

## РАССЕЯНИЕ АТОМОВ НА ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ

А.С. Долгов, А.А. Гетьман

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского “ХАИ” (Харьков)  
Украина*

Поступила в редакцию 07.04.2008

Теоретически исследовано рассеяние атомов на субмикроскопических геометрических дефектах поверхности клиновидного профиля. В качестве базовой модели принята схема зеркального отражения от поверхности. Устанавливается качественное различие закономерностей отражения от поверхности в вариантах, когда дефект уподобляется «вмятине», либо «щели». В рамках модели записаны точные формулы для распределения отраженных частиц по направлениям. Вводятся энергетические оценки развития процесса многократных соударений. Делаются прогнозы в отношении эволюции формы дефекта при продолжительном воздействии на поверхность. Указываются возможности управления этим процессом и использования потока отраженных от поверхности атомов как инструмента диагностики микро-рельефа.

### ВВЕДЕНИЕ

Рассеяние атомных частиц при столкновении с поверхностью попадает в поле зрения ряда исследователей и, в той или иной мере, обсуждается в огромном числе работ. Однако, чаще всего названный эффект оказывается вне фокуса внимания соответствующей разработки; молчаливо предполагается несамостоятельным, сопутствующим другим явлениям: распылению, осаждению, нагреву, которые легче наблюдаются и представляются более важными в прикладном отношении [1–4].

В теоретическом анализе особый интерес представляют те обстоятельства, которые отличают картину взаимодействия атомов с твердым телом от особенностей парного взаимодействия двух частиц. Широкое разнообразие микроскопических характеристик поверхности предопределяет обилие ситуаций, требующих изучения. Одним из таких обстоятельств, заведомо отсутствующих в предельно идеализированных схемах, является субмикроскопическая геометрическая неоднородность поверхности, что обозначается в названии, а также и другими авторами термином «шероховатость». Имеются работы, где это обстоятельство учитывается или рассматривается с тех или иных точек зрения [2, 5–7]. Здесь обсуждается картина рассеяния ато-

мов в субмикроскопических впадинах, имеющих форму клина. Такая форма неоднородности аппроксимирует значительный набор вариантов реальных отклонений формы поверхности от идеальной (царапины, следы обработки, последовательность моноатомных ступеней). Ограничиваемся двумерной схемой, что, впрочем, является не только упрощающей идеализацией: роль координаты вдоль направления царапины в некоторых вполне реалистических условиях (направленная бомбардировка) может быть несущественной.

### БАЗОВАЯ МОДЕЛЬ

Один из трудных вопросов анализа рассеяния поверхностью – закон распределения направлений в акте отражения от поверхности. Отдавая отчет о значительной вариативности возможных форм индикатрисы рассеяния, пригодных для разных вариантов массово-геометрических соотношений, мы выбираем схему зеркального отражения. Такое допущение предполагает наличие элементов коллективности во взаимодействии с поверхностью и является предельной формой корреляции между направлениями до и после акта столкновения. Предположение наиболее адекватно соответствует случаю бомбардировки легки-

ми атомами при низких энергиях. Кинетические особенности процесса могут быть распространены и на электронную компоненту надтепловых энергий.

Модельный объект представлен на рис. 1.

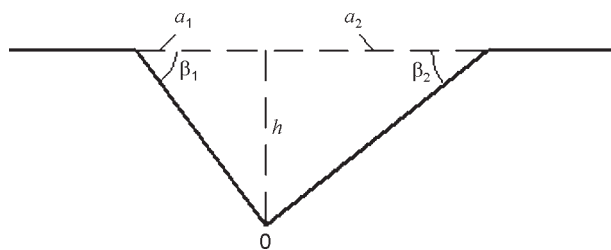


Рис. 1.

Отрезок, представленный штриховой линией, определяет границу между дефектом (“бороздка”) и примыкающей областью, играющей роль источника частиц. Распределение потока налетающих частиц на указанной границе нет оснований отличать от однородного.

Уравнения откосов бороздки таковы (начало координат в вершине клина):

$$\varphi_1 = q_1 x, \quad q_1 = -\text{tg}\beta_1 \quad (1)$$

$$\varphi_2 = q_2 x, \quad q_2 = \text{tg}\beta_2, \quad (2)$$

а уравнение траектории первичной падающей в пределы бороздки частицы имеет вид

$$\psi_0(x) = h + p_0(x - x_0), \quad (3)$$

где  $p_0$  – задает направление первичного потока,  $x_0, h$  – координаты пересечения налетающей частицей границы бороздки.

Если бороздка несимметрична, то роли двух откосов различаются и поэтому требуют рассмотрения по отдельности. Далее будем обсуждать версию первоначального падения на откос, обозначаемый индексом “1” (левый).

Пересечение прямых (1) и (3) определяет точку  $(x_1, y_1)$ , куда непосредственно попадает атом, прибывший из внешней зоны. Общая точка функции:

$$\psi_1(x) = y_1 + p_1(x - x_1), \quad (4)$$

где  $p_1$  задает направление отразившегося атома, и уравнения второго откоса (2) задают позицию второго контакта обсуждаемого атома  $(x_2, y_2)$ . Далее аналогично (4), записывается уравнение траектории после второго соуда-

рения  $\psi_2(x)$  и находится точка  $(x_3, y_3)$  очередного контакта, теперь вновь с первым откосом и т.д. Соответствующие аналитические операции дают рекуррентные соотношения:

$$x_1 = \frac{p_0 x_0 - h}{p_0 - q_1}, \quad (5)$$

$$x_{2n} = x_{2n-1} \frac{q_1 - p_{2n-1}}{q_2 - p_{2n-1}},$$

$$x_{2n+1} = x_{2n} \frac{q_2 - p_{2n}}{q_1 - p_{2n}}, \quad n \geq 1, \quad (6)$$

$$p_{2n+1} = \frac{u_1 p_{2n} + v_1}{v_1 p_{2n} - u_1} - 1, \quad p_{2n+2} = \frac{u_2 p_{2n+1} + v_2}{v_2 p_{2n+1} - u_2},$$

$$v_k = 2q_k, \quad n \geq 0. \quad (7)$$

Различие двух выражений (7) определяется только несовпадением угла наклона двух сторон клина. При этом каждое из выражений (7) обладает перестановочной симметрией  $p_{2n+1} \leftrightarrow p_{2n}$ .

Соотношения (5 – 7) представляют важнейшие параметры картины многократных столкновений, но, разумеется, не исчерпывают ее. Важную роль играет распределение атомов на влете в бороздку и возможность вылета из нее после одного или нескольких соударений.

На каждый из откосов в общем случае попадает только часть частиц, вылетающих вдоль определенного направления  $p_0$  с верхнего среза бороздки.

## ВЕРОЯТНОСТИ СОУДАРЕНИЙ

Как видно из рис. 2, доля атомов, попадающих на левый откос,  $W_0$  равна отношению

$$\frac{b}{a_1 + a_2}, \quad \text{что совпадает с выражением } \frac{-x_m}{a_1 - x_m},$$

позволяющим с учетом (2), (3), записать

$$W_0 = \frac{p_0 a_1 + h}{p_0 (a_1 + a_2)}. \quad (8)$$

Выражение (8) справедливо для двух диапазонов изменения  $p_0$ :  $p_0 < q_1$  и  $p_0 > q_2$ . Если же  $q_1 < p_0 < 0$ , то  $W_0 = 0$ . А условие  $0 < p_0 < q_2$  обеспечивает полное попадание на ограниченный участок левого откоса ( $W_0 = 0$ ).

Имеется существенное различие вариантов с мелкими бороздками  $\beta_1 + \beta_2 < \pi/2$  (типа

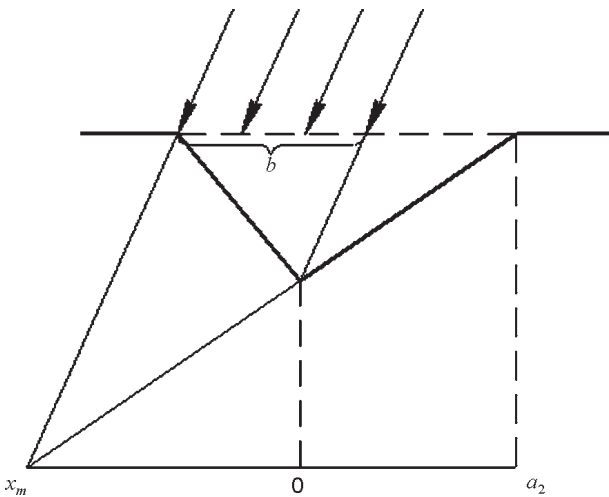


Рис. 2.

вмятины) и глубокими  $\beta_1 + \beta_2 > \pi/2$  (типа щели). Рассмотрим их отдельно, приняв также упрощение  $\beta_1 = \beta_2$  (симметричная бороздка).

Если  $2\beta < \pi/2$  (вмятина), то атом, влетевший в бороздку, покидает ее либо сразу после первого соударения, либо после второго.

Это задает две качественно различающиеся версии развития процесса. Вероятность первого соударения в рамках используемой модели – единица, а вероятность двух столкновений  $W_2$  (попадания во второй откос, после отражения от первого) подлежит вычислению.

Выясняется, что общая структура выражения для  $W_2$  содержит два подварианта:  $\pi/6 < \beta < \pi/4$  и  $\beta < \pi/6$ , что также можно обозначить неравенствами  $q > \sqrt{3}/3$  и  $q < \sqrt{3}/3$  ( $q \equiv q_2$ ,  $q_1 = -q$ ). В первом случае (“не слишком мелкая” бороздка) получается

$$W_2 = 2 \left\{ \int_{-\infty}^{2q/(1-q^2)} f(p_0) W_0 W_{12} dp + \int_{-2q/(1-q^2)}^{-q} f(p_0) W_0 dp + \int_{-(3q-q^3)/(3q^2-1)}^{\infty} f(p_0) W_0 W_{12} dp \right\}, \quad (9)$$

где  $f(p_0)$  – функция распределения ориентации (тангенсов) направлений пролета атомов через верхний срез бороздки; величина  $W_0$  определяется формулой (8), где  $a_1 = a_2 \equiv a$ ;  $W_{12}$  – вероятность попадания во второй склон при вылете из первого. Геометрическое построение, сходное с тем, что имеется на рис. 2,

с учетом соответствий (5, 6) определяет выражение

$$W_{12} = \frac{p_0(3q^2 - 1) + q(q^2 - 3)}{(q^2 + 1)(p_0 + q)}. \quad (10)$$

Второе слагаемое (9) учитывает вклад углов падения на соответствующий склон, близкие к скользящим, когда отраженный атом гарантировано попадает на другой склон. Первое слагаемое охватывает примыкающий диапазон углов, где возможен вылет уже после первого соударения, что учитывает величина  $W_{12}$  (10), на верхнем пределе достигающая единицы. Третье слагаемое охватывает следующий диапазон углов падения, ограниченный возможностью попадания на другой склон, что соответствует обращению  $W_{12}$  в нуль на нижнем пределе. Этот диапазон выпадает при приближении  $\beta$  к  $\pi/6$ . Диапазон углов, отвечающий более низким положительным значениям  $p_0$ , соответствует гарантированному вылету из бороздки и поэтому в формуле (9) не присутствует.

В условиях  $\beta < \pi/2$  (весьма мелкая вмятина) аналогичные построения приводят к формуле

$$W_2 = 2 \left\{ \int_{-2q/(1-q^2)}^{-q} f(p_0) W_0 W_{12} dp + \int_{(3q-q^3)/(3q^2-1)}^{-2q/(1-q^2)} f(p_0) W_0 W_{12} dp \right\}. \quad (11)$$

В простейшем предположении об изотропности (двумерной) атомов во внешней зоне и на уровне берегов бороздки нормированная на единицу функция распределения по углам первичной ориентации  $\theta$  такова  $f(\theta) = 1/\pi$ .

Используя соответствие  $f(\theta)d\theta = f(p_0)dp_0$ , находим

$$f(p_0) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{1 + p_0^2}. \quad (12)$$

Это, в свою очередь, дает возможность, найти функцию распределения по направлениям атомов, испытавших первое соударение

$$\text{с левым склоном бороздки } f(p_1) = f(p_0) \left| \frac{dp_0}{dp_1} \right|.$$

С учетом соответствия между  $p_0$  и  $p_1$  (7), получается  $f(p_1) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{1+p_1^2}$ , т.е. выражение

(12) с переобозначенным индексом. Аналогично, такие же выражения получаются и для всех последующих функций распределения.

Подстановка выражений (8), (10), (12) в соотношения (9), (11) после соответствующих выкладок дает точные выражения для величины  $W_2$ , что также позволяет непосредственно определить вероятность вылета после первого столкновения  $1 - W_2$  и среднее число столкновений  $1 + W_2$ . Выражение (11) приводится к виду:

$$W_2 = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{3-5q^2}{1+q^2} \beta - \frac{1-3q^2}{1+q^2} \arctg \frac{3q-q^3}{1-3q^2} + \frac{q}{2} \ln \frac{1+q^2}{4} - \frac{1}{2} \frac{3q-q^3}{1+q^2} \ln \frac{4(1+q^2)}{(3-q^2)^2} \right\}, \quad (13)$$

что в линейном приближении по  $q$  дает

$$W_2 \approx q \ln \frac{27}{16}. \quad (14)$$

Если первичное воздействие ориентировано по нормали к макроповерхности твердого тела ( $p_0 \rightarrow \infty$ ), что соответствует условиям ряда экспериментов и технологий, то при  $q < \sqrt{3}/3$  (формула (11)) вероятность  $W_2 = 0$ , а в диапазоне  $\sqrt{3}/3 < q < 1$  (9) величина  $W_2$  записывается как

$$W_2 = \frac{3q^2 - 1}{q^2 + 1}, \quad (15)$$

что соответствует изменению в пределах обозначенного диапазона от нуля до единицы.

Увеличение  $W_2$  с ростом  $q$  согласно (9), (13), (14), (15) соответствует повышению среднего количества столкновений атомов приповерхностной области с поверхностью. Это обстоятельство может играть более или менее значительную роль в ряде реальных ситуаций.

Один из вариантов такого типа отвечает существенному превышению энергии падающих атомов над энергией атомов подложки. Так зачастую обстоит дело при контакте поверхности с газовой или плазменной средой, а в случае пучкового воздействия это преобладание может быть как угодно большим.

Здесь имеет место столкновительная передача энергии от бомбардирующих атомов атомам подложки ([1, 2] и др.), зависящая от соотношения массово-геометрических параметров атомов-партнеров по взаимодействию. Увеличение числа актов соударения падающих атомов с поверхностью, обсуждаемое в данной работе, определяет рост коэффициента аккомодации энергии поверхностью, что влияет на энергетический спектр отраженных атомов и способствует усилению нагрева поверхности. Таким образом, эффективность передачи энергии от падающего на поверхность атома определяется не только микроскопическим механизмом акта взаимодействия, но и характеристиками более крупного пространственного масштаба (“мезоскопическими”).

Так как вследствие наличия мезоскопического рельефа на поверхности отдача энергии от газовой фазы увеличивается, то, значит, поверхность проявляет себя как более холодная. Это обстоятельство можно квалифицировать как траекторное охлаждение атомов из прилегающей газовой фазы.

Для искусственно созданного направленного потока на поверхность более уместно трактовать указанный эффект как кинематические (траекторные) поправки к массе атомов поверхности. Оценка указанной поправки может исходить из соответствия

$$(1-W_2) \left( \frac{M-m}{M+m} \right)^2 + W_2 \left( \frac{M-m}{M+m} \right)^4 \approx \left( \frac{\mu-m}{\mu+m} \right)^2, \quad (16)$$

где  $m, M$  – массы снаряда и мишени, соответственно;  $\mu$  – кинематически измененная (эффективная) масса, эта величина понимается также как результат осреднения по двум качественно различающимся сценариям процесса отражения от поверхности.

При существенном преобладании массы атомов поверхности над массой бомбардирующих атомов из соотношения (16) следует

$$\mu \approx \frac{M}{1+W_2}, \quad (17)$$

а при условии  $M \ll m$

$$\mu \approx (1+W_2)M. \quad (18)$$

Видим, что относительно тяжелые атомы подложки, согласно (17), проявляют себя как более легкие, а относительно легкие, вследствие реализации повторных соударений кажутся более тяжелыми (18). При этом масштаб различия между  $M$  и  $\mu$  не более двух.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Средняя энергия отраженных от поверхности атомов может играть роль индикатора поверхностного рельефа. Изменение этой энергии, или, шире, энергетического спектра, может использоваться для анализа свойств поверхности. Диагностическая особенность такого метода в том, что он, в соответствии с результатами (9), (11), (13)–(15), дает информацию о форме поверхностного рельефа, но не об абсолютных значениях линейных характеристик элементов рельефа.

Таким образом, предлагаемый инструмент может рассматриваться как возможное дополнение к иным существующим приемам, какие обычно ориентированы на определение абсолютных характеристик шероховатостей.

Разумеется, практическая реализация высказанных предложений, как и постановка соответствующих экспериментов, отнюдь не просты. Относительно легкодоступным представляется использование предполагаемого подхода для сопоставления разных образцов, сравнения результативности вариантов технологий. Здесь появляется возможность использования некоторых эталонных образцов, задающих определенный спектр энергий отраженных атомов. Энергетические отличия исследуемого образца от характеристик эталонного дает информацию о микрогеометрии поверхностного рельефа.

Высказанные общие соображения в основном справедливы и в случае значений  $q$ , превосходящих единицу (щель). Требуется, однако, обратить внимание на некоторые дополнительные обстоятельства. В отличие от рельефа типа относительно мелкой вмятины, атом в пределах щели может испытать большее число столкновений со стенками. Если угол первоначальной ориентации достаточно

велик ( $p_0 \gg 1$ ), то, в соответствии с формулами (7), значения  $p_k$  с увеличением индекса уменьшаются по модулю с чередованием знака. Следует обратить внимание, что слагаемые в числителе каждого из выражений (7) разных знаков. Это значит, что изменение величин  $p_n$  по указанному правилу будет происходить только до тех пор, пока иерархия численных значений указанных слагаемых не изменится, иначе говоря, до тех пор, пока величина  $u_k |p_k|$  не снизится до значения  $|v_k|$ .

Таким образом, соответствие  $|p_n| \approx \frac{2q}{q^2-1}$  определяет инверсию направления перемещения частицы. По достижению указанного условия начинается возвратное движение атома с ориентацией в сторону выхода из щели и постепенным увеличением  $|p_n|$ . Нетрудно убедиться, что изменение названных величин для случая  $q \gg 1$  в области  $|p_n| \gg 1$  следует правилу  $p_n \approx (-1)^k \frac{q}{2k}$ .

Согласно (7), на этапе последовательности соударений, отвечающих проникновению вглубь образца, величина  $q|p_n|$  не более 2. Это значит, что количество столкновений как на этапе проникновения, так и на этапе возврата около  $q^2/4$ . Общее число столкновений зависит от угла первоначальной ориентации  $p_0$  и, тем самым, может управляться изменением ориентации потока бомбардирующих атомов относительно поверхности. Так условие  $p_0 < q^{-1}$  отвечает однократному соударению с откосом щели и вылету из нее сразу после этого. Диапазон  $p_0 < 0$  соответствует не менее двум столкновениям; для области параметров, где  $p_0 < -1/q$ , число столкновений не менее трех, в диапазоне  $p_2 > 0$  – более трех и т.д. (напомним, что все значения  $p_n$  в соответствии с рекуррентными соотношениями (7) однозначно определяются величиной  $p_0$ ).

Все столкновения атома с поверхностями щели сопровождаются потерей некоторой порции энергии. Общая картина перераспределения энергии и сопутствующих эффектов требует самостоятельного изучения, однако, некоторые соображения предварительного характера могут быть указаны и теперь.



Следует думать, что во взаимодействии атома с поверхностью определяющую роль, как правило, играет акт парного взаимодействия с каким-то одним атомом на поверхности. Распределение передач энергии в таких столкновениях можно считать однородным в диапазоне, определяемом требованиями сохранения энергии и импульса (так получается и в модели твердых шаров, и в довольно общей ситуации, когда упругое рассеяние в системе центра инерции изотропно). Таким образом, среднее значение переданной в акте соударения энергии соответствует середине указанного диапазона. Можно ввести ориентировочное соответствие  $\varepsilon_k \sim \gamma^k \varepsilon_0$ , где  $\varepsilon_0$  – исходная энергия атома,

$$\gamma = \frac{M^2 + m^2}{(M + m)^2}.$$

Последовательность столкновений с поверхностями щели будет продолжаться до тех пор, пока энергия не снизится до значения  $\varepsilon_1$  – энергии связи обсуждаемого атома с поверхностью. Таким образом, наиболее вероятное число столкновений оценивается значением

$$K_0 \approx \frac{\ln(\varepsilon_0/\varepsilon_1)}{\ln(1/\gamma)}, \quad (19)$$

что может соответствовать как этапу внедрения в щель, так и возвратному движению. Положение участка вероятной адсорбции оценивается выражением (19), с учетом соотношений (1), (2), (6).

Таким образом, выявляется наличие некоторой (вероятно, слабо очерченной) области в пределах щели, где имеет место преимущественное осаждение прилетающих атомов. Это должно вести к появлению перемычек на некотором уровне высоты щели, что, в свою очередь, может приводить к разделению дефекта на две части: бороздка типа вмятины плюс изолированная от поверхности микрополость. Ввиду того, что указанный эффект изолирует микрообъем от поверхностных воздействий и, тем самым, способствует его консервации, следует ожидать постепенного накопления приповерхностных пор при длительной эксплуатации соответствующего образца в условиях всевозможных воздействий.

Положение области преобладающего осаждения зависит от первичной энергии  $\varepsilon_0$ . Показательным является сопоставление энергетически обусловленной величины (19), и указанной выше, геометрической оценкой  $q^2/4$ , соответствующей числу циклов прямого и возвратного движений. Если  $K_0 < q^2/4$ , то увеличение энергии отвечает осаждению на более глубоких участках щели, что способствует ее зарастанию. Если же, напротив  $K_0 > q^2/4$ , то влетевшие атомы как бы выталкиваются из бороздки, имея тенденцию к преимущественному осаждению на неглубоких участках дефекта.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически исследовано рассеяние атомов на субмикроскопических геометрических дефектах поверхности клиновидного профиля. Показано, что вследствие реализации повторных соударений относительно тяжелые атомы подложки проявляют себя как более легкие, а относительно легкие кажутся более тяжелыми. Выявлены следующие возможности модификации рельефа поверхности при длительной бомбардировке атомами: зарастание дефекта и постепенное накопление приповерхностных пор. Обсуждаются возможности диагностики поверхностного рельефа на основе анализа энергетического спектра отраженных атомов.

Построения данной работы допускают значительное развитие в отношении применения их к более сложным формам рельефа поверхности и использования иных видов закономерностей рассеяния. Результаты работы также могут быть использованы для трактовки распыления шероховатой поверхности и прогнозирования изменения рельефа.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Баранцев Р.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. – М., Ф.-М., 1975.
2. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел./Под ред. Е.С. Машковой.– М.: Мир, 1989.

3. Haile I.M. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods. – New York: Wiley – Interscience, 1992.
4. Кукушкин С.А., Осипов А.В.// УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1083
5. Берзин А.А., Морозов А.И.// ФТТ. – 2000. – Т. 42, № 2. – С. 354
6. Пугина Е.В., Корнич Г.В., Бетц Г.// Складні системи і процеси. – 2003. – Т. 2, № 1.
7. Абросимова Г.Е., Аронин А.С.// ФТТ. – 2008. – Т. 50, № 1. – С. 54

### РОЗСІЯННЯ АТОМІВ НА ШОРСТКІЙ ПОВЕРХНІ

А.С. Долгов, А.А. Гетьман

Теоретично досліджено розсіяння атомів на субмікроскопічних геометричних дефектах поверхні клинуватого профілю. У ролі базової моделі прийнята схема дзеркального відбиття від поверхні. Установлюється якісна різниця закономірностей відбиття від поверхні у варіантах, коли дефект уподібнюється “вм’ятині”, або “щілині”. В рамках моделі записані точні формули для розподілу відбитих часток по напрямкам. Вводяться енергетичні оцінки розвинення процесу багаторазових співударень. Робляться прогнози щодо еволюції форми дефекту при тривалому впливі на поверхню. Вказуються можливості керування цим процесом та використання потоку відбитих атомів як інструменту діагностики мікрорельєфу поверхні.

### ATOM DISPERSION ON THE ROUGH SURFACE

A.S. Dolgov, A.A. Get'man

Atom dispersion on the submicroscopic geometrical wedge-shaped surface defects is theoretically investigated. Scheme of specular reflection from the surface is accepted as a base model. Qualitative differences of the surface reflection law with such types of defects as “dent” and “gap” are determined. Accurate formulas for reflected particles direction distribution are written within the bounds of the model. Energy estimate of the multiple collision process is introduced. Defect form evolution prediction in the condition of continuous surface influence is made. Possibilities of mentioned process control and