

МОДЕЛИРОВАНИЕ СКОЛЬЗЯЩЕГО РАССЕЯНИЯ ИОНОВ НА НА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

С.С. Москаленко, Ю.А. Мелкозерова, И.К. Гайнуллин



Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

В настоящей работе исследуется скользящее рассеяние ионов Na на металлических поверхностях путем компьютерного моделирования. Моделирование электронного обмена с металлическими поверхностями основывается на нестационарной модели Андерсона-Ньюнса, предполагающей численное решение нестационарного уравнения Шредингера. Производится сравнение полученных результатов с результатами моделирования других научных групп, имеющими схождение с экспериментальными данными и рассчитанными с использованием метода САМ [1], а также с использованием метода распространения волновых пакетов [2]. Значения выхода нейтральных атомов, полученные с помощью модели Андерсона-Ньюнса немного больше значений, полученных другими методами, что является хорошим результатом для первопринципных расчетов.

Актуальность работы

Электронный обмен ионных пучков с поверхностью представляет существенный интерес для фундаментальной науки и является важнейшим фактором при изучении элементного состава и структуры поверхности твердых тел. На сегодняшний день рассеяние медленных ионов (РМИ) является единственным методом, позволяющим определять элементный состав поверхностного слоя атомов; игнорирование или некорректный учет электронного обмена может приводить к кратным ошибкам в определении концентрации элементов.

В настоящее время при изучении электронного обмена набирает популярность метод компьютерного моделирования, поскольку в отличие эксперимента моделирование является недорогим, и с его помощью можно изучать физические явления вблизи поверхности, которые невозможно изучить экспериментально.

Постановка задачи



Рисунок 1: Иллюстрация зарядового обмена между ионом Na и металлической поверхностью Al.

В настоящей работе исследуется скользящее рассеяние ионов Na на металлических поверхностях. Иллюстрация данного процесса представлена на рисунке 1. происходит скользящее рассеяние иона Na с последующей его нейтрализацией путем зарядового обмена.

Модель Андерсона-Ньюнса

На текущий момент существует несколько расчетных моделей, исследующих электронный обмен. Мы используем при изучении электронного обмена модель Андерсона-Ньюнса, предполагающей численное решение нестационарного уравнения Шредингера. Преимуществом модели Андерсона-Ньюнса является то, что она позволяет моделировать взаимодействие частицы с поверхностью с учетом нескольких электронных состояний, в отличие от других теоретических моделей. Также безусловным преимуществом данной модели является тот факт, что она применима как при моделировании взаимодействия частицы с металлом, так и при взаимодействии с диэлектриками. К недостаткам модели следует отнести использование адиабатического приближения, а также отсутствие трехмерной визуализации, в отличие от, например, метода распространения волновых пакетов. Помимо адиабатического приближения модель Андерсона-Ньюнсона предполагает исключение Оже и излучательных процессов.

- Учитывает только резонансный зарядовый обмен (не учитывает Оже и излучательные процессы).
- Использует адиабатическое приближение
- Использует обобщенный нестационарный Гамильтониан Андерсона-Ньюнса:

$$H(t) = \sum_a [\epsilon_a^{(1)}(z)P_1 + \epsilon_a^{(2)}(z)P_2]c_a^\dagger c_{a\sigma} + \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_{k\sigma} + N^{-1/2} \sum_{a;k} \{ [V_{a;k}^{(1)}(z)P_1 + V_{a;k}^{(2)}(z)P_2]c_a^\dagger c_{k\sigma} + \text{H.c.} \} + \sum_{a>b} U_{ab}n_a n_b + \frac{1}{2} \sum_a U_{aa}n_a(n_a - 1)$$

, где $c_a^\dagger c_{a\sigma}$ - оператор рождения электрона спина σ орбитали a , $c_k^\dagger c_{k\sigma}$ - оператор рождения электрона в металле с энергией ϵ_k , $V_{a;k}^{(1)}$ - матричный элемент связи состояний атома-металла

Также раскладываем волновую функцию многих тел на следующие составляющие:

$$|\Psi(t)\rangle = f(t)|0\rangle + \sum_{a;k < k_f} b_{a;k}(t)|a;k\rangle + \sum_{k < k_f, l > k_f} e_{l,k}(t)|l,k\rangle + \sum_{q < k < k_f} d_{k,q}(t)|k,q\rangle$$

$f(t)$ - позитивный ион без возбуждения в металле,

$b(t)$ - нейтральный атом с занятой а орбиталью и дыркой в металле с импульсом k ,

$e(t)$ - позитивный ион и частица-дырка в металле

Результат моделирования

Результат моделирования для случая нормального падения иона Na на поверхность Al(111) представлен на рисунке 1. Положительно заряженная частица приближается к металлической поверхности, после чего на расстоянии приблизительно 12 атомных единиц начинаются процессы электронного обмена и вероятность обнаружить нейтральную частицу начинает увеличиваться вплоть до расстояний приблизительно равным 9 а.е. После чего вероятность нахождения ионизованной частицы уменьшается и уже при отдалении от поверхности она снова начинает увеличиваться.

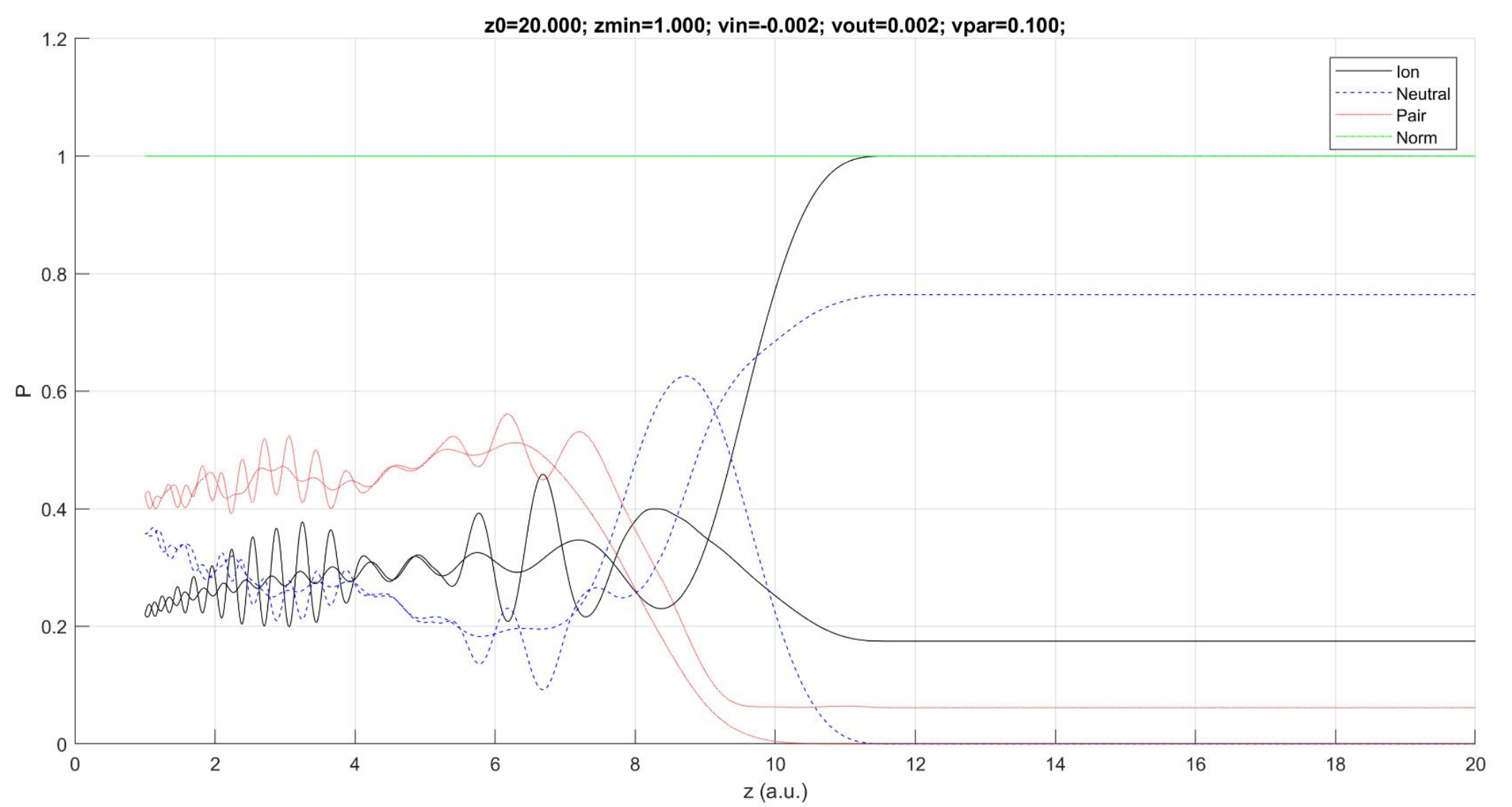
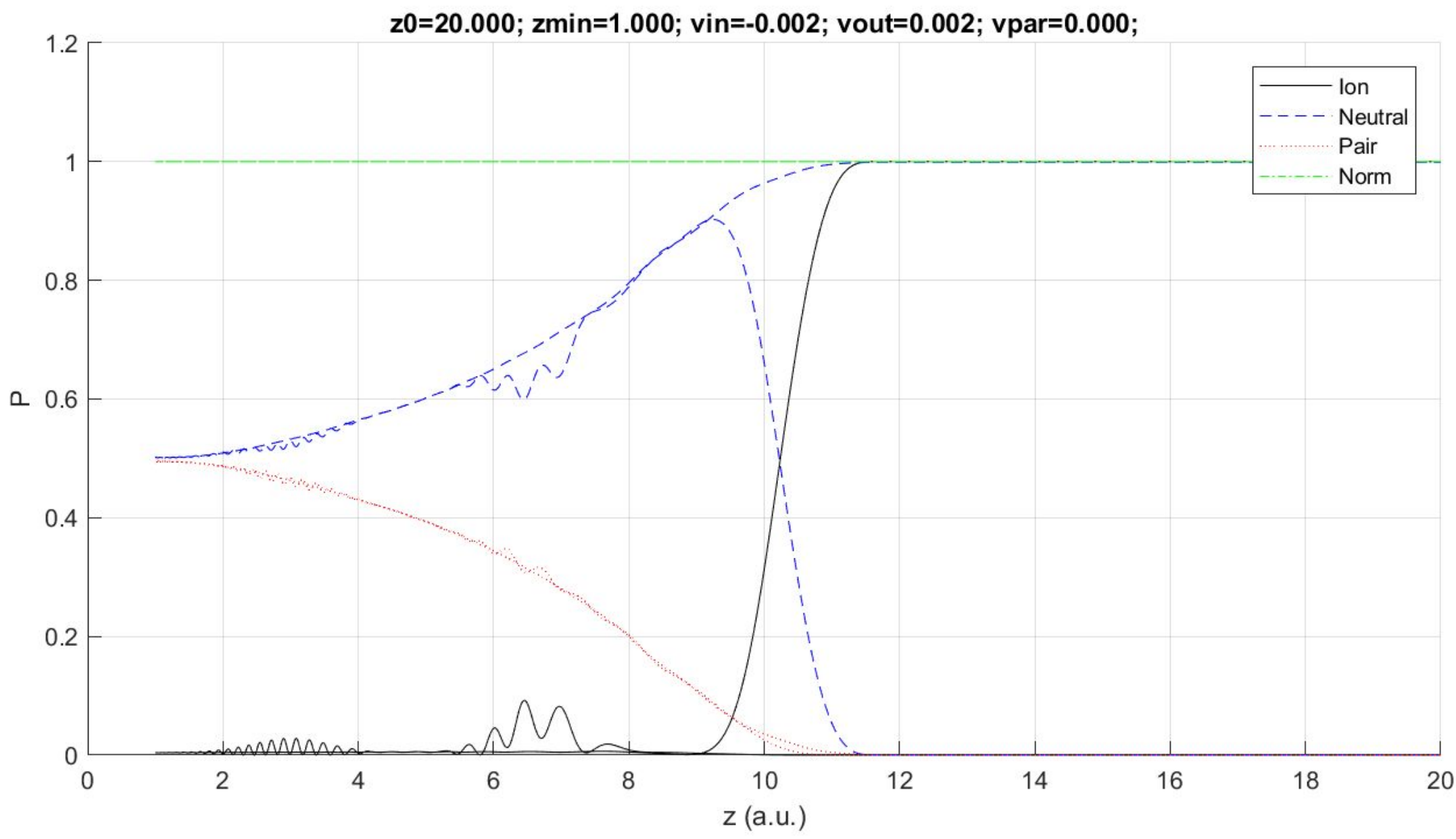
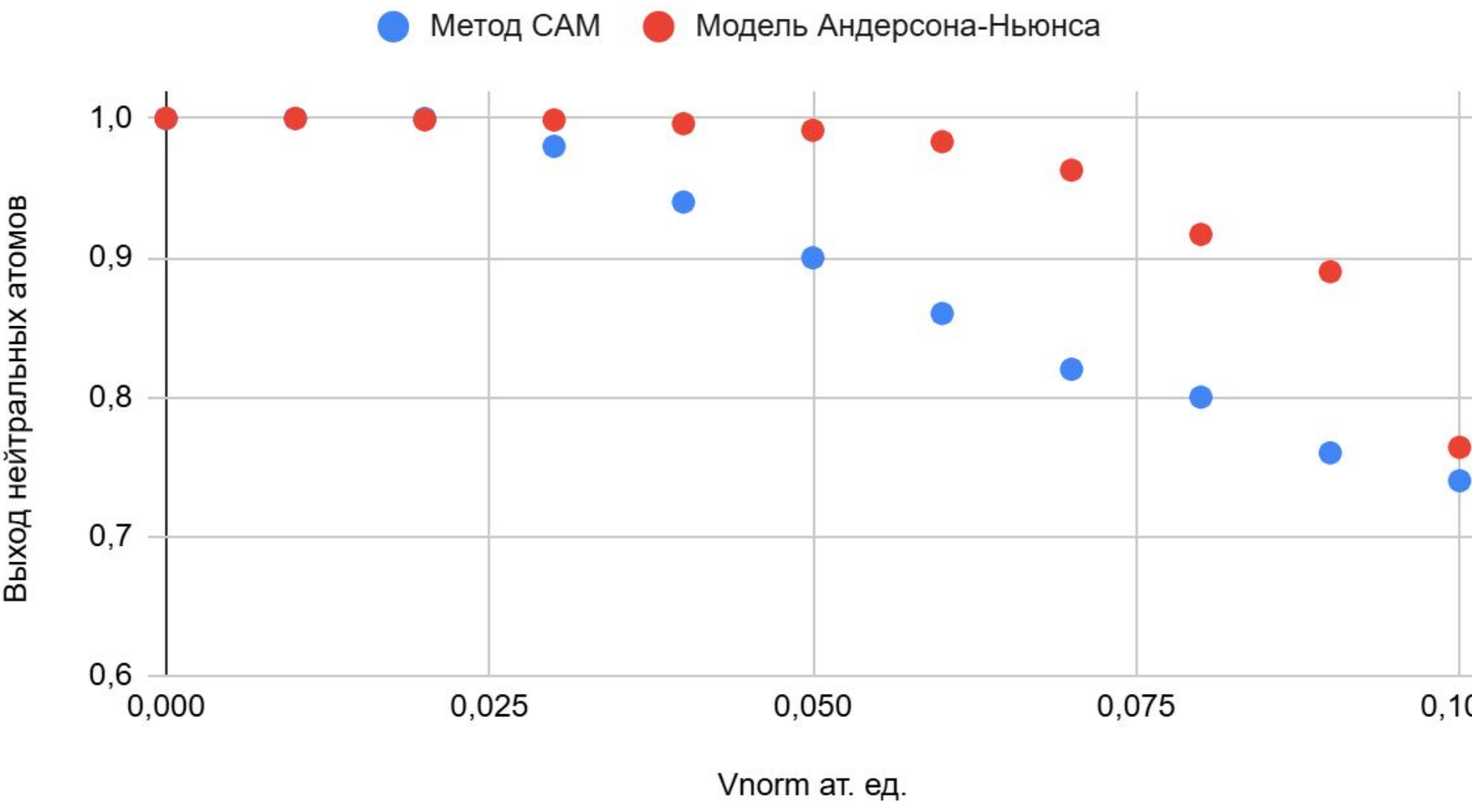


Рисунок 2: Распределение вероятности нахождения частицы в следующих состояниях в зависимости от расстояния до поверхности (в атомных единицах) для случая нормального падения иона на поверхность (сверху) и случая скользящего рассеяния с параллельной скоростью равной 0.1 ат.ед. (снизу). “Ion” - частица положительно ионизована, “neutral” - частица находится в нейтральном состоянии, “pair” - частица положительно ионизована, но в металле произошло изменение импульса электрон-дырочной пары.

Мы также построили график зависимости выхода нейтральных частиц Na с поверхности Al(111) от параллельной скорости движения иона вдоль поверхности. График представлен на рисунке 2. Видно падение вероятности выхода нейтральных частиц с увеличением параллельной скорости движения, что согласуется как с экспериментальными данными, так и данными рассчитанными с помощью других расчетных моделей (модель САМ) [1].

Для параллельной скорости равной 0.00172 ат.ед.



Для параллельной скорости равной 0.00265 ат.ед.

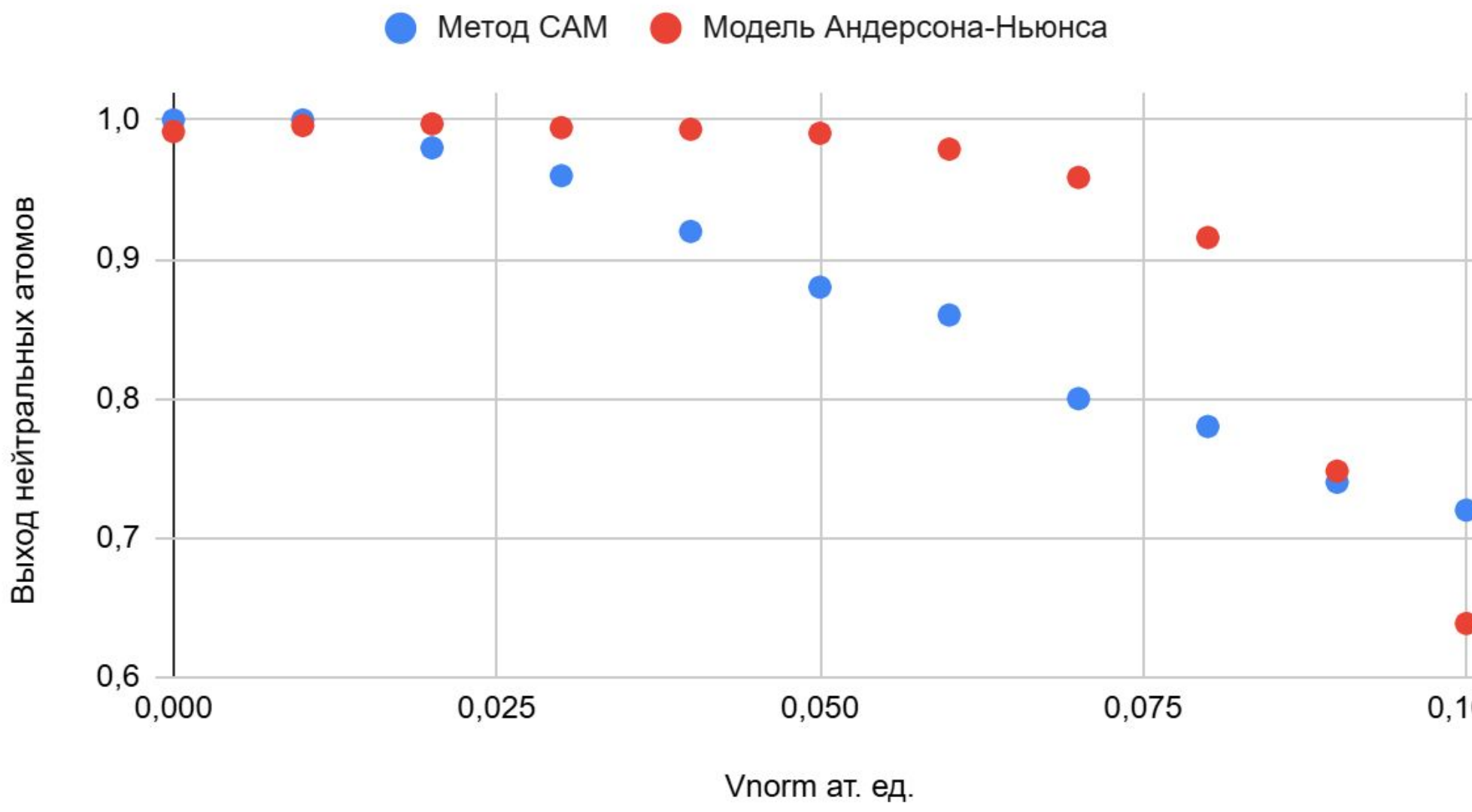


Рисунок 3: Зависимость выхода нейтральных атомов с поверхности от перпендикулярной скорости для случаев параллельной скорости равной 0.00172 ат. ед. (сверху) и 0.00265 ат.ед. (снизу). Красным обозначены результаты полученные с помощью модели Андерсона-Ньюнса, а синим цветом - результаты с использованием модели САМ [1].

На рисунке 4 представлены результаты нашего моделирования в сравнении с результатами, полученными с помощью метода распространения волновых пакетов [1]. Как видно, значения выхода нейтральных атомов, полученные на основе модели Андерсона-Ньюнса, немного больше, чем значения, полученные с помощью метода распространения волнового пакета.

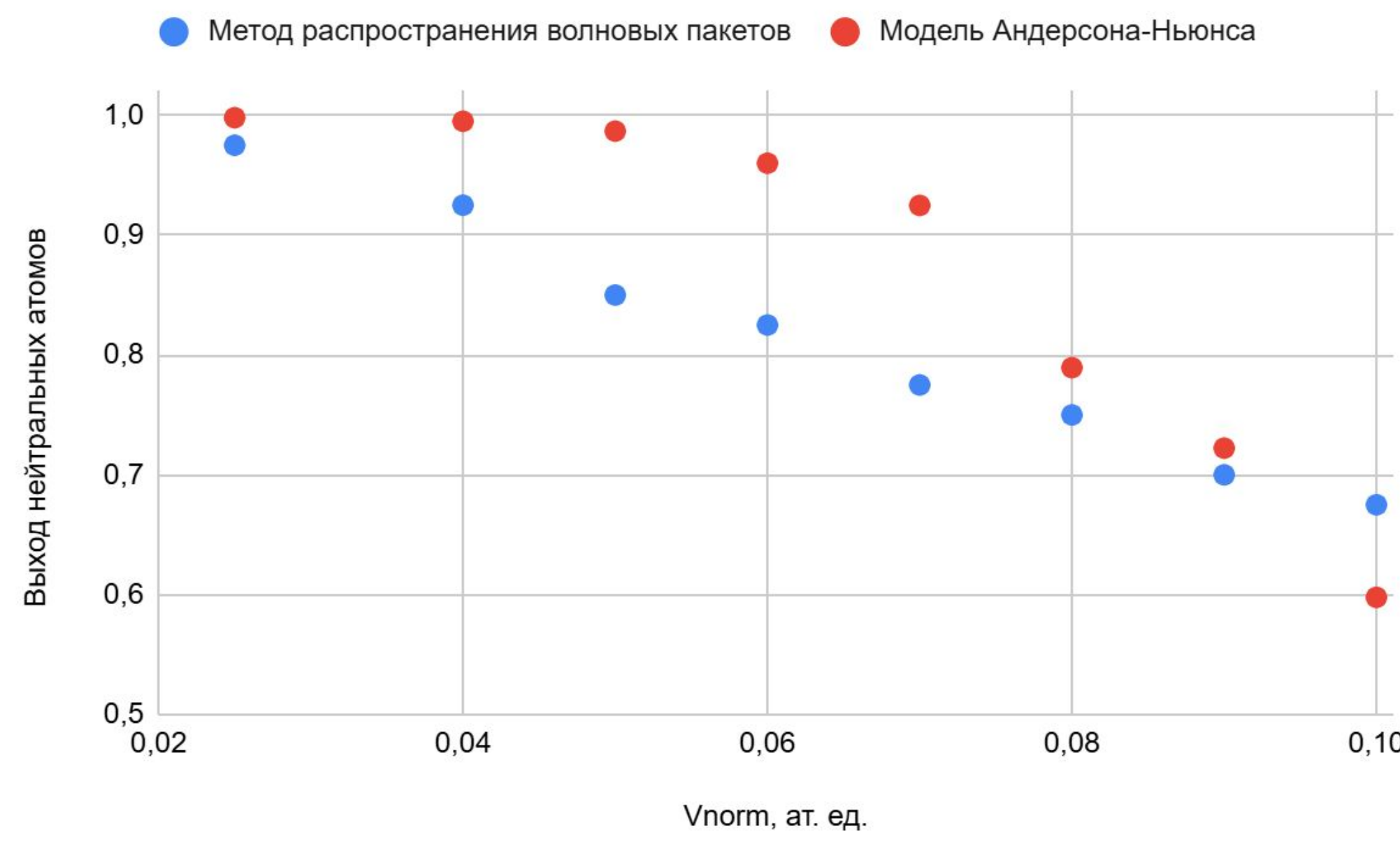


Рисунок 4: Зависимость выхода нейтральных атомов Na при рассеянии с поверхности Al от перпендикулярной скорости движения частиц при угле рассеяния равным 3.5 градусам. Красным обозначены результаты полученные с помощью модели Андерсона-Ньюнса, а синим цветом - результаты с использованием метода распространения волновых пакетов [2].

Из полученных результатов следует, что значения выхода нейтральных атомов, полученные с помощью модели Андерсона-Ньюнса несколько выше, чем для модели САМ и РВП. Возможной причиной такого расхождения является учет только одной внешней орбитали в процессе электронного обмена. Значение выхода нейтральных частиц уменьшается с увеличением нормальной скорости, что соответствует экспериментальным данным и данным расчетов с использованием других расчетных моделей.

[1] Borisov A. G. et al. // Physical Review B, 1996, 54, №. 23, 17166.

[2] Liu P. et al. //Physical Review A. – 2020. – Т. 101. – №. 3. – С. 032706.