

На правах рукописи

Мошкунов Константин Александрович

**ОТРАЖЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА ОТ
ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА**

Специальность: 01.04.08 – Физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Автор:



Москва - 2010

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор, Курнаев Валерий Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор, Борисов Анатолий Александрович
доктор физико-математических наук, профессор, Черныш Владимир Савельевич

Ведущая организация: Московский энергетический институт (технический университет)

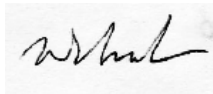
Защита диссертации состоится 17 мая 2010 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.130.05 при НИЯУ МИФИ

Адрес: 115409 Москва, Каширское ш., 31, корпус 33, ауд. 103

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ

Автореферат разослан «___» апреля 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.130.05, доктор физико-
математических наук



И.В. Евсеев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Взаимодействие ионов изотопов водорода с материалами является предметом интенсивных и широких исследований на протяжении многих лет. Интерес к таким исследованиям связан с проблемой управляемого термоядерного синтеза в установках с магнитным удержанием плазмы. Среди различных схем магнитного удержания сейчас больше всего внимания уделяется токамакам. Согласно решению международного сообщества к 2018 г. планируется закончить строительство экспериментального реактора ИТЭР, а к 2035-2050 гг. – первого коммерческого термоядерного реактора-токамака. ИТЭР, как промежуточная стадия, необходим для проверки множества пока не окончательно решенных проблем, наиболее сложной и неопределенной из которых сейчас является взаимодействие плазмы со стенкой. Та же проблема стоит и при создании объемного источника нейтронов на базе токамака как составляющей части энерготехнологий нового поколения. Сложность данной проблемы заключается не только в адекватном прогнозировании поведения обращенных к плазме элементов установок и возможности реализации стационарного режима работы, но и в неисследованности многих фундаментальных характеристик взаимодействия сложной по составу и параметрам плазмы с изменяющейся под ее воздействием поверхностью. Захват изотопов водорода, их накопление в материале, и модификация поверхности при плазменном воздействии влияют на материал стенки. С другой стороны, отражение частиц, рекомбинация атомов на поверхности, распыление, вторичная электронная эмиссия и диссоциация молекулярных ионов влияют на пристеночную плазму и параметры ее взаимодействия со стенкой. Однако, несмотря на большой объем исследований, остаются процессы, по которым отсутствуют численные данные, что не позволяет точно прогнозировать все эффекты взаимодействия плазмы со стенкой в термоядерных установках. В связи с разработкой концепции газового дивертора и мягкого «тушения» плазмы при быстром напуске большого количества газа, необходимо оценить вклад в энергетический и массовый обмен плазмы со стенкой молекулярных ионов, состоящих из различных изотопов водорода.

Данная работа посвящена изучению процессов отражения молекулярных ионов водорода от поверхности одного из кандидатных материалов первой стенки реактора ИТЭР – вольфрама.

Цель диссертационной работы

Целью настоящей работы является исследование процессов фрагментации молекулярных ионов, состоящих из различных изотопов водорода, при отражении от поверхности твердого тела. Это включает:

1. Создание экспериментальной установки для исследования спектров отраженных от поверхности ионов,
2. Изучение энергетических и массовых распределений ионов, полученных в результате бомбардировки поверхности молекулярными ионами водорода,
3. Определение механизмов, ответственных за фрагментацию молекулярных ионов водорода и формирование возможных молекулярных эффектов.

Защищаемые положения

На защиту выносятся следующие основные положения, определяющие научную новизну полученных в диссертации результатов:

1. Автоматизированная установка и реализованная на ней методика проведения экспериментов по измерению массовых и энергетических распределений отраженных ионов при облучении под скользящими углами молекулярными ионами твердотельной мишени,
2. Впервые экспериментально обнаруженный изотопный эффект в формировании энергетических спектров отраженных от поверхности ионов при ее бомбардировке молекулярными ионами изотопов водорода, заключающийся в зависимости величины уширения спектров ионов от массы фрагментов,
3. Впервые проведенное сравнение зависимости от энергии долей в рассеянном от поверхности пучке выживших двухатомных и трехатомных молекулярных ионов водорода и их фрагментов, демонстрирующее отсутствие влияния массы изотопов на вероятность выживания, и свидетельствующее о ступенчатой диссоциации трехатомных молекулярных ионов.
4. Установленный с помощью компьютерного моделирования и сравнения с экспериментом вклад в формирование энергетических спектров фрагментов молекулярных ионов водорода механизмов упругого рассеяния, неупругих потерь энергии, а также шероховатости поверхности.

Научная и практическая ценность

Создана автоматизированная установка для исследования процессов отражения молекулярных и атомарных ионов от поверхности твердого тела, которая может быть использована в широком классе задач по исследованию взаимодействия с поверхностью ионов кэвнских энергий. Впервые проведена систематизация работ по взаимодействию молекулярных ионов с твердым телом в широком диапазоне энергий, молекул и мишеней. Разработана модель, позволяющая количественно оценить вклад упругого рассеяния и неупругих потерь энергии в формирование спектра отраженных от поверхности молекул и их фрагментов. Измеренные вероятности выживания молекулярных ионов могут быть использованы в моделях расчета массо и энергообмена при взаимодействии пристеночной плазмы с поверхностью обращенных к плазме элементов термоядерных реакторов.

Апробация работы

По теме диссертации опубликовано 7 печатных работ, 2 из которых – в реферируемых журналах. Результаты работы доложены на:

- Международной конференции по атомным столкновениям частиц в твердом теле (ICACS2006, Berlin),
- 18 и 19 международной конференции по взаимодействию ионов с поверхностью (ISI 2007 и ISI 2009, Звенигород),
- XXXVI Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, МГУ, 2006), а также на
- Конференции по торможению частиц в веществе (HIS-2009, Москва, ИТЭФ).

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Работа содержит 110 страниц текста, включая 40 рисунков. Список литературы включает 200 наименований.

Личный вклад автора

Сборка и запуск установки, проведение эксперимента, создание кода и моделирование, а также сбор и анализ литературных данных проведены автором самостоятельно.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение

Во введении дана общая характеристика работы. Обоснована актуальность темы, сформулирована цель и определены задачи исследования, кратко изложена научная новизна и практическая ценность работы, описана структура и объем диссертации.

Глава 1

Первая глава представляет собой литературный обзор по теме диссертации. На основе рассмотренных работ собраны и обсуждены различные модели описания молекулярного взаимодействия с твердым телом, в том числе и приводящие к уширению энергетического спектра фрагментов диссоциации. Представленный материал охватывает всевозможные аспекты взаимодействия энергетичных молекул с твердым телом и описывает основные экспериментальные и теоретические результаты в этой области (за исключением распыления при облучении кластерами и молекулами).

Первая часть посвящена методам описания взаимодействия частиц в молекуле друг с другом и с твердым телом в области скоростей выше боровской (более 25 кэВ/нуклон). Рассмотрены эффекты как для 2-х и 3-х атомных молекул, так и для больших молекулярных кластеров. На основании наиболее распространенного метода описания неупругого взаимодействия частиц с твердым телом, - диэлектрического формализма, рассмотрена физика экранировки частиц, вклады различных механизмов потерь энергий, динамика кулоновского расталкивания, эффекты возмущения электронной плотности среды. Основным выводом этой части является невозможность применения в исследуемой области энергий (менее 10 кэВ/нуклон) модели кулоновского взрыва, характерной для высоких энергий [1] и ранее [2, 3] экстраполировавшейся в область низких энергий.

Вторая часть представляет данные, касающиеся фрагментации и выживания при отражении от поверхности твердого тела энергетичных (энергии более 10 эВ и менее 25 кэВ/нуклон) молекул. Представлены экспериментально наблюдавшиеся эффекты, а также предложенные для их объяснения модели. Так как в рассматриваемой области энергий уже невозможно, как это делается в области высоких энергий, пренебречь нелинейными эффектами, подробностями структуры мишени и ее поверхности, то и предложенных механизмов в области низких энергий гораздо больше. Для каждого из этих механизмов качественно оценена

область возможного вклада в формирование уширения спектра фрагментов диссоциации. В результате выполненного обзора и анализа литературных данных выявлены явления, важные для описания исследуемого эффекта:

- I. Одновременное упругое взаимодействие фрагментов друг с другом и атомами мишени [4,5].
- II. Разница в неупругих потерях энергии фрагментами при торможении на неоднородном электронном газе приповерхностного слоя. [6].
- III. Переходы электронного состояния молекулы между несколькими доступными состояниями [7-10].
- IV. Модель диссоциации за счет нейтрализации или возбуждения налетающего молекулярного иона в антисвязанное состояние [11-13]
- V. Экранировка межатомного взаимодействия внутри молекулы электронами среды [14-16].
- VI. Химическое взаимодействие фрагментов с атомами мишени может проявляться в дополнительном искажении потенциала взаимодействия и последующей диссоциации [17].

Глава 2

Вторая глава посвящена описанию созданной экспериментальной установки. Приведены ее принципиальная (рис. 1) и вакуумная схемы, описана система автоматизации.

Предельный остаточный вакуум в камере столкновения составляет $6 \cdot 10^{-7}$ Па, разрешение сепарирующей системы - 5 %, разрешение анализатора – не более 2 %, монохроматичность первичного пучка - 1 %. Характерный ток масс-сепарированного пучка – 1 мкА. Магнитный анализатор позволяет лучше, чем электростатический, разрешить спектры различных массовых компонент, что позволяет избежать наложения спектров фрагментов, мало отличающихся по массе, но обладающих широким энергетическим распределением. Площадь пучка в представленном эксперименте порядка 3 мм^2 , а ток пучка варьировался в пределах от 200 нА до 2 мкА в зависимости от энергии ионов.

Процессы экстракции и фокусировки ионного пучка, масс-сепарации и измерения спектров были автоматизированы. На рис 2. представлена схема подключения системы управления установки (управление ионным источником осуществляется отдельно и поставляется вместе с источником).

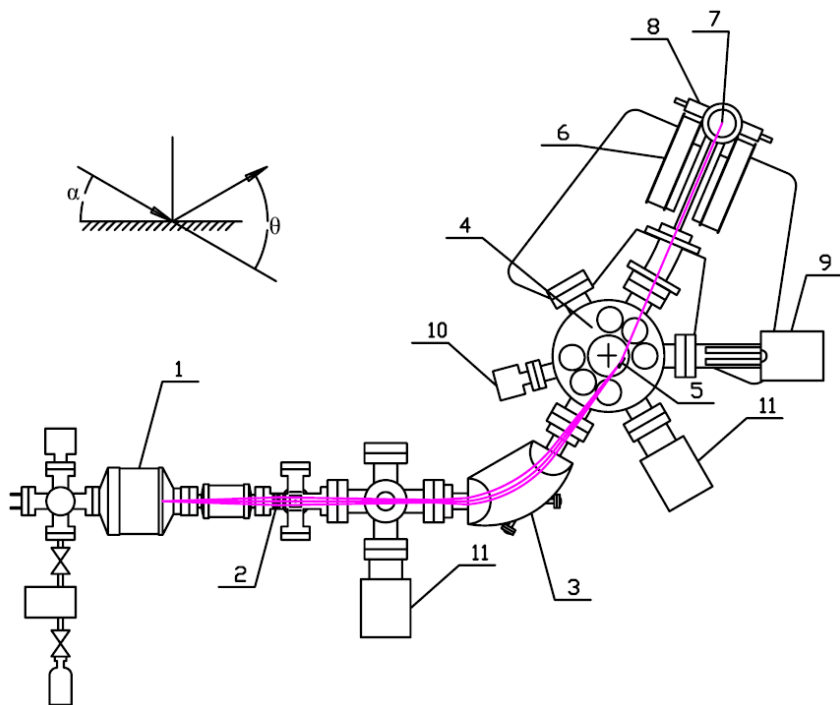


Рис. 1. Схема установки для эксперимента по малоугловому рассеянию, угол скольжения $\alpha=3^\circ$, угол рассеяния $\Theta=6^\circ$: 1 – дуоплазматрон, 2 – узел фокусировки пучка (трехэлектродная линза), 3 – сепарирующий электромагнит, 4 - камера столкновения, 5 – мишень, 6 – анализирующий секторный электромагнит (плоскость дисперсии перпендикулярна плоскости рисунка), 7 – детектор ВЭУ-1а, 8 – варьируемая диафрагма, 9 – квадрупольный масс-спектрометр, 10 – измеритель давления, 11 – турбомолекулярные насосы.

Для управления пучком и снятия показаний с приборов используется плата аналогового ввода-вывода с 12-разрядной дискретизацией входного и выходного сигналов PSI DAS 1602H и модульная система ICP DAS с блоками АЦП и ЦАП. Плата PSI DAS 1602H установлена в том же компьютере, что и ИК-порт. ICP DAS соединяется с этим же компьютером через COM-порт. С помощью программного обеспечения с ЦАПа подается сигнал на вход управляемых блоков питания магнитов.

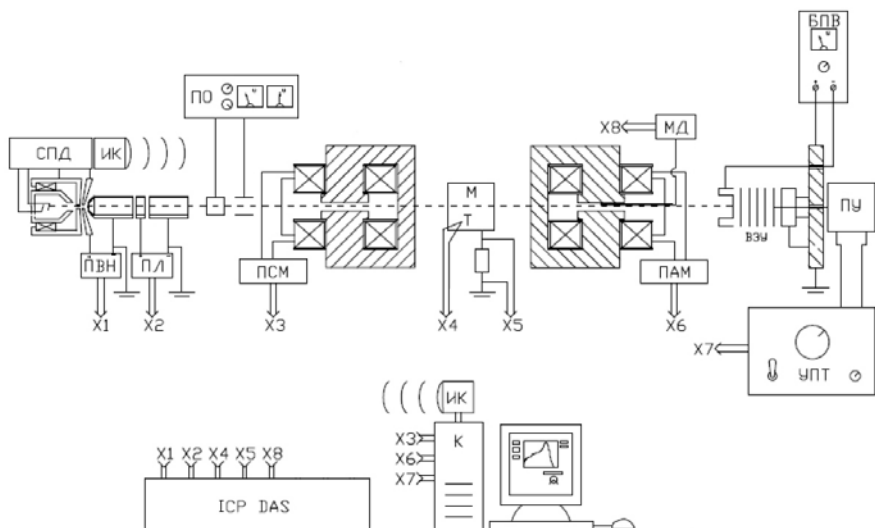


Рис. 2. Схема автоматизации управления ионным пучком. СПД – система питания разряда дуоплазматрона, ИК – инфракрасный порт, ПВН – питание вытягивающего напряжения, ПЛ – питание линзы, ПО – питание отклоняющих пластин, ПСМ – питание сепарирующего магнита, М – мишень с термонапарой Т, ПАМ – питание анализирующего магнита, БПВ – блок питания ВЭУ, ПУ – предусилитель, УПТ – усилитель постоянного тока, МД – датчик магнитного поля, К – компьютер со встроенной платой сбора данных. Пунктиром показан ионный пучок. X1-X8 - разъемы, соединяющие блоки питания с системой сбора данных.

По сигналу с магнитного датчика определяется величина магнитного поля в области дисперсии пучка одного из магнитов. Величина ионного тока на мишень измеряется с помощью высокоомного шунта, соединенного с платой. Сигнал с ВЭУ усиливается предусилителем, усилителем и тоже поступает на АЦП. Система усиления сигнала с ВЭУ заимствована из комплекса питания монопольного масс-спектрометра МХ-7304 и работает в токовом режиме усиления. Управление вытягивающим и фокусирующими напряжениями осуществляется также путем подачи соответствующих аналоговых сигналов на высоковольтные блоки питания. С этих же блоков снимаются показания реального выставленного напряжения и токов, протекающих через эти блоки.

На рис. 3. приведен вид интерфейса программы, управляющей системой автоматизации ионного тракта и спектрометра. Программное обеспечение создано на основе среды LabWindows CVI, и включает в себя следующие возможности:

1. Пошаговое измерение импульсных спектров осуществляется либо с постоянным шагом по импульсу, либо с постоянным относительным разрешением, либо развертка производится с минимальной шириной канала, определяемой минимальным шагом напряжения на ЦАПе платы.
2. Для каждого канала спектра проводится измерение величин ионного тока на мишень, сигнала с ВЭУ, сигнала с датчика магнитного поля, ускоряющего ионы напряжения, температуры мишени (измеряемой с помощью термопары) и реального времени.
3. Для каждого энергетического канала проводится фильтрации шумов посредством усреднения сигнала в заданном интервале времени с заданной частотой дискретизации.
3. Доли различных массовых компонент в пучке измеряются с помощью сепарирующего магнита и регистрации тока на мишень. Импульсные спектры отраженного пучка измеряются с помощью анализирующего электромагнита. После соответствующей процедуры преобразования получается массовый и энергетический спектр анализируемого пучка.
4. Ведение постоянной записи в файл журнала эксперимента. Регистрируются температура мишени, величина магнитного поля анализатора, ионный ток на мишень, сигнал с ВЭУ и время.

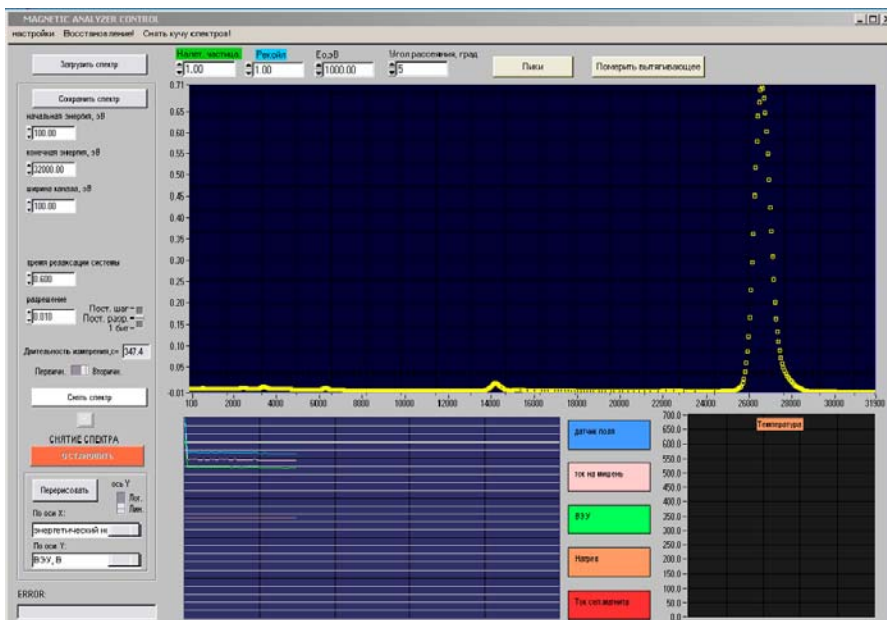


Рис. 3. Интерфейс программы управления установкой.

Все основные узлы установки помещаются в отдельных вакуумных камерах, управляются отдельными блоками питания, а программа автоматизации позволяет производить реконфигурацию измеряемых параметров. Таким образом модульность установки может быть использована для проведения экспериментов с различной геометрией и последовательностью элементов ионного тракта.

Глава 3

В третьей главе представлены результаты экспериментов по измерению энергетических спектров молекулярных ионов и их фрагментов при бомбардировке мишеней из вольфрама и углерода.

Эксперимент с вольфрамовой мишенью был сделан на описанной в главе 2 установке с использованием различных изотопных комбинаций исходных молекулярных ионов водорода. Угол скольжения был равен 3° , а рассеяния – 6° . Мишенью служил поликристаллический механически отполированный вольфрам. Перед измерением поверхность была очищена пучком Ag^+ с энергией в 5 кэВ.

На рис. 4 представлен характерный энерго-масс-спектр вторичного пучка при бомбардировке поверхности ионами D_2H^+ с начальной энергией 3 кэВ. Хорошо видны различные фрагменты диссоциации и выжившие первичные ионы.

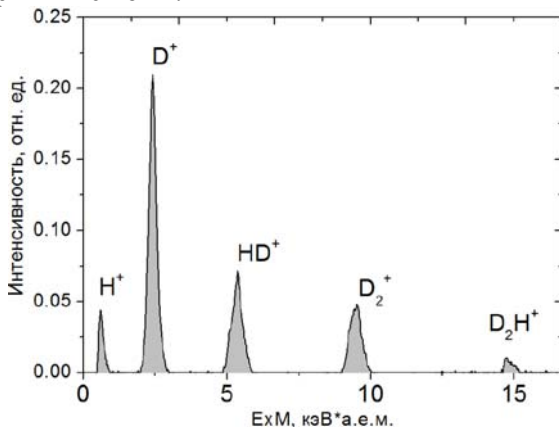


Рис. 4. Спектр вторичного пучка бомбардировке поверхности вольфрама ионами D_2H^+

Для энергетического спектра каждой компоненты измерена относительная полуширина, то есть отношение ширины на половине высоты к начальной энергии частицы. Результаты измерений представлены на рис. 5 и 6 для ионизированных атомарных и

молекулярных фрагментов соответственно. Особенностью этих наблюдений является впервые зарегистрированный изотопный эффект: уширение спектра дейтерия различно для исходной молекулы HD^+ и D_2^+ , а также для D_3^+ и D_2H^+ .

Зависимости относительной полуширины для выживших D_2^+ , HD^+ и изначально атомарного D^+ хорошо аппроксимируется функцией вида:

$$\frac{\Delta E_{1/2}}{E} = a + b \cdot E + \frac{c}{\sqrt{E}}, (1)$$

где a, b и c – постоянны для выбранной молекулы и фрагмента.

Для описания уширения спектра фрагментов при диссоциации гетероядерных ионов за счет взрывных моделей выведена следующая формула:

$$\frac{\Delta E_{1/2}^{\text{expl}}}{E} = 4 \sqrt{\frac{I \cdot m_2}{E \cdot m_1 \cdot (m_1 + m_2)}}, (2)$$

где m_1 – масса исследуемого фрагмента, m_2 – масса второго фрагмента, I – энергия расталкивания в системе центра масс, или энергия взрыва. Взрывная диссоциация может происходить за счет кулоновского расталкивания, но в исследуемой области энергий для описания уширения используется механизм нейтрализационной диссоциации. Это уширение добавляется к уже полученным кривым, полученным при аппроксимации формулой (1) для соответствующих исходных ионов. Затем, с использованием энергии взрывной диссоциации I в (2) как подгоночного параметра, были получены кривые, приведенные на рис. 5 и 6 для фрагментов молекулярных ионов после диссоциации. Для них указаны значения энергий расталкивания, соответствующие наилучшей подгонке (погрешность определения 0.1 эВ).

Как видно, данная модель хорошо описывает молекулярный, и в том числе изотопный эффект, то есть зависимость уширения от массы второго фрагмента m_2 в формуле (2). Кроме того, в рамках этой модели все уширения могут быть описаны одной энергией взрыва 1.1 ± 0.1 эВ. Это величина совпадает с энергией взрыва 1 эВ, полученной в работе [18] и немного меньше, чем 1.5 эВ, полученной в [19].

Измеренные доли в отраженном пучке выживших ионизированных молекул и доли двухатомных ионизированных фрагментов трехатомных молекул соответственно представлены на рис. 7 и 8.

Энергетические зависимости хорошо аппроксимируются функцией вида $Y(E) = A \cdot e^{-E/B}$. Такая же аппроксимация подходит и для вероятности образования иона D_2^+ из D_2H^+ . При отсутствии изотопных эффектов вероятность образования HD^+ из D_2H^+ в 2 раза больше, а D_2^+ из D_3^+ - в 3, что соответствует эксперименту – рис. 8. Кроме того, вероятность

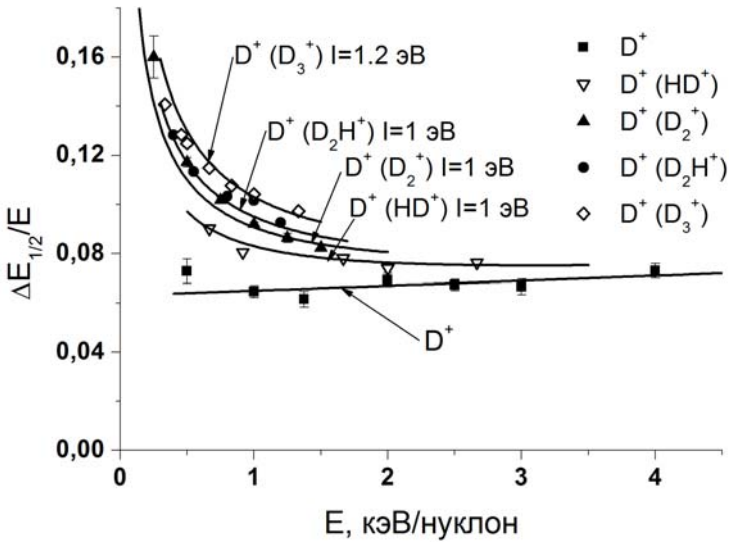


Рис. 5. Зависимость относительных полуширин изначально атомарного дейтрона и дейтрона как фрагмента различных молекулярных ионов, от начальной энергии на нуклон.

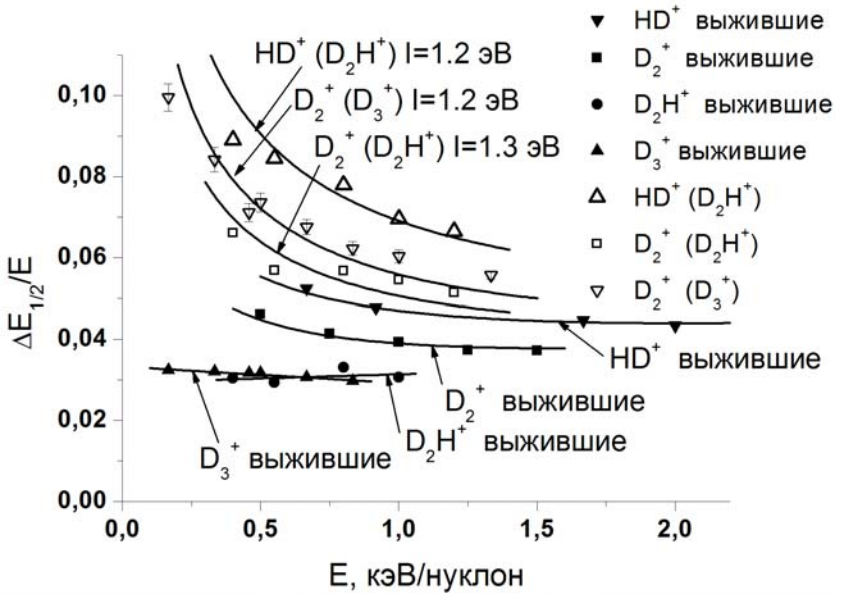


Рис. 6. Зависимость относительных полуширин различных отраженных молекулярных ионов и их ионизованных молекулярных фрагментов от начальной энергии на нуклон.

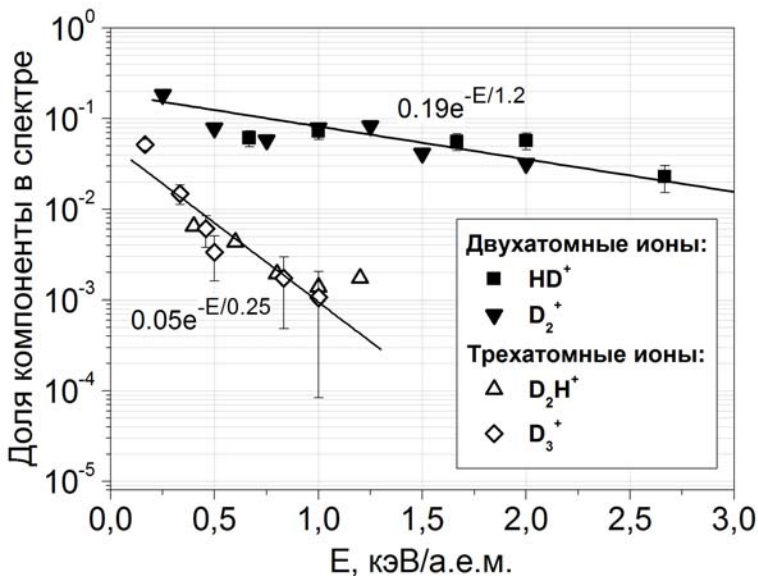


Рис. 7. Доли в спектре выживших при отражении от вольфрама молекулярных ионов. Линии – аппроксимация формулой $Y(E)=A \cdot e^{-E/B}$.

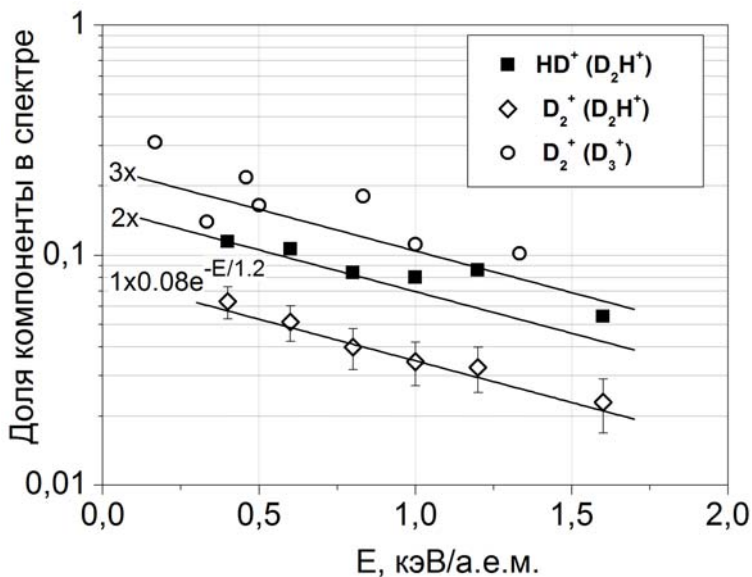


Рис. 8. Доли двухатомных ионизированных фрагментов для исходных трехатомных молекулярных ионов. Линии – аппроксимация формулой $Y(E)=P \cdot A \cdot e^{-E/B}$, где P – фиксированная вероятность образования пары.

выживания зависит от количества атомов в молекуле, но не от ее изотопного состава – рис. 7. То есть изотопная зависимость проявляется в уширении энергетических спектров фрагментов, но не в вероятности фрагментации и выживания молекулярного иона. Двухатомные ионы выживают гораздо лучше, чем трехатомные, причем изотопный состав иона не влияет на вероятность диссоциации.

Для трехатомных ионов показатель экспоненты при E в 4.8 раз больше, то есть диссоциация трехатомных ионов требует гораздо меньших затрат энергии и более чувствительна к скорости молекулы. Доля выживших трехатомных ионов гораздо меньше доли получившихся ионизированных фрагментов. Для выживших двухатомных ионов и для двухатомных фрагментов трехатомных ионов зависимость от энергии оказывается одинаковой. Это позволяет заключить, что диссоциация трехатомных ионов происходит ступенчато, и доминирующим процессом, приводящим к образованию одноатомных ионизированных фрагментов, является диссоциация двухатомных ионов, происходящая так же, как и для изначально двухатомных молекулярных ионов.

Для проверки полученных результатов в случае с графитовой мишенью и для выявления зависимости диссоциации от геометрии рассеяния был предложен и поставлен совместный с Институтом атомной физики в Белграде эксперимент по отражению ионов водорода от высокоориентированного пиролитического графита. На рис. 9 представлены относительные полуширины для отраженных от графита изначально атомарных ионов водорода и для фрагментов диссоциации H_2^+ .

Существование молекулярного эффекта хорошо подтверждается в области малых скользящих углов, а с увеличением этого угла эффект исчезает. Уширение зависит от угла падения, но не от угла рассеяния: для $\alpha=3^\circ$ уширение практически не меняется с Θ , кроме того, при $\Theta=15^\circ$ для $\alpha=3^\circ$ уширение спектров фрагментов наблюдается, а для $\alpha=8^\circ$ - нет. Отсюда можно предположить, что для диссоциации гораздо более важны процессы, происходящие во время приближения иона к поверхности, чем происходящие при удалении иона от поверхности.

Глава 4

В этой главе описан расчетный код, созданный для анализа процессов взаимодействия молекулярных ионов с твердым телом. В основу вычислений положен принцип молекулярной динамики: классические уравнения движения решаются методом центральной

разницы с адаптивным шагом по времени. Входными параметрами являются: геометрия кристаллической решетки и налетающей молекулы.

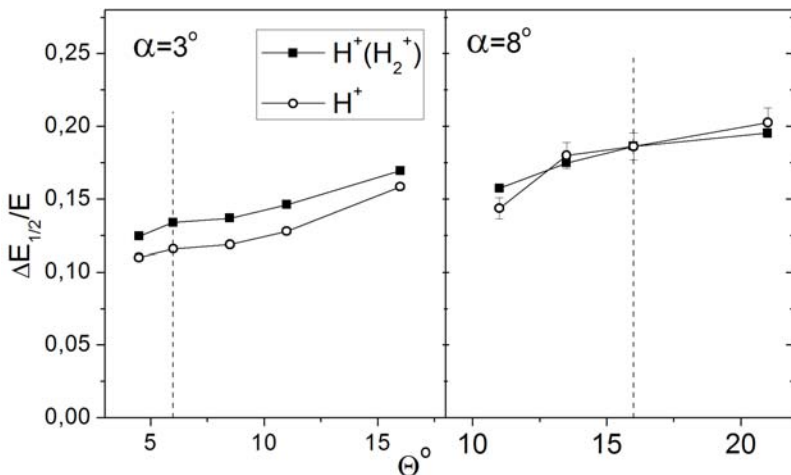


Рис. 9. Зависимость относительных полуширин изначально атомарного H^+ , и H^+ как фрагмента H_2^+ , от угла рассеяния для двух углов падения. Пунктир отмечает геометрию зеркального рассеяния. Энергия составляет 1 кэВ/нуклон, мишень – высокорентрированный пиролитический графит (НОРГ).

Процедура позволяет моделировать как взаимодействие с монокристаллами, так и с поликристаллами. Неупругие потери включены как сила трения, пропорциональная электронной плотности среды. Особенностью модели является то, что электронная плотность, входящая в формулу расчета неупругих потерь, являясь постоянной внутри твердого тела, за его поверхностью плавно убывает в соответствии с [20].

На рис. 10 представлены расчетные и экспериментальный спектры дейтронов, образовавшихся при распаде HD. Представлено два вида моделирования: с включением силы торможения за счет неупругих потерь и без нее. Первый вид моделирования переоценивает энергетические потери частицы при отражении от поверхности. Однако полуширина расчетных спектров соответствует эксперименту для дейтронов, образовавшихся из D_2 и HD – рис. 11. Целью данного этапа исследований является исследование разницы в полуширинах между спектрами фрагментов и спектрами изначально атомарных частиц.

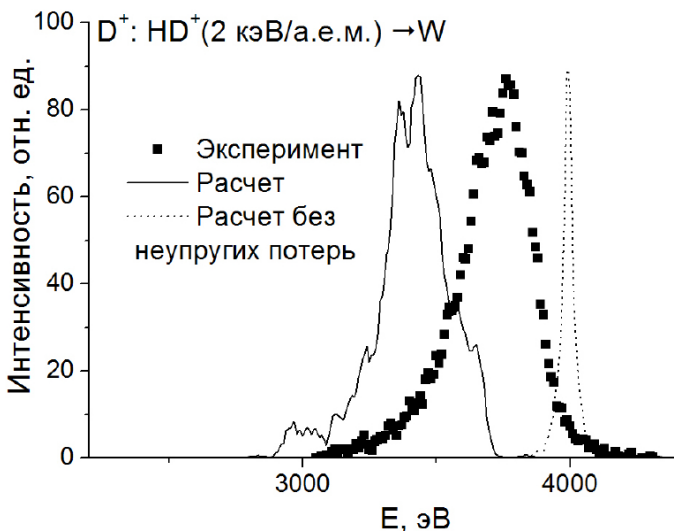


Рис. 10. Расчетные и экспериментальный энергетические спектры дейтронов, при фрагментации молекулы HD с энергией 6 кэВ.

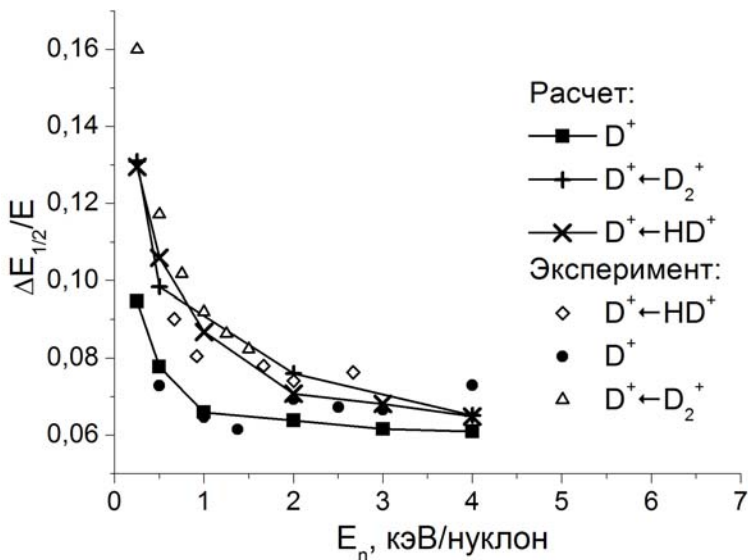


Рис. 11. Сравнение расчетной относительной полуширины с экспериментальной для отражения иона D^+ , как изначально атомарного, так и образовавшегося при диссоциации D_2^+ и HD^+ .

Вид зависимости $\Delta E_{1/2}^{mol}/E$ от начальной энергии на нуклон представлен на рис. 12. Аналогично рис. 11 представлены два вида расчета: с учетом неупругих потерь и без. Видно, что последнего недостаточно, чтобы воспроизвести молекулярный эффект. Основную роль в формировании уширения в расчете играют неупругие потери. Расчет воспроизводит энергетическую зависимость молекулярного эффекта, но не изотопную.

Было предположено, что расхождение между расчетным и экспериментальным спектрами вызвано неровностью поверхности мишени. Оценка роли шероховатости в формировании исследуемого уширения основывается на предположении, что все отраженные на малый угол в 6° ионы отражаются от небольших плоских участков поверхности. Размеры атомной решетки мишени, участвующей в расчете, были ограничены величиной R_{cut} . Были получены зависимости относительной полуширины (рис. 13) и положения максимума пика (рис. 14) от этого параметра. С уменьшением R_{cut} , что соответствует более шероховатой поверхности, расчетное положение максимума пика приближается к экспериментальному, но при этом уменьшается относительная ширина пика.

Таким образом, даже с учетом шероховатости мишени, кинематическое взаимодействие фрагментов и разница в неупругих потерях не могут быть ответственны за формирование наблюдаемого уширения спектра ионизированных фрагментов молекулярных ионов. Влияние неупругих потерь приводит к большим потерям, чем в эксперименте, что свидетельствует либо о более разреженной электронной плотности вблизи поверхности, либо о нелинейном и/или нелокальном механизме неупругих потерь. С уменьшением неупругих потерь пропорционально уменьшится и уширение спектра фрагментов. Таким образом, для более точного описания наблюдаемого эффекта необходим учет искажения потенциала межатомного взаимодействия за счет экранировки электронами среды.

В работе [21] были получены распределения по энергии в системе центра масс молекулы E_{expl} и по углу Θ_{expl} между межатомной осью и нормалью к поверхности для нейтральных фрагментов диссоциации нейтральных молекул водорода при отражении от поверхности монокристалла меди. На рис. 15 приведены данные этого эксперимента, а справа – результаты расчета для такой же энергии и геометрии рассеяния, произведенные с помощью созданного кода. Вверху распределений указано значение перпендикулярной к поверхности составляющей энергии E_{\perp} ($E_0=3$ кэВ).

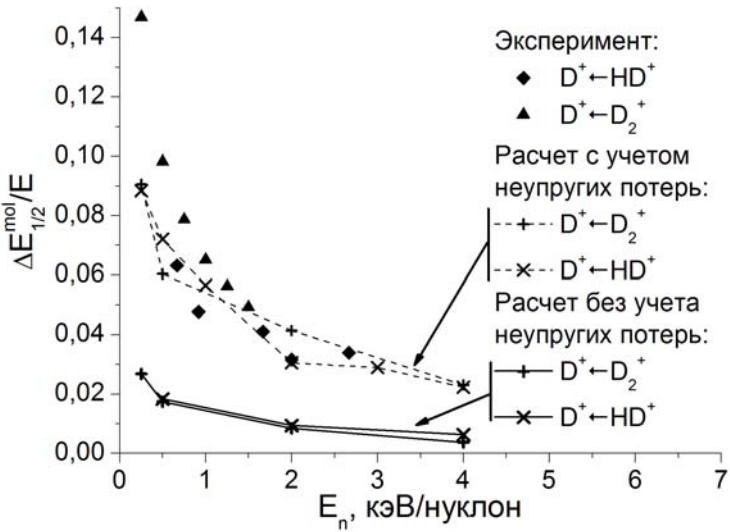


Рис. 12. Расчетный и экспериментальный вклады молекулярного эффекта в относительную полуширину спектров фрагментов.

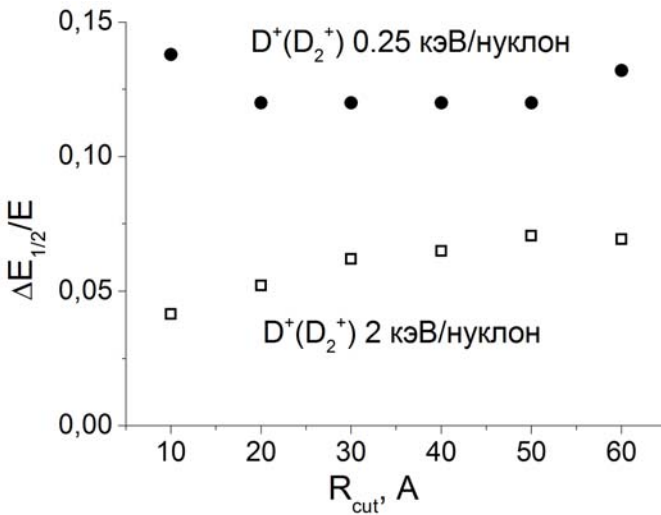


Рис. 13. Расчетные относительные полуширины для фрагментов D_2^+ как функция параметра R_{cut} .

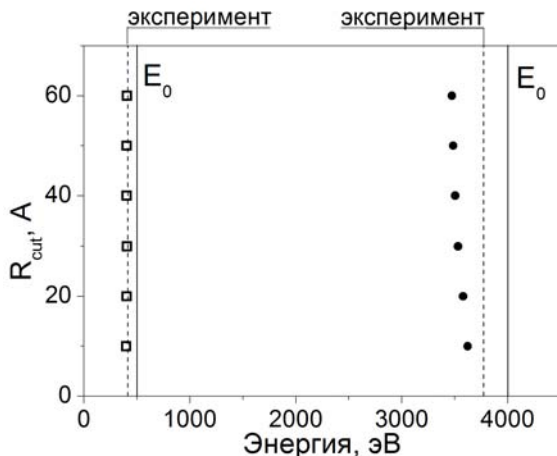


Рис. 14. Расчетное положение максимума пика фрагментов D_2^+ для двух энергий и различных значений параметра R_{cut}

Как видно из графиков, моделирование с помощью разработанного кода не воспроизводит экспериментальные данные при таком же значении $E_{\perp}=4$ эВ, а при $E_{\perp}=33$ эВ воспроизводит зависимость лишь удовлетворительно. При энергиях $E_{\perp}<4$ эВ в эксперименте наблюдается активная диссоциация, но в расчете этого не наблюдается.

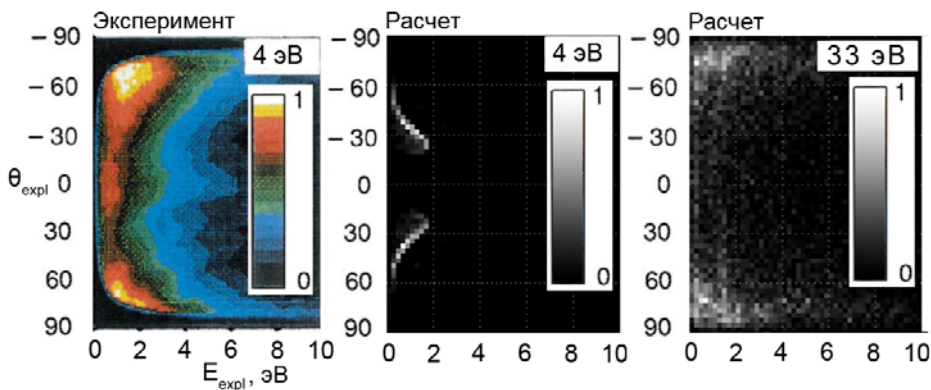


Рис. 15. Нормализованные распределения событий диссоциации по энергии E_{expl} в с.ц.м. молекулы и углу между межатомной осью и нормалью к поверхности Θ_{expl} для скользящего падения нейтральных ионов водорода на монокристалл меди.

Это свидетельствует о доминирующей роли диссоциации либо при возбуждении молекулы в антисвязанное состояние, либо искажением межатомного потенциала при погружении молекулы в электронный газ поверхности. С увеличением E_{\perp} разница неупругих потерь энергии увеличивается, так как частица глубже проникает в электронный газ поверхности, приводя к диссоциации. Сходство расчетного распределения событий с полученным в эксперименте можно объяснить тем, что двухатомная молекула диссоциирует с большей вероятностью при перпендикулярной ориентации межатомной оси молекулы к поверхности для всех описанных механизмов, а затем в силу разницы в скоростях фрагментов и полученной вращательной энергии межатомная ось поворачивается вдоль поверхности.

Эксперимент с медью проводился с участием нейтральных налетающих и отраженных частиц, а в эксперименте с вольфрамом и углеродом использовался первичный ионный пучок и регистрировались только ионы. Для результирующих ионов механизм диссоциационной нейтрализации не играет такого значения для диссоциации (и уширения спектров), как в случае с нейтральными фрагментами. Это связано с характерными временами процессов и, кроме того, экранировка потенциала вблизи поверхности сильно снизит энергию расталкивания, как показано в литературном обзоре.

Проведенные сравнения расчетных данных и экспериментов с ионами и нейтральными частицами показывает вклад различных моделей в процесс диссоциации, и позволяет определить основные ответственные за диссоциацию механизмы.

Заключение

В заключении представлены выводы из диссертационной работы.

- Разработана методика для измерения спектров ионизированных фрагментов диссоциации молекулярных ионов при отражении от поверхности. Для малых углов падения и рассеяния разработана специальная геометрия эксперимента. Создана и автоматизирована установка для исследования поверхности пучками медленных ионов.
- На основе экспериментально измеренных уширений энергетических спектров фрагментов диссоциировавших гомо- и гетероядерных молекулярных ионов водорода впервые обнаружен изотопный эффект в уширении энергетических спектров фрагментов диссоциировавших молекулярных ионов водорода. Измерения вероятности выживания двух и трехатомных молекулярных ионов водорода различного изотопного состава при отражении от поверхности показали, что изотопный эффект в вероятности фрагментации и выживания отсутствует.
- Экспериментально измеренные доли различных компонент в пучке отраженных от поверхности двух и трехатомных молекулярных ионов водорода свидетельствуют о ступенчатом характере фрагментации трехатомных ионов водорода.
- С помощью созданного расчетного кода вычислен вклад упругого взаимодействия и неупругих потерь энергии в формирование спектра фрагментов, а также возможный вклад шероховатости. Показано, что этих механизмов для описания экспериментальных данных недостаточно и требуется привлечение других моделей: для ионизированных фрагментов молекулярных ионов водорода – это искажение межатомного потенциала при взаимодействии с электронами приповерхностного слоя, а для нейтральных фрагментов нейтральных ионов водорода – искажение межатомного потенциала при взаимодействии с электронами приповерхностного слоя и возбуждение в антисвязанное состояние.

Список цитируемой литературы

1. Nestor A. Arista // Nucl. Instr. and Meth. B. 2002. V. 193. P. 227.
2. Гриднева Е.А., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н. // Известия РАН. Серия Физическая. 2006. Т. 70. С. 838.
3. Гриднева Е.А., Курнаев В.А., Трифонов Н.Н., Жданов С.К. // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 77. С. 15.
4. Bitensky I.S., Parilis E.S., Wojciechowski I.A. // Instr. and Meth. B. 1992. V. 67. P. 359.
5. Bitensky I.S., Parilis E.S. // Surf. Sci. 1985. V. 161. P. L565.
6. R. Harder, Nesbitt A., Herrmann G., Tellioglu K., Rechten J.H., Snowdon K.J. // Surf. Sci. 1994. V. 316. P. 63.
7. Snowdon K.J., Harder R., Nesbitt A. // Surf. Sci. 1992. V. 363. P. 42.
8. Nesbitt A., et. al. // Chem. Phys. 1994. V. 179. P. 215.
9. Harder R., Nesbitt A., Golichowski A., Herrmann G., Snowdon K.J. // Surf. Sci. 1994. V. 316. P. 47.
10. Nesbitt A., Harder R., Herrmann G., Golichowski A., Snowdon K.J. // Faraday Discuss. 1993. V. 96. P. 317.
11. Willerding B. et. al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2031.
12. Imke U., Snowdon K.J., Heiland W. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 41.
13. Imke U., Snowdon K.J., Heiland W. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 41.
14. Diaz-Valdes J., et. al. // Nucl. Instr. and Meth. B. 2007. V. 254. P. 69.
15. Bitensky I.S., Verleger V.Kh., Wojchecowski I.A. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1997. V. 125. P. 201.
16. Holloway S., Gadzuk J.W. // J. Chem. Phys. 1985. V. 82. P. 5203.
17. Harris J., Andersson S. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. P. 1583.
18. Willerding B., Steininger H., Snowdon K.J., Heiland W. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1984. V. 2. P. 453.
19. Willerding B., Snowdon K., Heiland W. // Z. Phys. B. 1985. V. 59. P. 435.
20. Smith J. R. // Phys. Rev. 1979. V. 181. P. 522.
21. A. Nesbitt, R. Harder, G. Herrmann, A. Golichowski, and K.J. Snowdon. Faraday. Discuss., 96:317–323, 1993.

Список публикаций по теме диссертации

1. Мошкунов К.А., Курнаев В.А. Изотопный эффект в уширении энергетических спектров отраженных от поверхности фрагментов молекулярных ионов водорода. **Известия Российской Академии Наук. Серия физическая.** № 5. Т 72. с 661, 2008.
2. Мошкунов К.А., Курнаев В.А., Синельников Д.Н., Смирнов С.В. Эффект уширения энергетических спектров фрагментов молекулярного иона при малоугловом отражении от поверхности. **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.** 2008. №3. С.3.
3. Moshkunov K.A., V.A. Kurnaev. Isotopic effect in the energy spectra broadening of the fragments of different scattered hydrogen molecular ions. Труды восемнадцатой международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП-2007» в 2 т., т. 1, с. 252.
4. K.A. Moshkunov, E.A. Gridneva, V.A. Kurnaev, N.N. Trifonov. Hydrogen isotopes energy spectra broadening for keV molecular ions scattering. Abstracts of the 17th International Conference on Atomic Collisions and Solids (ICACS2006), P-A49.
5. Мошкунов К.А., Курнаев В.А. Исследование параметров тонких пленок легких элементов пучками медленных ионов. Тезисы докладов XXXVI Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, НИИЯФ МГУ, 2006, с. 94.
6. Мошкунов К.А., Курнаев В.А., Шатунов В.Г., Гриднева Е.А. Установка для исследования и модификации материалов пучками медленных ионов. Материалы Всероссийского симпозиума молодых ученых, студентов и аспирантов "Фундаментальные проблемы приложений физики низкотемпературной плазмы", Петрозаводск, 2005., с. 224.
7. Мошкунов К.А., Курнаев В.А. Применение магнитного спектрометра для анализа взаимодействия легких ионов с материалами ТЯР. Тезисы докладов Двенадцатой международной научно-технической конференции студентов и аспирантов, МЭИ, 2006, т. 3, с. 119.