

### 3. Хвостов В.В. Моделирование взаимодействия ионов с поверхностью кристаллов<sup>1</sup>

Ионное облучение широко используется в технологии микроэлектроники. Ряд различных технологических операций производится с применением ионов (травление, очистка поверхности, легирование). Этот ряд может быть существенно расширен и результат воздействия ионного облучения оптимизирован на основе использования новых эффектов и механизмов ионного воздействия на поверхность.

Кроме того, знание состояния иона, отраженного поверхностью после взаимодействия позволяет при определенных предположениях определить массу атомов, на которых происходило рассеяние, т.е. провести анализ состава поверхности (в отличие от традиционных методов рентгеноструктурного анализа, позволяющих исследовать структуру кристалла). Оптимизация и повышение сечения эффекта ионного облучения связываются с использованием механизмов неупругого взаимодействия ионов с поверхностью – перезарядкой ионов на поверхности. При низких энергиях ионов ( $< 1 \text{ кэВ}$ ) за счет неупругих процессов скорость травления может быть повышена на порядок и более, при этом осуществимо селективное травление заданного компонента поверхности. Это связано с тем, что перезарядка медленных ионов на поверхности ионных и ионно–ковалентных кристаллов приводит к радиационным нарушениям, приводящим к радикальным изменениям физических свойств поверхности. Наблюдаемый эффект имеет ярко выраженный резонансный характер. Причина резонанса заключается в квантово–механическом характере взаимодействия электронных подсистем иона и твердого тела. Это проявляется в появлении резких экстремумов в сечениях образования электронных возбуждений и радиационных эффектов от параметров облучения. Однако, неупругие взаимодействия низкоэнергетичных ионов с поверхностью – резонансная перезарядка – происходят в узких интервалах параметров ионного облучения и требуют избирательного подхода к выбору облучающих ионов. Прогнозирование условий ионной стимуляции требует глубокого понимания процессов взаимодействия ионов низких энергий с поверхностью.

В задаче теоретически рассматривается следующая (близкая к эксперименту) задача. На исследуемый кристалл под углом 45 градусов к нор-

---

<sup>1</sup> © В.В. Хвостов, 2012.

© Физический факультет МГУ, 2012

мали падает пучок ионов неона с энергией 1000 эВ (Рис. 1)<sup>2</sup>. Рассеянные под углом 45 градусов (или близким к нему) к кристаллу ионы сепарируются с помощью системы диафрагм и поступают анализатор по энергиям. Проанализируем процессы, происходящие при взаимодействии иона с поверхностью кристалла.

### 1. Упругое рассеяние легких ионов

В основе рассмотрения взаимодействия атомных частиц с твердыми телами лежит задача о столкновении двух частиц [1]. Она является сложной задачей многих тел, так как происходит столкновение частиц, состоящих из ядра и большого числа электронов. Упругие столкновения характеризуются сохранением кинетической энергии и импульса движущейся частицы и атома твердого тела, с которым произошло взаимодействие. Под неупругими подразумеваются столкновения, при которых происходят возбуждение электронов и ионизация сталкивающихся частиц. Как в упругих, так и в неупругих столкновениях взаимодействие обусловлено кулоновскими силами между зарядами ядер и электронов. При рассмотрении упругих столкновений полагают, что роль электронов сводится, в основном, к электростатическому экранированию зарядов ядер.

#### 1.1. Кинематика и динамика столкновения иона с атомом мишени

В задаче проводится численное моделирование рассеяния ионов низких энергий поверхностью (100) монокристалла NaCl. Обычно анализ рассеяния проводят в рамках классической механики, а именно на основе соотношения элементарного акта взаимодействия двух частиц. На рис. 1 представлена картина рассеяния в лабораторной системе координат.

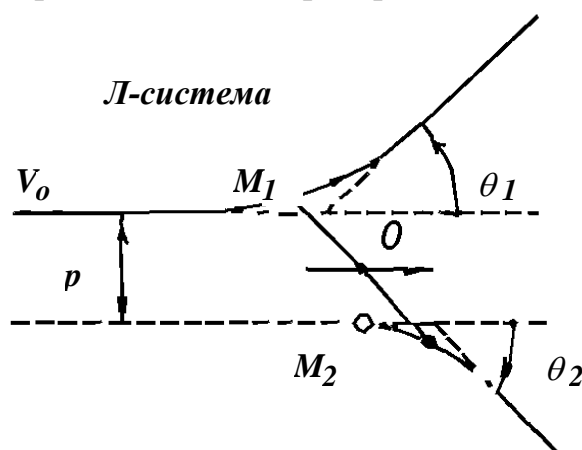


Рис.1. Схема рассеяния в лабораторной системе координат.

<sup>2</sup> Мы пренебрегаем процессами распыления атомов мишени под действием ионной бомбардировки

Ион массы  $M_1$  со скоростью  $v_0$  налетает на первоначально покоящийся атом «мишени», масса которого равна  $M_2$ . Если бы взаимодействие между ионом и атомом мишени отсутствовало, то ион пролетел бы на расстоянии  $p$  от атома мишени. Это расстояние называют прицельным параметром. В результате взаимодействия ион рассеивается на угол  $\theta_1$  по отношению к направлению первоначального движения. Что же касается атома мишени, то он после столкновения движется в направлении, составляющем угол  $\theta_2$  с направлением первоначального движения иона. Этот атом называют атомом отдачи. На рисунке отмечена траектория движения центра инерции и его положение (точка 0) в момент наибольшего сближения взаимодействующих частиц. Если столкновение не сопровождается изменением внутреннего состояния частиц, т.е. является упругим, то из законов сохранения кинетической энергии и импульса

$$M_1(V_0)^2 = M_1(V_1)^2 + M_2(V_2)^2$$

$$M_1V_0 = M_1V_1\cos\theta + M_2V_2\cos\varphi$$

$$M_1V_1\sin\theta - M_2V_2\sin\varphi = 0$$

можно получить выражения для энергии иона, рассеянного на угол  $\theta_1$ , и атома отдачи, летящего в направлении  $\theta_2$

$$E_1 = E_0 M_1 / (M_1 + M_2)^2 \left\{ \cos\theta_2 + \left[ (M_2/M_1)^2 - \sin^2\theta_1 \right]^{1/2} \right\} \quad (1)$$

$$E_2 = E_0 4M_1M_2 / (M_1 + M_2)^2 \cos\theta_2 \quad (2)$$

где  $E_0$  – энергия падающего атома,  $E_1$  – энергия рассеянного атома,  $E_2$  – энергия атома отдачи. Выражения (1) и (2) основаны только на законах сохранения и поэтому не зависят от конкретного вида закона взаимодействия. Результатом решения задачи столкновения двух частиц является интеграл рассеяния, то есть зависимость угла рассеяния от прицельного параметра. В общем случае в системе центра инерции этот интеграл имеет вид:

$$\chi = \pi - 2 \int b dr / r^2 g(r) \quad (2)$$

$$g(r) = (1 - b^2/r^2 - V(r)/E)^{1/2} \quad (2a)$$

где  $E$  – энергия относительного движения,  $r$  – расстояние между взаимодействующими частицами  $V(r)$  – двухчастичный потенциал взаимодействия. Определив угол рассеяния в системе центра масс по формуле перехода:

$$\operatorname{tg}\theta = \sin\chi / (m_1/m_2 + \cos\chi)$$

можно найти углы рассеяния в лабораторной системе координат.

Аналитически эту задачу можно решить только для двух частиц. При исследовании рассеяния ионов на поверхности твердого тела необходимо учитывать взаимодействие иона одновременно с несколькими атомами поверхности, так как расстояние между атомами на поверхности сопоставимо с радиусом экранирования иона. Такие задачи решают с помощью численного моделирования.

## 1.2. Сечение обратного рассеяния

В экспериментах по рассеянию не наблюдают траекторию отдельной частицы. На мишень направляют пучок частиц, обладающих одинаковыми скоростями  $v_0$ , и измеряют поток частиц, рассеянных в заданном направлении. Так как частицы пучка обладают различными прицельными параметрами  $p$  и азимутальными углами  $\phi$  по отношению к рассеивающему центру, то они рассеиваются под разными углами. Угловое распределение частиц, рассеиваемых силовым центром, описывается с помощью представления об эффективном сечении рассеяния.

Дифференциальное эффективное сечение рассеяния  $\sigma(\chi, \phi)$  определяют как отношение числа частиц, рассеянных за единицу времени в единицу телесного угла в направлении, характеризуемом полярным  $\chi$  и азимутальным  $\phi$  углами рассеяния, к плотности  $N$  падающего потока. Следовательно, число частиц, рассеянных в элемент телесного угла  $d\Omega$ , равно:

$$N \sigma(\chi, \phi) \delta\Omega = N \delta\sigma; \delta\sigma = \sigma(\chi, \phi) \delta\Omega \quad (3)$$

Кроме дифференциального эффективного сечения рассеяния, пользуются также понятием полного эффективного сечения рассеяния, которое получается интегрированием дифференциального эффективного сечения рассеяния по всем возможным углам.

Зависимость дифференциального сечения рассеяния от углов рассеяния легко получается при однозначной связи угла  $\chi$  и прицельного параметра  $p$ . В этом случае в интервал углов между  $\chi$  и  $\chi+d\chi$  рассеиваются те частицы, которые обладают прицельными параметрами в интервале между  $p$  и  $p+dp$ . Число таких частиц равно произведению плотности падающего потока  $N$  на площадь элементарной площадки  $dS = pdp d\phi$  (рис. 2), т.е.

$$N pdp d\phi = N \sigma(\chi, \phi) d\Omega \quad (4)$$

В случае кулоновского и обратноквадратичного потенциалов можно записать несложное аналитическое выражение для дифференциального эффективного сечения рассеяния. Так, для потенциала взаимодействия  $V$ , выра-

женного в виде  $V=A/r$ , где  $A$  – эмпирическая константа, получается формула Резерфорда:

$$\sigma = (A/4E)^2 / \sigma_i v^4 (\chi/2) \quad (5)$$

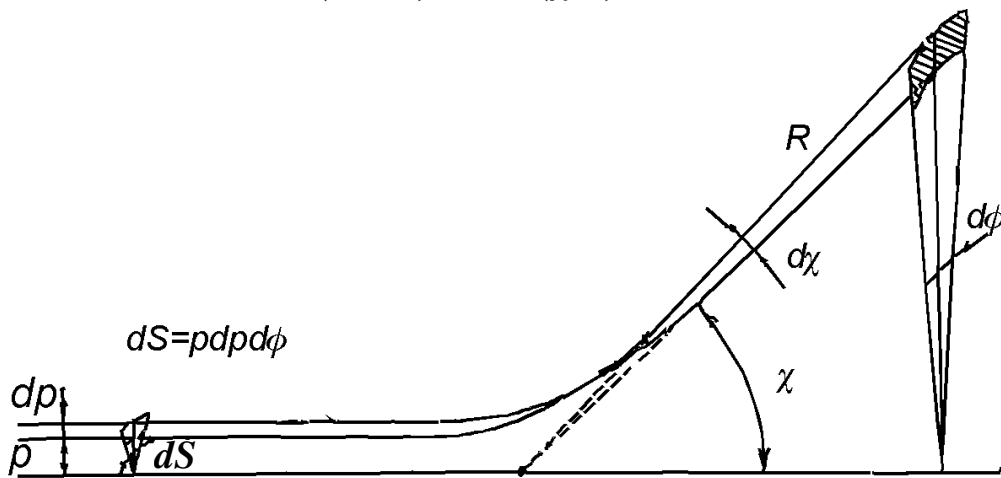


Рис.2. Рассеяние потока частиц силовым центром

### 1.3. Энергетическая зависимость интенсивности рассеяния

Если полная вероятность нейтрализации иона при приближении и удалении от поверхности равна  $P_n(E)$ , где  $E$  – энергия поля, а дифференциальное сечение упругого рассеяния на поверхности равно  $\sigma(E)$ , то для интенсивности  $I(E)$  обратного рассеяния ионов мы имеем выражение

$$I(E) = \sigma(E) [1 - P_n(E)] \quad (6)$$

Расчеты в классическом приближении величины  $\square$  для столкновений атомов с поверхностями показывают, что с увеличением энергии величина  $\square(E)$  монотонно убывает. Вероятность  $P_n$  того, что ион нейтрализуется при движении к телу и обратно, изменяется пропорционально  $\exp(-A/av)$ . Таким образом, при увеличении  $E$  и  $v$  вероятность  $P_n$  должна уменьшаться, а величина  $(1 - P_n)$  – монотонно возрастать. Согласно формуле (6), это приводит к тому, что интенсивность  $I(E)$  проходит через широкий максимум в области  $100 < E < 1000$  эВ.

### Упражнения 1 – 2.

В данной задаче с помощью компьютерного моделирования рассчитываются параметры рассеяния ионов на реальной поверхности твердого тела. В задаче моделируется рассеяние ионов азота ( $M_N=14$ ) на поверхности кристалла NaCl ( $M_{Na}=23$ ,  $M_{Cl}=36$ ) атомов двух приповерхностных слоев. При этом учитывается взаимодействие падающего иона с цепочкой из 5

атомов двух приповерхностных слоев. На рис.3 показан фрагмент структуры первого слоя поверхности NaCl. Большие сферы соответствуют атомам хлора, а малые – атомам натрия. Период решетки кристалла NaCl  $a=5.0 \text{ \AA}$ .

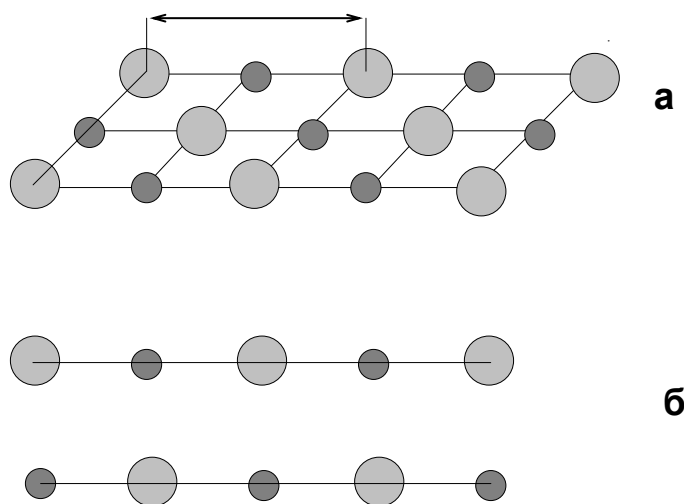


Рис. 3 Положение атомов в кристаллической решетке. Крупные атомы – хлор, более мелкие – Натрий.

С помощью программы `zadanie1.exe` рассчитать траектории рассеяния для различных прицельных параметров в пределах постоянной кристаллической решетки (от 0 до 5  $\text{\AA}$ ). На запрос программы “input initial ,final parameters” ввести начальное и конечное значение прицельных параметров через запятую (0,5). Результаты расчетов будут записаны в файл “parameters.dat” в виде таблицы, в которой первая колонка содержит прицельные параметры, соответствующие зеркальному рассеянию первичных ионов, а вторая – соответствующую данному прицельному параметру энергию рассеянных ионов. В процессе моделирования в правом верхнем углу выводятся текущие значения прицельного параметра.

Из полученной таблицы выписать диапазоны изменения прицельных параметров, соответствующих близким значениями энергии рассеянных ионов.

Более подробное распределение рассеянных ионов по энергии определяется с помощью программы `zadanie2.exe`. Начальные и конечные значения прицельного параметра из файла “parameters.dat” вводить через запятую (например 1.07, 1.08). В качестве имени выходного файла ввести среднее значение прицельного параметра (десятые доли через дефис, например 1–75). В процессе моделирования обратить внимание на движе-

ние атомов отдачи траектории, которых отображаются красным цветом. Определить приблизительно средний угол движения атома отдачи относительно направления движения первичного атома. На экране прямыми белыми линиями показаны угловые метки через  $5^\circ$ . Записать вид рассеяния (одно или двукратное) и тип рассеивающих атомов (Cl, Cl–Na, Na, Na–Cl). В случае двукратного рассеяния (Cl–Na, или Na–Cl) .

Составить таблицу 2

$\Delta b$	$E_{cp}$ $E^*$	Угол отдачи	Центры рассеяния	$E_{расч}$
Cl				
Cl–Na				
Na				
Na–Cl				

С помощью программ EXCEL или OPEN OFFICE построить энергетическое распределение рассеянных ионов для рассматриваемых вариантов. Для сравнения рассчитать аналитически энергии рассеянных атомов с учетом только парного взаимодействия (формула 1). В нашем случае, когда угол рассеяния равен  $90^\circ$  известная формула для энергии, рассеиваемой частицы

$$E_1/E_o = 1/(1+A)^2 [\cos\Theta \pm (A^2 - \sin^2\Theta)^{1/2}]^2 \quad (6)$$

где  $A=M_2/M_1$  принимает простой вид  $E_1/E_o = (A-1)/(A+1)$ .

По последней формуле рассчитать значение энергии рассеянной частицы в приближении однократного рассеяния.

### Упражнение 3.

Запустить программу zadanie3.exe. На запрос “input x” ввести число, заданное преподавателем от 1 до 3. На запрос “input File name” ввести произвольное имя файла только латинскими буквами. По мере расчета траекторий следить за значениями прицельного параметра для различных типов рассеяния (одно и двукратного рассеяния). В полученном файле определить энергии рассеянных от различных атомов поверхности ионов.

Составить таблицу 3

$\Delta b$	$E_{расч.}$	Центры рассеяния	$E_{теор.}$


По формуле (2) используя, полученные значения  $E_{расч.}$  определить тип рассеянных ионов. Рассчитать также теоретические значения  $E_{теор.}$ . Объяснить различие расчетных и теоретических значений энергии рассеянных ионов.

#### Упражнение 4.

Запустить программу zadanie4.exe. На запрос “input x” ввести число, заданное преподавателем от 1 до 4. На запрос “input File name” ввести произвольное имя файла только латинскими буквами. По мере расчета траекторий следить за значениями прицельного параметра для различных типов рассеяния (одно и двукратного рассеяния). В полученном файле определить энергии рассеянных от различных атомов поверхности ионов.

Составить таблицу 3

$\Delta b$	$E_{расч.}$	Центры рассеяния	$E_{теор.}$

По значения  $E_{расч.}$  определить какой атом поверхности является примесным и его массу. Рассчитать также теоретические значения  $E_{теор.}$ . Объяснить различие расчетных и теоретических значений энергии рассеянных ионов.

**Дополнение (выполняется по указанию преподавателя).**

## 2. Неупругие процессы, сопровождающие рассеяние

Процессы переноса заряда в системе ион – твердое тело описывались в целом ряде работ. Наиболее полная классификация дана в [2], в которой предлагается три основных типа неупругих процессов:

- а) адиабатическое тунелирование или резонансная нейтрализация и ионизация;
- б) оже–нейтрализация и оже–девозбуждение;
- в) неадиабатическая резонансная перезарядка.



## 2.1 Резонансная нейтрализация и ионизация

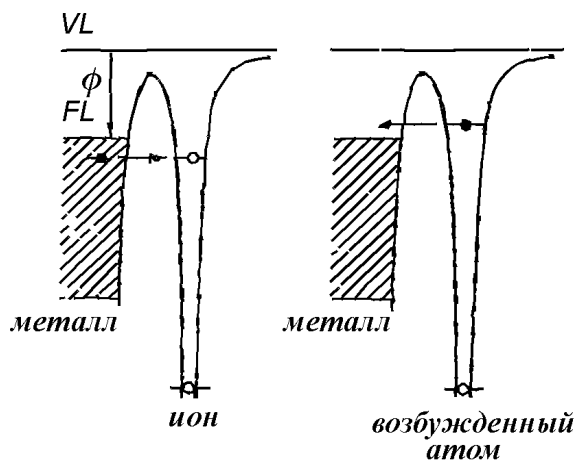


Рис.4 Резонансная нейтрализация иона.

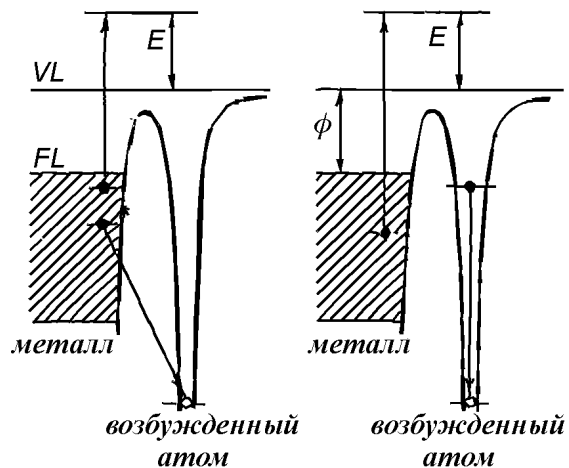


Рис.5. Оже нейтрализация и Оже де-возбуждение атома.

На рис. 4 и 5 изображены заполненные энергетические уровни, расположенные в металлах ниже уровня Ферми  $FL$ , который в свою очередь лежит ниже энергетического уровня  $VL$ , соответствующего значению энергии свободного электрона в вакууме, на величину работы выхода электрона из металла  $\phi$ . Электронные переходы показаны стрелками, первоначально заполненные электронные состояния атома или твердого тела – темными кружками, первоначально незаполненные состояния – светлыми кружками.

На рис.4 слева изображена резонансная нейтрализация иона, в результате которой возникает возбужденное состояние нейтрализованного атома с энергией, меньшей энергии уровня Ферми. В этом процессе электрон туннелирует с заполненного уровня в твердом теле и переходит на возбужденный уровень атома, имеющий ту же энергию. Конечно, возможна и резонансная нейтрализация с переходом на основной уровень, если этот уровень на атоме лежит напротив заполненной энергетической зоны твердого тела. Резонансная ионизация атома на поверхности возможна, если заполненный электронный уровень в атоме лежит выше уровня Ферми вблизи поверхности и, таким образом, находится напротив незаполненных энергетических уровней металла. И снова таким исходным уровнем может быть заполненный основной уровень атома, если эффективная энергия ионизации атома у поверхности  $E_i$  меньше работы выхода  $\phi$ . Для электро-

нов, находящихся на возбужденных уровнях, энергетическое условие осуществимости резонансной перезарядки имеет вид  $E_i - E_x > \phi$ , где  $E_x$  – эффективная энергия возбуждения атома вблизи поверхности. Если каждый из процессов, изображенных на рис. 4, рассматривается, как истинно резонансный, то кинетическая энергия налетающей частицы может изменяться в результате взаимодействия частиц с твердым телом, но в процессах перехода электронов кинетическая энергия как таковая непосредственно не используется.

## *2.2 Оже–нейтрализация и Оже–девозбуждение.*

Вторая разновидность быстрых и поэтому существенных электронных переходов носит характер оже–процесса и заключается в одновременном переходе двух электронов. На рис. 5 изображены два таких процесса. При оже–нейтрализации (рис. 5, слева) один электрон из заполненной зоны твердого тела туннелирует в потенциальную яму атома и переходит на его основной энергетический уровень. Вторым электронам приобретает освобожденную при этом энергию и становится быстрым возбужденным электроном, который может при подходящем направлении своей скорости выйти из твердого тела. Так называемые нижние электроны в этих безызлучательных процессах теряют, а верхние получают одну и ту же энергию. Начальное состояние каждого из этих электронов может занимать любое положение в заполненной энергетической зоне твердого тела.

Оже–девозбуждение атома (рис. 5, справа) сопровождается одновременной эмиссией электрона из системы. При этом имеется два энергетически равноценных процесса, один из которых – показанный на рис. 2, а другой – в котором верхний электрон освобождается с возбужденного уровня атома, а нижний электрон совершает переход из заполненной энергетической зоны твердого тела. При этом в обоих случаях один из двух электронов должен освободиться с вполне определенного уровня, а именно с энергетического уровня возбужденного атома, и не может освободиться из энергетической зоны, как это имеет место для второго электрона в случае оже–девозбуждения, или для двух электронов в случае оже–нейтрализации. Таким образом, хотя оже–девозбуждение и является двухэлектронным процессом, на самом деле оно носит квази–одноэлектронный характер. Поэтому оже–девозбуждение – принципиально иной процесс, нежели оже–нейтрализация, и распределение возбужденных электронов по кинетическим энергиям при оже–девозбуждении сильно отличается от аналогичного распределения при оже–нейтрализации.

### 3. Резонансная перезарядка

Если энергетические уровни внутренних оболочек атомов твердого тела отличаются от ионизованного уровня иона менее чем на 10 эВ, то наблюдается очень интересное явление: зависимость коэффициента обратного рассеяния ионов от энергии первичных ионов носит осциллирующий характер, как это представлено на рис.6 кривой 2.

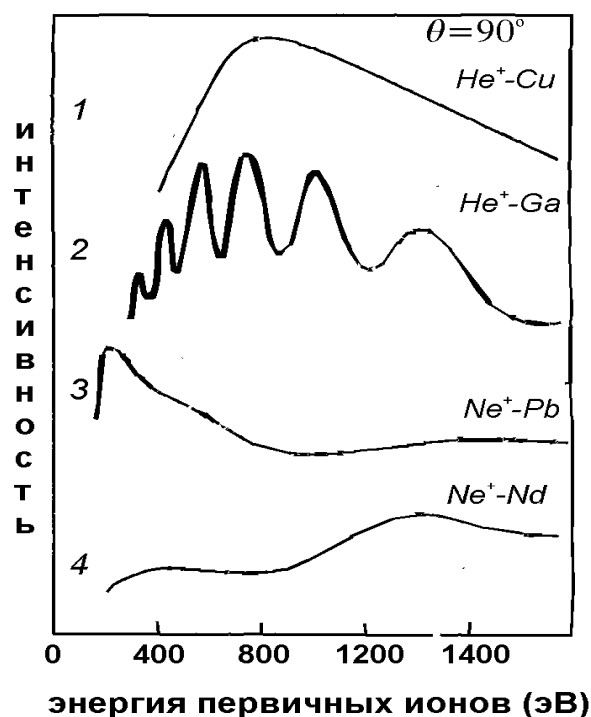


Рис.6. Энергетические зависимости коэффициента обратного рассеяния ионов.

Эрикссон и Смит, обнаружившие этот эффект, пришли к выводу, что это явление обусловлено почти резонансным колебательным электронным обменом между энергетическим уровнем внутренней оболочки атомов твердого тела и основным уровнем падающей или удаляющейся от поверхности тела атомной частицы, причем здесь существенно соотношение между продолжительностью процесса перехода электрона и длительностью взаимодействия атома с твердым телом. При изменении скорости иона длительность взаимодействия также изменяется, что приводит к изменению фазы электронного обмена в точке выхода атомной частицы из области, близкой к поверхности твердого тела. Талли предложил полную теорию этого явления и сравнил ее с экспериментом. Основное положение теории перезарядки – представление о классическом

характере движения иона, то есть в любой момент времени можно определить его траекторию  $R=R(t)$ . Электронный обмен между поверхностью и ионом описывается квантово–механически с использованием гамильтониана Андерсена–Ньюнса.

Применив изложенный метод, Талли удалось удовлетворительно объяснить специфические закономерности рассеяния ионов на поверхности (осцилляция интенсивности рассеянных ионов в зависимости от начальной энергии). В рамках теории нейтрализации Талли построил аналитическое решение задачи перезарядки ионов инертных газов на поверхности  $d$ -металлов (функция распределения плотности электронных состояний имеет пик на  $d$ -уровне, что позволяет рассматривать взаимодействие уровня иона лишь с  $d$ -уровнем металла), которое можно считать частным примером общего случая перезарядки на кристаллах. Однако, рассмотрение процесса перезарядки ионов инертных газов на поверхности ионных и ионно–ковалентных кристаллов значительно усложняет задачу, и метод Талли не позволяет решить ее аналитически.

### 3.1 Теоретическая модель для численного решения.

Будем использовать гамильтониан Андерсона – Ньюнса в виде:

$$H(t) = E_a a_a^+ a_a + E_b a_b^+ a_b + \sum_k E_k a_k^+ a_k + U_a \sum_k (a_a^+ a_k + h.c.) + U_b \sum_k (a_b^+ a_k + h.c.) \quad (7)$$

где  $a^+$ ,  $a$  – соответственно операторы рождения и уничтожения состояний « $a$ » и « $b$ » с соответствующими энергиями  $E_a$  и  $E_b$ , расположенных на налетающем ионе,  $h.c.$  – оператор перестановки. Энергия  $E_k$  описывает электронное состояние в валентной зоне.  $U_a$  и  $U_b$  являются интегралами перекрытия « $a$ » и « $b$ » состояний иона с зоной.

Операторы  $a^+$ ,  $a$  действуют по правилам, доказанным в [3]:

- 1)  $a^+ (\varphi) |1,2,3,\dots,N\rangle = |\varphi,1,2,\dots,N\rangle,$
- 2)  $a (k) |1,2,3,\dots,N\rangle = (-1)^{k-1} |1,2,\dots,k-1,k+1,\dots,N\rangle,$
- 3)  $(-1)^{k-1} |\varphi_1,1,\dots,k-1,k+1,\dots,N\rangle = |1,\dots,k-1,\varphi_1,k+1,\dots,N\rangle,$

где  $a^+(\varphi)$  – оператор рождения состояния « $\varphi$ » и  $a(k)$  – оператор уничтоже-

ния состояния «к». В нашем случае состояния «a» и «b»  $p$  – орбиталей иона могут иметь соответственно нормальную и параллельную ориентацию к поверхности, поэтому  $U_a$  и  $U_b$  должны быть вычислены как функции расстояния между ионом и рассеивающим атомом, как показано на рис.7.

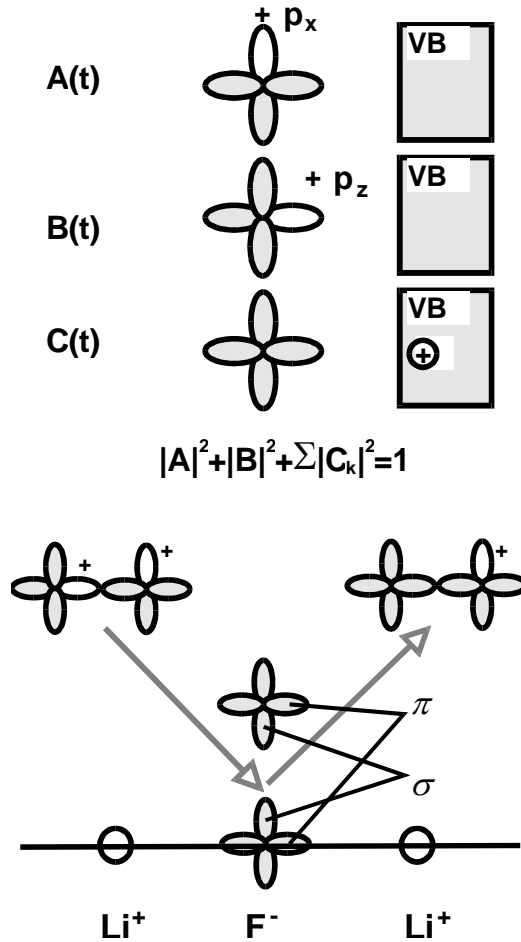


Рис.7. Схематическое изображение модели для описания перезарядки.

В нашей модели система описывается  $N+1$  волновых функций электронов:

- 1)  $|a, 1, 2, \dots, N\rangle$  – валентная зона полностью занята, один электрон в состоянии  $E_a$ ;
- 2)  $|a, 1, \dots, k-1, b, k+1, \dots, N\rangle$  – состояния  $E_a$  и  $E_b$  заполнены, в валентной зоне  $N-1$  электрон;
- 3)  $|b, 1, 2, \dots, N\rangle$  – один электрон в состоянии  $E_b$ , валентная зона заполнена.

Тогда общая волновая функция системы:

$$\Psi = A_0 |a, 1, 2, \dots, N\rangle + B_0 |b, 1, 2, \dots, N\rangle + \sum_k B_k |a, 1, \dots, k-1, b, k+1, \dots, N\rangle \quad (9)$$

где амплитуды  $A_0$ ,  $B_0$ ,  $B_k$  зависят от времени взаимодействия  $t$ . Из условия ортонормированности используемого базиса:  $\langle b|k\rangle = \Delta_{bk}$  следует, что она удовлетворяет следующему уравнению:

$$a_\alpha^+ a_\beta |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = \sum_j \langle \beta | \psi_j \rangle |\psi_1, \dots, \psi_{j-1}, \alpha, \psi_{j+1}, \dots, N\rangle \quad (10)$$

Подставляя волновую функцию (9) в нестационарное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \partial \psi / \partial t = H \psi \quad (11)$$

и приравнявая коэффициенты при одинаковых состояниях, можно получить следующую систему:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial A_0 / \partial t &= E_a A_0 + U_a \sum_k B_k \\ i\hbar \partial B_0 / \partial t &= E_b B_0 + U_b \sum_k B_k \end{aligned} \quad (12)$$

$$i\hbar \partial B_k / \partial t = (E_b + E_a - E_k) B_k + U_a A_0 + U_b B_0$$

с условием нормировки:

$$|A_0|^2 + |B_0|^2 + \sum_k |B_k|^2 = 1 \quad (13)$$

где  $|A_0|^2$  – вероятность выживания иона в состоянии  $E_a$ ,  $|B_0|^2$  – в состоянии  $E_b$  и  $|B_k|^2$  – вероятность нейтрализации иона (оба состояния «а», «b» заняты, и вакантное состояние  $E_k$  находится в валентной зоне).

#### 4. Численное решение

В машинном эксперименте модельный кристалл  $LiF$  представляется конечным набором ионов  $Li^+$  и  $F^-$ , расположенных в узлах кристаллической решетки с периодом  $d = 4.17 \text{ \AA}$ . Рассеивающий ион  $N^+$  движется в поле, создаваемом всеми ионами кристалла, которые попадают в сферу с радиусом  $15 \text{ \AA}$ . Решение системы дифференциальных уравнений, описывающих движение рассеивающего иона и ионов модельного кристалла, производится при помощи метода Рунге–Кутты четвертого порядка с переменным шагом.

Движение иона  $N^+$  рассматривается с расстояния  $10 \text{ \AA}$  от поверхности. Моделирование проводилось для ионов с энергией  $200\text{--}1000 \text{ эВ}$ . Тра-

ектория иона выбирается исходя из экспериментальных условий: угол рассеяния  $\theta = 90^\circ$ , угол падения  $\alpha = 45^\circ$ .

Потенциалы взаимодействия рассчитываются как среднее значение интегралов перекрывания от 3-х ближайших атомов поверхности (смотри рис. 6б) – в случае однократного рассеяния и от 4-х атомов – в случае двукратного. Для каждой из взаимодействующих орбиталей  $p_x$ ,  $p_z$  потенциал взаимодействия определялся следующим образом:

$$\begin{aligned} U_x(r) &= (U_\pi(r) |\sin(\alpha)| + U_\sigma(r) \cos(\alpha)) \\ U_z(r) &= (U_\pi(r) \cos(\alpha) + U_\sigma(r) |\sin(\alpha)|) \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\alpha$  – угол между направлением движения иона и поверхностью. Из этих уравнений следует, что при изменении угла рассеяния от  $45^\circ$  до  $90^\circ$  для  $p_x$  – орбиталей  $\pi$  – взаимодействие преобладает над  $s$ , тогда как для  $p_z$  – орбиталей  $s$  – взаимодействие доминирует.

Типичная зависимость вероятности перезарядки как функции времени  $t$  (или расстояния от поверхности) показана на рис.8.

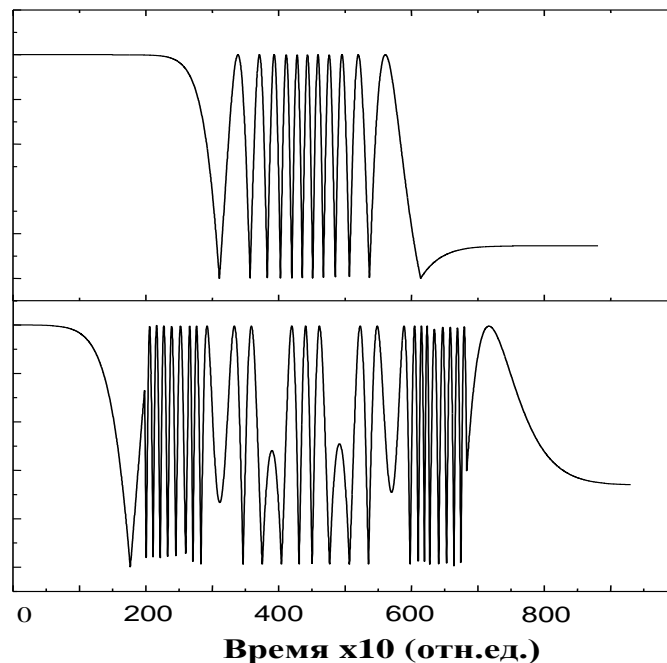


Рис. 8. Временная зависимость вероятности ионизации  $p_x$ – орбиталей (верхняя) и  $p_z$ – орбиталей (нижняя)

Верхняя кривая соответствует вероятности выживания ионизованного состояния  $2p_x$  – орбиталей, нижняя – вероятности ионизации  $2p_z$  – орбиталей. Как видно из рисунка, в начальный момент, когда расстояние ион –

поверхность велико, взаимодействие отсутствует. При приближении иона к поверхности кристалла появляются осцилляции на обеих кривых вследствие электронного обмена. После удаления от поверхности осцилляции исчезают, и достигается конечное значение вероятностей ионизации  $p_x$  и  $p_z$  орбиталей. Так как дырка может существовать с равной вероятностью на обеих орбиталях, вычисления проводятся для двух различных начальных положений дырки: на  $p_x$  и  $p_z$  орбиталях налетающего иона. Конечный результат вычисляется как среднее значение между полученными величинами.

### **Упражнение 5. Расчет энергетической зависимости вероятности нейтрализации ионов**

Рассчитать вероятность нейтрализации ионов при одно и двукратном рассеянии для энергий от 200 до 1000 эВ. Построить зависимость вероятности от скорости иона и объяснить наличие на кривой осцилляций

### **Литература**

1. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М.: Атомиздат, 1980.
2. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел. Под ред. Л.Фирмэнса, Дж. Вэнника и В. Декейсера. М.: Мир, 1981.
3. Фейнман Р.П. Статистическая механика. М.: Мир, 1972.