

# Рассеяние быстрых атомов и ионов кристаллической поверхностью. Ориентационные эффекты Обзор

© В.С. Малышевский

Южный федеральный университет,  
Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: vsmalyshevsky@sfedu.ru

Поступила в Редакцию 22 января 2020 г.

В окончательной редакции 22 января 2020 г.

Принята к публикации 28 января 2020 г.

Обсуждаются особенности в рассеянии ускоренных нейтральных атомов при скользящих взаимодействиях с кристаллическими поверхностями. Особое внимание уделено явлению „радужного рассеяния“ нейтральных атомов при их отражении от ориентированной кристаллической поверхности. Рассмотрены физические причины возникающих эффектов и возможность восстановления из экспериментальных данных двухчастичного „поляризационного“ и „динамического“ ион-атомных потенциалов взаимодействия.

**Ключевые слова:** поверхностное каналирование, радужное рассеяние, ион-атомный потенциал.

DOI: 10.21883/FTT.2020.08.49594.035

## 1. Введение

Ориентационные эффекты — это целый класс явлений, возникающих при взаимодействии пучков ускоренных заряженных частиц с кристаллами. Первые эффекты и особенности взаимодействия частиц с кристаллами были открыты более пятидесяти лет тому назад [1,2]. Интерес к этим проблемам сегодня связан с одной стороны с возможностью использования этих эффектов для исследования кристаллов и кристаллических поверхностей, а с другой — с открытием ряда новых явлений, имеющих фундаментальный характер, таких как когерентное тормозное излучение [3], излучение при каналировании [4], структурное Черенковское излучение [5], поворот частиц высокой энергии изогнутыми кристаллами [6] и ряд других.

За последние годы появились новые экспериментальные данные и теоретические работы, в которых исследованы особенности в рассеянии ионов и нейтральных атомов от кристаллических поверхностей. В частности, было обнаружено явление радужного рассеяния нейтральных атомов при их отражении от ориентированной кристаллической поверхности под скользящими углами [7–11]. Активно исследуются квантовые эффекты при рассеянии быстрых атомов и молекул на кристаллических поверхностях под малыми углами падения [12]. Интересной особенностью таких процессов является существенное различие в ориентационной зависимости угловых распределений рассеянных атомов благородных газов и некоторых металлов, зависимость от энергии углов радужного рассеяния атомных частиц поверхностью металлических и диэлектрических кристаллов, и, наконец, уверенное наблюдение дифракционных картин при значениях длин волн частиц де Бройля намного

меньших, чем характерный период кристаллических решеток.

Описанные явления несут ценную информацию не только о структурных особенностях поверхностных слоев кристаллов, но и о характере потенциалов ион-атомных взаимодействий. Последнее обстоятельство, пожалуй, делает эти эффекты особенно привлекательными для исследователей.

В настоящей статье рассмотрены эти и другие из появившихся в последнее время перспективных направлений исследований в этой, достаточно богатой на новые эффекты, области физики. Не все из них оказываются одинаковыми по своей сложности в описании и интерпретации. Поэтому здесь дан скорее качественный взгляд на основные результаты и направления современных исследований в этой области физики.

## 2. Ориентационные эффекты

Кратко остановимся на основных положениях физики ориентационных эффектов заряженных частиц в кристаллах. Если быстрая заряженная частица движется в кристалле, то при некоторых условиях и для определенных траекторий она может претерпевать ряд столкновений с атомами при практически одинаковых прицельных параметрах. В этом случае говорят, что индивидуальные столкновения становятся коррелированными, а отклонения в каждом столкновении с атомами будут при этом малы. Если такая частица движется вдоль главных кристаллографических направлений, она претерпевает серию малоугловых коррелированных отклонений на соседних атомах цепочки. Такие частицы называют каналированными, а подобный режим движения называют ка-

налированием заряженных частиц в кристаллах. Атомы кристаллической решетки вдоль основных кристаллографических направлений формируют, так называемые, каналы, которые ограничиваются плотно упакованными атомными рядами или плоскостями.

Потенциал взаимодействия налетающей частицы с ориентированным кристаллом или поверхностью  $U(r)$  определим как суперпозицию потенциалов взаимодействия с отдельными атомами (ионами) кристалла. Основная идея, существенно упрощающая теоретический анализ эффекта каналирования в целом, состоит в замене истинного потенциала атомов кристалла потенциалом, усредненным по координатам вдоль кристаллографического направления. Такое приближение особенно эффективно, если угол падения частицы на ось или плоскость достаточно мал. В зависимости от характера движения заряженных частиц в кристалле различают различные режимы каналирования — осевое каналирование (движение вдоль атомных цепочек) и плоскостное каналирование (движение вдоль атомных плоскостей).

Основа непрерывного приближения заключается в предположении, что формирование траектории частицы происходит в результате многочисленных последовательных столкновений частицы с атомами кристаллической решетки.

При этом закономерности движения частицы в кристалле будут отличаться от закономерностей ее движения в аморфном веществе. В непрерывном приближении движение частиц вдоль атомной цепочки определяется средним потенциалом, зависящим только от расстояния  $\rho$  от оси цепочки, т. е.

$$U(\rho) = (1/d) \int_{-\infty}^{+\infty} V(r = \sqrt{z^2 + \rho^2}) dz, \quad (1)$$

где  $V(r)$  — ионно-атомный потенциал и  $d$  — расстояние между атомами в цепочке, направленной вдоль оси  $z$ . Потенциал в канале формируется суперпозицией потенциалов отдельных атомных цепочек. Так называемая „поперечная энергия“ частицы  $E_{tr}$  с массой  $m$  и „поперечной компонентой“ импульса  $\mathbf{p}$  в канале дается следующим выражением:

$$E_{tr} = \mathbf{p}^2/2m + U(\rho). \quad (2)$$

Далее, существует критический угол каналирования (критический угол Линдхарда [1]) относительно кристаллографических направлений, который разделяет все траектории на регулярные и хаотические. При углах больших критического атомные цепочки или плоскости не оказывают направляющего действия на движение частицы.

### 3. Радужное рассеяние

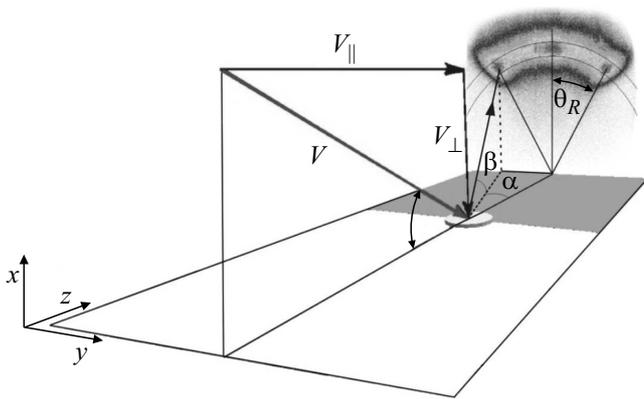
В атомных и ядерных столкновениях наблюдается явление, при котором происходит сгущение траекторий

рассеянных частиц вблизи некоторого угла. Это явление возникает вследствие немонотонного поведения зависимости угла рассеяния от прицельного параметра. Угол, вблизи которого происходит сгущение траекторий рассеянных частиц, носит название радужного угла, а такое рассеяние называют радужным рассеянием, по аналогии с известным оптическим явлением. Иными словами, эффект радужного рассеяния возникает, когда зависимость угла рассеяния от прицельного параметра имеет экстремумы. В этом случае угловое распределение рассеянных частиц будет иметь максимумы при некоторых углах рассеяния. В настоящее время накоплен большой экспериментальный материал по рассеянию различных частиц в области энергий, где проявляется радужное рассеяние. При этом радужное рассеяние существенно влияет на поведение дифференциальных сечений в различных областях углов рассеяния в зависимости от природы явления — „ядерная“ или „кулоновская“ радуга [13]. Эффект „ядерной“ радуги проявляется в угловых сечениях упругого рассеяния легких ядер ядрами. Эффект кулоновской радуги приводит к изменению поведения сечения рассеяния в области кулоновского радужного угла.

В работах [14,15] экспериментально обнаружено радужное рассеяние частиц на цепочке атомов в тонком кристалле. Экспериментальные исследования вместе с моделированием этого процесса методом Монте-Карло [16] стимулировали изучение таких процессов при движении потока частиц в тонких кристаллических пленках [17,18] и при скользящих падениях на кристаллическую поверхность [7].

Для исследования структуры поверхности кристаллов и процессов, происходящих в поверхностном слое, большое распространение получили методы поверхностного каналирования и поверхностной дифракции пучков частиц. Теоретические исследования в этой области восходят к ранним работам Ленарда–Джонса и Девоншира [19]. Так как энергии частиц, используемых в данных экспериментах не очень большие, от нескольких keV до десятков MeV, данные методы позволяют производить не только модификацию поверхности, но и неразрушающий анализ. Различие данных методов заключается в направлении пучков рассеивающихся частиц относительно различных плотноупакованных кристаллических направлений. При поверхностном каналировании частицы рассеиваются вдоль плотноупакованных атомных рядов. На возникающие при этом угловые распределения частиц может влиять как структура поверхности, так и характер взаимодействия и процессы протекающие в поверхностном слое кристаллов. Большое количество работ, посвящены исследованию зависимости рассеяния нейтральных атомов от поверхности кристаллов, рассеиваемых как в режиме дифракции, так и в режиме поверхностного каналирования.

При небольших энергиях частиц (1–100 keV) в угловые распределения частиц, рассеянных поверхностью, большой вклад вносит эффект радужного рассея-



**Рис. 1.** Геометрия рассеяния атомов на поверхности кристалла при падении под скользящими углами. Для фиксации выходных параметров рассеянных частиц используются полярные координаты в соответствии с принятыми в [20] обозначениями, где  $\alpha$  и  $\beta$  — так называемые азимутальный и полярный выходные углы соответственно,  $V$  — скорость частицы, а  $V_{\parallel}$  и  $V_{\perp}$  — ее продольная (вдоль плоскости) и поперечная компоненты, соответственно.

ния [20,21] на системе атомных цепочек. Данное явление позволяет напрямую судить о характере потенциала взаимодействия между атомами и поверхностью кристаллов по угловым распределениям рассеянных частиц. Характерные наблюдаемые угловые распределения и геометрия рассеяния частиц представлены на рис. 1. Как видно из рисунка, в распределении наблюдаются четко выраженные максимумы вблизи радужных углов.

Для атомов He, рассеянных от поверхности LiF [22], помимо максимумов радужных углов наблюдаются также другие максимумы. Данные эффекты наблюдаются для легких атомов (He, Ne) и небольших полных энергиях частиц (от 1 и до 8 keV). Наблюдаемый эффект авторы [22] связывают с квантовой интерференцией рассеянных частиц. Механизм рассеяния, названный как „добавочная радуга“ (Supernumerary Rainbow), создается рельефом потенциала поверхности, который дает усиление квантовой интерференции между частицами, отлетающими от поверхности в одном направлении, но отраженными поверхностью в разных точках движения.

На сегодняшний день наиболее надежным способом количественного описания рассеяния атомных частиц от кристаллической поверхности является метод математического моделирования процессов ион-атомных соударений. В работах [23,24] путем моделирования траекторий частиц рассмотрены особенности отражения нейтральных атомов от поверхности кристаллов и дана интерпретация наблюдаемым особенностям. В работе [24] процесс рассеяния пучка моделировался численным интегрированием методом Дормана–Принса [25] классических нерелятивистских уравнений движения каждой отдельной частицы в поле поверхности кристалла с учетом двухчастичных потенциалов взаимодействия.

Учитывалось поле, созданное ближайшим окружением с выбранным числом атомов и слоев кристаллической поверхности. Положения атомов кристалла определялись известной структурой кристаллической решетки и дисперсией нормального распределения тепловых смещений. При этом каждая отдельная частица пучка на протяжении длины пробега (порядка нескольких постоянных решетки) испытывала влияние поля неподвижных атомов, находящихся в случайно смещенных положениях. Для фиксации выходных параметров рассеянных частиц использовались полярные координаты в соответствии с принятыми, например, в [20]. Разработанное приложение позволило авторам проследить за характером траекторий рассеиваемых частиц, а также установить зависимость выходных параметров от прицельного параметра для отдельных траекторий. Для набора достаточной статистики накопление данных осуществлялось для нескольких десятков тысяч траекторий.

#### 4. Поляризационные эффекты

В теоретических моделях, описывающих ориентационные эффекты, обычно используется приближение непрерывных потенциалов (1), а в качестве потенциала ион-атомного взаимодействия берутся различные аппроксимации, основанные на статистической теории Томаса–Ферми с учетом электронного экранирования. Данные кулоновские потенциалы характеризуются экранирующей функцией, которая может быть представлена в виде суммы экспоненциальных функций с длиной экранирования  $a_s$  :

$$V(r) = (Z_1 Z_2 / r) \sum_i a_i \exp(-b_i r / a_s), \quad (3)$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер атомов налетающей частицы и атома мишени, соответственно,  $a_i$  и  $b_i$  параметры экранирующей функции, зависящие от модели потенциала. Так, например, в аппроксимации Мольера эти параметры равны  $a_i = 0.35, 0.55, 0.1$  и  $b_i = 0.3, 1.2, 6.0$  с длиной экранирования равной, так называемой, длине экранирования Фирсова [26]  $a_s = a_F = 0.8854(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}$ . Для так называемого „универсального потенциала“ ZBL (Ziegler, Biersack and Littmark [27]) используются следующие параметры  $a_i = 0.1818, 0.5099, 0.2802, 0.02817$  и  $b_i = 3.2, 0.9423, 0.4028, 0.2016$  с длиной экранирования  $a_s = a_u = 0.8854/(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})$ . Для улучшенной аппроксимации потенциала Мольера с коррекцией длины экранирования Фирсова используется так называемый OCR-потенциал (O’Connor and Biersack [28]), в котором  $a_s = a_{OCB} = a_F[\alpha(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}) + \beta]$ , где  $\alpha = 0.045$  и  $\beta = 0.54$ . Описанные потенциалы зависят от порядковых атомных номеров частиц и расстояния между ними и не учитывают электронную структуру атомных оболочек.

Авторы [22] показали, что для атомов He, рассеянных от поверхности ионного кристалла LiF, квазиклассическая модель с использованием потенциала

взаимодействия Томаса–Ферми в ZBL-приближении, не дает согласия с экспериментом, более того, полученный в результате компьютерного моделирования радужный угол оказывается меньше измеренного в эксперименте. Используемый в работе [29] потенциал, учитывающий распределение электронной плотности, качественно воспроизводит характер углового распределения рассеянных атомов, но показывает систематический сдвиг между пиками в угловом распределении полученными экспериментально, и пиками вычисленных траекторий. В работе [30] для описания данного эффекта использовалась квазиклассическая модель искаженных плоских волн. Данный метод правомерен при малой длине волны де Бройля рассеиваемых атомов и использует квазиклассическое эйкональное приближение волновой функции для описания рассеяния от поверхности. Поскольку описываемый процесс очень чувствителен к выбору потенциала взаимодействия, то основная цель работы [30] была в изучении влияния дальнедействующей части потенциала, возникающей при поляризации налетающей частицы в поле ионных остовов кристаллической решетки. Авторами был выбран потенциал, отвечающий за поляризацию налетающих на поверхность ионного кристалла частиц, в виде

$$V(r) = V^{\text{TF}}(r) + V^{\text{POL}}(r), \quad (4)$$

где  $V^{\text{TF}}(r)$  — короткодействующий потенциал Томаса–Ферми,  $V^{\text{POL}}(r)$  — дальнедействующий поляризационный потенциал ион-атомного взаимодействия. Для поляризационного потенциала фактически использовано известное приближение (см., например, [31]):

$$V^{\text{POL}}(r) = -(1/2)\beta Z_2 e^2 (r + r_0)^{-4}, \quad (5)$$

где  $\beta$  — поляризуемость налетающего атома,  $Z_2 e$  — заряд иона мишени,  $r_0$  — радиус обрезания, который можно принять, например, равным сумме радиусов электронных оболочек иона мишени и налетающего атома. Полученные в данной модели спектры дают неплохое согласие с результатами работы [22].

Другими, интересными явлениями, наблюдаемыми в подобных экспериментах, являются зависимости от полной и поперечной начальной энергии углов радужного рассеяния нейтральных атомов от поверхности металлических кристаллов. Подробные экспериментальные данные рассеяния нейтральных атомов от поверхности металлов даны в работах [20,32]. В работе [32] авторами исследуется зависимость угла радужного рассеяния нейтральных атомов Ag и Ne от поверхностей Ag(111) и Cu(111), соответственно. Показано, что зависимость угла радужного рассеяния ведет себя монотонно в обоих случаях, а именно, возрастает с увеличением значения начальной поперечной энергии. Это можно объяснить тем, что потенциал взаимодействия между атомами и поверхностью монотонно возрастает по мере приближения к поверхности. В работе проведено моделирование

взаимодействия атомов с поверхностью. В модели использовалось приближение непрерывных потенциалов, а в качестве ион-атомного потенциала взаимодействия использовались потенциалы взаимодействия, основанные на статистической теории Томаса–Ферми с учетом электронного экранирования в атоме. Полученные данные вычислений траекторий частиц, основанных на этой модели, дают хорошее согласие с результатами экспериментов. Стоит отметить, что в данных работах изучалось рассеяние атомов благородных газов, у которых все электронные оболочки заполнены полностью, поэтому использование потенциалов в модели Томаса–Ферми является обоснованным и дает неплохое согласие с результатами эксперимента.

В работе [33] путем моделирования траекторий движения частиц исследовались радужное рассеяние и ионная фокусировка атомов Ag на поверхности кристаллов Al(111) и Ag(111) и атомов Ne, Ar, Kr на поверхности кристалла Al(001). Полученные данные об особенностях в спектрах, связанных с радужным рассеянием, позволили определить амплитуду тепловых колебаний атомов для мишеней Al(111) и Ag(111). Полученные значения согласуются с данными независимых измерений. Из зависимости положения радужного пика от начальной энергии атомов были получены потенциалы взаимодействия атом-поверхность. При этом величины и функциональные зависимости потенциалов от межъядерного расстояния несколько отличаются от хорошо известных моделей парных потенциалов.

Дальнейший анализ угловых распределений атомов, рассеянных от поверхности, представлен той же группой авторов в работе [20]. В этой работе сравнивается поведение угла радужного рассеяния от поверхности в зависимости от начальной поперечной энергии частиц для различных видов атомов. Проведенные эксперименты показывают расхождение в зависимости радужного угла от поперечной энергии атомов инертных газов и металлов. Для Ag, например, который является инертным газом с полностью заполненными электронными оболочками, зависимость, как и в предыдущей работе, является монотонно возрастающей с увеличением поперечной энергии. Для атомов же Na и Al эта же зависимость не является монотонной и начинает вновь возрастать при небольших поперечных энергиях частиц. Следует отметить, что атомы Na и Al являются атомами металлов, у которых последние электронные оболочки не заполнены. Проведенное компьютерное моделирование с использованием модели непрерывных потенциалов с потенциалом взаимодействия из модели Томаса–Ферми, как и следовало ожидать, не дает согласия с результатами экспериментов для случаев рассеяния атомов Na и Al. Причиной этого, вероятно, является поляризация нейтральных атомов, падающих на поверхность мишени, что может привести не только к особенностям рассеяния, но и к новым, ранее не изученным эффектам. Действительно, дальнедействующими силами притяжения обычно пренебрегают, когда

изучают процессы, требующие малых прицельных параметров, при которых происходит значительное взаимное проникновение электронных оболочек сталкивающихся частиц. Для правильного описания столкновений с большими прицельными параметрами следует учитывать дальнюю часть потенциал, которая зависит от поляризуемости сталкивающихся частиц. Именно такой случай имеет место при падении ускоренных нейтральных атомов металлов Na и Al на поверхность кристалла. При малых углах падения на кристаллическую поверхность именно большие прицельные параметры начинают играть важную роль в формировании углового распределения рассеянных частиц. Поскольку поляризуемость атомов металлов значительно превышает поляризуемость атомов инертных газов, естественно, можно ожидать значительного поляризационного эффекта для атомов металлов (например, поляризуемость атомов He и Ar составляет 1.39 и 11.1 а.е. соответственно, а поляризуемость, например, атомов Na и K составляет 157 и 250 а.е. соответственно).

Для описания данного эффекта необходимо вводить потенциал двухчастичного взаимодействия, принимающего во внимание электронную структуру оболочек атома и учитывающего эффект погружения атома в поверхностный электронный газ. Полученный таким образом потенциал взаимодействия будет иметь притягивающую и отталкивающую часть.

Так, в работе [34] данные экспериментов [20,21] были проанализированы с помощью компьютерного моделирования с использованием кода АСОСТ [35] на основе приближения бинарных столкновений с межатомными парными потенциалами. Совпадение результатов моделирования с экспериментальными данными с использованием парного ZBL-потенциала было получено только для энергии атомных частиц 70 keV. В [34] отмечается, что экспериментальные результаты можно воспроизвести с использованием кода АСОСТ при учете дальнедействующей притягивающей части ион-атомного потенциала.

Для нахождения потенциала парного взаимодействия между падающими частицами и атомами поверхности кристалла, а также для изучения структуры поверхностного слоя монокристалла, в работе [24] проводился квантово-механический расчет полной энергии основного состояния системы, которая включает энергию электрон-электронного и электрон-ядерного взаимодействия для фиксированных положений ядер. Расчеты выполнялись с использованием теории функционала электронной плотности [36,37]. Зависимость полной энергии системы от межатомного расстояния соответствует искомому потенциалу взаимодействия в адиабатическом приближении для равновесной электронной подсистемы. Тогда потенциал взаимодействия между падающим атомом и ориентированной поверхностью кристалла определится как суперпозиция потенциалов взаимодействия с отдельными поверхностными атомами (ионами) в первом и последующих слоях.

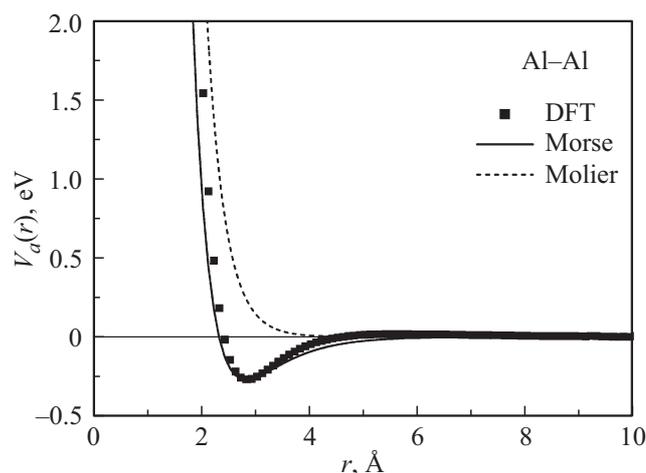


Рис. 2. Расчетные парные потенциалы взаимодействия Al–Al для разных аппроксимаций [24].

Сравнение рассчитанного таким образом потенциала парного взаимодействия атомов Al с классическим потенциалом Томаса–Ферми для различной параметризации показывает хорошее согласие для малых и больших расстояний. В диапазоне прицельных параметров, соответствующих длине связи Al–Al, имеется локальный минимум потенциала, который обусловлен ненулевой поляризуемостью нейтральных атомов Al, то есть компонентой дальнего притяжения потенциала взаимодействия (рис. 2).

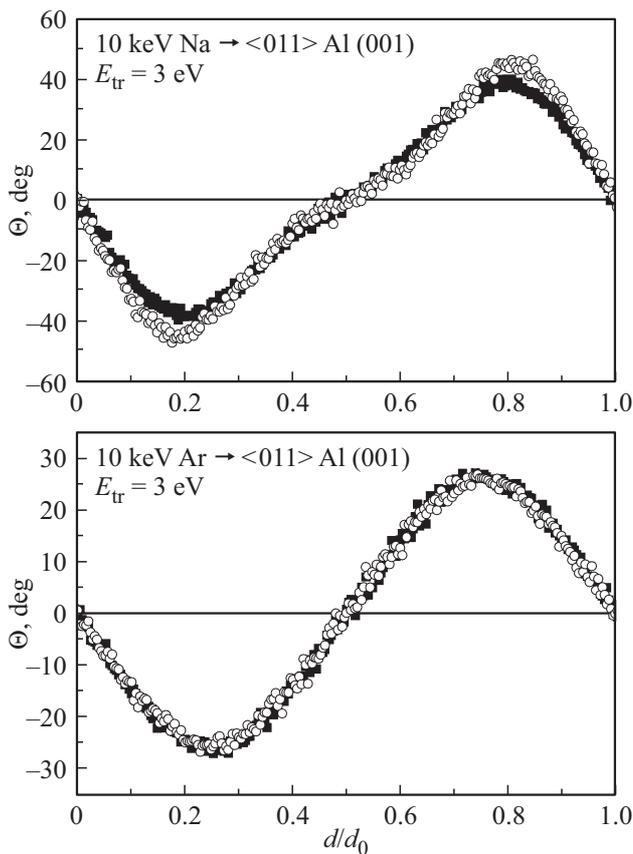
Для целей компьютерного моделирования траекторий атомных частиц, рассеиваемых на поверхности кристалла, удобно использовать хорошо известную аналитическую трехпараметрическую аппроксимацию (так называемый потенциал Морзе [38]:

$$V(r) = \epsilon(e^{-2\alpha(r-\sigma)} - 2e^{-\alpha(r-\sigma)}). \quad (6)$$

Эта аппроксимация, в случае соответствующего выбора параметров подгонки  $\epsilon$ ,  $\alpha$  и  $\sigma$ , хорошо описывает потенциал, рассчитанный с использованием теории функционала электронной плотности в диапазоне прицельных параметров, представляющих интерес для обсуждаемых задач. На рис. 2 рассчитанные потенциалы Al–Al сравниваются с потенциалами Морзе и Молиера, которые обычно используются в задачах рассеяния атомов. Параметры аналитического потенциала Морзе для Al–Al, и Al–Na, аппроксимирующего квантово-механические расчеты, показаны в табл. 1 [39].

Таблица 1. Значения параметров потенциала Морзе для двухчастичного взаимодействия Al–Al и Na–Al

Параметр	Al–Al	Na–Al
$\epsilon$ , eV	0.27	0.11
$\sigma$ , Å	3.25	3.76
$\alpha$ , 1/Å	1.16	0.97



**Рис. 3.** Зависимость азимутального угла рассеяния от прицельного параметра  $d$  (где  $d_0$  — расстояние между ближайшими атомными цепочками) при падении нейтральных атомов Na и Ar с энергией 10 keV на поверхность кристалла Al вдоль осевого направления  $\langle 011 \rangle$  [39]. Начальная поперечная энергия составляет  $E_{tr} = 3$  eV. Символы квадрат и кружок обозначают рассеяние на одинарном и двойном поверхностных слоях, соответственно.

Компьютерное моделирование процесса рассеяния атомов на поверхности кристалла показывает, что при фиксированном значении поперечной энергии зависимость азимутального угла рассеяния от прицельного параметра относительно выбранной атомной цепочки имеет ярко выраженные максимумы [39] (рис. 3), что демонстрирует наличие эффекта радужного рассеяния системой цепочек атомов. Максимальное и минимальное значения азимутального угла рассеяния и соответствующую радужному углу  $\Theta_R$ . Как следует из представленных на рис. 3 данных [39], значение радужного угла для атомов Na, в отличие от Ar, зависит от числа кристаллографических плоскостей, участвующих в процессе рассеяния. Это означает, что радужное рассеяние атомов с большой поляризуемостью оказывается чувствительным к структурным особенностям, связанными, например, с нормальной релаксацией и реконструкцией поверхности.

На рис. 4 показаны результаты математического моделирования углового распределения (в поперечной плоскости) атомов Na, Al и Ar, рассеянных на поверхности

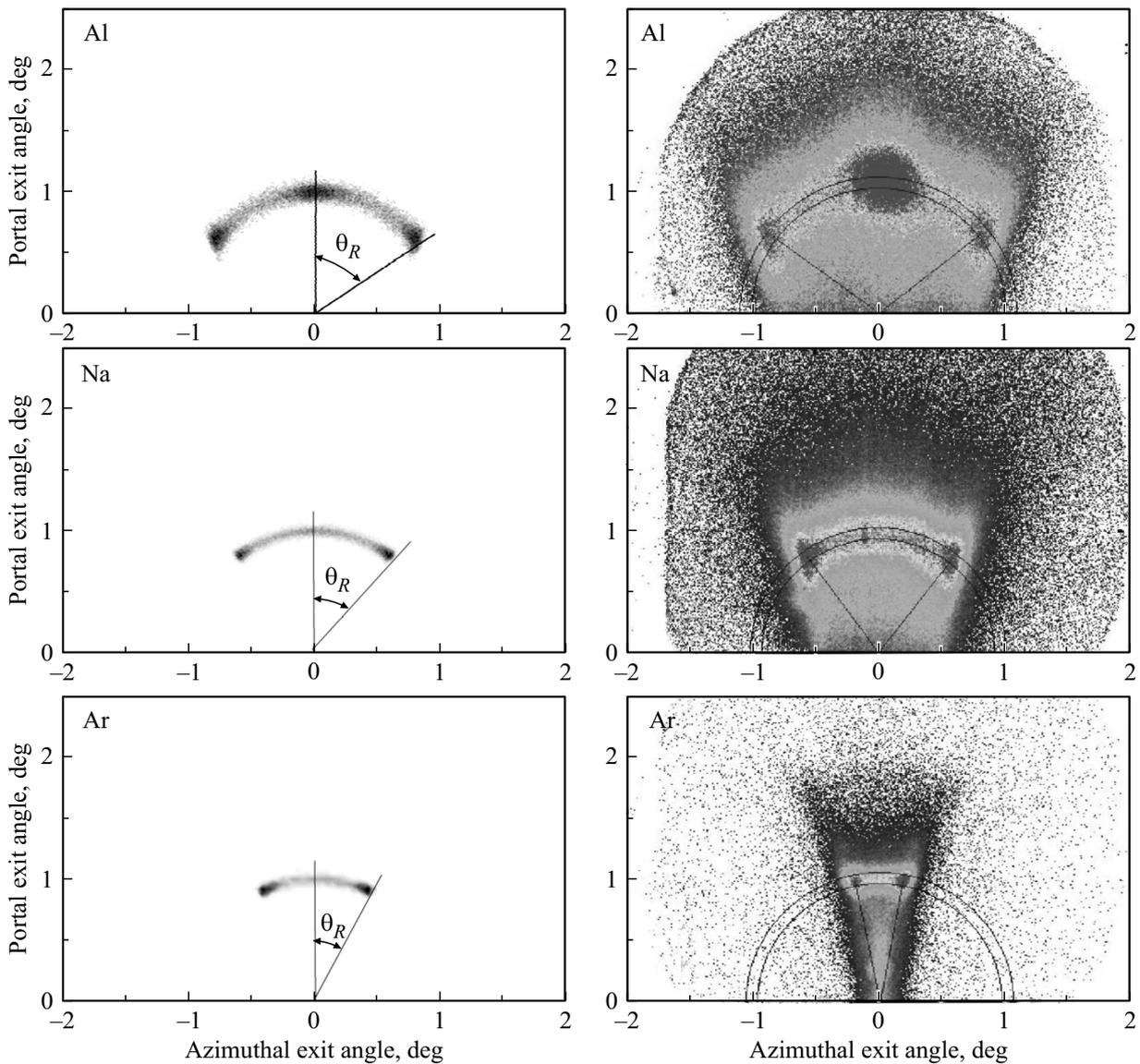
кристалла Al (001), в случае падения частиц с энергией 10 keV вдоль осевого направления  $\langle 011 \rangle$  с поперечной энергией  $E_{tr} = 3$  eV. Эффект радужного рассеяния, проявляющийся в появлении двух боковых симметричных пиков, хорошо виден. Для сравнения на рис. 4 приведены также результаты экспериментов [20].

Зависимость рассчитанного в [39] радужного угла от начальной поперечной энергии для атомов Al, Na и Ar оказывается существенно иной (рис. 5). Радужный угол начинает увеличиваться при малых поперечных энергиях для атомов Al и Na. Такое поведение можно объяснить тем, что с уменьшением начальной поперечной энергии падающих частиц угловое распределение формируется за счет процессов рассеяния с большими прицельными параметрами, и поляризационный вклад в потенциал взаимодействия оказывается значительным. Поскольку поляризуемость атомов Al и Na намного больше, чем у атомов Ar, этот эффект практически не проявляется для атомов Ar. Поэтому для атомов Ar моделирование процесса рассеяния, выполненное с использованием потенциала Томаса–Ферми в приближении OCR, дает наилучшее согласие с данными.

Следует обратить внимание на еще один интересный эффект, к которому приводят поляризационные эффекты. Из-за эффекта поляризации падающего атома потенциал взаимодействия между ними и поверхностью имеет минимум, и падающий атом, теряющий энергию при столкновении с поверхностью кристалла, может быть захвачен в поверхностное связанное состояние в потенциальной яме [9,39]. Атом в этом состоянии движется вдоль плоскости, слегка колеблясь в поперечном направлении (рис. 6, a). Отметим, что подобное явление рассматривалось в работе [40], где этот эффект возникал из-за поляризации поверхности мишени налетающей точечной заряженной частицей. Компьютерное моделирование [39] показывает, что в объеме кристалла также находятся частицы, захваченные в плоскостные каналы (рис. 6, b). Вероятность захвата в такие состояния зависит от начального прицельного параметра и точки влета в кристалл. Очевидно, что такие траектории не формируют угловое распределение отраженных от поверхности кристалла частиц.

## 5. Динамические эффекты

Другой интересной проблемой в рассеянии нейтральных атомов от поверхности металлов является зависимость угла радужного рассеяния от полной энергии налетающей частицы. Данные исследования проводились той же группой и представлены в [10]. Здесь исследовалась зависимость углов радужного рассеяния от полной энергии частиц для атомов O и N, рассеивающихся от поверхностей Al(001), Al(111) и LiF(001), LiF(111). Показано, что для атомов N угол радужного рассеяния при увеличении начальной поперечной энергии может как возрастать при большой полной кинетической энергии

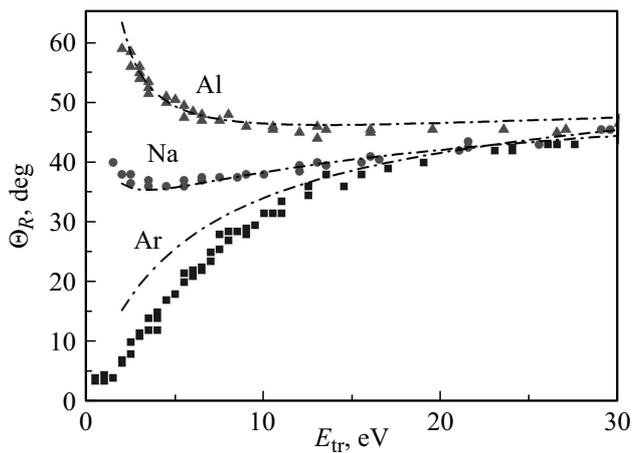


**Рис. 4.** Угловые распределения (в поперечной плоскости) атомов Na, Al и Ar с энергией 10 keV, рассеянных поверхностью кристалла Al (001) вдоль осевого направления  $\langle 011 \rangle$  с поперечной энергией  $E_{tr} = 3$  eV, (a) — результаты моделирования [39], (b) — экспериментальные данные [20].

частиц, так и уменьшаться при малой полной энергии частиц (рис. 7). Также было установлено, что в случае рассеяния атомов N от поверхности LiF, наблюдается только монотонное увеличение угла радужного рассеяния с ростом поперечной энергии, для всего интервала полных энергий частиц, используемых при проведении экспериментов.

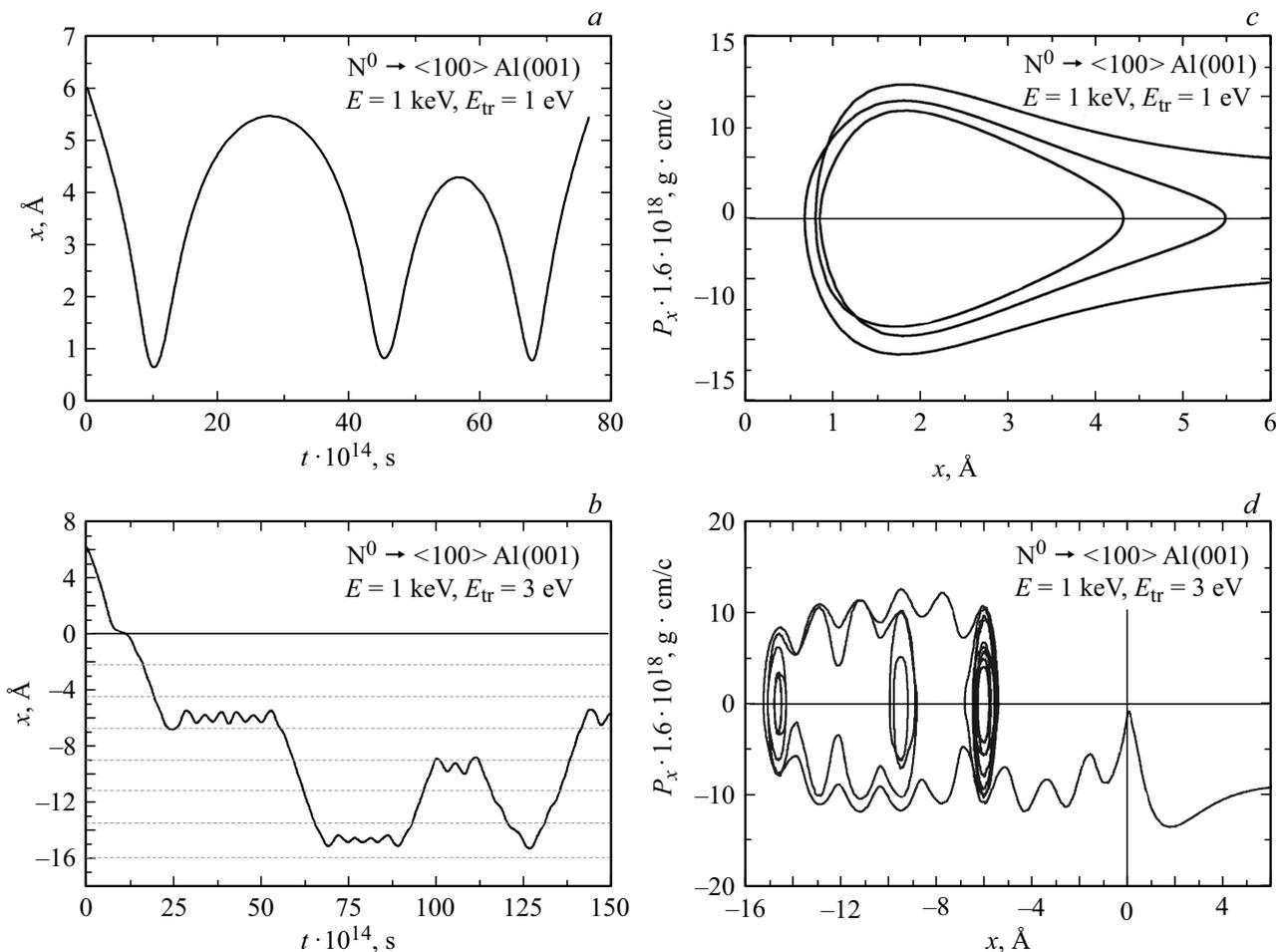
Для атомов кислорода наблюдается аналогичное поведение угла радужного рассеяния от полной энергии частицы. А именно, угол радужного рассеяния для атомов O и N при фиксированной начальной поперечной энергии и различных полных энергиях частиц уменьшается при возрастании полной энергии [10], и это наблюдается в обоих случаях только для взаимодействия атомов с поверхностью Al (рис. 7).

Заметим, что LiF является кристаллом диэлектрика, а Al — металлом, и поэтому наблюдаемые динамические явления в рассеянии могут быть связаны с диссипативными процессами, а именно, с зависимостью взаимодействия погруженного в электронный газ атома с поверхностью металлического кристалла от его кинетической энергии. А точнее, описанные закономерности можно объяснить влиянием электронного торможения медленных атомных частиц вблизи поверхности металлического кристалла. Действительно, в цитированных экспериментальных работах скорость рассеиваемых атомных частиц не превышает фермиевскую скорость (например, при энергии атомов азота 10 keV их скорость равна  $3.7 \cdot 10^7$  cm/s, в то время как фермиевская скорость электронов в Al на порядок

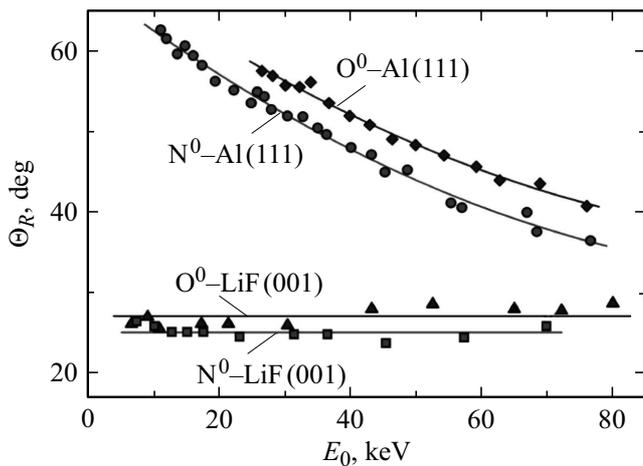


**Рис. 5.** Зависимость радужного угла от начальной поперечной энергии при рассеяния нейтральных атомов Na, Al и Ar с энергией 10 keV поверхностью (001) кристалла Al в осевом направлении <011>. Символы обозначают экспериментальные данные [10,20]. Соответствующие результаты моделирования для тех же значений энергии показаны штрих-пунктирными линиями.

больше и равна  $2.03 \cdot 10^8$  cm/s). В этом случае на характер взаимодействия медленной атомной частицы с электронной подсистемой существенную роль оказывает статистика Ферми электронного газа и величина скорости частицы. При скоростях, намного меньших фермиевской, передача импульса электронам настолько мала, что только для электронов из небольшого слоя вблизи поверхности Ферми есть возможность перейти в свободные состояния. Увеличение скорости и, соответственно, переданного импульса, приводит к увеличению этого слоя и, следовательно, к увеличению числа электронов, вовлеченных в процесс передачи импульса. Вследствие этого значение тормозного сечения возрастает вместе со скоростью частицы [41,42]. Как показано в [43,44], именно это обстоятельство является причиной уменьшения радужного угла с увеличением скорости частицы. С другой стороны описание атомных столкновений при малых скоростях сталкивающихся частиц можно проводить, используя зависящие от скорости парные потенциалы [45]. Зависимость потенциалов от скорости появляется при учете в уравнениях



**Рис. 6.** Результаты моделирования [39] траекторий (a, b) нейтральных атомов азота с энергией 1 keV и различными значениями поперечной энергии при падении на поверхность (001) кристалла Al вдоль осевого направления <100>. (c, d) — соответствующие сечения Пуанкаре, где  $x$  — нормальная координата в поперечной плоскости,  $P_x$  — нормальная компонента поперечного импульса.



**Рис. 7.** Зависимость радужного угла рассеяния нейтральных атомов азота и кислорода от полной энергии при падении частиц на поверхность кристаллов Al (111) вдоль осевого направления  $\langle 110 \rangle$  и на поверхность LiF (001) вдоль осевого направления  $\langle 100 \rangle$  по данным экспериментов [10]. Начальная поперечная энергия фиксирована и равна  $E_{tr} = 8$  eV.

Томаса–Ферми–Дирака передачи кинетической энергии электронам сталкивающихся атомов. В этом случае статистика Ферми также определяет доступное число состояний электронной подсистемы, вовлеченной в передачу энергии. Оба подхода в определенной степени эквивалентны, поскольку и в том и другом случае речь идет о передаче энергии электронной подсистеме, а область разрешенных начальных состояний определяется скоростью относительного движения сталкивающихся атомных частиц.

В работе [46] продемонстрирована возможность восстановления парного динамического потенциала по зависимости радужного угла рассеяния атомов азота при скользящих падениях на поверхность кристалла алюминия от полной кинетической энергии атомных частиц. Путем моделирования траекторий частиц рассмотрены особенности отражения нейтральных атомов азота от поверхности кристалла Al (001) и (111) при скользящих падениях вдоль осевых направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  соответственно. Зависимость угла радужного рассеяния от начальной поперечной энергии для атомов азота оказывается принципиально различной в зависимости от полной кинетической энергии атомов. Угол радужного рассеяния при увеличении энергии уменьшается. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными позволило уточнить параметры аналитической аппроксимации парного потенциала взаимодействия атомных частиц. Наилучшее согласие с экспериментальными данными [40,47] достигается при найденных в [46] динамических параметрах потенциала Морзе. Зависимость параметров потенциала (6), выраженного в единицах eV, от полной кинетической энергии может быть аппроксимирована следующими

формулами

$$\epsilon = \epsilon_1 + \epsilon_2 e^{-E/\epsilon_3}, \quad \sigma = \sigma_1 + \sigma_2 e^{-E/\sigma_3}, \quad (7)$$

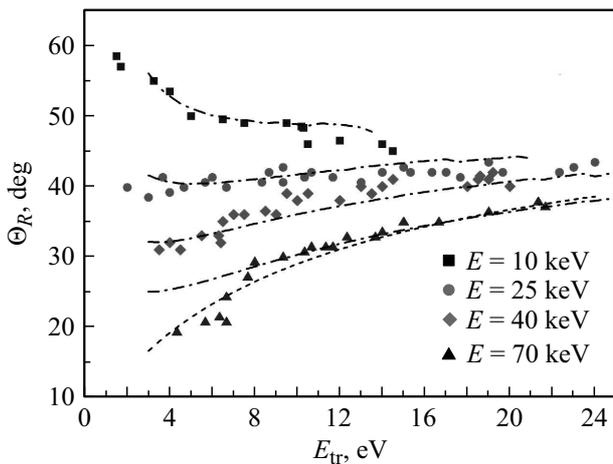
где значения констант приведены в табл. 2.

Результаты компьютерного моделирования, с использованием найденного динамического потенциала для взаимодействия N–Al, дают хорошее согласие с экспериментальными данными. Зависимость угла радужного рассеяния от начальной поперечной энергии для атомов азота оказывается принципиально различной в зависимости от полной кинетической энергии атомов. Угол радужного рассеяния при увеличении энергии уменьшается. Некоторые результаты моделирования угловых распределений с использованием динамического потенциала приведены в [46]. Рассчитанные угловые распределения полностью согласуются с экспериментальными данными [10]. Зависимость радужного угла от поперечной энергии при различных полных энергиях иллюстрируется на рис. 8 и 9. В широком интервале поперечных энергий наблюдается неплохое согласие с экспериментальными данными [10,47], выполненными для различных кристаллографических направлений. Следует отметить, что при энергии атомов азота 70 keV не удается добиться согласия с экспериментальными данными во всем интервале поперечных энергий с использованием аппроксимации Морзе. Результаты компьютерного моделирования в потенциале Морзе дают несколько завышенный результат для радужного угла при малых поперечных энергиях (или, что тоже самое, при больших прицельных параметрах).

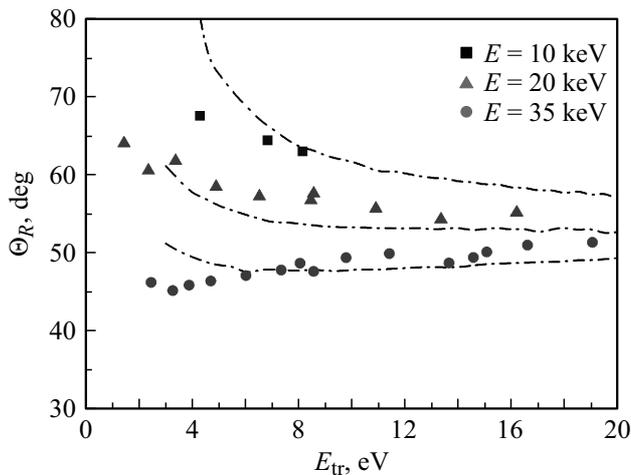
Для качественного понимания этого результата заметим, что при энергии атомов азота 70 keV их скорость равна  $0.97 \cdot 10^8$  cm/s, что уже сравнимо с приведенной выше фермиевской скоростью. Это означает, что в процесс передачи импульса электронной подсистеме вовлечены все заполненные состояния и тормозное сечение перестает возрастать с увеличением скорости атомной частицы. Зависимость потерь энергии от скорости определится сечением рассеяния на короткодействующем потенциале, которое уменьшается с увеличением скорости частицы. С точки зрения потенциального рассеяния это свидетельствует о том, что используемая аппроксимация потенциала Морзе несколько недооценивает роль экранирования атомных потенциалов при малых поперечных энергиях и при скоростях, сравнимых или больше фермиевской скорости. Действительно, меньший угол рассеяния свидетельствует о меньшей силе,

**Таблица 2.** Значения параметров аппроксимации зависящего от энергии двухчастичного потенциала Морзе N–Al

$i$	1	2	3
$\epsilon_i$	0.189	0.276	45.74
$\sigma_i$	3.616	-1.016	59.74



**Рис. 8.** Зависимость радужного угла рассеяния нейтральных атомов азота с энергиями 10, 25, 40 и 70 keV от поперечной энергии при падении частиц на поверхность (001) кристалла Al в осевом направлении  $\langle 100 \rangle$ . Экспериментальные данные [10] показаны символами, соответствующие результаты моделирования [46] для той же энергии показаны штрих-пунктирными линиями. Пунктирная линия — рассчитанный радужный угол при энергии частиц 70 keV в потенциале OCR.



**Рис. 9.** Зависимость радужного угла рассеяния нейтральных атомов азота 10, 20 и 35 keV от поперечной энергии при падении частиц на поверхность (111) кристалла Al в осевом направлении  $\langle 110 \rangle$ . Экспериментальные данные [47] показаны символами, соответствующие результаты моделирования [46] для той же энергии показаны штрих-пунктирными линиями.

действующей на частицу, или иначе, большей степени экранирования атомных потенциалов. В этом случае потенциал взаимодействия, описывающий процесс рассеяния, будет являться потенциалом отталкивания, который определяется взаимодействием ядер и электронов внутренних оболочек атомов. В частности, проведенное моделирование процесса рассеяния с использованием потенциала Томаса–Ферми в аппроксимации OCR дает наилучшее согласие с измеренными данными для

энергии атомов 70 keV во всем интервале поперечных энергий.

## 6. Заключение

Во многих задачах радиационной физики, связанных с прохождением ускоренных атомных частиц через среды, обычно используются короткодействующие парные ион-атомные потенциалы. Это обусловлено тем, что основные процессы разыгрываются при малых прицельных параметрах. Однако, в некоторых случаях, например при скользящих взаимодействиях частиц с поверхностью, как было продемонстрировано выше, дальнедействующая часть парного потенциала может оказаться существенной. Особенности такого взаимодействия несут ценную информацию о парном потенциале ион-атомного взаимодействия. Применение таких потенциалов для решения разнообразных задач физики взаимодействия ускоренных частиц с веществом позволяет, с определенными оговорками, не учитывать детали электронной структурой вещества. Результаты моделирования рассеяния нейтральных атомов поверхностью кристалла показывают, что эффект радужного рассеяния оказывается достаточно чувствительным к изменениям межатомных потенциалов взаимодействия и структуры приповерхностных слоев. Особенности радужного рассеяния атомов могут дать ценную информацию о характере межатомных взаимодействиях и о структурных особенностях релаксации и реконструкции поверхности. Изучаемые особенности позволяют, во-первых, по иному взглянуть на традиционные задачи физики ориентационных эффектов, а во-вторых, могут существенно расширить возможности метода как для исследования поверхности кристаллов, так и физики ионно-атомных столкновений. В частности, более подробное изучение энергетической зависимости радужного рассеяния атомных частиц от поверхности кристаллов позволит реализовать идею экспериментального разделения ядерных и электронных потерь энергии, что не удастся сделать при изучении тормозных потерь в традиционных экспериментах на прохождении.

## Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] Й. Линдхард. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц. Успехи физических наук **99** 249 (1969). [J. Lindhard. Influence of Crystal Lattice on Motion of Energetic Charged Particles. Mater.-Fys. Med. Dan. Vid. Selsk. **34**, 14 (1965)]
- [2] M.W. Thompson. Con. Temp. Phys. **9** 4, 375 (1968).
- [3] М.Л. Тер-Микаэлян. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. АНА ССР, Ереван (1969).

- [4] M.A. Kumakhov. Phys. Lett. A **57**, 17 (1976).
- [5] И.М. Франк. Излучение Вавилова–Черенкова. Вопросы теории. Наука, М. (1988).
- [6] Ю.А. Чесноков, А.Г. Афонин, В.Т. Баранов, Г.И. Бритвич, П.Н. Чирков, В.А. Майшеев, Д.А. Савин, В.И. Терехов. ЖЭТФ **154**, 134 (2018).
- [7] H. Winter, A. Schuller. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **232**, 165 (2005).
- [8] M.S. Gravielle, J.E. Miraglia, A. Schuller, H. Winter. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **317**, 77 (2013).
- [9] В.С. Малышевский, А.В. Казаков. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **8**, 25 (2011).
- [10] A. Schuller, H. Winter. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **267** 2621 (2009).
- [11] В.С. Малышевский, Г.В. Фомин, Е.В. Дергачева, Т.И. Жилина. ФТТ **60**, 1207 (2018).
- [12] H. Winter. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **332** 195 (2014).
- [13] Ю.А. Бережной, А.В. Кузниченко, Г.М. Онищенко, В.В. Пилипенко. Физика элементарных частиц и атомного ядра **18**, 289 (1987).
- [14] Ю.Н. Жукова, Г.А. Иферов, А.Ф. Тулинов, В.Я. Чуманов. ЖЭТФ **63**, 217 (1972).
- [15] Yu.N. Zhukova, G.A. Iferov. Phys. Status. Solidi B **110**, 653 (1982).
- [16] H.F. Krause, S. Datz, P.F. Dittner, et. al. Phys. Rev. B **33**, 6036 (1986).
- [17] S. Petrovich, L. Miletich, N. Neskovich. Phys. Rev. B **61**, 184 (2000).
- [18] M. Chosich, S. Petrovich, N. Neskovich. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **422**, 54 (2018).
- [19] J.E. Lenard-Jones, F. Devonshire. Nature **137**, 1069 (1936).
- [20] A. Schuller, H. Winter. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **256**, 122 (2007).
- [21] A. Schuller, H. Winter. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **267**, 628 (2009).
- [22] A. Schuller, H. Winter. Phys. Rev. Lett. **100**, 097602 (2008).
- [23] P.Yu. Babenko, D.S. Meluzova, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **406**, 460 (2017).
- [24] Л.А. Авакян, Т.И. Жилина, В.С. Малышевский, Г.В. Фомин. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **1,80** (2016).
- [25] J.R. Dormand, P.J. Prince. J. Comp. Appl. Math. **6**, 1, 19 (1980).
- [26] О.Б. Фирсов. ЖЭТФ **33**, 696 (1957).
- [27] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark. The Stopping and Range of Ions in Solids. Pergamon, N.Y. (1985). 321 p.
- [28] D.J. O'Connor, J.P. Biersack. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **15**, 14 (1986).
- [29] Y.S. Kim, R.G. Gordon. J. Chem. Phys. **60**, 4323 (1974).
- [30] M.S. Gravielle, J.E. Miraglia. Phys. Rev. A **78**, 022901 (2008).
- [31] Е.Е. Никитин, Б.М. Смирнов. Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями. Наука, М. (1988) 83 с.
- [32] A. Schuller, S. Wethekama, A. Mertens, K. Maass, H. Winter, K. Gartner. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **230**, 172 (2005).
- [33] П.Ю. Бабенко, Д.С. Мелузова, А.П. Солоницына, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев. ЖЭТФ **155**, 46, 612 (2019).
- [34] Wataru Takeuchi. Nuclear Inst. Meth. Phys. Res. B **440**, 68 (2019).
- [35] Y. Yamamura, W. Takeuchi. Nucl. Instr. Meth. B **29**, 461 (1987).
- [36] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [37] J.P. Perdew, Y. Wang. Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [38] L.A. Girifalco, V.G. Weizer. Phys. Rev. **114**, 687 (1959).
- [39] V.S. Malyshevsky, G.V. Fomin. Interaction Between Atomic Projectiles and a Crystal Surface at Grazing Incidence: Computer Simulation. arXiv:1909.06641. <http://arxiv.org/abs/1909.06641>
- [40] Y.H. Ohtsuki, K. Koydama, Y. Yamamura. Phys. Rev. B **20**, 5044 (1979).
- [41] E. Fermi, E. Teller. Phys. Rev. **72**, 399 (1947).
- [42] И.А. Ахиезер, Л.Н. Давыдов. УФН **129**, 239 (1979).
- [43] В.С. Малышевский, А.В. Казаков. Письма в ЖТФ **37**, 17, 98 (2011).
- [44] V.S. Malyshevsky. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **309**, 151 (2013).
- [45] Г.В. Дедков. УФН **165**, 919 (1995).
- [46] В.С. Малышевский, Г.В. Фомин, Е.В. Дергачева. Изв. вузов. Физика. **61**, 97 (2018).
- [47] P. Tiwald, C. Lemell, A. Schuller, H. Winter, J. Burgdorfer. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **269**, 1221 (2011).

Редактор Ю.Э. Кумаев