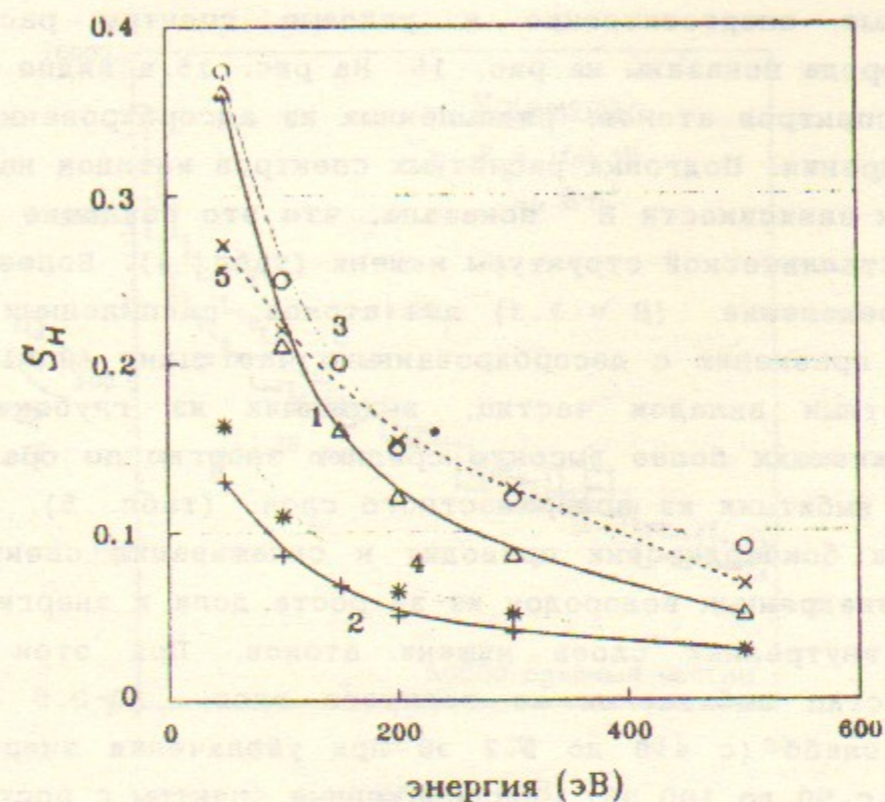


Рис. 14. Зависимость коэффициентов распыления водорода  $S_H$  от энергии бомбардировки  $E_0$  при  $\psi = 0^\circ$  из мишеней: 1 - Mo(поли) + H(адс); 2 - Mo(поли) + H(внедр, 20%); 3 - Mo(аморф) + H(адс); 4 - Mo(аморф) + H(внедр, 20%); 5 - Mo(аморф) + H(внедр, 50%).

либдена на 50% больше, чем для поликристаллического. Это связано с увеличенным на 40% коэффициентом отражения для аморфной мишени по сравнению с поликристаллом (кривая 1 на рис. 11, кривая 2 на рис. 6, а) и, соответственно, дополнительным распылением адсорбированных атомов выходящим из мишени потоком отражённых атомов. Кроме того, в энергоспектре атомов, отражённых от аморфного молибдена доля частиц с низкими энергиями (при которых распыление более эффективно) выше, чем в случае поликристаллического молибдена.

**Внедренный водород.** Кристаллическая структура мишени слабо влияет на величину коэффициента  $S_H$  при одинаковых концентрациях водорода в металле (кривые 2 и 4, рис. 14). При  $n(0) = 0.2$  и  $E_0 = 50$  эВ величина коэффициента распыления из поликристалла на 20% меньше, чем из аморфной мишени. При энергиях бомбардировки  $\geq 200$  эВ эти коэффициенты совпадают. Увеличение концентрации водорода в молибдене с 20% до 50% приводит к росту величины  $S_H$  в 2



раза во всем исследованном диапазоне энергий первичных атомов.

Типичные энергетические и угловые спектры распыленных атомов водорода показаны на рис. 15. На рис. 15, а видно различие в форме E-спектров атомов, распыленных из адсорбированного слоя и фазы внедрения. Подгонка расчётных спектров методом наименьших квадратов к зависимости  $E^{-\beta}$  показала, что это различие не зависит от кристаллической структуры мишени (табл. 4). Более пологое энергораспределение ( $\beta \approx 1.3$ ) для атомов, распыленных изнутри мишени по сравнению с десорбированными частицами ( $\beta \approx 1.55$ ) вызвано заметным вкладом частиц, выходящих из глубоких слоев мишени и имеющих более высокую среднюю энергию по сравнению с частицами, выбитыми из поверхностного слоя. (табл. 5). Увеличение энергии бомбардировки приводит к сглаживанию спектров для мишеней с внедренным водородом из-за роста доли и энергии выходящих из внутренних слоев мишени атомов. При этом средняя энергия частиц выбиваемых из верхнего слоя ( $0-0.5 a_k$ ), изменяется слабо (с 4.3 до 5.2 эВ при увеличении энергии бомбардировки с 50 до 100 эВ). Десорбционные спектры с ростом энергии первичных частиц изменяются незначительно.

Близкие десорбционные спектры были получены в расчетах Таглауэра и Байтата по программе MORLAY [28]. Для процесса  $H \rightarrow Ni(111) + H(адс)$  при  $E_0 = 300$  эВ и угле бомбардировки  $30^\circ$  по отношению к поверхностной нормали форма энергоспектра распыленного водорода аппроксимировалась выражением  $\sim E^{-1.57}$ , а при распылении дейтерия (процесс:  $H \rightarrow Ni(111) + D(адс)$ )  $\Delta E/\Delta N \sim E^{-1.59}$ .

Таблица 4. Формы энергоспектров атомов водорода, распыленных из разных мишеней при  $E_0 = 100$  эВ. 50000 пробных частиц.

Мишень		$(\Delta N/\Delta E)$ расп. H
Mo + H(адс)	поли	$\sim E^{-1.55}$
	аморф	$\sim E^{-1.54}$
Mo + H(внедр, 20%)	поли	$\sim E^{-1.26}$
	аморф	$\sim E^{-1.28}$
Mo(аморф) + H(внедр, 50%)		$\sim E^{-1.31}$

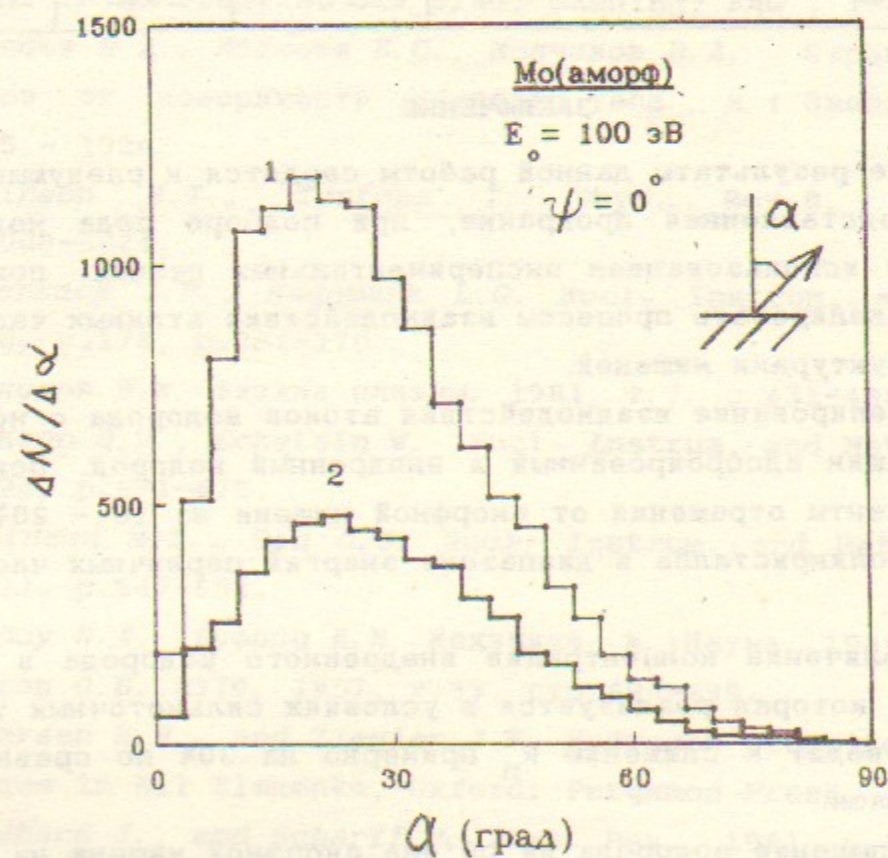
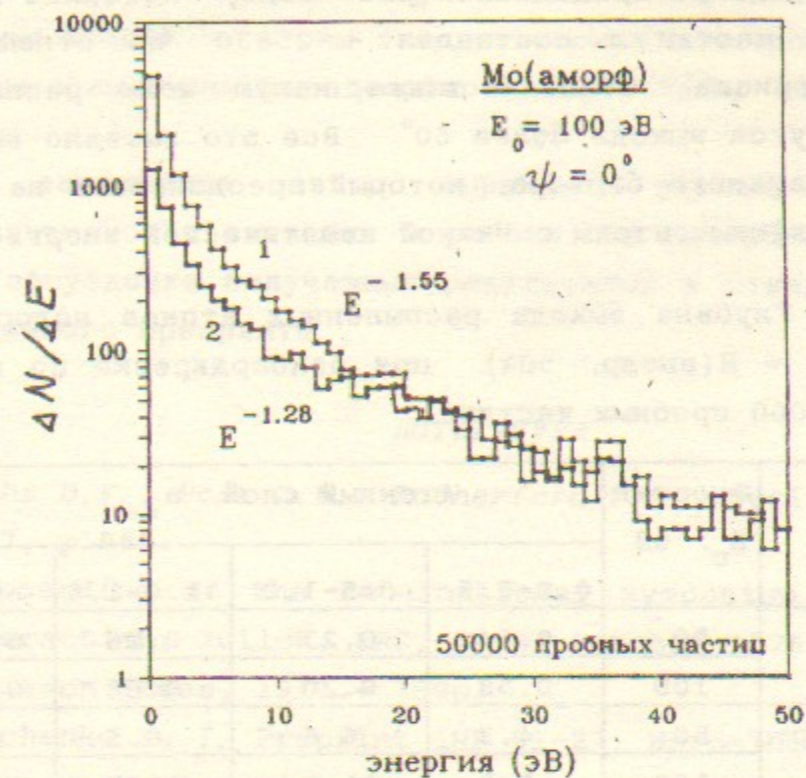


Рис. 15. Энергетические (а) и угловые (б) спектры атомов водорода, распыленных из аморфных структур: 1 - Mo + H(адс); 2 - Mo + H(внедр, 20%).  $E_0 = 100$  эВ.  $\psi = 0^\circ$ . Угловые спектры распыленных частиц существенно отличаются



от косинусоидального распределения (рис. 15, б). Наиболее вероятный угол выхода частиц  $\alpha$  составлял  $\sim 25-30^\circ$  по отношению к поверхностной нормали. Отметим также малую долю распыленных атомов, имеющих угол выхода более  $60^\circ$ . Все это вызвано влиянием плоского потенциального барьера, который преодолевают на выходе из металла распыленные атомы с низкой кинетической энергией.

Таблица 5. Глубина выхода распыленных атомов водорода из мишени Mo(аморф) + H(внедр, 50%) при бомбардировке по нормали к поверхности. 5000 пробных частиц.

	Энергия $E_0$ , эВ	Атомный слой, $a_{no}$			
		0.0-0.5	0.5-1.0	1.0-1.5	>1.5
Доля в испускании	50	0.64	0.23	0.06	0.07
	100	0.58	0.20	0.08	0.14
Средняя энергия $\bar{E}$ , эВ	50	4.3	6.6	8.5	9.0
	100	5.2	11.1	13.8	19.4

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты данной работы сводятся к следующему:

(1) Представленная программа, при подборе ряда модельных параметров с использованием экспериментальных данных, позволяет адекватно моделировать процессы взаимодействия атомных частиц со сложными структурами мишеней.

(2) Моделирование взаимодействия атомов водорода с молибденом, содержащим адсорбированный и внедренный водород, показало, что коэффициенты отражения от аморфной мишени на 10 - 20% меньше, чем от поликристалла в диапазоне энергий первичных частиц от 50 до 500 эВ.

(3) Увеличение концентрации внедренного водорода в молибдене до 50%, которая реализуется в условиях сильноточных тлеющих разрядов приводит к снижению  $R_p$  примерно на 30% по сравнению с чистым металлом.

(4) Распыление водорода из объема аморфной мишени на 25 - 50% выше, чем из поликристалла при энергиях бомбардировки  $> 100$  эВ.

(5) Энергоспектр десорбированных частиц имеет более пикированную форму, чем спектр частиц, распыленных из объема. Это связано с наличием более высокой средней энергии у частиц, выходящих из внутренних слоев мишени.

(6) Не обнаружено существенного влияния кристаллической структуры мишени на формы энергетических спектров атомов водорода, распыленных как из адсорбированного слоя, так и из внедренной фазы.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Ю.И. Бельченко за внимание к работе над программой, заинтересованное обсуждение полученных результатов и стимулирование написания данного препринта.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Duchs D.F., Post D.E., Rutherford P.H. Nucl. Fusion, 1977, v.17, p.565.
2. Proceeding of the International Symposium on Plasma Wall Interaction, Julich, FRG, 18-22 October 1976, New York e.a.: Pergamon Press, 1977.- 750p.
3. Belchenko Yu.I. Preprint INP 91-27, Novosibirsk, 1991.
4. Eckstein W. Preprint IIP 9/43, Garhing, FRG, 1983.
5. Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела., М.: Энергоатомиздат, 1985.- 192с.
6. Robinson M.T., Torrens I. Phys. Rev.B, 1974, v.9; p.5008-5024.
7. Biersack J.P., Haggmark L.G. Nucl. Instrum. and Methods, 1980, v.174, p.254-270.
8. Сомников В.М. Физика плазмы, 1981, т.7, с.431-436.
9. Jackson D.R., Eckstein W. Nucl. Instrum. and Methods, 1982, v.194, p.671-675.
10. Robinson M.T., Oen O.S. Nucl. Instrum. and Methods, 1976, v.132, p.647-653.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика, М.:Наука, 1988, 215 с.
12. Фурсов О.Б. ЖЭТФ, 1957, т.33, стр.696-699.
13. Andersen H.H., and Ziegler J.F. Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements, Oxford: Pergamon Press, 1977. - 317p.
14. Lindhard J., and Scharff M. Phys. Rev., 1961, p.128-130.
15. Фурсов О.Б. ЖЭТФ, 1959, т.36, стр.1517-1522.
16. Sputtering by Particle Bombardment 1/ Ed. by Behrisch R., - Berlin e.a.: Springer, 1981.-281p.
17. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика, ч.1, М.: Наука, 1976, - 450с.



18. Марадудин А., Монролл Э., Вейс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении/ Пер. с англ. - М.: Мир, 1963, - 383с.
19. Hou M., Robinson M.T. Nucl. Instrum. and Methods, 1976, v.132, p.641-645.
20. Парилус Э.С., Тураев Н.Ю., Умаров Э.Э., Нижная С.Л. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. - Ташкент: Фан, 1987, - 212с.
21. Шульце Г. Металлофизика/ Пер. с нем. - М.: Мир, 1971. - 503с.
22. Niskes J.R. J. de Physique. 1979, C7, v.40, p.179-192.
23. Sorensen H. in [2], p.437-442.
24. Sidenius G. Lenskjae T. Nucl. Instrum. and Methods, 1976, v.132, p.673-679.
25. Bay H.L., Roth J. Bohdanky J. J. Appl. Phys., 1977, v.48, p.4722.
26. Sagara A., Akaishi K., Kamada K., e.a. J Nucl. Mater, 1981, v.103/104, p.357-362.
27. Взаимодействие водорода с металлами/Агеев В.Н., Бекман У.Н., Бурмистрова О.П. и др. М.: Наука, 1987. -296с.
28. Taglauer E., Beitath U. J. Nucl. Mater., 1982, v.111/112, p.800-804.
29. Schulz R., Behrisch R., Scherzer B.M.U. Nucl. Instrum. and Methods, 1980, v.168, p.295-299.
30. Писарев А.А., Циплаков В.Н. ЖТФ, 1979, т.49, стр.1758.
31. Oen O.S., Robinson M.T. J. Nucl. Mater., 1982, v.111/112 p.789-794.
32. Oen O.S., Robinson M.T. J. Nucl. Mater., 1978, v.76/77, p.370-377.
33. Eckstein W., Verbeek H. Ibid.- p.365-369.

А.С. Куприянов

Численное моделирование взаимодействия быстрых атомов водорода с содержащим сорбированный водород молибденом

ИЯФ 92-23

Ответственный за выпуск С.Г. Попов

Работа поступила 14 апреля 1992 г.

Подписано в печать 14 апреля 1992 г.

Формат бумаги 60×90 1/16. Объем 2,6 печ.л., 2,1 уч.-изд.л.

Тираж 170 экз. Бесплатно. Заказ N 23.

Обработано на IBM PC и отпечатано на ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.