

ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ ДЕЛЕНИЯ ПОТОКА ОТРАЖЕННЫХ ИОНОВ КОНУСАМИ ВЕНЕРА НА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

М.И. Братченко, С.В. Дюльдя, В.В. Рожков, М.А. Скоробогатов

Научно-производственный комплекс

“Возобновляемые источники энергии и ресурсосберегающие технологии”

Национального научного центра “Харьковский физико-технический институт”

г. Харьков, Украина, sdul@kipt.kharkov.ua

Показано, що проста геометрична модель дзеркального відбиття частинок від поверхні конуса Венера (типового елемента макроскопічного рельєфу поверхні твердого тіла, що утворюється при іоннім бомбардуванні) дозволяє якісно описати суттєві характеристики ефекту розподілу потоку частинок, що відбиваються, який був раніше завбачений методами комп'ютерного моделювання.

Показано, что простая геометрическая модель зеркального отражения частиц от поверхности конуса Венера (типичного элемента макроскопического рельефа поверхности твердого тела, образующегося при ионной бомбардировке) позволяет качественно описать существенные черты эффекта деления потока отражающихся частиц, предсказанного ранее методами компьютерного моделирования.

It is shown that simple geometrical model of specular reflection of particles from the surface of Wehner cone (frequently observed feature of solid surface macroscopic topography developed under ion bombardment) can describe qualitatively the essential characteristics of the reflected particles flux splitting effect predicted earlier by means of computer simulation methods.

ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] путем моделирования на ЭВМ методом Монте-Карло было показано, что при малоугловом отражении ионов от поверхности с развитым крупномасштабным рельефом (образующимся, например, в процессе ионного травления [2] и обладающим характерными размерами 1...100 мкм, много большими пробегах ионов) должны иметь место ориентационные эффекты нового типа — макроскопические. В отличие от ориентационных эффектов в малоугловом отражении от монокристаллов [3,4] они связаны не с корреляцией столкновений ионов с атомами кристаллической решетки, а с тем, что угловое и энергетическое распределение отраженных частиц определяется распределением локальных наклонов элементов рельефа к оси ионного пучка. В пользу таких эффектов свидетельствует и качественная аналогия между отражением ионов при скользящем падении и отражением электромагнитных волн (в оптическом и рентгеновском диапазоне) от статистически неоднородных поверхностей [5,6].

Влияние мезоскопической (~ 0.1 мкм) шероховатости поверхности на обратное рассеяние ионов изучалось, например, в работах [6,7]. Путем прямого моделирования на ЭВМ методом парных соударений для рельефа в виде регулярно расположенных случайно ориентированных вертикальных тетраэдрических пирамид было обнаружено влияние его геометрии рельефа на коэффициенты обратного рассеяния протонов с энергиями 50...500 эВ [7]. В одномерной модели пилообразного рельефа было по-

казано [6,7], что оно распространяется и на энергетические спектры и угловые (полярные) распределения отраженных протонов.

В машинном эксперименте [1] нами были продемонстрированы нетривиальные азимутальные зависимости отражения ионов от конуса Венера — характерного элемента дендритных структур, развивающихся при ионной бомбардировке [2]. Полученная при учете статистического характера процесса отражения картина угловых распределений достаточно сложна в интерпретации. В настоящей работе предпринята попытка качественного анализа отражения от конуса Венера аналитическими методами, основанными на известных приближениях геометрической оптики и техники трассировки лучей [5,6]. Мы ограничимся моделью отражения от уединенного конуса; несомненно важное влияние отражения от подстилающей поверхности и многократного рассеяния на соседних конусах дендритной структуры будут рассмотрены отдельно.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИКИ

В качестве модели конуса Венера мы будем рассматривать круговой конус (рис. 1), пренебрегая при этом тонкой структурой реально наблюдающихся конусов и пирамид [2] и микроскопической шероховатостью их поверхности.

В канонической системе координат уравнение такого конуса имеет вид:

$$a_1x^2 + a_2y^2 - a_3z^2 = 0, \quad (1)$$

где $a_1 = a_2 = 1/(H \cdot \operatorname{tg} \gamma)^2$, $a_3 = 1/H^2$, H — длина оси конуса. Переход к системе координат поверхности (XYZ , см. рис. 1), в которой задается распределение падающих и отраженных ионов, тривиально выполняется путем преобразований поворота и сдвига.

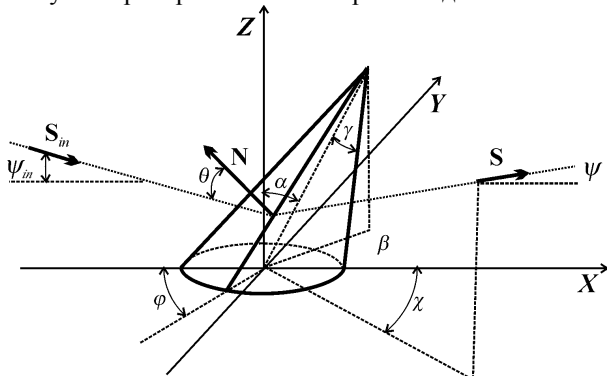


Рис. 1. Геометрия зеркального отражения луча от поверхности конуса с углом полураствора γ . Углы α и β определяют направление оси наклонного конуса;

ψ_{in} — угол скольжения пучка к поверхности

По аналогии с приближением Кирхгофа в теории рассеяния волн [5] примем, что ионы отражаются от локальной касательной плоскости в точке их встречи с поверхностью конуса. Мы будем считать отражение зеркальным. Хотя для ионов это приближение в количественном отношении не является реалистическим, поскольку не описывает наблюдаемых широких угловых распределений, оно все же пригодно для качественного анализа, так как эти распределения имеют максимумы вблизи угла зеркального отражения [3,4]. Заметим, что оно может иметь и количественный характер для случая отражения света и мягкого рентгеновского излучения [6].

Если S_{in} — единичный вектор направления падающего пучка, а N — единичный вектор нормали к поверхности конуса в точке встречи (определяемый дифференцированием формулы (1)), то единичный вектор S зеркального направления имеет вид:

$$S = S_{in} - 2 \cdot (N \cdot S_{in}) \cdot N. \quad (2)$$

Для вертикального конуса ($\alpha = 0$) направляющие косинусы отраженного луча имеют вид:

$$\begin{aligned} S_x &= \cos \psi_{in} - 2 \cdot \cos \theta \cdot \cos \gamma \cdot \cos \varphi; \\ S_y &= -2 \cdot \cos \theta \cdot \cos \gamma \cdot \sin \varphi; \\ S_z &= -\sin \psi_{in} + 2 \cdot \cos \theta \cdot \sin \gamma, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\cos \theta(\varphi, \gamma, \psi_{in}) = \cos \psi_{in} \cdot \cos \gamma \cdot \cos \varphi + \sin \psi_{in} \cdot \sin \gamma$ — косинус локального угла падения θ на касательную плоскость, отсчитываемый от нормали N , а φ — угловая полярная координата точки встречи, (см. рис. 1), отсчитываемая от отрицательного направления оси X . Параметрическая зависимость $S(\varphi)$ полностью определяет картину зеркального отражения, поскольку лежащие на одной образующей конуса точки встречи соответствуют параллельным направлениям отраженного луча.

Анализ проекций вектор-функции $S(\varphi)$ на координатные плоскости показывает (рис. 2), что для типичного случая достаточно малых γ и ψ_{in} в зависимости от положения точки встречи конус может

зеркально отражать как вверх ($S_z > 0$), так и вниз (в подстилающую поверхность, $S_z < 0$), как в переднюю ($S_x < 0$), так и в заднюю ($S_x > 0$) полусферы.

Полагая, что детектор отраженного потока находится в верхнем переднем квадранте, выясним, при каких условиях имеется отражение в область детектора, т.е. “вперед—вверх”.

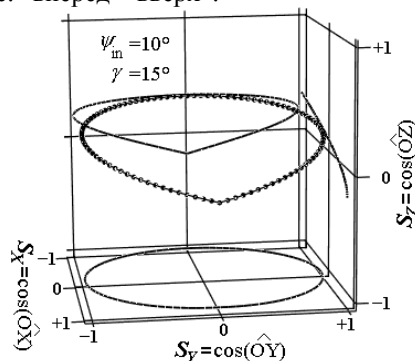


Рис. 2. Годограф вектор-функции $S(\varphi)$ направлений зеркального отражения от вертикального конуса

Из формул (3) легко показать, что векторам S , направленным вверх ($S_z > 0$), соответствуют симметричные относительно оси X точки встречи, азимут φ которых удовлетворяет неравенству $|\varphi| < \varphi_{max}$, где

$$\cos \varphi_{max} = \operatorname{tg} \psi_{in} \cdot \operatorname{ctg} 2\gamma. \quad (4)$$

Если $\psi_{in} > 2\gamma$, то отражение вверх невозможно.

Аналогично отражение в переднюю полусферу ($S_x < 0$) возможно при условии $|\varphi| > \varphi_{min}$, где

$$\cos \varphi_{min} = \frac{1}{2} \operatorname{tg} \psi_{in} \operatorname{tg} \gamma \cdot \left[\sqrt{1 + \frac{2}{\sin^2 \gamma \cdot \operatorname{tg}^2 \psi_{in}}} - 1 \right]. \quad (5)$$

Если $\psi_{in} < 2\gamma - \pi/2$, то конус отражает только вперед; при этом следует положить $\varphi_{min} = 0$.

Одновременная возможность отражения вверх и вперед существует в случае, когда $|\varphi_{min}| < |\varphi_{max}|$, что приводит к условию $\psi_{in} < \psi_c(\gamma)$, где

$$\operatorname{tg} \psi_c = \frac{\operatorname{tg}^2 \gamma}{\sin \gamma} \sqrt{\frac{2}{1 + \operatorname{tg}^4 \gamma}}. \quad (6)$$

Обычно конусы Венера [2] имеют малые углы γ полураствора, близкие к значению $(90^\circ - \Theta_m)$, где угол $\Theta_m \sim (70^\circ \dots 85^\circ)$ отвечает максимуму угловой зависимости коэффициента распыления. При малых γ критический угол ψ_c также мал, и $\psi_c \approx \gamma \sqrt{2}$.

ЭФФЕКТ ДЕЛЕНИЯ ПОТОКА

Если $\varphi_{min} = 0$, то на обращенной к пучку поверхности конуса существует односвязная область углов $\varphi < |\varphi_{max}|$, отражающая вперед и вверх. Это означает, что в плоскости детектора наблюдаемое изображение отраженного потока будет представлять собой замкнутую кривую, соответствующую уширению тривиального углового распределения зеркального отражения от плоской поверхности.

Качественно иной эффект возникает, если угол $\varphi_{min} > 0$. В этом случае имеются два симметричных относительно плоскости $Z-X$ участка поверхности, соответствующие образующим с $|\varphi_{min}| < |\varphi| < |\varphi_{max}|$, отражающие лучи в направлении плоскости детек-

тора и разделенные участком поверхности, который не дает вклада в отраженный в плоскость детектора поток. Это и означает, что имеется эффект деления потока лучей конусом.

Проиллюстрируем эффект деления потока на примере зависимости интенсивности отраженного вертикальным конусом потока от азимутального угла ϕ , отсчитываемого от положительного направления оси Z в плоскости детектирования $Z-Y$ (рис. 3). Легко получить, что:

$$\phi(\varphi) = \pi/2 - \arctg(S_Z(\varphi)/S_Y(\varphi)), \quad (7)$$

где $S_Z(\varphi)$ и $S_Y(\varphi)$ выражаются формулами (3). При $\varphi = \varphi_{min}$ формула (7) определяет азимутальный угол ϕ_s полураствора тени, возникающей в результате деления потока конусом.

Изображением конуса на плоскости детектирования, параллельной плоскости $Z-Y$ и находящейся на расстоянии $L \gg H$ от конуса, является кривая $Z(Y)$, которая представляет собой приведенную к декартовым координатам проекцию годографа вектор-функции $S(\varphi)$ на плоскость детектора. Параметрически она задается уравнениями:

$$Z(\varphi) = S_Z(\varphi)/S_X(\varphi); \quad Y(\varphi) = S_Y(\varphi)/S_X(\varphi). \quad (8)$$

В практически важном случае $\gamma < \pi/4$ приближенная формула для $Z(Y)$ имеет вид:

$$Z(Y) = -\sqrt{1+Y^2} \cdot \operatorname{tg} \left(\psi_{in} + 2 \cdot \arctg \frac{\sqrt{2} \cdot \operatorname{ctg} \gamma}{\sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1+Y^2}}}} \right). \quad (9)$$

Нетрудно показать, что (1) $Z(Y)$ монотонно возрастает с ростом $|Y|$; (2) $Z(0) < 0$; и (3) при $|Y| \gg 1$ зависимость $Z(Y)$ линейна (см. рис. 3).

Очевидно, что если прямая, исходящая под углом ϕ из начала координат в плоскости детектирования, не пересекает кривую $Z(Y)$, то угол ϕ попадает в область тени. Отсюда, используя свойства (2) и (3) функции (9), нетрудно получить простую приближенную зависимость угла ϕ_s полураствора тени от угла скольжения и угла полураствора конуса:

$$\phi_s = \psi_{in} + 2 \cdot \arctg(\sqrt{2} \cdot \operatorname{ctg} \gamma) - \frac{\pi}{2} \quad (10)$$

Результаты сравнения расчетов по формуле (10) с точным расчетом по формуле (7), приведенные в таблице, показывают, что точность приближения (10) весьма хороша даже при сравнительно больших γ и улучшается с ростом ψ_{in} .

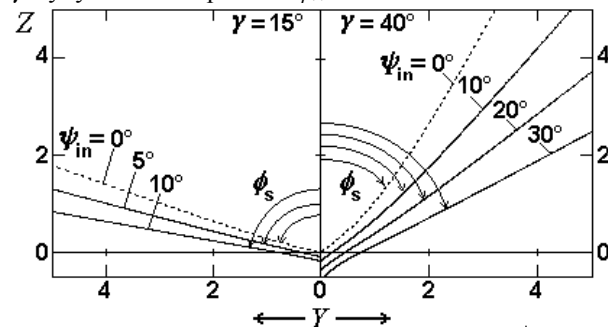


Рис. 3. Тени конусов с различными углами полу-

раствора при различных углах скольжения пучка

Деление потока происходит не только в азимутальной плоскости детектора, но и по азимутальным углам χ вылета отраженных ионов в плоскости подстилающей поверхности. Полуширина χ_s тени острого ($\gamma \ll 1$) конуса в этой плоскости имеет вид:

$$\chi_s \approx \pi - 2 \cdot \varphi_{max} \approx \pi - 2 \arccos(\operatorname{tg} \psi_{in} \cdot \operatorname{ctg} 2\gamma). \quad (11)$$

Полурастворы ϕ_s тени конуса

γ	ψ_{in}	Ф-ла (7), $\varphi = \varphi_{min}$	Ф-ла (10)
15°	0°	68.529°	68.543°
	5°	73.539°	73.543°
	10°	78.543°	78.543°
40°	0°	24.627°	28.636°
	10°	37.231°	38.636°
	20°	48.308°	48.636°
	30°	58.635°	58.636°

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ КОНУСА

Заметим, что эффект деления потока носит ориентационный характер, поскольку зависит не только от геометрических параметров конуса, но и от угла ψ_{in} скольжения пучка. Существенное влияние на параметры эффекта оказывают и отклонения направления оси конуса от вертикального, а также азимутальный разворот к пучку.

Для произвольной ориентации конуса на поверхности ($\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$) координатное представление формулы (2) весьма громоздко, и мы его опускаем. На рис. 4 приведены результаты численных расчетов по формуле (2) проекций годографа функции зеркального отражения $S(\varphi)$ на плоскость детектирования для различных ориентаций оси конуса относительно подстилающей плоскости. На этом рисунке, как и на рис. 2, использована сферическая проекция, позволяющая, в отличие от декартовой на рис. 3, рассмотреть полный интервал углов вылета.

Как видно (см. рис. 4), наклон конуса в противоположную направлению падения лучей сторону приводит к подавлению отражения “вперед-вверх”, тогда как наклон “от пучка” стимулирует этот тип отражения. При $\alpha \neq 0$, $\beta \neq 0$ отражение становится асимметричным, при этом для наклоненного в сторону пучка конуса возрастает интенсивность отражения вверх.

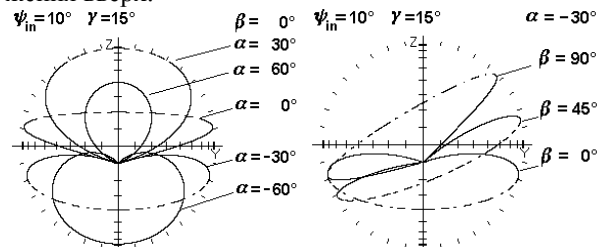


Рис. 4. Влияние угла α наклона конуса к нормали (слева) и азимутального угла β (справа) на зеркальное отражение лучей конусом. Значения $\alpha < 0$ соответствуют наклону конуса против пучка. Пунктирная часть кривых отвечает рассеянию назад

Вне области затенения конусом распределения зеркально отраженных ионов по некоторой угловой

или энергетической переменной η определяются распределениями локальных углов θ падения пучка на поверхность конуса в разрешенной области углов $|\varphi_{\min}| < |\varphi| < |\varphi_{\max}|$ и коэффициентами отражения $R(\theta)$:

$$f(\eta) = C \cdot R[\theta(\varphi, \gamma, \psi_{in})] \cdot \cos(\theta(\varphi, \gamma, \psi_{in})) \cdot \left| \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right| \quad (12)$$

где $\varphi = \varphi(\eta)$, C — нормировочная константа. Эта формула используется далее для расчетов азимутальных распределений отраженных конусом ионов в приближении геометрической оптики.

СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 5 и 6 приведено сравнение данных расчетов в приближении зеркального отражения с данными машинного моделирования методом Монте-Карло по методике работы [1].

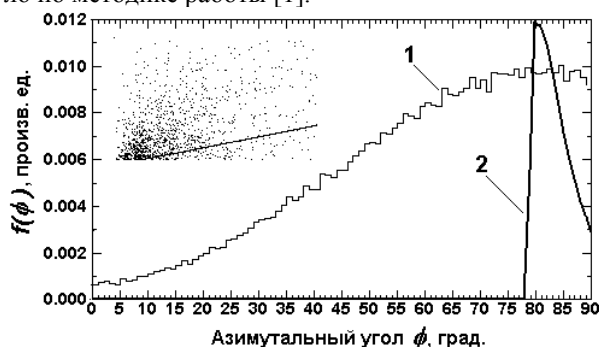


Рис. 5. Функции азимутального распределения ионов, отраженных вертикальным конусом Венера с углом полураствора 15° при угле скольжения 10° , рассчитанные методом Монте-Карло [1] (кривая 1) и в модели зеркального отражения (кривая 2)

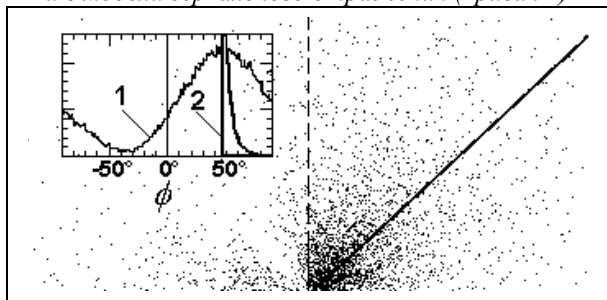


Рис. 6. Карта распределения ионов, отраженных конусом Венера с углом полураствора 15° , наклоненным к пучку под 30° к нормали и развернутым на 90° по азимуту. Угол скольжения 10° . Сплошная линия — граница тени зеркального отражения. На врезке — соответствующие функции азимутального распределения отраженных ионов, рассчитанные методом Монте-Карло (кривая 1) и в геометрической модели зеркального отражения (кривая 2).

В полном согласии с данными рис. 4 картина рис. 6 отражения ионов наклоненным и развернутым по азимуту конусом резко асимметрична.

Очевиден (см. рис. 5 и 6) драматический характер влияния уширения угловых распределений при учете реалистической кинетики обратного рассеяния ионов. В результате возможно попадание их в об-

ласть геометрической тени. Однако качественные предсказания развитой простой геометрической модели остаются в силе: видно, что максимум плотности азимутального распределения отраженных ионов приходится на значение рассчитанной в модели зеркального отражения границы тени конуса. Объяснение же наблюдаемого при $\phi < 0$ широкого минимума, по-видимому, выходит за рамки элементарных геометрических соображений и требует анализа кинетики отражения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выводы, следующие из предложенного в настоящей работе элементарного геометрического рассмотрения, качественно согласуются с данными моделирования методом Монте-Карло. Это позволяет надеяться, что подобные геометрические методы будут полезны при анализе отражения частиц (а также рентгеновского излучения) от поверхностей с макроскопическими неоднородностями, в том числе стохастического характера.

Ориентационный эффект деления потока рассмотрен нами для отражения от уединенного конуса, т.е. выделен в чистом виде. В такой постановке, конечно, нет речи о его экспериментальном обнаружении на фоне отражения от подстилающей поверхности. Однако при наличии на поверхности дендритных структур ("леса конусов") статистический вес эффекта может возрасти, и он, по нашему мнению, может быть обнаружен экспериментально.

В этом случае величина эффекта деления потока должна зависеть от плотности расположения и геометрических параметров элементов макроскопического рельефа, что открывает принципиальную возможность использования этого эффекта в диагностических приложениях, в том числе *in situ*.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.В. Дюльдя, М.И. Братченко, В.В. Рожков. Компьютерное моделирование макроскопических ориентационных эффектов ионного рассеяния и распыления // *Труды XIV Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению. Алушта, 12–17 июня 2000 г.* Харьков: ННЦ ХФТИ, 2000, с. 27–28.
2. Дж. Картер, Б. Навиншек, Дж. Виттон. Развитие рельефа при бомбардировке тяжелыми ионами. // *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. II.* М.: "Мир", 1984, с. 310–359.
3. В.А. Курнаев и др. *Отражение легких ионов от поверхности твердого тела.* М.: "Энергоатомиздат", 1985, 192 с.
4. Э.С. Парилис и др. *Атомные столкновения в газах и на поверхности твердого тела.* Ташкент: Изд-во "ФАН" УзССР, 1988, 180 с.
5. Ф.Г. Басс, И.М. Фукс. *Рассеяние волн на статистически неровной поверхности.* М.: "Наука", 1972, 424 с.
6. А.В. Виноградов и др. *Зеркальная рентгеновская оптика.* Л.: "Машиностроение", 1989, 463 с.

7.Н.Н. Коборов, В.А. Курнаев. О влиянии шероховатости поверхности на малоугловое рассеяние ионов водорода. // *Поверхность. Физика. Химия. Механика*. 1983, № 8, с. 45-48.

8.N.N. Koborov, V.A. Kurnaev, V.M. Sotnikov. The Surface Roughness Influence on the Light Ions Backscattering // *Journal of Nuclear Materials*. 1984, v. **128&129**, p. 691-693.