

УДК 519.85

Д.А. Терентьев (6 курс, каф. ЭЯФ), Е.Е.Журкин, к.ф-м.н., доц.

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ БАРЬЕРОВ ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МИШЕНЕЙ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящее время методы машинного моделирования активно привлекаются для более детального изучения свойств кристаллической решетки металлов и сплавов и их поведения под действием ионизирующих излучений. Важным параметром, определяющим процесс распыления поверхности металлов, является поверхностная энергия связи, или так называемый поверхностный барьер [1].

Целью данной работы являлась оценка поверхностной энергии связи поверхностных атомов никеля и алюминия при различных ориентациях поверхности кристалла, а также при различных температурах мишени.

Для решения указанной задачи был использован метод классической молекулярной динамики [2]. Взаимодействие атомов описывалось с помощью многочастичного потенциала, полученного в работе [3] в рамках параметризации квантово-механической модели сильной связи. Применялся следующий алгоритм расчета: случайным образом выбирался атом из двух верхних монослоев мишени, которому сообщалась некоторая начальная кинетическая энергия в направлении нормали к поверхности, а затем путем отслеживания координаты атома вычислялась вероятность вылета атома в зависимости от данной энергии.

Путем дифференцирования энергетической зависимости вероятности вылета атома, определялись распределения плотности вероятности и соответствующие средняя энергия вылета и её дисперсия.

Результаты вычислений сведены в табл. 1 и 2. Экспериментальные значения теплот сублимации [1] для исследуемых веществ также приведены в табл. 1. Видно, что полученные при нулевой и комнатной температурах значения поверхностных барьеров для первого монослоя (001) поверхности металлов оказываются близкими к приведенным экспериментальным значениям. Для более глубоких слоев значение энергии поверхностной связи атомов существенно возрастает. Кроме того, величина поверхностных барьеров существенным образом зависит от ориентации поверхности мишени.

Таблица 1. Средняя величина поверхностного барьера  $E_0$  и стандартного отклонения  $\sigma$  для алюминия и никеля (поверхность (001)) для двух первых поверхностных монослоев

		Алюминий (теплота сублимации 3,36 эв)			Никель (теплота сублимации 4,46 эв)		
Температура		1 слой	2 слой	1-2 слой	1 слой	2 слой	1-2 слой
0 К	$\sigma$	3,6 7	9,3 2	5,57	4,44	9,2 2	7,42
		0,8 4	0,1 5	1,99	0,24	0,1	1,00

30 0 К	0	3,4 6	7,9 6	5,62	4,12	9,2 2	6,95
		0,2 3	1,3 4	1,59	0,25	0,1	0,68
10 00 К	0	4,9 2	7,3 8	6,21 9	5,5	9,6 8	6,34
		0,7 9	2,0 2	1,99	0,27	0,8 9	2,01

Таблица 2. Средняя величина поверхностного барьера  $E_0$  и стандартного отклонения  $\sigma$  для алюминия и никеля (поверхность (111)) для двух первых монослоев при температуре 0 К

Величина	Алюминий		Никель	
	1 слой	2 слой	1 слой	2 слой
$E_0$	4,41	9,2	4,85	9,25
$\sigma$	1,23	1,46	0,97	1,27

*Выводы:* разработанная компьютерная методика позволяет оценивать величины поверхностных барьеров для металлических мишеней при различных условиях распыления.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. В. Экштайн. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995.
2. M.P. Allen, D.J. Tildesley «Computer simulation of Liquids» Clarendon press: Oxford, 1987.
3. F. Gao, D.J. Bacon, G.J. Ackland Point-defect and displacement energies in  $Ni_3Al$ . Philosophical Magazine A, 1993, Vol. 67, No. 2, 275-288.