

У. МЮЛЛЕР-ЯРАЙС

ОБ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ПРОВЕРКЕ ДВУХАТОМНОЙ МОДЕЛИ РАССЕЙНИЯ ИОНОВ КРИСТАЛЛАМИ

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 17 XII 1969)

1. При изучении закономерностей рассеяния ионов кристаллами был обнаружен так называемый эффект кратного рассеяния. Он состоит в том, что в энергетических распределениях рассеянных ионов (1) и атомов отдачи (2) присутствует система относительно узких пиков, число и интенсивность которых зависят как от сорта и энергии ионов, так и от структуры кристалла и его ориентации относительно ионного пучка и анализатора рассеянных ионов.

К настоящему времени этот эффект довольно подробно изучен экспериментально. Было установлено также (3-5), что многие наблюдаемые экспериментально закономерности могут быть качественно удовлетворительно объяснены в рамках простой двухатомной модели процесса рассеяния. К сожалению, до сих пор не удавалось объяснить одну из основных закономерностей — тот факт, что эффект кратного рассеяния наиболее отчетливо наблюдается лишь в тех случаях, когда угол скольжения ионов близок к половине угла рассеяния. Между тем, как будет показано ниже, этот факт также легко объясним на основе двухатомной модели рассеяния, если только рассматривать эту модель более последовательно, чем это делалось прежде.

2. Рассмотрим задачу о рассеянии ионов парой атомов, расположенных на расстоянии d (см. рис. 1а). Предположим, что взаимодействие ионов с атомами описывается потенциалом О. Б. Фирсова, что угол скольжения α и угол рассеяния θ малы и что плоскость рассеяния совпадает с плоскостью рисунка. Если θ_1 — угол рассеяния в первом столкновении, p_1 и p_2 — прицельные параметры первого и второго столкновения, то для малых углов α и θ имеет место соотношение $p_2 = p_1 + d(\theta_1 - \alpha)$ (см., например, (3)). Используя известную аппроксимацию потенциала Фирсова выражением A/r^2 , где $A = 3,05 \cdot 10^{-16} z_1 z_2 \times (z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{-3/2}$ эв·см², а также связь между прицельным параметром и углом рассеяния при малых углах (6), получим:

$$\text{const} \cdot (\theta_1 - \alpha) = 1/\sqrt{\theta - \theta_1} - 1/\sqrt{\theta_1}. \quad (1)$$

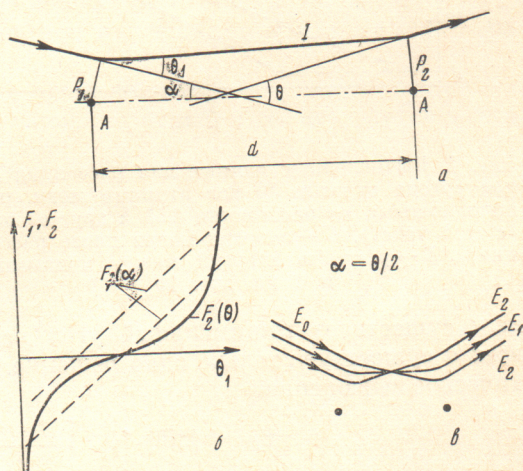


Рис. 1. Схема рассеяния. А — атомы; I — траектория иона; $F_1(\alpha) = \text{const} \cdot (\theta_1 - \alpha)$, $F_2(\theta) = 1/\sqrt{\theta - \theta_1} - 1/\sqrt{\theta_1}$; E_0 — энергия ионов до рассеяния; E_1 , E_2 — после рассеяния

При фиксированных углах скольжения α и рассеяния θ уравнение (1) может иметь несколько решений θ_1 , которые соответствуют различным возможным траекториям ионов и которые в общем случае дают различные потери энергии рассеянных ионов. Рис. 1б иллюстрирует появление трех решений в случае $\alpha = \theta/2$ и одного решения, когда угол α значительно отличается от $\theta/2$. Из этого рисунка видно, что больше чем одно решение может существовать только вблизи $\alpha = \theta/2$ *. В случае $\alpha = \theta/2$ существуют три решения, но два из них являются эквивалентными по отношению к потерям энергии рассеянных ионов (в приближении малых углов). Этот случай показан на рис. 1в. Одно решение соответствует симметричной траектории иона, два других — несимметричным траекториям, соответствующим одной и той же потере энергии рассеянными ионами.

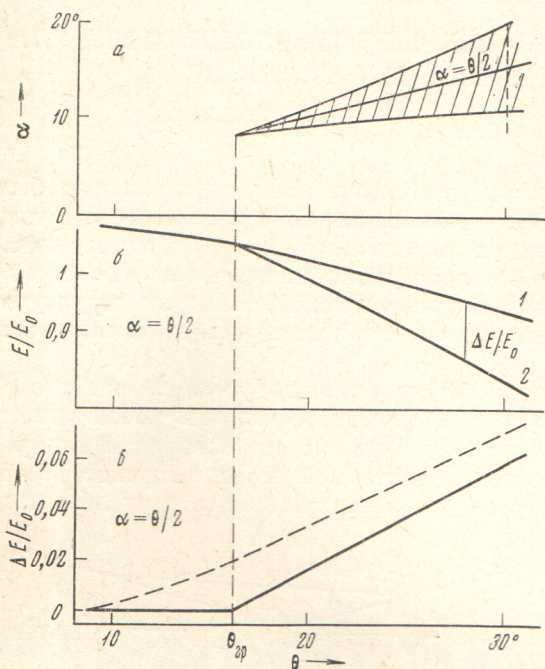


Рис. 2. Вычисленные данные для рассеяния ионов аргона энергии 30 кэВ атомами меди, расположенными на расстоянии 2,55 Å друг от друга (см. текст). E — энергия ионов после рассеяния; ΔE — разность энергий между кривыми 1 и 2 на рис. 2б

Однако существует минимальный угол рассеяния $\theta_{гр}$, ниже которого при всех α существует только одно решение. Для этого угла мы нашли аналитическое выражение

$$\theta_{гр} = 1,56 \cdot 10^{-5} \left[\frac{z_1 z_2}{(z_1^{1/2} + z_2^{1/2})^{2/3} d^2 E_0} \right]^{1/3} \quad (2)$$

Здесь расстояние d между атомами выражено в сантиметрах, E_0 — в электронвольтах. Из уравнения (2) следует, что $\theta_{гр}$ увеличивается, когда расстояние между атомами уменьшается. При рассеянии ионов аргона атомами меди (при $E_0 = 30$ кэВ) $\theta_{гр}$ имеет самое большое значение для атомной цепочки $\langle 110 \rangle$ ($d = 2,55$ Å), оно равно $16,2^\circ$. При углах рассеяния ниже $\theta_{гр}$ согласно двухатомной модели мы не можем ожидать появления пиков кратного рассеяния.

На рис. 2б изображены для случая $\alpha = \theta/2$ и $d = 2,55$ Å вычисленные энергии рассеянных ионов, а на 2в — зависимость разности вычисленных значений (т. е. расчетного энергетического расстояния между пиками) от

* Эти соображения принадлежат А. Х. Рахматулиной, автор выражает ей свою глубокую признательность.

угла рассеяния θ . В верхней части кривая 1 соответствует симметричному рассеянию (т. е. $\alpha = \theta$, см. рис. 1*б*), а кривая 2 — обоим несимметричным столкновениям. Разность энергии между обоими значениями энергии уменьшается при уменьшении θ и обращается в нуль при $\theta_{гр}$. Ниже $\theta_{гр}$ существует только симметричное столкновение и, следовательно, только

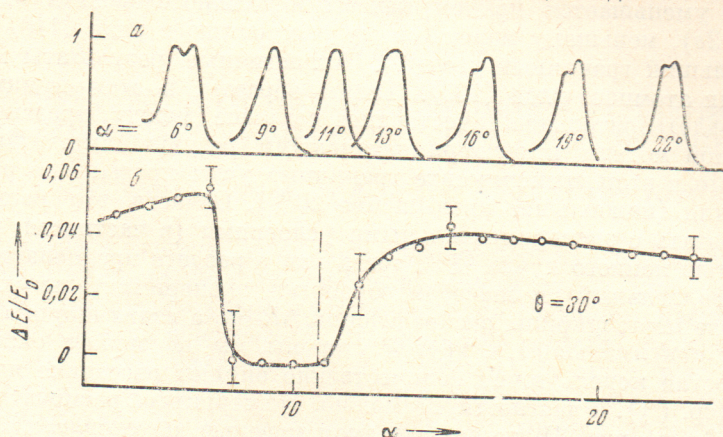


Рис. 3. Экспериментальные данные рассеяния ионов аргона энергии 30 кэВ кристаллом меди, $d = 2,55 \text{ \AA}$, $\theta = 30^\circ$, атомный ряд $\langle 110 \rangle$. *a* — формы энергетических распределений рассеянных ионов при различных значениях угла скольжения; *б* — максимальная разность энергии между пиками

одно значение энергии рассеянных ионов. Пунктирная кривая на рис. 2*в* соответствует $d = 6,24 \text{ \AA}$ (расстояние между атомами в цепочке $\langle 111 \rangle$ кристалла меди).

3. С целью экспериментальной проверки описанных выше предсказаний двукратной модели было выполнено экспериментальное изучение рассеяния ионов аргона энергии 30 кэВ гранью (110) кристалла меди. Ориентация мишени была такова, что в плоскости рассеяния находились поочередно различные по плотности упаковки атомные цепочки мишени $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. На рис. 3 приведены экспериментальные результаты, относящиеся к случаю ряда $\langle 110 \rangle$. Угол рассеяния θ оставался постоянным и равным 30° , а угол скольжения α изменялся. Измерения соответствуют пунктирной кривой на рис. 2*а*. На рис. 3*а* изображены энергетические распределения рассеянных ионов, на рис. 3*б* — максимальные расстояния между пиками (т. е. расстояния между крайними пиками, если их 3). Видно, что вблизи вычисленного значения угла скольжения $\alpha = 10,8^\circ$ наблюдается резкое изменение формы распределений — переход от двух пиков к куполу. Однако при еще меньших углах (ниже 8°) структура появляется снова. Этот факт моделью не описывается. Точно так же моделью не описывается наличие структуры при α выше $19,2^\circ$: согласно модели, при этих углах должен наблюдаться лишь один пик.

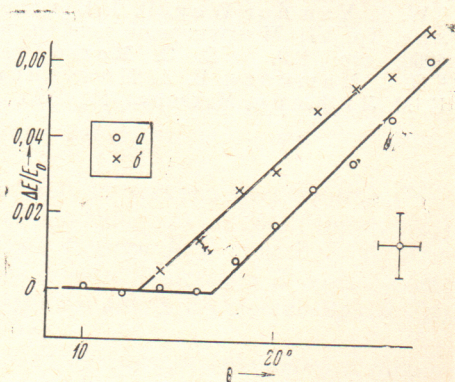


Рис. 4. Экспериментальные данные рассеяния ионов аргона энергии 30 кэВ кристаллами меди. *a* — $d = 6,24 \text{ \AA}$ (атомный ряд $\langle 111 \rangle$); *б* — $d = 2,55 \text{ \AA}$ (атомный ряд $\langle 110 \rangle$), ΔE — разность энергии пиков, определенная по ширине энергетических распределений на высоте, равной $1/e$ от максимальной

На рис. 4 изображены данные, характеризующие потери энергии рассеянными ионами в случае атомных рядов $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. В этом эксперименте изменялись и θ , и α , но всегда сохранялось условие $\alpha = \theta / 2$ — см. прямую на рис. 2а. Видно, что величина $\Delta E : E_0$ (определенная по ширине энергетических распределений рассеянных ионов) с уменьшением угла рассеяния уменьшается, причем, как это и должно следовать из модели (см. рис. 2в), меньшему межатомному расстоянию в ряде $\langle 110 \rangle$ соответствует больший граничный угол $\theta_{гр}$. Аналогичные результаты мы получили и для атомного ряда $\langle 100 \rangle$. Таким образом, в этом пункте имеет место удовлетворительное качественное согласие между предсказаниями двухатомной модели и экспериментальными результатами. Однако все измеренные в этом эксперименте граничные углы превышают расчетные их значения (наибольшее превышение 20%). Отчасти это расхождение можно связать с экспериментальными условиями (в частности, конечной сходимостью ионного пучка $\pm 1^\circ$, тогда как в расчете предполагалось, что пучок параллельный) и способом обработки экспериментальных данных (в качестве меры ширины распределений ΔE была взята ширина на высоте $1/e$ от максимальной). С другой стороны, мы не можем ожидать, что столь простая модель точно количественно опишет рассеяние ионов кристаллом (ср. (7)). В частности, возможно, что структура распределений при больших θ (см. рис. 3), не описываемая моделью, обусловлена столкновениями ионов более чем с двумя поверхностными атомами мишени, или с атомами глубинных слоев мишени.

Автор благодарит В. А. Молчанова за предложение темы работы и помощь в ее осуществлении, Е. С. Машкову и Ю. Г. Скрипку — за помощь в проведении экспериментов.

Университет им. Гумбольдта
Берлин, ГДР

Поступило
29 XI 1969

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Е. С. Машкова, В. А. Молчанов и др., Phys. Lett., 18, 7 (1965).
² W. F. Van der Weg, D. J. Bierman, Physica, 38, 406 (1968). ³ Э. С. Парлис, Тр. VII Междунаро. конф. по явлениям в ионизованных газах, Белград, 1966, стр. 129. ⁴ Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, ФТТ, 8, 1517 (1966).
⁵ Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, ДАН, 172, 813 (1967). ⁶ Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика, М., 1965. ⁷ J. Lindhard, Phys. Lett., 12, 126 (1964).