



RU0310627

**МОДИФИЦИРОВАННЫЙ КОД «SCATTER-R», УЧИТЫВАЮЩИЙ
РЕЛЬЕФ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ОТРАЖЕНИЯ
И РАСПЫЛЕНИЯ.**

А.Курнаев, Н.Н.Трифонов

Московский государственный инженерно-физический институт, Москва.

При моделировании взаимодействия ионов и атомов с поверхностью твердого тела часто возникает необходимость учета влияния рельефа поверхности на получаемые результаты. Особенно это важно для скользящих углов падения атомов на мишень. С появлением недорогих сканирующих туннельных микроскопов (СТМ) стало возможным решить проблему получения «реальных» рельефов поверхности мишени в виде, пригодном для прямого моделирования. Программа «SKATTER» работает в приближении парных столкновений для аморфной среды с зависящем от энергии средним расстоянием между атомами. Для описания рельефа поверхности используется граничное условие, основанное на данных, полученных с СТМ в виде таблицы значений высот. Программа позволяет рассчитывать угловые и энергетические зависимости отраженных и распыленных частиц. При помощи программы «SKATTER-R» были проведены расчеты коэффициентов отражения и распыления для реальных поверхностей, используемых в экспериментах как до, так и после высокодозного облучения пучками легких ионов. Показано, что характеристики взаимодействия зависят от конкретной топологии поверхности, при этом для различных сканов одной и той же поверхности полученные коэффициенты отличаются на уровне статистической погрешности. Как правило, для облученных поверхностей коэффициент отражения легких ионов при нормальном падении пучка возрастает, а при касательном-падает, а уменьшение коэффициента распыления сильно и немонотонно зависит от энергии частиц.