

В. М. КИВИЛИС, Э. С. ПАРИЛИС, Н. Ю. ТУРАЕВ

К «ЭФФЕКТУ ЦЕПОЧКИ» ПРИ РАССЕЙАНИИ ИОНОВ  
ГРАНЬЮ МОНОКРИСТАЛЛА

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 19 XI 1969)

В работах (1, 2) был проведен расчет рассеяния ионов  $Ag^+$  с энергией 30 кэВ при скользящем падении на грань [100] монокристалла меди в плоскости, проходящей через ось [110]. В первой работе атомы металла предполагались покоящимися в положениях равновесия ( $T = 0$ ), а во второй были учтены их коррелированные тепловые колебания.

Оказалось, что последовательное рассеяние ионов на атомах, расположенных вдоль плотно упакованной оси кристалла, вызывает своеобразный «эффект цепочки», проявляющийся в особенностях углового и энергетического распределения рассеянных ионов. Он состоит в том, что отра-

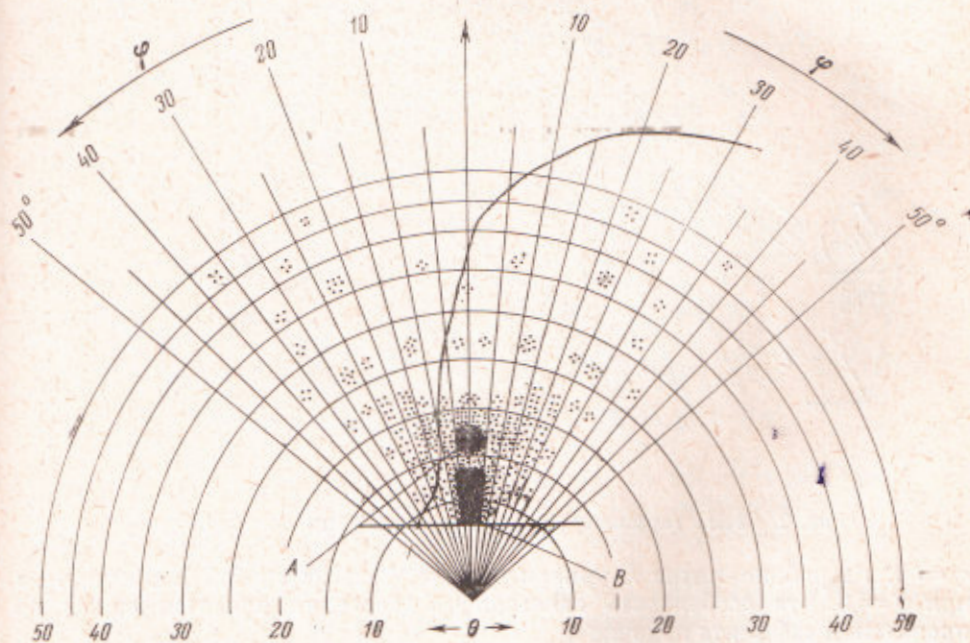


Рис. 1. Угловое распределение ионов  $Ag^+$ , рассеянных гранью (100) меди. Угол скольжения  $\psi = 8^\circ$

женный пучок оказывается ограниченным некоторыми минимальными и максимальными углами вылета, а зависимость энергии ионов от угла рассеяния изображается характерными овалами, которые тем меньше и тем сильнее смещены относительно кривых однократного и двукратного рассеяния, чем меньше угол скольжения падающих ионов. Аналогичные овалы были получены в работе (3).

Расчет рассеяния ионов гранью монокристалла, выполненный с помощью ЭВМ, показал, что ионы, рассеянные цепочкой атомов, составля-

ют существенную и весьма характерную часть рассеянного пучка (4). Они образуют компактную группу (пятно *A* на рис. 1) около направления зеркального отражения.

В пятно *B* попадают частицы с точками прицеливания внутри полуканалов, образованных цепочками [110] первого и второго атомных слоев (рис. 2) — это каналированные ионы, рассеянные на малые углы вне плоскости падения. В пятне *B* полностью отсутствуют частицы, отраженные в плоскости  $\varphi = 0$ . К сожалению, на рисунке невозможно изобразить узкую белую полосу, прорезающую пятно *B* по линии  $\varphi = 0$ .

Таким образом, если на рис. 1 двигаться по дуге  $\theta = \text{const}$  в районе пятна *A*, то кривая интенсивности рассеяния будет иметь максимум при

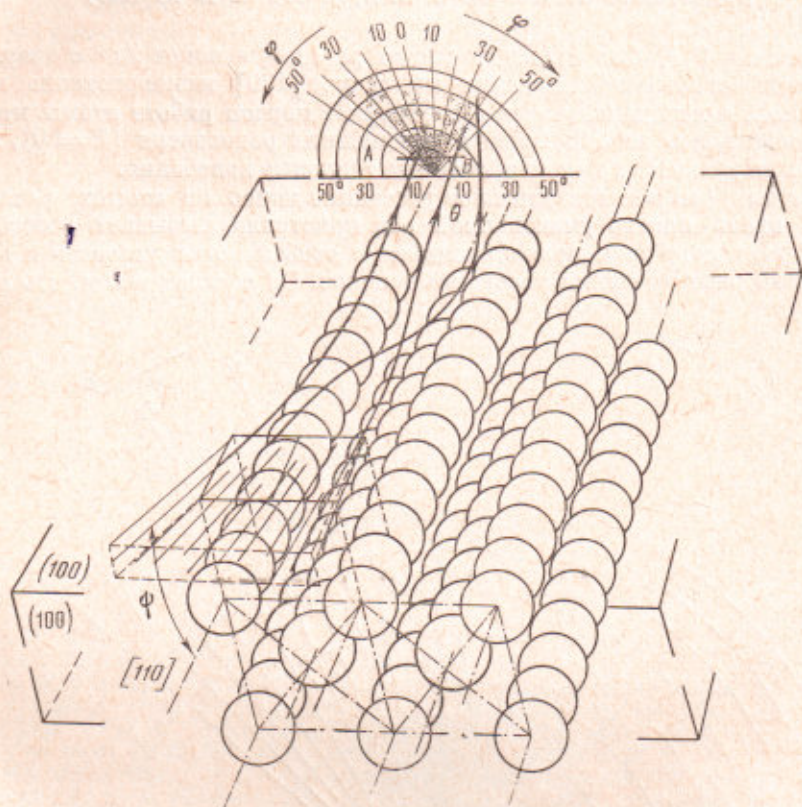


Рис. 2. Схема рассеяния ионов поверхностными полуканалами

$\varphi = 0$ , а в районе пятна *B* кривая должна быть двугорбой с минимумом при  $\varphi = 0$ . Эта особенность скользящего рассеяния является одним из проявлений «эффекта цепочки».

Таким образом, исследуя пятно *A*, можно выделить группу ионов, рассеянных цепочкой [110]. Это заставляет относиться с большим вниманием к результатам, получаемым на модели одномерной цепочки.

Кроме того, скользящее рассеяние  $\text{Ar}^+$  на кристалле  $\text{Cu}$  было исследовано экспериментально (5), причем было получено вполне удовлетворительное согласие с результатами расчета (1) и дано убедительное доказательство существования «эффекта цепочки».

В частности, впервые были получены характерные овалы, которые, однако, оказались смещенными относительно соответствующих теоретических кривых. Кроме того, при малых углах скольжения ограничения рассеянного пучка не наблюдалось, хотя пики однократного и двукратного рассеяния оказались настолько близкими (как это и следует из тео-

рии), что не могли быть разрешены. Представляет также интерес наблюдавшееся в (5) сближение этих пиков при переходе от менее плотно упакованных цепочек к более плотно упакованным.

Для объяснения результатов, полученных в (5), нами был предпринят расчет зависимости энергии отраженных ионов  $E$  от угла рассеяния  $\theta$  при разных углах скольжения, начальной энергии ионов  $E_0$  и температуре кристалла  $T$ . Расчет был проведен тем же методом, что и в (1, 2).

Исследовалось рассеяние ионов  $\text{Ar}^+$  на цепочке [110] кристалла  $\text{Cu}$ . Были взяты три значения начальной энергии ионов  $E_0 = 5, 10$  и  $30$  кэВ,

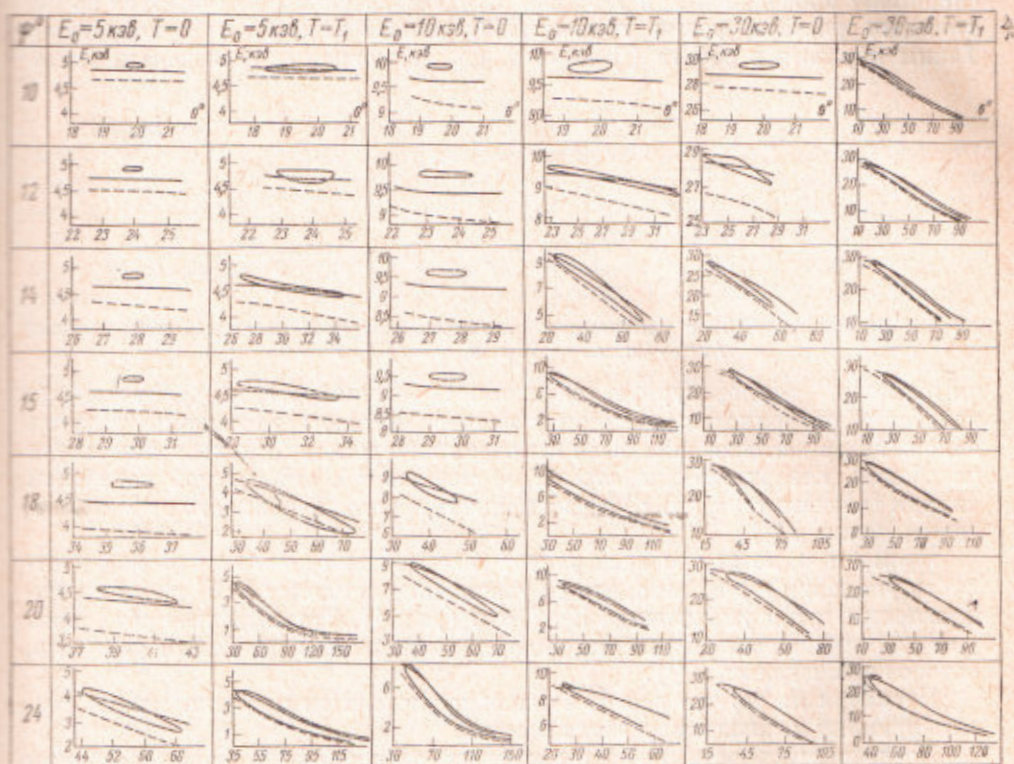


Рис. 3. Зависимость функции  $E(\theta)$  от  $E_0$ ,  $T$  и  $\psi$

различные углы скольжения  $\psi = 10, 12, 14, 15, 18, 20$  и  $24^\circ$  при  $T = 0$  и  $T = T_1$ . Первая температура соответствовала неподвижной идеальной решетке, вторая — амплитуде колебаний атомов, равной  $0,1d$  ( $d$  — расстояние между атомами цепочки).

На рис. 3 представлены результаты расчета. Штриховая линия указывает функцию  $E(\theta)$  для однократного рассеяния. Проходящая выше сплошная линия — такую же зависимость для двукратного. Овалы соответствуют рассеянию на цепочке.

Можно заметить, что «эффект цепочки» тем сильнее, чем меньше угол скольжения. Для одного и того же угла скольжения такая же тенденция наблюдается с уменьшением  $T$  и  $E_0$ , овалы сужаются, сокращаются в размерах и поднимаются над кривыми для однократного и двукратного рассеяния.

Рис. 3 дает возможность наглядно проследить изменение кривых  $E(\theta)$  с изменением всех указанных параметров. Например, если исходить из картины, соответствующей  $\psi = 15^\circ$ ,  $E_0 = 10$  кэВ,  $T = 0$ , то переход к обычному рассеянию можно осуществить различными путями: 1) увеличение угла скольжения от  $15$  до  $24^\circ$  при той же энергии и температуре; 2) увеличением температуры до  $T_1$  и 3) увеличением  $E_0$  от  $10$  до  $30$  кэВ

без изменения температуры. Наоборот, сокращение угловой ширины рассеянного пучка рассеянных ионов и увеличение их энергии, т. е. «эффекта цепочки» может быть достигнут, если, исходя, например, из  $\psi = 15^\circ$ ,  $E_0 = 10$  кэВ,  $T = T_1$ : 1) перейти к  $\psi = 15^\circ$ ,  $E_0 = 10$  кэВ,  $T = 0$ , т. е. лишь уменьшить температуру кристалла, либо 2) уменьшить лишь энергию  $E_0$  до 5 кэВ ( $\psi = 15^\circ$ ,  $T = 0$ ), либо, наконец: 3) уменьшить при прочих неизменных условиях  $\psi$  до  $10^\circ$ .

Некоторое несоответствие экспериментальных результатов <sup>(5)</sup> с расчетом <sup>(4)</sup> можно объяснить тем, что расчет был выполнен для  $T = 0$ , а эксперимент проводился при  $T \approx 300^\circ \text{K}$ . Действительно, как следует из настоящего расчета, форма кривых  $E(\theta)$  сильно зависит от температуры. Таким образом, в работе <sup>(5)</sup> наметилась возможность исследовать экспе-

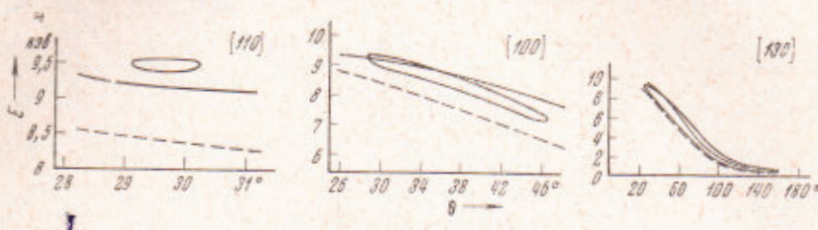


Рис. 4. Изменение  $E(\theta)$  с изменением плотности упаковки рассеивающей цепочки  $\text{Ar}^+ - \text{Cu}$ ,  $E_0 = 10$  кэВ,  $\psi = 15^\circ$ ,  $T = 0$

риментально температурную зависимость амплитуды коррелированных колебаний поверхностных атомных цепочек методом рассеяния тяжелых ионов. Такое исследование было бы очень интересно, поскольку амплитуда колебаний поверхностных атомов не совпадает с амплитудой колебаний внутри твердого тела <sup>(6)</sup>. «Эффект цепочки» и его зависимость от  $T$  наблюдалась также в <sup>(7)</sup>.

Кроме того, нами проведен расчет рассеяния на цепочках разной плотности упаковки и показано, что ее увеличение изменяет  $E(\theta)$  в том же направлении, что и уменьшение  $E_0$ ,  $T$  и  $\psi$  (рис. 4). Это позволяет объяснить уже упоминавшееся сближение пиков с увеличением плотности упаковки, которое наблюдалось в <sup>(5)</sup>.

Несмотря на то, что расчет выполнен численным методом, можно указать причину наблюдаемых зависимостей.

Последовательность коррелированных столкновений иона с атомами цепочки определяется углами  $\beta_i$ , образованными прямолинейными отрезками траектории с осью цепочки. Этот угол грубо определяется соотношением  $\sin \beta_i \approx [p(\theta_{i+1}) - p(\theta_i - \delta(T))] / d$ .

Поскольку тепловое смещение атома  $\delta(T) \sim \sqrt{T}$ , а параметры столкновений  $p(\theta) \sim E_0^{-1/2}$  и растут с уменьшением  $\theta$  (для зеркального отражения  $\theta \approx 2\psi$ ), то сходные траектории и, следовательно, сходные овалы  $E(\theta)$  получаются в результате изменения  $d$ ,  $E_0$ ,  $\psi$  и  $T$  в одном направлении.

Авторы благодарят В. А. Молчанова за предоставление возможности ознакомиться с результатами работы <sup>(5)</sup> до ее опубликования.

Институт электроники  
Академии наук УзССР  
Ташкент

Поступило  
11 X 1969

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- 1 В. М. Кивилис, Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, ДАН, 173, 805 (1967).
- 2 E. S. Parilis, N. Yu. Turaev, V. M. Kivilis, Proc. Int. Conf. on Phenom. in Ionized Gases, Vienna, 1967.
- 3 V. E. Yurasova, V. I. Shulga, D. S. Karuzov, Canad. J. Phys., 46, 759 (1968).
- 4 Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, В. М. Кивилис, XII Всесоюз. конф. по эмиссионной электронике, М., 1968, Тезисы докладов; E. S. Parilis, N. Yu. Turaev, V. M. Kivilis, Proc. IX Intern. Conf. Phen. Ioniz. Gases, Bucharest, 1969.
- 5 И. Н. Евдокимов, Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, ДАН, 186, 549 (1969).
- 6 В. С. Clark, R. Herman, R. F. Wallis, Phys. Rev., 139, A 860 (1965).
- 7 У. А. Арифов, А. А. Алиев, IV Международн. конф. по атомным столкновениям в твердых телах, Брайтон, Сассекс, 1969, Тезисы докладов.