

ДОНЕЦКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ЗАСТАВНЮК Валерий Викторович

УДК 537.534

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ
ПОВЕРХНОСТНЫХ ПРОЦЕССОВ
ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА
ИОНАМИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ**

01.04.07 — физика твердого тела

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

ДОНЕЦК — 1992

Работа выполнена в Донецком государственном университете

г. Донецк

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ - кандидат физико-математических наук,
ТЕПЛОВ С. В.

ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ - доктор физико-математических наук,
профессор
ЗАРОЧЕНЦЕВ Е. В.
кандидат физико-математических наук,
САМОИЛОВ В. Н.

ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ - Запорожский государственный универ-
ситет

Защита диссертации состоится 23 декабря 1992 г.
в 15 часов на заседании Специализированного Совета
К. 068. 06. 01 в Донецком государственном университете
по адресу : 340055, Донецк-55, ул. Университетская 24, ДонГУ,
главный корпус.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Донецкого
государственного университета.

Автореферат разослан "___" _____ 1992 г.

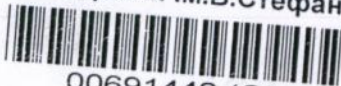
Ученый секретарь

Специализированного Совета

к. ф. н. н.

А. Е. Зюбанов

ЛННБ України ім. В. Стефаника



00691442 (Q)

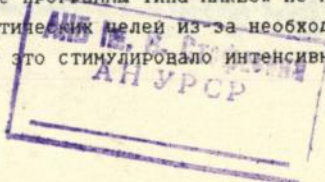
АВ 26.269

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

А к т у а л ь н о с т ь т е м ы. В последнее время, в связи с дальнейшей миниатюризацией микроэлектронных устройств, развитием новых тонкопленочных технологий важное значение приобретает изучение начальных стадий осаждения тонких пленок на поверхность кристаллических твердых тел, а также дальнейшее развитие методов диагностики поверхности на атомарном уровне. Особый интерес, при этом, все чаще вызывает структура и характер адсорбции наилегчайших атомов на кристаллической подложке.

Большие возможности для качественного и количественного исследования структуры поверхности твердых тел открывают методы, использующие в качестве зонда ионные пучки средних энергии (1-10 кэВ). Такие пучки низкой плотности мало разрушают поверхность и не проникают глубоко в образец, что определяет поверхностную чувствительность метода. В то же время, траектории движения атомных частиц средних энергий можно описывать в рамках классической механики [1, 2], что позволяет, используя современные возможности ЭВМ, детально моделировать процессы энергетичного атом-атомного взаимодействия, происходящие в приповерхностной области.

Развитие представлений о характере взаимодействия ионных пучков с поверхностью и расширение возможностей, предоставляемых экспериментальной техникой, сделало реальным появление в последнее время методик определения поверхностной структуры кристаллов с точностью до 0.1 \AA и выше, используя, например, методы низкоэнергетической ионно-рассеивательной спектроскопии (ИРС), прицельно-столкновительной ионно-рассеивательной спектроскопии (ПСИРС) и спектроскопии атомов отдачи (САО) [2, 3]. Такая высокая точность достигается благодаря применению машинного моделирования экспериментов на ЭВМ, что фактически является обратной задачей по восстановлению исходной структуры поверхности на основе полученных экспериментально зависимостей. Однако, не все процессы, протекающие при взаимодействии ускоренных частиц с веществом, являются структурно-чувствительными. Более того, при определенных условиях эксперимента полезный информационный сигнал может полностью заглушаться в результате различных побочных эффектов. Как показывает почти 30 летний опыт моделирования взаимодействия ионных пучков с твердым телом, большие универсальные программы типа MARLOW не могут эффективно применяться для практических целей из-за необходимости мощных машинных ресурсов. Все это стимулировало интенсивные



теоретические и экспериментальные исследования по дальнейшему развитию методов анализа поверхности на основе применения ионных зондов, поиску структурно-чувствительных поверхностных процессов, определению экспериментальных условий для их наилучшей реализации, а также созданию небольших, специализированных моделирующих программ, позволяющих значительно ускорить обработку результатов эксперимента, а следовательно, перевести определение структуры поверхности в сферу практической деятельности.

Небольшое количество столкновений в поверхностных процессах, реализуемых в методах ИРС, ПСИРС и САО, а также точное представление о полных траекториях регистрируемых частиц позволяет использовать машинное моделирование и как эффективный инструмент для исследования таких фундаментальных задач, как уточнение потенциала взаимодействия атомных частиц в твердом теле, изучение механизма нейтрализации ионов при отлете от поверхности, исследование характера тепловых колебаний поверхностных атомов и др. Таким образом, дальнейшее развитие методов определения структуры поверхности на основе машинного моделирования является актуальным как для фундаментальных, так и для прикладных исследований.

Ц е л ю р а б о т ы я в и л о с ь:

- исследование столкновительных структурно-чувствительных процессов, происходящих при взаимодействии ионов средних энергий с поверхностью монокристалла с субмонослойными покрытиями адсорбированных атомов и без в методах ИРС, ПСИРС и САО;

- исследование возможностей и способов определения структуры наилегчайших адсорбированных атомов, в частности водорода, на кристаллической подложке, применяя методы ИРС и САО;

- создание комплекса специализированных моделирующих компьютерных программ, максимально учитывающих особенности экспериментов по ИРС, ПСИРС и САО, и позволяющих эффективно применять их для анализа результатов данных экспериментов;

- тестирование данных программ и использование их для получения ряда конкретных результатов.

Н а у ч н а я н о в и з н а заключается в том, что:

- На основе предложенного алгоритма одноатомного статистического моделирования (ОСМ) создана оригинальная программа, позволяющая с большой эффективностью моделировать экспериментально получаемые ПСИРС-характеристики в предположении о независимости вкладов от каждой рассматриваемой пары атомов поверхности. Данное условие выполняется в зависимости от степени сложности поверхности

в области углов падения до 40° - 60° и касается атомов, расположенных в 1 - 3 слоях монокристалла.

- Создана оригинальная программа, позволяющая методом Монте - Карло детально моделировать обратное рассеяние ионов в широком интервале углов бомбардировки. В отличие от ОСМ модели, в ней допускается существование траекторий движения, сформированных в результате совокупного влияния многих атомов мишени. Это позволяет учитывать вклады в результирующую ПСИРС-характеристику от глубоко залегающих атомов мишени при больших углах бомбардировки и применять ПСИРС для анализа структуры более глубоких атомных слоев.

- Создана оригинальная программа, моделирующая методом Монте-Карло процессы атом-атомных столкновений, происходящие на поверхности кристалла с субмонослойными покрытиями из адсорбированных атомов при бомбардировке ионными пучками низких и средних энергий. Данная программа может эффективно использоваться для моделирования результатов экспериментов по ионно-рассеивательной спектроскопии и спектроскопии атомов отдачи.

- Моделирование на ЭВМ показало, что при определенных условиях проведения эксперимента по бомбардировке ионами средних энергий кристаллической поверхности с субмонослойными покрытиями водорода могут реализовываться структурно-чувствительные механизмы образования атомов отдачи. Анализ особенностей в регистрируемых угловых или энергетических распределениях как рассеянных частиц, так и атомов отдачи с использованием машинного моделирования позволяет определять структуру адсорбированных легких атомных частиц.

- С использованием программы и экспериментальных данных предложена структура осажденного на Ni (100) слоя адсорбированного водорода.

- С использованием программы и экспериментальных данных определена структура осажденного на Si (111) субмонослойного покрытия атомов Sn.

- С использованием программы и экспериментальных данных определена структура субмонослойного покрытия C на поверхности Ir (110).

- Предложен метод определения степени покрытия поверхности легкими адсорбированными атомами. Метод основан на анализе положения пиков в энергетическом спектре рассеянных и выбитых атомов.

Практическая ценность. Созданные при выполнении диссертационной работы программы для ЭВМ могут быть использованы в области исследования структуры поверхности монокристаллов с субмонослойными покрытиями методами ПСИРС, ИРС и САО.

Выявленные методом моделирования на ЭВМ структурно-чувствительные поверхностные процессы и условия их реализации представляют интерес при выработке рекомендаций для выбора условий проведения экспериментов по определению структуры поверхности с субмонослойными покрытиями адсорбированных атомов различных сортов и без.

Предложенный метод определения степени покрытия поверхности легкими адсорбированными атомами может найти применение в различных прикладных областях, например, катализ, водородное охрупчивание, химические реакции и др.

Полученные результаты о структуре субмонослойных покрытий H на Ni(100), Sn на Si(111) и C на Ir(110) могут быть использованы в областях, связанных с осаждением тонких пленок на кристаллическую подложку.

Н а з а щ и т у в ы н о с я т с я :

- Метод определения структуры поверхности с субмонослойными покрытиями легких адсорбированных атомов. При определенном образом проведенных экспериментах по ИРС и САО в определяемых угловых и энергетических распределениях вылетевших атомных частиц наблюдаются пики, связанные с структурно-чувствительными процессами на поверхности. Моделируя данные эксперименты с помощью специально созданных программ возможно определять количественную информацию о структуре поверхности.

- Метод определения степени покрытия поверхности легкими адсорбированными атомами. Метод основан на анализе положения пиков в энергетическом спектре рассеянных и выбитых атомов при бомбардировке поверхности ионными пучками под малыми углами падения.

- Определение структуры субмонослойного покрытия H на Ni(100).

- Определение структуры субмонослойного покрытия Sn на Si(111).

- Определение структуры субмонослойного покрытия C на Ir(110).

- Модель одноатомного статистического моделирования, позволяющая с большой эффективностью моделировать экспериментально получаемые ПСИРС-характеристики.

А п р о б а ц и я р а б о т ы. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на:

- IX Всесоюзной конференции "Взаимодействие атомных частиц с твердым телом", Москва, 1989.

- 6-ой международной школе по вакуумным, электронным и ионным технологиям, Болгария, Варна, 1989.

- Всесоюзном совещании семинаре "Диагностика поверхности ионным пучками", Одесса, 1990.

- 9-ом ежегодном симпозиуме Аризонского отделения американского вакуумного общества, США, Скотсдейл, 1991.

- X Всесоюзной конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью", Москва, 1991.

- VI Всесоюзном семинаре "Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссии", Харьков, 1991.

- Международном совещании-семинаре "Диагностика поверхности ионными пучками", Запорожье, 1992.

П у б л и к а ц и и. По материалам диссертации опубликовано 11 научных работ.

С т р у к т у р а и о б ъ е м д и с с е р т а ц и и.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка библиографических ссылок. Материалы диссертационной работы изложены на 182 страницах, включая 119 страниц машинописного текста, 61 рисунок, 4 таблицы и список библиографических ссылок из 121 наименования.

С О Д Е Р Ж А Н И Е Р А Б О Т Ы

В о в в е д е н и и отмечена актуальность темы, которой посвящена диссертационная работа, сформулированы основные задачи и практическая значимость их решения, перечислены основные положения, выносимые автором на защиту, раскрывается структура диссертации по главам и разделам.

П е р в а я г л а в а диссертации имеет обзорный характер. На основе анализа литературы в ней кратко рассмотрено состояние исследований в области определения количественного и качественного состава поверхности твердых тел.

В разделе 1.1 рассмотрены различные методы исследования поверхности, применяемые в настоящее время. Такие как сканирующая туннельная микроскопия, полевая ионная микроскопия, методы, использующие в качестве зондов электроны, фотоны и ионы. Каждому из указанных методов даны краткие характеристики. На основе сравнительного анализа делается вывод, что для точного определения структуры поверхности наибольшие возможности открывают методы ИРС, ПСИРС и САО.

В разделе 1.2 описываются общие принципы ИРС, а также возмож-

ности этого метода для анализа состава поверхности. Показано, что для интерпретации экспериментальных данных по ИРС необходимо использовать машинное моделирование, поскольку с одной стороны получаемая экспериментально зависимость формируется в результате взаимодействия многих тел, а с другой стороны характерное количество столкновений в анализируемых траекториях (~ 5) мало для возможности применения статистического подхода. Показано, что моделирование экспериментов по ИРС, ПСИРС и САО в области применяемых энергий (0.1 - 10 кэВ) возможно проводить в рамках классической механики, используя бинарный подход.

В разделе 1.3 рассматриваются возможности применения для количественного анализа структуры поверхности общепринятого подхода к ИРС. Имеется в виду использование углов рассеяния в интервалах от 30° до 120° . В частности, на основе данных из литературы демонстрируются различные возможности применения данного метода для анализа структуры поверхности. Показано, что на основе понятий теневого и блокировочного конусов возможно успешно определять плотноупакованные направления на поверхности, а также делать приблизительные заключения о структуре поверхностных атомов. Однако для более высокой точности относительного расположения атомов необходимо применять машинное моделирование.

В разделе 1.4 описываются основные принципы ПСИРС, проводится анализ различных экспериментов, приведенных в литературе. На основе этих данных делается вывод о высокой эффективности данного метода для точного определения поверхностной структуры. В частности, с помощью ПСИРС возможно определять расстояния между атомами первых слоев твердого тела с точностью до 0.1 \AA , степень ступенчатости поверхности, ориентировать образец вдоль кристаллографических направлений с точностью до 0.5° , определять степень дефектности и разупорядочения поверхности. На примере данных из литературы показаны большие перспективы, открывающие возможность применения ПСИРС во время различных динамических процессов. Так, во время осаждения пленки на подложку, изменении температуры или других воздействий возможно определять различные промежуточные фазы изменения структуры поверхности.

В разделе 1.5 описаны основные принципы САО, а также различные результаты применения этого метода, приведенные в литературе.

На основании проведенного анализа различных методик определения структуры поверхности делается вывод, что большие возможности в этом направлении открывает совместное использование методов диф-

ракции медленных электронов (ДМЭ), ИРС, ПСИРС и САО совместно с время-пролетной регистрацией всех вылетевших частиц и детальным моделированием происходящих процессов на ЭМ.

Раздел 1.6 посвящен изложению основных принципов моделирования атом-атомного взаимодействия в области низких и средних энергий, а также аналитической модели расчета атом-атомных столкновений, применяемой в данной работе.

В разделе 1.7 сформулированы задачи, решение которых имеет важное значение для дальнейшего развития методов анализа структуры поверхности кристаллических твердых тел.

Во второй главе приводятся разработанный быстрый алгоритм одноатомного статистического моделирования (ОСМ), программа, позволяющая на основе данного ОСМ рассчитывать и анализировать результаты экспериментов по ПСИРС. Приведены результаты тестирования и исследований на основе данной программы.

В разделе 2.1 рассматривается задача о расчете теневого конуса, формируемого за рассеивающим неподвижным атомом при падении на него параллельного ионного пучка. Полученный таким образом теневой конус используется как для визуализации теневых и блокировочных эффектов на поверхности, так и для получения количественных результатов, в частности, в предложенной модели ОСМ.

Для демонстрации закономерностей изменения размеров теневого конуса в зависимости от сорта взаимодействующих частиц и энергии приводится ряд рассчитанных конусов на основе потенциала Томаса-Ферми-Мольера.

Раздел 2.2 посвящен изложению основных принципов одноатомной статистической модели. Данная модель позволяет моделировать ПСИРС-зависимость с точным определением межатомных расстояний и требует гораздо меньших ресурсов по сравнению с методом Монте-Карло.

В методе ПСИРС угол между источником и анализатором рассеянных частиц фиксирован. Следовательно, полное сечение рассеяния для данного сорта ионов от атомов с определенным атомным номером не зависит от ориентации образца в течении эксперимента. Изменения в измеряемой интенсивности обратнорассеянных в одном жестком столкновении ионов в зависимости от угла падения θ в этом случае определяются изменением плотности потока ионов, направленных на рассеивающий атом кристалла. Поскольку рассматриваемое жесткое рассеяние происходит от атомов 1-2 слоев, можно предположить, что изменение плотности потока ионов, падающих на эти атомы, определя-

ется модуляцией плотности пучка на границе теневого конуса, формируемого предыдущим по направлению пучка атомом. Таким образом, если пренебречь блокировкой рассеянных ионов на отлетном участке траектории, можно смоделировать ПСИРС зависимость $I_0(\alpha)$ для пары атомов с межатомным расстоянием d , рассчитав распределение плотности ионных траекторий в теновом конусе, формируемым за атомом в зависимости от угла падения пучка к линии, соединяющих эти атомы. Различные ПСИРС-зависимости, полученные методом ОСМ для каждой характерной пары атомов, встречающихся вдоль анализируемого кристаллографического направления, можно сложить и, таким образом, смоделировать полную ПСИРС-характеристику, измеряемую в эксперименте.

В разделе 2.3 проанализировано влияние тепловых колебаний поверхностных атомов на размытие рассчитанной методом ОСМ безтемпературной зависимости $I_0(\alpha)$. Показано, что существенно влияют на форму ПСИРС-зависимости, в основном, колебания атомов, перпендикулярные поверхности.

При падении иона на поверхность при используемых энергиях (~ 1 кэВ) он взаимодействует с практически неподвижной температурной конфигурацией в данный момент. Для двух соседних атомов каждую 1-ю конфигурацию характеризует угол α_i между линией, соединяющей атомы и поверхностью. Поскольку амплитуда тепловых колебаний при обычно используемых комнатных температурах в ПСИРС мала по сравнению с межатомными расстояниями в кристалле, можно предположить, что каждая 1-я температурная конфигурация пары атомов дает одинаковую форму "нулевой" характеристики ПСИРС $I_0(\alpha)$, но смещенную на угол поворота i вдоль оси углов падения. Сложив все возможные характеристики $I_{0i}(\alpha)$, умноженные на вероятность их реализации при данной температуре кристалла, можно получить искомую "размытую" зависимость:

$$I(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G_i \cdot I_0(\alpha + \alpha_i). \quad (1)$$

В разделе 2.4 приводится описание созданного для моделирования ПСИРС-экспериментов пакета программ PLOT и результаты его тестирования.

Пакет программ PLOT, последовательно рассчитывает:

1) Теневой конус на основе численного интегрирования интеграла рассеяния для выбранного модельного потенциала. Энергия рассе-

янных ионов рассчитывалась по классическим формулам [2] без учета неупругих потерь. Обычно задаваемая плотность траекторий - 1000 на ангстрем;

2) Безтемпературную ПСИРС-характеристику на основе модели ОСМ для заданного межатомного расстояния;

3) Температурно размытую ПСИРС-характеристику для заданной пары атомов и температурных условий.

4) Полную ПСИРС-характеристику для выбранной структуры, состоящей из нескольких характерных пар, с учетом возможной нейтрализации рассеянных частиц.

В программе возможно также учитывать следующие характеристики эксперимента:

1) Угол рассеяния ионов;

2) Точность определения угла между пучком ионов и поверхностью;

3) Угловое разрешение энергоанализатора;

4) Температура образца;

5) Энергетическое разрешение энергоанализатора.

В качестве тестового эксперимента был выбран ПСИРС-эксперимент [4], в котором ионами Ne^+ с энергией 4 кэВ бомбардировалась поверхность Ni(100) вдоль направлений [100] и [110]. В процессе тестирования программы было исследовано влияние на форму рассчитываемых кривых таких параметров как энергетическое разрешение энергоанализатора и значения выбираемой поверхностной температуры Дебая Θ_{DS} . Было определено, что наилучшее совпадение наблюдается для $\Theta_{DS} = 325$ К, что соответствует: т увеличению поверхностной амплитуды по сравнению с объемной ($\Theta_{DV} = 425$ К [5]) в 1,68 раза.

В разделе 2.5 рассматривается влияние учета зарядового состояния частиц на форму рассчитываемой ПСИРС-характеристики. Приводятся различные модели нейтрализации отлетающих от поверхности твердого тела ионов. В данной работе применялся совмещенный подход, использующий модели Хэгструма и Энгельмана. Вероятность нейтрализации при подлете и отлете ионов от поверхности определялась по формуле:

$$R = \exp(-V_0 / V_{\perp}), \quad (2)$$

где V_{\perp} - перпендикулярная составляющая скорости ионов к поверхности. V_0 - константа (см/с). При проникновении ионов под первый слой атомов поверхности:

$$R = \exp(-A \cdot t), \quad (3)$$

где A - константа ($1 / c$) - частота электронных переходов, обуславливающих нейтрализацию иона; t - время нахождения ионов ниже первого слоя (c).

Хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов было достигнуто для значений $V_0 = 1 \cdot 10^5$ см/с и $A = 6.5 \cdot 10^{14}$ с⁻¹.

В третьей главе приводится описание, а также теоретические и практические результаты, полученные на основе созданной программы ICISS.N. Данная программа осуществляет детальное моделирование ПСИРС экспериментов методом Монте-Карло в широком интервале углов бомбардировки. В отличие от ОСМ модели, в ней допускается существование траекторий движения, сформированных в результате совокупного влияния многих атомов мишени. Это позволяет учитывать вклады в результирующую ПСИРС-характеристику от глубоко залегающих атомов мишени при больших углах бомбардировки и применять ПСИРС для анализа структуры более глубоких атомных слоев.

Раздел 3.1 посвящен описанию программы ICISS.N. Программа ICISS.N моделирует обратное рассеяние ионов на двумерной кристаллической мишени, которая может содержать до 7 бесконечных атомных цепочек, расположенных в плоскости падения пучка. Для каждой цепочки задается сорт атомов, межатомное расстояние, а также сдвигка относительно начала координат. Такой способ задания мишени позволяет моделировать сложные поверхностные структуры с возможностью задания релаксации верхних слоев, а также расположения адсорбированных атомов. Для каждой цепочки учитываются индивидуальные тепловые колебания в направлении, перпендикулярном поверхности. В результате расчетов запоминается полное энергетическое распределение рассеянных первичных ионов для каждого угла падения. Угол рассеяния θ является фиксированным. Итоговые распределения просматриваются с помощью специальной просмотровой программы, в которой можно формировать интересующую ПСИРС-характеристику, задавая ширину и положение энергетического интервала, а также выбирать различные модели и параметры нейтрализации ионов.

В разделе 3.2 приводятся результаты тестирования работы данной программы на известном эксперименте, в котором методом ПСИРС исследовалось положение адсорбированного монослоя Ni на поверхности Si(111) [8]. Как показано, результаты расчетов довольно близко совпадают с экспериментальными данными, что свидетельствует

о том, что программа ICISS. N. в основном, верно моделирует эксперименты по ПСИРС и может быть применена в исследовательских целях.

В разделе 3.3 с помощью программы ICISS. N проводится исследование структуры слоя адсорбированных атомов Sn на поверхности Si(111). Эксперимент был проведен в лаборатории проф. Тсонга И. С. Е из Аризонского университета и с его любезного разрешения используется в данной работе. В разделе показано, что в результате осаждения атомов Sn на поверхность Si(111) происходит образование поверхности $Si(111) - (\sqrt{3} * \sqrt{3}) Sn$. Атомы Sn находятся в положении T₄, то есть в симметричном положении относительно 3 атомов Si первого слоя прямо над атомом второго слоя Si, на высоте $(1.38 \pm 0.1) \text{ \AA}$ над атомами первого слоя и $(2.66 \pm 0.2) \text{ \AA}$ над атомами второго слоя Si, что соответствует расстоянию связи между атомами Si и Sn в $(2.6 \pm 0.2) \text{ \AA}$. При этом расстояние между двумя первыми слоями Si уменьшено по сравнению с объемным на $(0.3 \pm 0.2) \text{ \AA}$.

В заключении делается вывод о том, что в результате анализа процессов, происходящих в приповерхностной области кристаллического твердого тела при проведении экспериментов по ПСИРС, была создана эффективная компьютерная программа, моделирующая методом Монте-Карло данные эксперименты. Регистрация в ПСИРС жестко рассеянных в плоскости падения пучка первичных ионов позволяет полностью моделировать результаты эксперимента на двумерной мишени, ограниченной несколькими слоями вглубину, что значительно повышает скорость получения результата по сравнению с трехмерными программами Монте-Карло на полубесконечной мишени.

В четвертой главе приводится описание, а также теоретические и практические результаты, полученные на основе созданной программы RECAD. Данная программа осуществляет двумерное моделирование методом Монте-Карло рассеяния ионов и образование быстрых атомов отдачи в результате бомбардировки ионным пучком атомной цепочки с расположенным над ней одним или двумя слоями адсорбированных атомов.

Раздел 4.1 посвящен описанию программы RECAD. Программа RECAD была создана с целью исследования простейших структурно-чувствительных механизмов рассеяния и образования атомов отдачи в приповерхностных слоях кристаллических твердых тел с субмонослойными покрытиями адсорбированных атомов. Выделение таких процессов, которые приводят к образованию четких пиков на экспериментальных зависимостях и несут информацию о поверхностной структуре, позволило

бы на основе несложного моделирования и специально поставленного эксперимента определять положение адсорбатов на поверхности.

Программа RECAD моделирует в приближении парных столкновений взаимодействие ионов с двумерной мишенью. Поверхность представлялась в виде цепочки атомов кристаллической подложки (сорт А) с фиксированным межатомным расстоянием d и одним или двумя слоями адсорбированных атомов (сорт В) над ней. Сдвигка узлов ряда адсорбатов относительно цепочки атомов подложки выбиралась фиксированной, однако в программе возможно было задавать плотность слоя адсорбатов. В результате расчетов запоминались угловые и энергетические распределения распыленных и рассеянных атомных частиц. Зарядовое состояние, вылетевших частиц не рассматривалось. Моделирование траекторий движения частиц проводилось с использованием универсального потенциала по методике, предложенной в [6]. Учитывались температурные колебания атомов перпендикулярно поверхности.

В разделе 4.2 на основе сравнения результатов расчета RECAD с экспериментом [7] проанализированы основные поверхностные механизмы, приводящие к вылету атомных частиц и их вклады в результирующее энергораспределение.

В эксперименте грань Ni(100) с небольшим присутствием водорода на поверхности бомбардировалась пучком ионов Ne^+ с энергией 5 кэВ в направлении [110]. Регистрировались энергетические спектры вылетевших ионов для фиксированных углов вылета $\bar{\theta}$: 10° , 15° , 20° , 25° . Наилучшее соответствие расчетной и экспериментальной характеристик было достигнуто в предположении, что водород находится в Top-позиции на высоте 2.25 \AA над атомами второго слоя Ni и в Bridge-позиции (на мостике между двумя соседними атомами первого слоя Ni) на высоте 1.75 \AA над первым слоем атомов Ni. Используя данную программу были идентифицированы некоторые характерные пики на экспериментальном энергораспределении и сделаны выводы о возможности применения малых углов падения ионов и анализируемых углов рассеяния для определения структуры легких адсорбатов на поверхности кристаллических твердых тел.

В разделе 4.3 рассматривается прохождение атомных частиц через монослой водорода и предлагается метод определения концентрации водорода на поверхности твердых тел.

При моделировании с различной плотностью адсорбированных атомов водорода наблюдалась сдвигка в энергетическом положении пиков ПАО никеля. Это можно объяснить тем, что при прохождении высокоэнергетичных тяжелых частиц сквозь слой покрывающего водорода под

малыми углами они теряют энергию, но почти не меняют направления траектории. Это еще подтверждается тем фактом что при расчетах для меньших углов вылета данное расхождение больше. Были проведены расчеты методом Монте-Карло коэффициента ослабления для различных атомных частиц и начальных энергий при пролете их через атомную цепочку водорода с межатомным расстоянием 2.5 \AA . На основании этих расчетов можно сделать вывод, что бомбардируя поверхность кристалла легкими низкоэнергетичными ионами под малыми углами и анализируя относительную сдвигку в ожидаемых энергетических положениях то ли пиков ПАО атомов подложки, то ли рассеянных ионов можно количественно определить концентрацию слоя покрывающего водорода.

В разделе 4.4 с помощью программы RECAD проведено исследование вопросов выбора оптимальных условий проведения экспериментов по САО для определения структуры адсорбированного водорода.

На основании анализа различных поверхностных процессов, протекающих при бомбардировке ионными пучками поверхности кристаллического твердого тела с субмонослойным покрытием был выделен наиболее обещающий структурно-чувствительный механизм, который можно использовать для определения структуры адсорбированных атомов - прямое выбивание адсорбированного атома первичным атомом отдачи подложки.

В конце раздела после исследования различных условий проведения эксперимента предложен наилучший вариант для получения информации о структуре адсорбатов: угол падения тяжелых ионов - 85° к поверхности; угол регистрации - от 0° до 90° к поверхности. При таких условиях в регистрируемом энергораспределении значительно снижается нежелательный вклад ПАО водорода. Важно значение в таком эксперименте имеет правильный выбор энергетического интервала для углового распределения вылетевших ионов.

В конце раздела проанализировано влияние на расчетное распределение тепловых колебаний атомов поверхности.

В разделе 4.5 на основе программы RECAD и эксперимента, проведенного в Хьюстонском университете и любезно предоставленного проф. Рабалаисом, была определена структура субмонослойного покрытия атомов С на поверхности Ir(110).

В результате расчетов был сделан вывод о присутствии на поверхности Ir структур (1×3) и (1×1) , атомы С находятся над поверхностью Ir на высоте 0.2 \AA с расстоянием между атомами С-С 3.8 \AA вдоль направления $[001]$. Соответствующее расстояние от атомов С до атомов Ir из первого и второго слоя составило 1.9 и 2.1 \AA . Вышеп-

риведенные данные соответствуют плотности покрытия углерода в 0.5 - 0.6 монослоя.

ВЫВОДЫ

МАТЕРИАЛЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ

1. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Простая модель для описания экспериментов по ПСИРС / В кн. Материалы IX Всесоюзной конференции "Взаимодействие атомных частиц с твердым телом", Москва, 1989, т. 1, ч. 2, с. 43-45.

2. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Прицельно-столкновительная ионно-рассеивательная спектроскопия. Экспериментальные исследования, теоретические модели // Препринт ДонФТИ АН УССР, г. Донецк, 1990, 36 с.

3. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Моделирование механизма взаимодействия ионов средних энергий с поверхностью, покрытой слоем адсорбированного водорода / В кн. Тезисы докладов Всесоюзного совещания семинара "Диагностика поверхности ионными пучками", Одесса, 1990, с. 92-93.

4. V. V. Zastavnjuk, S. V. Teplov The fast computer code for the simulation of ICISS experiments / SIXTH International School on Vacuum, Electron and Ion Technologies, 1989, Varna, Bulgaria.

5. А. И. Бажин, В. В. Заставнюк, С. В. Теплов Машинное моделирование процесса анализа поверхности твердых тел методом ионно-рассеивательной прицельно-столкновительной спектроскопии // В сб. ФТТ, Харьков, в. 20, 1990, с. 57 - 61.

6. Teplov S. V., Tsong I. S. T., Zastavnjuk V. V. Computer simulations of impact-collision ion scattering spectrometry // Proc. 9 Ann. Symp. Arizona Chart. Amer. Vac. Soc. Scotsdail, 1991, P. 112.

7. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Угловое распределение атомов отдачи при ионной бомбардировке поверхности кристалла, покрытой слоем адсорбированного водорода / В кн.: Материалы X Всесоюзной конференции "Взаимодействие ионов с поверхностью", Москва, 1991, с. 185 - 189.

8. Заставнюк В. В., Теплов С. В. О моделировании экспериментов по обратному рассеянию медленных ионов поверхностью твердого тела // Поверхность, N. 7, 1991, с. 14 - 19.

9. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Машинное моделирование углового распределения атомов отдачи при ионной бомбардировке грани W(211), покрытой адсорбированным водородом / В кн. "Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссии. Тезисы докладов VI Всесоюзного семинара", Харьков, 1991, с. 197 - 198.

10. А. И. Бажин, В. В. Заставнюк, С. В. Теплов, Л. О. Корнилова Моделирование на ЭМ взаимодействия атомных частиц с твердым телом // Физико-химические, структурные и эмиссионные свойства тонких пленок и поверхности твердого тела. Сборник научных трудов. Под общей редакцией Н. Г. Находкина - Киев: УМК ВО, 1992, с. 250 - 259.

11. Запороженко О. С., Заставнюк В. В., Теплов С. В. Анализ структуры субмонослойного углеродного покрытия на грани (110) иридия (машинное моделирование) // В сб. "Диагностика поверхности ионными пучками", Запорожье, 1992, с. 40 - 42.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лейман К. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов / Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1979, 285 с.
2. Парилис Э. С., Тураев Н. Ю. Умаров Ф. Ф., Нижная С. А. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. Ташкент: Фан, 1987. 212с.
3. Заставнюк В. В., Теплов С. В. Прицельно-столкновительная ионно-рассеивательная спектроскопия. Экспериментальные исследования, теоретические модели // Препринт ДонФТИ АН УССР, г. Донецк, 1990, 36 с.
4. Fauster Th. and Metzner M. H. Low energy ion scattering from a Ni (001) surface // Surf. Sci., 1986, vol. 166. p. 29.
5. D. P. Jackson Approximate calculation of surface Debye temperatures // Surf. Sci. 1974, v. 43, p. 431 - 440.
6. Konoplev V. M. // Rad. Eff. Lett., 1986, vol. 87, p. 207.
7. Teplov S. V., Porter T. L., Chang C. S., Knipping V., Tsong I. S. T. // Phys. Rev. B. 1988. B35. N2. P. 2225-2231.
8. D. M. Cornellison, C. S. Chang, and I. S. T. Tsong Surface reconstructions included by thin overlayers of indium on Si (111) // J. Vac. Sci. Technol. A 8(4), Jul / Aug, 1990, P. 3443 - 3448.

АНБ им. В. Стефанія
ХНУРСР

Подп. в печать 04.08.92. Формат 60×84^{1/16}. Бумага *милосра.р.* Офсетная печать.
Уса. печ. л. 0,93. Уса. кр.-отг. 1,16. Уч.-изд. л. 1,0. Тираж 120 экз.
Заказ № 9-1538. Бесплатно.

Донецкий государственный университет, 340055, Донецк, Университетская, 24.

ДМПП, 340050, Донецк, ул. Артема, 96.

469088

AB 26.269

AB 26.269