

С. Д. МАРЧЕНКО, Э. С. ПАРИЛИС, Н. Ю. ТУРАЕВ

## РАССЕЯНИЕ ИОНОВ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКОЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА

(Представлено академиком Л. А. Арцимовичем 3 I 1972)

В работах (1-6) было отмечено, что атомные цепочки кристалла должны играть важную роль в отражении ионов от его грани. Однако прямой связи между параметрами рассеянных ионов и их траекторией установлено не было. Если бы удалось установить взаимно однозначное соответствие между направлением рассеяния иона и его энергией, с одной стороны, и точкой прицеливания на поверхности кристалла, направлением падения иона и его энергией, с другой стороны, то это могло бы служить ключом к расшифровке экспериментально измеряемых угловых и энергетических распределений рассеянных ионов и дало бы метод исследований атомной структуры поверхности кристалла. В настоящем сообщении приводятся результаты расчета, позволившего установить такое соответствие.

Вычисления проводились для рассеяния аргона с энергией 30 кэВ при скользющем падении на цепочку [110] монокристалла меди. На грани (100) была выбрана элементарная квадратная площадка со сторонами, параллельными осям [110], которая сканировалась ионным пучком при моделировании рассеяния на ЭВМ М-220.

Стороны квадрата были разбиты на 100 (координата  $r$ ) и 400 (координата  $q$ ) отрезков (рис. 1). Узлы образовавшейся решетки служили точками прицеливания, причем плоскости падения и вылета ионов могли не проходить через ось цепочки, образуя с ней соответственно углы  $\xi$  и  $\varphi$ , при этом начальная и конечная асимптоты траектории иона образуют с поверхностью грани (100) соответственно углы  $\psi$  и  $\beta$ .

Вычислялась величина энергии  $E$  рассеянного иона, углов  $\varphi$  и  $\beta$  в зависимости от углов  $\xi$  и  $\psi$  и координат  $r$  и  $q$ . Была предусмотрена возможность полностью проследить траекторию иона в наиболее интересных случаях. Рассчитывались только параметры «отраженных» ионов, т. е. таких, которые рассеиваются выше плоскости грани кристалла.

На рис. 2 изображен типичный результат расчета для  $\psi = 13^\circ$ ,  $\xi = 4^\circ$ . Как видно из рисунка, ионы с точками прицеливания, лежащими на прямых  $q = \text{const}$ , рассеиваются в овалы, причем положение точек на овале определяется значениями координат  $r$  (нанесены рядом с овалами). Овал, соответствующий прицеливанию по гребню цепочки ( $q = 0$ ), вырождается в прямую линию.

Четко различаются внутренняя и внешняя границы рассеянного пучка, огибающие овалы поверхности, являющиеся обобщением минимального и

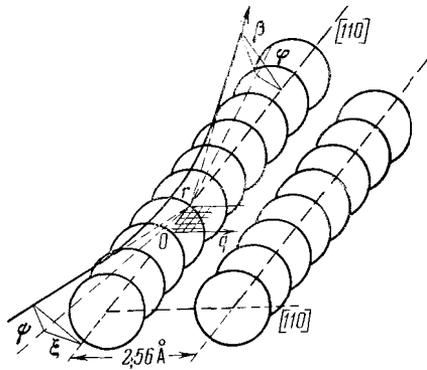


Рис. 1

максимального углов рассеяния в плоской задаче <sup>(1)</sup>. В представленном на рис. 2 случае рассеянные ионы не выходят за пределы  $\beta = 40^\circ$ , а угловые размеры тени составляют  $\sim 12^\circ$ . По мере увеличения азимутального угла  $\varphi$  границы пучка сужаются. В угловом распределении отраженных частиц нет овалов, выходящих за пределы  $-8 < q < +12$ . Это значит что вклад в отражение ионов вносит лишь узкая полоска над гребнем пучка шириной в  $20/200$  межатомного расстояния по оси  $[110]$  ( $\sim 0,25 \text{ \AA}$ )

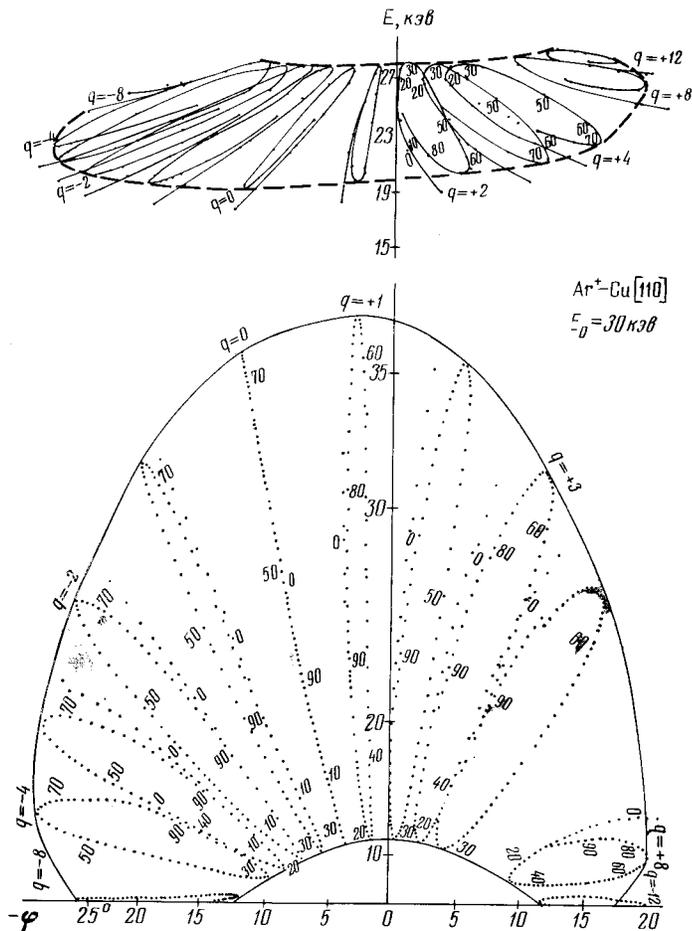


Рис. 2

что соответствует коэффициенту отражения, наблюдаемому экспериментально для скользких углов падения <sup>(3)</sup>.

Правые части овалов ( $24 < r < 67$ ) соответствуют траекториям, содержащим последовательное рассеяние на два сравнительно крупных угла и ряд малых углов, и в этом смысле являются аналогами «двукратного» рассеяния. Левые части овалов соответствуют «однократному» рассеянию, т. е. траекториям, содержащим один крупный и ряд малых углов рассеяния. Так же, как и в плоском случае, они разделены энергетически (рис. 2, 3), но кроме того, за счет разного изгиба траектории этих типов разделяются пространственно, что и приводит к появлению характерных овалов.

В верхней части рис. 2 показаны соответствующие овалы в энергетическом спектре. Высокоэнергетическая часть спектра соответствует внутренней границе отраженного пучка. На диаграмме углового распределения (рис. 2) очерчен участок вблизи  $\varphi = 4^\circ$ ,  $\beta = 13^\circ$  (зеркальное отра-

жение в плоскости падения пучка) с угловыми размерами, соответствующими апертуре экспериментальных установок.

Для построения энергетического спектра частиц, попадающих в эту область, была увеличена густота разбивания соответствующего участка площадки прицеливания.

На рис. 3 показаны спектры, построенные с учетом разрешающей способности анализаторов ( $\sim 200$  эВ). В спектрах хорошо различается группа

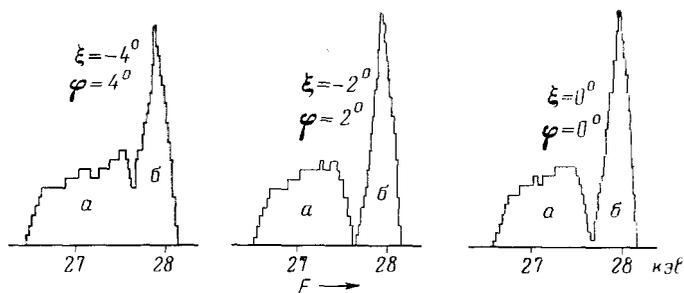


Рис. 3

«однократного» (а) столкновения ( $r = 15-20$ ) и «двукратного» (б) рассеяния ( $r = 30-37$ ). В выбранный участок попадают траектории с  $q = 3$  и  $q = 4$ , однако их характер от этого не изменяется. Для примера укажем, что траектория с  $q = 4$ ,  $r = 18$  содержит четыре столкновения с рассеянием на углы  $2^\circ 10'$ ,  $20^\circ 40'$ ,  $2^\circ 35'$  и  $0^\circ 35'$ , т. е. соответствует «однократному» рассеянию, а траектория с  $q = 3$ ,  $r = 35$  получается также в результате четырех столкновений с углами рассеяния  $1^\circ 35'$ ,  $11^\circ 55'$ ,  $11^\circ 20'$ ,  $1^\circ 40'$ , что представляет типичное «двукратное» рассеяние. На рис. 3 также приведены спектры для зеркального отражения в плоскости падения при  $\xi = 0$  и  $-2^\circ$ .

Смысл настоящего расчета состоит в возможности привести в однозначное соответствие параметры отраженного иона с точкой прицеливания на поверхности кристалла, что открывает возможность весьма детального исследования роли поверхностных атомных цепочек в рассеянии ионов.

Институт электроники  
Академии наук УзССР  
Ташкент

Поступило  
3 I 1972

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> В. М. Кивилис, Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, ДАН, 173, 805 (1967).
- <sup>2</sup> В. М. Кивилис, Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, ДАН, 192, 1259 (1970).
- <sup>3</sup> Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, Ю. Г. Скрипка, ДАН, 190, 73 (1970).
- <sup>4</sup> Э. С. Парилис, Н. Ю. Тураев, В. М. Кивилис, Радиотехника и электроника, 15, 214 (1970). <sup>5</sup> У. А. Арифов, А. А. Алиев, ДАН, 189, 756 (1969). <sup>6</sup> Д. С. Карпузов, В. И. Шульга, В. Е. Юрасова, Изв. АН СССР, сер. физ., 33, 819 (1969).