

УДК 537.534

ОБ ИЗМЕНЕНИИ ЭМИССИИ АТОМОВ С ПОВЕРХНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА НИКЕЛЯ ПРИ МАГНИТНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

Н. Г. Ананьева, А. Н. Матвеев, В. Н. Самойлов

(кафедра общей физики для физического факультета)

С помощью моделирования на ЭВМ рассчитаны особенности эмиссии атомов из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni в направлениях, близких к нормали к поверхности, и впервые исследованы изменения траекторий эмитируемых частиц при $p \rightarrow f$ переходе.

Введение. В последнее время продолжают активно разрабатываться проблемы, связанные с определением величины энергии связи атома на поверхности монокристалла и с расчетом конфигурации поля у поверхности для эмитируемых частиц. Получили дальнейшее развитие расчеты на ЭВМ, в результате которых были выявлены новые особенности эмиссии атомов верхнего слоя с поверхности кристалла [1—3]. Актуальность таких работ обусловлена в большой степени сильным влиянием стадии эмиссии с поверхности на число, угловые и энергетические распределения распыленных частиц. Развитие современных методов диагностики поверхности ионными пучками предъявляет жесткие требования к знаниям о последней стадии распыления, которой является эмиссия атома с поверхности.

Движение атомов, выбитых с поверхности монокристалла, происходит в поверхностном поле сложной формы. Конфигурация поля у поверхности грани (001) Ni была рассчитана в работах [4, 5]. Согласно работе [6], переход Ni из ферро- в парамагнитное состояние ($f \rightarrow p$) сопровождается изменением потенциала взаимодействия $U(r)$ двух атомов Ni. Это связано с переходом от параллельной к хаотической ориентации спинов. Изменение $U(r)$ при $f \rightarrow p$ переходе приводит к изменению энергии связи E_b атомов на поверхности [7, 8] и конфигурации поля у поверхности монокристалла. Это в свою очередь должно привести к изменению характера эмиссии атомов верхнего слоя. Изучению особенностей эмиссии атомов с поверхности монокристалла и изучению изменения эмиссии при $f \rightarrow p$ переходе посвящена настоящая работа.

Модель расчета. Исследовалась эмиссия атома из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni в направлениях, близких к нормали к поверхности. Предполагалось, что вылет рассматриваемого атома не изменяет положений остальных атомов кристалла. Таким образом, траектория эмитируемого атома прослеживалась в статическом поле кристалла. Такое приближение можно использовать при условии, что за время вылета частицы не происходит заметного изменения положений окружающих атомов. Это условие выполняется для выбранного диапазона углов и энергий вылета, для которых отсутствуют сильные столкновения эмитируемой частицы с окружающими атомами, а время вылета оказывается настолько малым, что последние не успевают сместиться в сторону образовавшейся вакансии. Подобная модель уже использовалась в работах [9, 10] для исследования эмиссии атомов с поверхности в целях определения параметра кривизны сферического потенциального барьера с преломлением на поверхности монокристалла. Кристалл моделировался с помощью блока, состоявшего из 591 атома Ni; атомы были расположены в 7 слоях, параллельных грани (001).

Анализ результатов работы [7], в которой был проведен расчет величины блока, необходимого для вычисления энергии связи атома на поверхности грани (001) монокристалла Ni с заданной точностью, показывает, что величина блока атомов, использованного в настоящей работе, является достаточной для расчетов особенностей эмиссии атома с поверхности с высокой точностью. Тепловые колебания атомов, возможные дефекты кристаллической решетки и релаксация поверхностных слоев атомов монокристалла не учитывались.

В качестве потенциала взаимодействия атом-атом в p -состоянии был использован потенциал Морзе $U_p(r) = D(\exp(-2\alpha(r-r_0)) - 2\exp(-\alpha(r-r_0)))$ с константами $D=0,4205$ эВ, $\alpha=1,4199 \text{ \AA}^{-1}$, $r_0=2,780 \text{ \AA}$ [11]. В f -состоянии, согласно [6], $U_f(r) = U_p(r) + \Delta U_f(r)$, где $\Delta U_f(r)$ — добавка к потенциалу за счет спин-спинового обменного взаимодействия двух атомов Ni в f -состоянии. Эта добавка равна $\Delta U_f(r) = -5,16 \exp(-0,8112r^2)$ (здесь ΔU измеряется в электрон-вольтах, а r — в ангстремах). Радиус действия потенциала был бесконечным. Атом выбивался с энергией E_0 под углами θ_0 и φ_0 (угол θ_0 отсчитывался от нормали к поверхности, угол φ_0 — от направления $\langle 001 \rangle$ в плоскости поверхности). Интегрирование уравнений движения проводилось методом средней силы [12] до тех пор, пока атом не достигал расстояния 7 Å от поверхности. Здесь для атома рассчитывались углы θ_e и φ_e . Критерием для выбора шага интегрирования служило сохранение суммарной механической энергии эмитируемого атома. Динамика вылета рассчитывалась по программе QD EJECT (версия SC).

Результаты и обсуждение. Зависимости угла отклонения вектора скорости эмитируемой частицы θ от расстояния от поверхности z p -Ni для $\varphi_0=0$ и набора значений начальной энергии E_0 и начального угла вылета θ_0 представлены на рис. 1. Анализ таких зависимостей показал, что траектории эмитируемых атомов для рассмотренных диапазонов изменения начальной энергии и углов вылета ($E_0 \geq 7$ эВ ($E_{bp} \approx 5,500$ эВ, $E_{bf} \approx 5,775$ эВ [7]), $\theta_0 \leq 15^\circ$, φ_0 — произвольный) имеют существенную особенность, заключающуюся в том, что сначала (для $E_0=7$ эВ и $\varphi_0=0$ для p -Ni до расстояния $z \approx 1,6$ Å от поверхности) атомы отклоняются к нормали к поверхности в выпуклом (фокусирующем) поле, а далее — от нормали в вогнутом (расфокусирующем) поле (о конфигурации поля у поверхности грани (001) Ni см. в работе [4]). Эта особенность траекторий вылетающих атомов была получена в работе [9]. Оказалось также, что в конечном итоге эмитируемый атом отклоняется от нормали к поверхности (т. е. $\theta_e > \theta_0$), и, таким образом, потенциальное поле у поверхности дефокусирует траектории атомов, эмитируемых вблизи направления $\langle 001 \rangle$. Это соответствует дальнодействующему характеру притяжения вылетающего атома к кристаллу. Существующие в настоящее время аналитические модели распыления не описывают отклонения атома к нормали к поверхности на начальном этапе вылета (в частности, в силу того, что в этих моделях не учитывается корректным образом многочастичный характер взаимодействия вылетающей частицы с кристаллом). Исключение здесь составляет, по-видимому, только аналитический расчет [13], в рамках которого, однако, также нельзя получить действительной зависимости угла отклонения вылетающего атома θ от его расстояния до поверхности z .

Зависимости угла отклонения $\theta_{\min} - \theta_0$ от угла θ_0 для p - и f -Ni, $\varphi_0=0$ и набора значений начальной энергии E_0 представлены на рис. 2. Величина отклонения $\theta_{\min} - \theta_0$ почти линейно убывает с увеличением θ_0 и возрастает с ростом E_0 . Последнее естественно связать с меньшим влиянием поля у поверхности монокристалла на траекторию высоко-

энергетичной частицы по сравнению с его влиянием на траекторию низкоэнергетичной частицы. Абсолютная величина отклонения $\theta_{\min} - \theta_0$ невелика (например, для $E_0 = 7$ эВ, $\varphi_0 = 0$ и $\theta_0 = 15^\circ$ она достигает всего $\sim 3,8^\circ$ для p -Ni и $\sim 3,0^\circ$ для f -Ni).

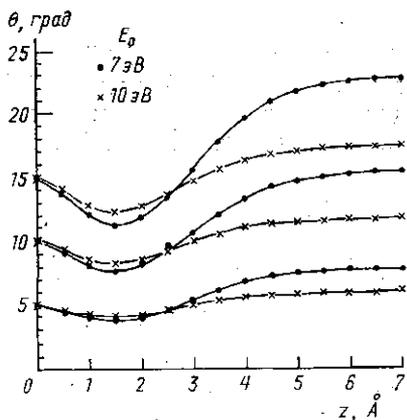


Рис. 1

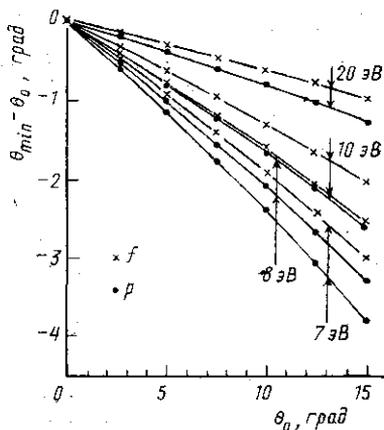


Рис. 2

Зависимости угла отклонения частицы $\theta_e - \theta_0$ от угла θ_0 для $\varphi_0 = 0$ и набора энергий E_0 для p - и f -Ni представлены на рис. 3. Отклонение $\theta_e - \theta_0$ почти линейно растет с увеличением θ_0 . Уменьшение величины отклонения $\theta_e - \theta_0$ с ростом E_0 также связано с меньшим влиянием поля у поверхности на движение высокоэнергетичной частицы. Для малых значений E_0 наблюдается значительная расфокусировка (например, для $E_0 = 7$ эВ, $\varphi_0 = 0$, и $\theta_0 = 15^\circ$ $\theta_e - \theta_0$ достигает $\sim 7,7^\circ$ для p -Ni и $\sim 11,9^\circ$ для f -Ni). Модель сферического барьера (без преломления) не описывает этих изменений (в расчетах по этой модели для всех распыленных атомов $\theta_e - \theta_0 = 0$ вне зависимости от E_0 и θ_0). В то же время плоский барьер дает завышенное значение $\theta_e - \theta_0$ (для $E_0 = 7$ эВ, $\varphi_0 = 0$ и $\theta_0 = 15^\circ$ в $\sim 2,48$ раза для p -Ni). В работе [9] было показано, что при малых углах вылета θ_0 для описания зависимости угла отклонения $\theta_e - \theta_0$ от угла θ_0 возможно применение модели сферического потенциального барьера с преломлением.

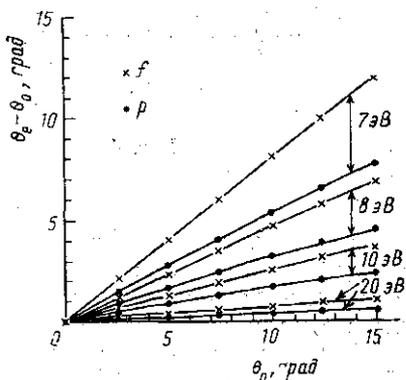


Рис. 3

Переход из p - в f -состояние приводит к заметному возрастанию угла θ_{\min} (см. рис. 2). Возрастание угла θ_{\min} при переходе Ni из парамагнитного в ферромагнитное состояние объясняется характером изменений поля у поверхности грани (001) Ni при фазовом переходе и связано, в частности, с уменьшением сечения взаимодействия атом-атом при $p \rightarrow f$ переходе.

Зависимости относительного изменения угла θ_{\min} при $p \rightarrow f$ переходе $(\theta_{\min f} - \theta_{\min p}) / \theta_{\min p}$ от угла θ_0 для $\varphi_0 = 0$ и набора значений начальной энергии E_0 представлены на рис. 4. Относительное изменение угла θ_{\min} при $p \rightarrow f$ переходе слабо растет с ростом θ_0 и уменьшается с ростом E_0 . Это изменение не очень велико (для $E_0 = 7$ эВ, $\varphi_0 = 0$ и $\theta_0 = 15^\circ$ оно составляет $\sim 6,8\%$). В то же время абсолютная величина относительного изменения угла отклонения $\theta_{\min} - \theta_0$ при $p \rightarrow f$ переходе $|(\theta_{\min f} - \theta_0) - (\theta_{\min p} - \theta_0)| / (\theta_{\min p} - \theta_0)$ достигает $\sim 20-23\%$ (например, при $E_0 = 7$ эВ и $\varphi_0 = 0$ эта величина равна $\sim 21\%$ для $\theta_0 = 2,5^\circ$ и $\sim 20\%$ для $\theta_0 = 15^\circ$), что велико по сравнению с изменением при $p \rightarrow f$ переходе энергии связи атома на поверхности грани (001) Ni, которое равно $\sim 5,0\%$ [7].

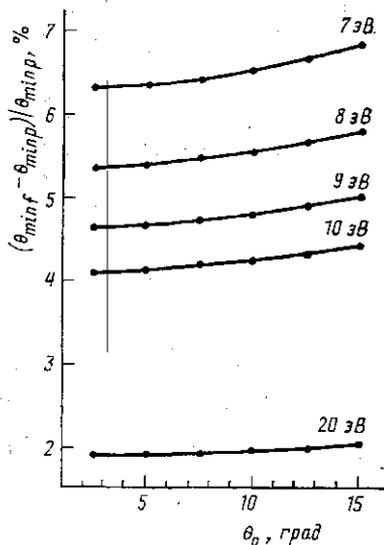


Рис. 4

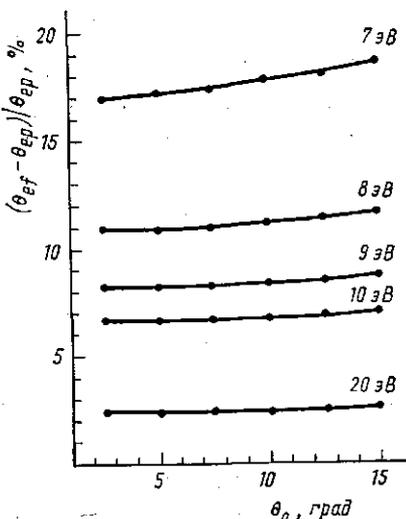


Рис. 5

Переход из p - в f -состояние приводит к существенному возрастанию угла вылета θ_e (см. рис. 3). Возрастание угла θ_e при $p \rightarrow f$ переходе связано, в частности, с увеличением энергии связи атома, т. е. притяжения атома к поверхности кристалла при таком фазовом переходе.

Зависимости относительного изменения угла θ_e при $p \rightarrow f$ переходе $(\theta_{ef} - \theta_{ep}) / \theta_{ep}$ от угла θ_0 для $\varphi_0 = 0$ и набора энергий E_0 представлены на рис. 5. Относительное изменение θ_e при $p \rightarrow f$ переходе уменьшается с увеличением E_0 и слабо растет с ростом θ_0 . Увеличение E_0 приводит к меньшей чувствительности траектории вылетающего атома к изменению поля у поверхности монокристалла при $p \rightarrow f$ переходе. Для сравнительно малых E_0 это изменение весьма велико (по сравнению с изменением энергии связи при $p \rightarrow f$ переходе). Например, для $E_0 = 7$ эВ, $\varphi_0 = 0$ и $\theta_0 = 15^\circ$ оно составляет $\sim 19\%$. Таким образом, траектории низкоэнергетичных распыленных атомов, эмитируемых вблизи направления $\langle 001 \rangle$, являются значительно более расфокусированными для f -состояния. Угол отклонения $\theta_e - \theta_0$ оказывается еще более чувствительным к изменению магнитного состояния монокристалла. Для $\varphi_0 = 0$ и $\theta_0 = 15^\circ$ относительное изменение угла отклонения $\theta_e - \theta_0$ при $p \rightarrow f$ переходе $(\theta_{ef} -$

$-\theta_0) - (\theta_{ep} - \theta_0)) / (\theta_{ep} - \theta_0)$ достигает $\sim 55\%$ для $E_0 = 7$ эВ и $\sim 78\%$ для $E_0 = 20$ эВ.

Таким образом, учет малой добавки к потенциалу взаимодействия атом-атом $\Delta U_j(r)$ для Ni в ферромагнитном состоянии приводит к сильному изменению угла отклонения $\theta_{\min} - \theta_0$ при $p \rightarrow f$ переходе. Отклонение конечного угла вылета от первоначального направления эмиссии $\theta_e - \theta_0$ оказывается исключительно чувствительным к изменению магнитного состояния кристалла.

Сравнение результатов, представленных на рис. 4 и 5, показывает, что конечный угол θ_e более чувствителен к изменению магнитного состояния кристалла, чем минимальный угол θ_{\min} . Это может быть связано с тем, что выход на асимптоту $\theta = \theta_e$ происходит в течение более продолжительного конечного этапа вылета (для которого $z > z_{\min}$, $\theta(z_{\min}) = \theta_{\min}$, см. рис. 1) по сравнению с начальным этапом вылета (для которого $z < z_{\min}$). Изменения поля у поверхности монокристалла при $p \rightarrow f$ переходе будут рассмотрены нами в отдельной работе. Разница в изменении поля вблизи узла на поверхности и вдали от поверхности при магнитном переходе также может приводить к большей чувствительности θ_e к изменению магнитного состояния кристалла.

Заключение.

1. В работе с помощью моделирования на ЭВМ в рамках многочастичной квазидинамической модели рассчитаны особенности эмиссии атомов из узла на поверхности грани (001) монокристалла Ni в направлениях, близких к нормали к поверхности, и впервые исследованы изменения траекторий эмитируемых частиц при $p \rightarrow f$ переходе.

2. Обнаруженные особенности траекторий соответствуют сложному влиянию поля у поверхности монокристалла на движение вылетающих атомов.

3. Показано, что существующие в настоящее время аналитические модели распыления не описывают существенных особенностей траекторий атомов, например фокусировки траекторий в направлении к нормали к поверхности на начальном этапе вылета (в частности, в силу того, что в этих моделях не учитывается многочастичный характер взаимодействия вылетающей частицы с кристаллом).

4. Обнаружено, что $p \rightarrow f$ переход Ni приводит к сильному изменению характеристик траекторий эмитируемых частиц.

5. Полученные результаты могут быть полезны для развития представлений об особенностях эмиссии атомов с поверхности монокристалла при ионной бомбардировке, а также для разработки современных методов диагностики магнитного состояния поверхности кристалла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Veen A. van, Wit A. G. J. de, Fluit J. M. // Proc. Sympos. on Sputtering. Perchtoldsdorf (Austria), 1980. P. 226. [2] Gibbs R. A., Holland S. P., Foley K. E. et al. // Phys. Rev. 1981. B24, N 10. P. 6178. [3] Самойлов В. Н. // Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссия: Тез. докл. V Всесоюз. семинара. Харьков, 1988. Ч. 1. С. 86. [4] Самойлов В. Н., Эльтеков В. А. // Взаимодействие атомных частиц с твердым телом: Матер. VIII Всесоюз. конф. М., 1987. Т. 1. С. 109. [5] Samoylov V. N., Ananieva N. G., Eltekov V. A. // Atomic Collisions in Solids: Abstracts 12th. Int. Conf. Okayama (Japan), 1987. P. PD-13. [6] Кувакин М. В., Лусников А. В. // Взаимодействие атомных частиц с твердым телом: Матер. V Всесоюз. конф. Минск, 1979. Ч. 3. С. 36. [7] Самойлов В. Н., Эльтеков В. А., Юрасова В. Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 27, № 2. С. 87. [8] Самойлов В. Н., Филиппс А. Х., Эльтеков В. А. // Диагностика поверхности ионными пучками: Тез. докл. Всесоюз. совещания-семинара. Ужгород, 1985. С. 191. [9] Воробьев П. А., Кувакин М. В., Мотавех Х. А. // Поверхность. 1982. № 3. С. 50. [10] Abdel-Malik T. G., Aly A. A., Abdeen A. M., Motaweh H. A. // Phys.

УДК 536.764

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КРИСТАЛЛАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППОЙ C_{5v}^5

А. И. Лебедев

(кафедра физики полупроводников)

Проведен теоретико-групповой анализ фазовых переходов 2-го рода, допускаемых в кристаллах с пространственной группой $R3m(C_{5v}^5)$. Проанализированы условия появления и устойчивость низкосимметричных фаз, рассмотрена физическая реализация параметра порядка для всех фазовых переходов.

В настоящей работе проведен теоретико-групповой анализ фазовых переходов (ФП) 2-го рода, допускаемых в кристаллах с пространственной группой $R3m(C_{5v}^5)$. Такую структуру, в частности, имеют при низкой температуре (ниже температуры сегнетоэлектрического ФП $O_h^5 \rightarrow C_{5v}^5$) узкозонные полупроводники-сегнетоэлектрики группы A^4B^6 (GeTe, $Pb_{1-x}Ge_xTe$ и др.). Необходимость анализа связана с поиском возможных структур, которые могут возникать в результате последовательных ФП в этих кристаллах, на что указывают некоторые эксперименты [1, 2].

Вопрос о возможных ФП 2-го рода в кристаллах с симморфной пространственной группой (пр. гр.) C_{5v}^5 изучался ранее [3]. В этой работе, однако, были найдены не все возможные ФП; совсем не рассматривались ФП 2-го рода, которые могут происходить в изолированных точках на (p, T) -плоскости; не анализировались условия возникновения и устойчивость образующихся фаз, а также физическая реализация параметра порядка.

В настоящей работе мы следовали подходу, описанному в работе [4]*. Условие вещественности плотности накладывает существенные ограничения на возможные векторы k , характеризующие представления, которые описывают изменение симметрии при ФП 2-го рода. Согласно [4, 7], в пр. гр. C_{5v}^5 такими векторами являются: 1) векторы, эквивалентные обратным ($k \equiv -k$), которые лежат в точках $\Gamma(k=0)$, $L(k=b_1/2)$, $X(k=(b_1+b_2)/2)$ и $T(k=(b_1+b_2+b_3)/2)$; 2) векторы k , которые переходят в $-k$ при операции отражения σ_v . Это векторы, лежащие на оси $\Sigma(k=\lambda(b_2-b_3))$ и векторы, лежащие на поверхности зоны Бриллюэна на линии $Y(k=b_1/2+\lambda(b_2-b_3))$.

В пр. гр. C_{5v}^5 имеются три неприводимых представления, отвечающих точке Γ : два одномерных (Γ_1, Γ_2) и одно двумерное (Γ_3). Для того чтобы в кристалле был возможен ФП 2-го рода, необходимо, чтобы

* Задача нахождения возможных ФП 2-го рода в рамках теории Ландау детально обсуждается в книгах [5, 6]. Из других подходов к решению этой задачи следует отметить подход, основанный на анализе критерия Бирмана [6]. Он очень удобен для анализа ФП, происходящих без изменения объема примитивной ячейки, однако для представлений с $k \neq 0$ требует построения всех подгрупп заданной пр. гр. с кратным объемом примитивной ячейки.