

02;11

О динамическом взаимодействии нейтральных атомов с поверхностью кристалла при скользящих падениях

© А.В. Казаков, В.С. Малышевский

Южный Федеральный университет, Ростов-на-Дону
E-mail: vsmalyshevsky@sfedu.ru

Поступило в Редакцию 29 марта 2011 г.

Дана интерпретация обнаруженных недавно динамических эффектов в радужном рассеянии нейтральных атомов при скользящих падениях на поверхность металлических кристаллов. Показано, что указанные особенности могут быть объяснены электронным торможением рассеиваемых атомных частиц вблизи поверхности кристалла.

В ряде недавних работ были обнаружены особенности в рассеянии ускоренных до энергии в несколько десятков keV нейтральных атомов от кристаллических поверхностей. Одной из обнаруженных в [1] особенностей является различная ориентационная зависимость рассеяния атомов благородных газов и некоторых металлов, что является следствием поляризации падающих на поверхность мишени нейтральных атомов [2]. Количественное объяснение эффекта зависит от правильного выбора дальнедействующей части потенциала взаимодействия [3]. Другая особенность была описана в работе [4] и состоит в нетривиальной зависимости радужного угла рассеяния от полной энергии атомных частиц, падающих на поверхность металлических и диэлектрических кристаллов. А именно, при фиксированной начальной поперечной энергии значение радужного угла рассеяния атомных частиц от металлической поверхности уменьшается с увеличением полной начальной энергии частиц. Эффект наблюдается только при рассеянии поверхностью металлов и отсутствует при рассеянии атомов диэлектрическими поверхностями. Авторы [4] не дали объяснения обнаруженному эффекту, а лишь констатировали динамический характер взаимодействия атомов с поверхностью металлов. В данной работе мы покажем, что указанные особенности являются следствием

электронного торможения рассеиваемых атомов, которое оказывается существенным для металлических поверхностей.

При рассеянии частиц ориентированной поверхностью кристаллов вдоль атомных цепочек эффект радужного рассеяния возникает, когда зависимость азимутального угла рассеяния $\Phi(\rho)$ от прицельного параметра ρ относительно выбранной атомной цепочки имеет экстремумы. Значение азимутального угла рассеяния в экстремуме и есть радужный угол Φ_R . Основная идея, существенно упрощающая теоретический анализ ориентационных эффектов рассеяния при скользящих падениях, состоит в замене истинного потенциала атомов кристалла потенциалом, усредненным по координатам вдоль кристаллографического направления. При движении вдоль атомных цепочек усредненный потенциал на расстоянии ρ от оси цепочки определяется как [5]:

$$U_c(\rho) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} V_a(R = \sqrt{z^2 + \rho^2}) dz, \quad (1)$$

где $V_a(R)$ — потенциал взаимодействия налетающих частиц с атомами (или ионами) кристалла и d — расстояние между атомами в цепочке. Для короткодействующего двухчастичного потенциала взаимодействия $V_a(R)$ в физике каналирования используют различные аппроксимации, например в модели Томаса–Ферми хорошим приближением является аппроксимация Мольера. Потенциал взаимодействия атомной частицы с ориентированной кристаллической поверхностью $U(x, y)$ является суперпозицией потенциалов изолированных цепочек (1) и зависит лишь от координаты, лежащей в плоскости (x, y) , перпендикулярной кристаллографическому направлению.

Для анализа зависимости эффекта радужного рассеяния от начальной энергии падающих на поверхность кристалла атомов отметим два важных обстоятельства. Во-первых, энергия атомов в цитированных выше экспериментах такова, что их скорость меньше или сравнима со скоростью внутриатомных электронов. В этом случае удельные электронные потери энергии возрастают с увеличением скорости частиц, а зависимость тормозного сечения S_e от скорости частиц может иметь нелинейный характер. Во-вторых, в этих условиях торможение атомов или ионов в веществе определяется большим числом различных

физических процессов, а используемые теоретические модели оказываются достаточно упрощенными и не могут охватить весь интервал скоростей v . Поэтому для практических целей используются различные эмпирические и интерполяционные формулы. Мы будем использовать выражение для тормозного сечения из модели свободного ферми-газа, учитывающее квадратичные по скорости члены [6], $S_e = 4\pi a^2 M v^2$, где a — длина рассеяния электроном атомной частицы, M — масса атомной частицы. Длину рассеяния оценим как $a = k a_0$, где a_0 — борковский радиус, k — феноменологический поправочный коэффициент, который введен для учета вклада внутренних и внешних электронов в тормозное сечение и, вообще говоря, зависит от скорости атомной частицы.

Силу торможения, направленную против вектора скорости атомной частицы, запишем как $\mathbf{F}_e = -4\pi a^2 n_e M v^2 \mathbf{n}$, где $\mathbf{n} = \mathbf{v}/v$, n_e — электронная плотность, которая в общем случае является функцией координат. Усредненную по продольному направлению электронную плотность вблизи поверхности можно оценить, зная потенциал $U(x, y)$, из уравнения Пуассона $n_e(x, y) = -\Delta U(x, y)/4\pi e^2$. Таким образом, уравнения движения, описывающие движение нерелятивистских частиц вдоль атомных цепочек с учетом электронного торможения, имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{dp_x}{dt} &= F_x(x, y) - 4\pi a^2 n_e v p_x, & \frac{dx}{dt} &= \frac{p_x}{M}, \\ \frac{dp_y}{dt} &= F_y(x, y) - 4\pi a^2 n_e v p_y, & \frac{dy}{dt} &= \frac{p_y}{M}, \\ \frac{dp_z}{dt} &= -4\pi a^2 n_e v p_z, & \frac{dz}{dt} &= \frac{p_z}{M}, \end{aligned} \quad (2)$$

где p_x , p_y и p_z — поперечные и продольная компоненты импульса, $F_x(x, y)$ и $F_y(x, y)$ — компоненты силы, действующей на атомную частицу, $F_x(x, y) = -\partial U(x, y)/\partial x$, $F_y(x, y) = -\partial U(x, y)/\partial y$.

Решение системы уравнений (3) позволяет установить влияние электронного торможения на закономерности радужного рассеяния. Для феноменологического коэффициента k , введенного выше для оценки длины рассеяния, полагалось, что $k = 10$ для всех значений энергии падающих частиц, что дало удовлетворительное согласие численных расчетов с результатами измерений. Зависимость рассчитанного азимутального угла рассеяния $\Phi(\rho)$ атомов азота при заданной поперечной

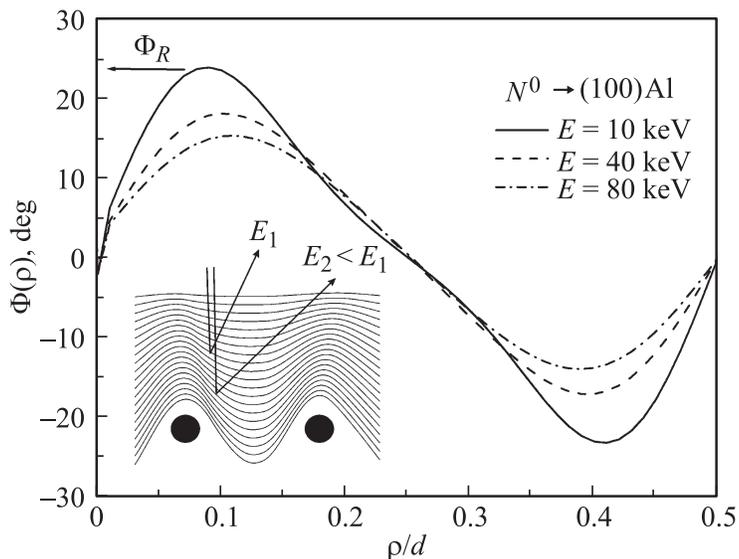


Рис. 1. Зависимость азимутального угла рассеяния от прицельного параметра при падении нейтральных атомов азота с различной энергией на поверхность Al(100) вдоль направления $\langle 100 \rangle$ с начальной поперечной энергией 8 eV.

энергии от прицельного параметра относительно выбранной атомной цепочки на поверхности кристалла алюминия имеет выраженные максимумы (рис. 1), что свидетельствует об эффекте радужного рассеяния. Увеличение полной энергии приводит к уменьшению угла радужного рассеяния Φ_R (рис. 2), как это и наблюдалось в экспериментах [4]. Причем зависимость от энергии появляется только при учете потерь энергии, которые при скользящих падениях на поверхность металлического кристалла определяются главным образом электронным торможением. Физическая причина явления заключается в том, что в исследуемом энергетическом диапазоне увеличение скорости сопровождается возрастанием потерь как полной энергии, так и ее поперечной составляющей. В результате отражение атомной частицы от поверхности кристалла происходит в области меньшего значения ее потенциальной энергии, т.е. на больших расстояниях от поверхности кристалла, где

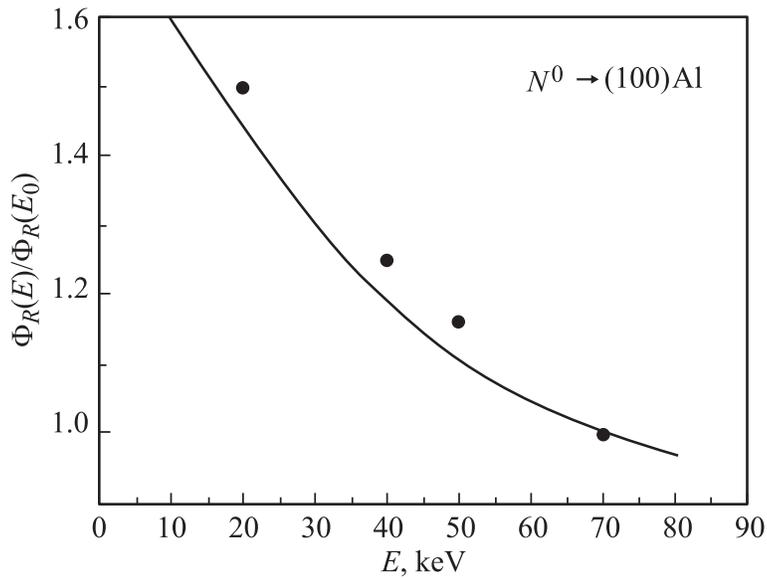


Рис. 2. Зависимость относительного азимутального угла рассеяния $\Phi_R(E)/\Phi_R(E_0)$ ($E_0 = 70 \text{ keV}$) от полной энергии нейтральных атомов азота при падении на поверхность Al(100) вдоль направления $\langle 100 \rangle$ с начальной поперечной энергией 8 eV. Сплошная линия — результаты расчетов, • — результаты измерений согласно [4].

рельеф потенциала более пологий и, следовательно, азимутальный угол рассеяния меньше. Эта ситуация наглядно иллюстрируется на вставке к рис. 1, на которой показана проекция процесса рассеяния на атомных цепочках (черные кружочки) на поперечное направление. Атомная частица с полной энергией E_1 , большей, чем E_2 , отражается в силу указанных выше причин от поверхности кристалла с рассеянием на меньший азимутальный угол.

В заключение отметим, что 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 экспериментах на прохождении.

Список литературы

- [1] *Schuller A., Winter H.* Nuclear Instruments Methods Physics Research. B. 2007. V. 256. P. 122.
- [2] *Мальшевский В.С., Казаков А.В.* // Тез. докл. XXXIX Междунар. конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. Москва, 26–28 мая 2009 г. С. 21.
- [3] *Tiwald P., Schuller A., Winter H.* et al. // Physical Review. B. 2010. V. B82. P. 125 433.
- [4] *Schuller A., Winter H.* // Nuclear Instruments Methods Physics Research. B. 2009. V. 267. P. 628.
- [5] *Lindhard J.* // Kgl. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. 1965. V. 34. N 14. P. 64. (Линдхард Й. // УФН. 1969. В. 2. С. 249–296).
- [6] *Ахиезер И.А., Давыдов Л.Н.* // УФН. 1979. Т. 129. В. 2. С. 239–254.