

## Фокусировка при рассеянии частиц на поверхности

П. Ю. Бабенко<sup>1)</sup>, А. Н. Зиновьев, А. П. Шергин

Физико-технический институт им. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 27 апреля 2015 г.

Путем компьютерного моделирования показано, что при рассеянии атомов аргона на кристаллических мишенях из алюминия и германия при скользких углах падения, меньших  $4^\circ$ , коэффициент отражения частиц близок к 1 и наблюдается фокусировка пучка рассеянных частиц (угловые распределения частиц сильно сжаты). Если фокусировка пучка по азимутальному углу известна и ранее изучалась, то острая фокусировка в направлении, перпендикулярном поверхности, при малых углах падения до сих пор не исследовалась. Данный эффект подтверждается экспериментальными результатами. Он связан с многократным рассеянием налетающих частиц на атомной цепочке. Результаты моделирования позволили получить весьма точное значение амплитуды тепловых колебаний атомов на поверхности ( $0.123 \pm 0.007 \text{ \AA}$  для алюминия), которое хорошо согласуется с экспериментом.

DOI: 10.7868/S0370274X15120139

Цель настоящей работы – исследование применимости разработанной нами программы [1] для описания эффекта ионной фокусировки – одного из интереснейших явлений, связанных с многократным рассеянием атомов поверхностью.

Как известно, если пучок ионов или атомов, падающих на монокристалл, ориентирован по отношению к атомной цепочке определенным образом, имеет место так называемое поверхностное каналирование (эффект сжатия потока рассеянных частиц). Поверхностное каналирование при рассеянии монокристаллами наблюдалось в работе [2] и получило название эффекта ионной фокусировки. Данное явление уже нашло применение при изучении поверхностных структур, возбужденных состояний, эффектов зарядового обмена, поверхностного магнетизма и потенциалов взаимодействия [3–7].

В основу программы расчета рассеяния атомных частиц поверхностью в настоящей работе положена модель, рассматривающая последовательность бинарных соударений частиц в веществе [1]. Использовался алгоритм, аналогичный примененному Робинсоном [7]. В процессе вычислений записываются глубина достигнутого слоя и прицельные координаты налетающей частицы. Это позволяет отслеживать вклад в рассеяние различных атомных слоев мишени. В программе предусмотрена возможность пошагово отслеживать траектории частицы, проводить расчеты с любым угловым и энергетическим разрешением. Как правило, число обрабатываемых траекторий составляло  $4 \cdot 10^7$ . Для работы програм-

мы достаточно быстродействия персонального компьютера.

При машинном моделировании широко применяются потенциалы взаимодействия  $U(r)$ , относящиеся к группе экранированных кулоновских потенциалов. В работе [8] был предложен потенциал, наилучшим образом описывающий существующие экспериментальные данные по рассеянию частиц:

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp \left\{ \frac{-x}{c_1 + c_2 x^{1/2} + c_3 x} \right\},$$

где  $Z_1, Z_2$  – заряды ядер,  $e$  – заряд электрона,  $r$  – межъядерное расстояние,  $x = r_0/a_F$ ,  $a_F = 0.8853(Z_1^{0.5} + Z_2^{0.5})^{-2/3}$  – длина экранирования, предложенная Фирсовым,  $c_1 = 0.582$ ,  $c_2 = 0.654$ ,  $c_3 = -0.03$ . В последующих расчетах мы использовали потенциал [8], опирающийся на экспериментальные данные.

На рис. 1 приведены результаты расчета коэффициента отражения частиц  $R_N$  в зависимости от угла падения атомов Ag на мишени из Al и Ge. По определению, коэффициент отражения частиц  $R_N = N_{bs}/N_p$  (где  $N_p$  – число налетающих частиц, а  $N_{bs}$  – число рассеянных частиц) представляет собой вероятность того, что налетающая частица будет рассеяна твердым телом ( $0 \leq R_N \leq 1$ ).

Кривые 1–3 рассчитаны по нашей программе для кристаллических мишеней, а 4, 5 – по программе SRIM-2013 [9] для тех же материалов, но для аморфных мишеней. Как видно из рисунка, для кристаллических мишеней и углов падения пучка на мишень  $\alpha \leq 4^\circ$  коэффициент отражения частиц  $R_N$  близок к единице, т.е. имеет место ярко выраженный эффект

<sup>1)</sup>e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

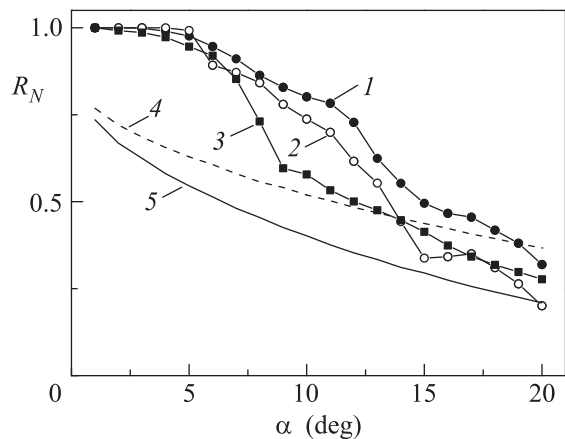


Рис. 1. Зависимости коэффициента отражения частиц  $R_N$  от угла падения  $\alpha$  при бомбардировке пучком Ag с энергией 5 кэВ мишеней из Al и Ge: 1 – мишень Al(110), 2 – мишень Al(001), 3 – мишень Ge(100), 4 – мишень Ge (аморфная), 5 – мишень Al (аморфная)

фокусировки. В то же время для аморфных мишеней эффект фокусировки отсутствует.

Рассмотрим случай, когда атомы Ag с энергией 10 кэВ падают на мишень Al(111) вдоль оси  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  под углом  $2.35^\circ$ . На рис. 2 приведены результаты сравне-

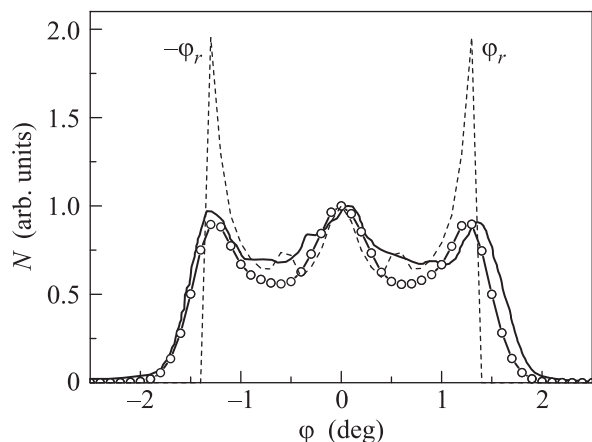


Рис. 2. Распределения интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от азимутального угла рассеяния. Бомбардирующие атомы Ag с энергией 10 кэВ падают на мишень Al(111) вдоль оси  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  под углом  $2.35^\circ$ . Сплошная линия – экспериментальные данные работы [10]. Наш расчет: штриховая линия соответствует температуре мишени  $T = 0$  К, линия с точками – комнатной температуре. Углы радужного рассеяния обозначены  $\pm\varphi_r$ .

ния рассчитанного в настоящей работе и измеренного в работе [10] распределений интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от азимутального угла рассеяния  $\varphi$ . Видно, что расчет и эксперимент [10]

хорошо согласуются. Также видно, что азимутальные углы рассеяния лежат в очень узком диапазоне,  $\pm 1.5^\circ$ .

Зависимость угла рассеяния  $\varphi$  от проекции прицельного параметра  $y$ , отсчитываемого в направлении, перпендикулярном атомной цепочке, приведена на рис. 3. Она имеет экстремумы при углах  $\varphi_r =$

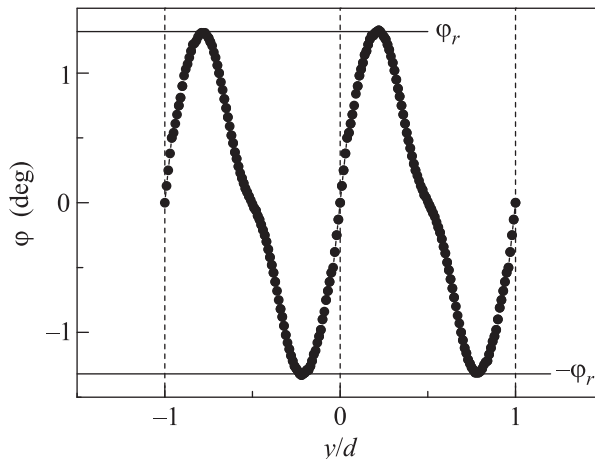


Рис. 3. Зависимость азимутального угла рассеяния  $\varphi$  от прицельного параметра  $y$ , отсчитываемого в направлении, перпендикулярном атомной цепочке. Значения  $y/d = 0, \pm 1$  соответствуют рассеянию на атомной цепочке ( $d$  – расстояние между цепочками атомов в направлении  $y$ ). Условия моделирования указаны в подписи к рис. 2

$= \pm 1.32^\circ$ . Для выбранного случая значения  $y/d = 0, \pm 1$  соответствуют рассеянию на атомной цепочке (здесь  $d$  – расстояние между цепочками атомов в направлении  $y$ ). При увеличении параметра  $y$  от этих значений азимутальный угол рассеяния  $\varphi$  вначале растет, потом начинает сказываться влияние параллельной цепочки атомов, при  $y \approx d/4$  угол  $\varphi$  достигает максимума, а затем уменьшается. При  $y = d/2$  угол  $\varphi$  меняет знак и картина повторяется. Следует отметить, что поведение кривой  $\varphi(y)$  слабо зависит от значения прицельной координаты вдоль оси  $x$  (направление вдоль цепочки атомов).

Поскольку интенсивность сигнала  $N \sim (d\varphi/dy)^{-1}$ , это приводит к появлению пиков в случае  $d\varphi/dy = 0$ , связанных с эффектом “радуги” при рассеянии. При классическом рассмотрении рассеяния на угол, больший  $\varphi_r$ , не происходит. На рис. 2 штриховой линией приведено модельное распределение частиц, полученное при нулевой величине тепловых колебаний атомов в мишени. Видно, что в районе “радужных” углов интенсивность рассеянных частиц резко возрастает и отсутствуют частицы с

азимутальными углами рассеяния, превышающими  $\varphi_r$ .

Вследствие тепловых колебаний атомов мишени имеет место “размытие” радужного максимума. Положение атома разыгрывалось случайным образом. Колебания соседних атомов считались некоррелированными. Нами предполагалось, что имеет место распределение Гаусса по всем координатам атомов мишени. Сравнение расчета с экспериментом позволяет определить амплитуду тепловых колебаний в направлении вдоль поверхности  $\sigma_{\parallel}$ . В нашем случае ее величина составила  $\sigma_{\parallel} = 0.123 \pm 0.007 \text{ \AA}$ , что практически совпадает с данными работы [11], в которой получено значение  $\sigma_{\parallel} = 0.110 \pm 0.006 \text{ \AA}$  для колебаний в массиве мишени.

На рис. 4 приведено распределение интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от угла рассея-

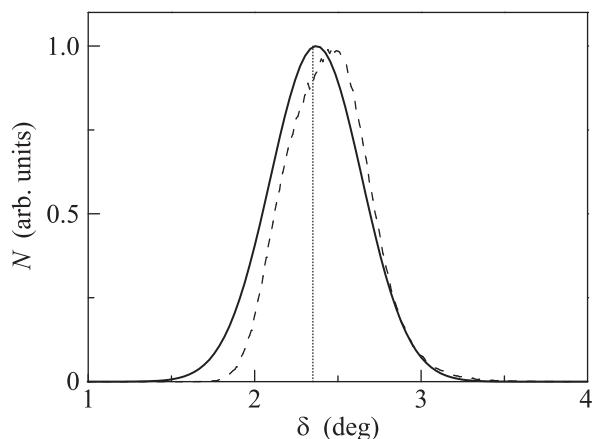


Рис. 4. Распределения интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от угла рассеяния  $\delta$ . Бомбардирующие атомы Ag с энергией 10 кэВ падают на мишень Al(111) вдоль оси  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  под углом  $2.35^\circ$ . Сплошная линия – экспериментальные данные работы [10], штриховая – наш расчет. Угол падения показан вертикальной линией

ния  $\delta$ , отсчитываемого от оси  $x$ , лежащей на поверхности и направленной вдоль цепочки атомов. Данные работы [10] показаны сплошной линией, расчет по нашей программе – штриховой. Видно, что мы имеем дело со случаем, близким к зеркальному отражению, когда угол рассеяния равен углу падения. Расчетное распределение имеет схожую ширину, но асимметрично и несколько смещено в сторону больших углов. Ширина распределения на полувысоте  $\sim 0.65^\circ$ , т.е. по углу рассеяния  $\delta$  имеет место фокусировка частиц.

Чтобы прояснить природу эффекта, мы провели также расчет для случая, когда тепловые коле-

бания атомов отсутствуют. На рис. 5 приведена зависимость угла  $\delta$  от прицельных параметров  $y$  и  $x$ ,

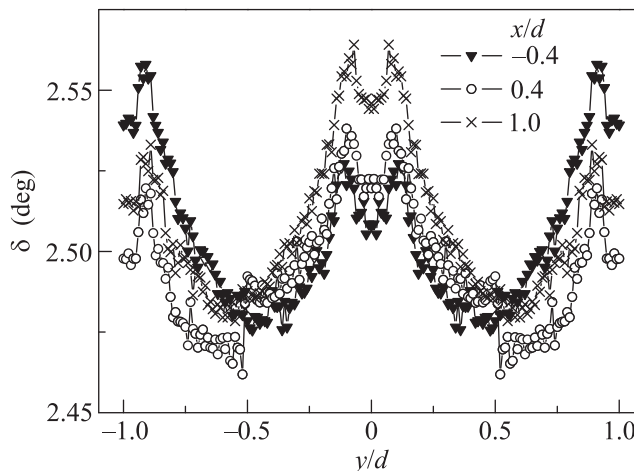


Рис. 5. Зависимости угла рассеяния  $\delta$  от прицельного параметра  $y$ , отсчитываемого в направлении, перпендикулярном атомной цепочке, при различных значениях параметра  $x$ . Значения  $x$  менялись в пределах  $0-d$ . Условия моделирования указаны в подписи к рис. 2

изменяющихся в пределах  $[-d, d]$ . Видно, что при отсутствии тепловых колебаний с изменением параметра  $x$  угол  $\delta$  меняется крайне мало. Эти изменения связаны с модуляцией потенциала вдоль атомной цепочки. Если заменить цепочку атомов рассеивающей нитью, то, очевидно, угол падения будет равен углу отражения. Наибольшие различия в значении  $\delta$  наблюдаются при  $\varphi \approx 0$ , когда вклад в рассеяние вносят две группы траекторий. Первая из них соответствует рассеянию с малыми значениями параметра  $y$  (рассеяние на поверхностной цепочке атомов). Вторая группа отвечает рассеянию при параметрах  $y = \pm d/2$ .

Траекторные расчеты показали, что для изучаемых условий (рассеяние атомов Ag с энергией 10 кэВ и углом падения  $2.35^\circ$  на кристалле Al (111)) и первой группы траекторий заметный вклад в рассеяние вносят 34 соударения, в каждом из которых угол рассеяния меняется на величину в пределах  $0.008^\circ-0.4^\circ$ . Именно вследствие многократности соударений имеют место усреднение по потенциалу взаимодействия вдоль цепочки и, как следствие, слабая зависимость угла  $\delta$  от прицельного параметра  $x$ .

Для второй группы траектории имеют характер змейки: рассеяние на атомах второго слоя сопровождается боковыми соударениями с двумя параллельными цепочками атомов первого слоя. Кратность соударения возрастает до 82 при наборе угла отклонения в каждом соударении в пределах  $0.007^\circ-0.1^\circ$ .

Как видно из рис. 5, при любых значениях  $x$  и  $y$  разброс в угле рассеяния  $\delta$  при  $T = 0$  К не превышает  $0.1^\circ$ . Различие в угле рассеяния максимально для первой и второй группы траекторий. Таким образом, наш расчет предсказывает весьма узкое распределение по углу  $\delta$  при  $T = 0$  К. Было бы весьма интересно подтвердить этот вывод, проведя измерения при низких температурах мишени.

В нашем случае угловое распределение размыто вследствие тепловых колебаний. Основной вклад вносят колебания в направлении, перпендикулярном поверхности. Полученное нами значение амплитуды колебаний  $\sigma_\perp$  составляет  $0.18 \pm 0.02 \text{ \AA}$ , что несколько больше данных для первого слоя из работы [11] – ( $0.146 \pm 0.006 \text{ \AA}$ ).

Вследствие многократности соударений наблюдаемый угловой разброс по углу  $\delta$  с учетом тепловых колебаний составляет  $0.6^\circ$ , что много меньше разброса, равного  $\arctg(\sigma_\perp/d) \approx 3^\circ$ , ожидаемого для однократных соударений. По-видимому, деформация распределения и сдвиг в сторону углов, больших зеркального, связаны с эффектом блокировки.

Фокусировка по углу рассеяния  $\delta$  при бомбардировке мишени Cu(100) ионами аргона с энергией  $E_0 = 30$  кэВ для угла падения  $8^\circ$  наблюдалась экспериментально в работе [12] и моделировалась в работе [13]. Однако в этом случае доминируют квазиоднократные соударения и эффект фокусировки слабо выражен. В нашем случае угол падения гораздо меньше (он составляет  $2.35^\circ$ ) и энергия бомбардирующих атомов аргона ( $E_0 = 10$  кэВ) тоже меньше. Частицы пучка испытывают многочисленные малоугловые отклонения и не проникают внутрь кристалла, а движутся над поверхностью мишени. При таких условиях эффект фокусировки проявляется наиболее наглядно.

Распределения интенсивностей рассеянных частиц в зависимости от азимутального угла для различных углов падения бомбардирующего пучка ( $\alpha = 1^\circ - 6^\circ$ ) показаны на рис. 6. Видно, что для угла падения  $\alpha = 1^\circ$  распределение имеет два максимума, соответствующих радужным углам рассеяния, и провал интенсивности в центре. Также наблюдается резкий спад интенсивности по краям справа и слева. С увеличением угла падения начинает проявляться максимум в центре. Для угла  $\alpha = 3^\circ$  он доминирует. При еще большем угле падения распределение имеет плоскую вершину и наклонные края.

На рис. 7 представлены распределения интенсивности рассеянных атомов в зависимости от угла рассеяния  $\delta$  для различных углов падения пучка на мишень. Видно, что для углов падения  $\alpha = 1^\circ - 3^\circ$  рас-

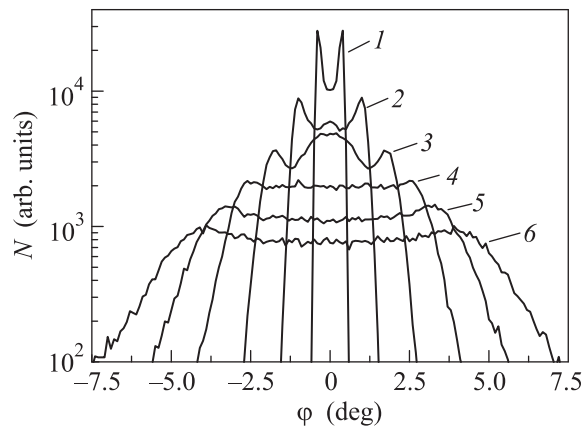


Рис. 6. Распределения интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от азимутального угла рассеяния  $\varphi$ . Бомбардирующие атомы Ag с энергией 10 кэВ падают на мишень Al(111) вдоль оси  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  под углами  $1^\circ - 6^\circ$  (углы указаны рядом с соответствующими кривыми)

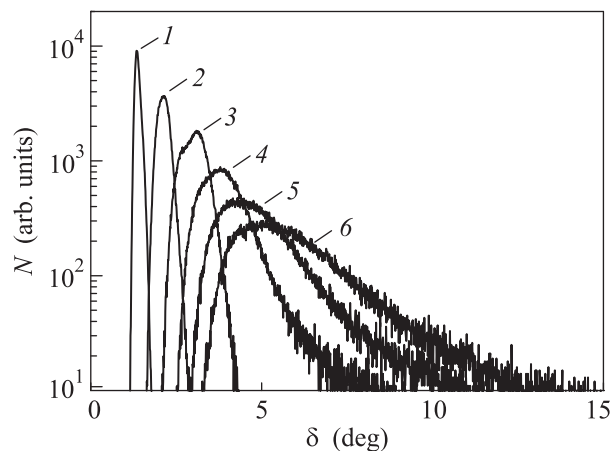


Рис. 7. Распределения интенсивности рассеянных атомов Ag в зависимости от угла рассеяния  $\delta$ . Бомбардирующие атомы Ag с энергией 10 кэВ падают на мишень Al(111) вдоль оси  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$  под углами  $1^\circ - 6^\circ$  (углы указаны рядом с соответствующими кривыми)

пределение является очень узким, а с ростом угла падения становится шире с затянутым правым краем. Как следует из рисунка, эффект фокусировки при углах, больших  $4^\circ$ , исчезает.

Таким образом, проведенные расчеты, на наш взгляд, достаточно убедительно демонстрируют применимость программы [1] для описания эффекта фокусировки. В тех случаях, когда можно провести сравнение расчета и эксперимента, наблюдается хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Перспективной представляется возможность определения амплитуды тепловых колебаний из сравнения эксперимента и расчета. Нали-

чие острой фокусировки в направлении, перпендикулярном поверхности, и наше предсказание об усилении эффекта при низких температурах мишени, безусловно, представляют интерес и нуждаются в экспериментальном изучении.

Наличие условий, при которых коэффициент рассеяния атомов или ионов поверхностью близок к 1, следует учитывать при модификации поверхности пучками атомных частиц. Кроме того, этот эффект, возможно, следует принимать во внимание при выборе формы корпуса и траектории полета космических аппаратов, чтобы уменьшить радиационные повреждения их поверхности частицами солнечного ветра.

1. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, А. П. Шергин, *Поверхность* **6**, 41 (2014).
2. Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, *Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел*, Атомиздат, М. (1980), гл. 6, с. 174.
3. R. Sizmann and C. Varelas, *Nucl. Instr. Meth.* **132**, 633 (1976).
4. H. Obermeyer, K. Snowdon, H. Hemme, and W. Heiland, *Z. Phys. B* **61**, 187 (1985).
5. R. Zimny, H. Nienhaus, and H. Winter, *Nucl. Instr. Meth. B* **48**, 361 (1990).
6. H. Winter, H. Hagedorn, R. Zimny, H. Niehaus, and J. Kirschner, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 296 (1989).
7. В. Экштайн, *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*, Мир, М. (1995), гл. 7, с. 138 [W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions*, Springer-Verlag, Berlin (1991), ch. 7, p. 104].
8. А. Н. Зиновьев, *Поверхность* **5**, 38 (2008).
9. J. F. Ziegler and J. P. Biersack, <http://www.srim.org>.
10. P. Tiwald, A. Schüller, H. Winter, K. Tökesi, F. Aigner, S. Gräfe, C. Lemell, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. B* **82**, 125453 (2010).
11. H. Gobel and P. von Blanckenhagen, *Phys. Rev. B* **47**, 2378 (1993).
12. И. Н. Евдокимов, Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, *Доклады АН СССР* **186**, 549 (1969).
13. В. И. Шульга, *Поверхность* **7**, 33 (1990).