01;02;11

Обратное рассеяние легких ионов поверхностями неоднородных многокомпонентных аморфных материалов

© В.С. Сухомлинов

Научно-исследовательский институт физики Санкт-Петербургский государственный университет,
198904 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 8 февраля 1995 г. В окончательной редакции 20 декабря 1995 г.)

Развита предложенная в [1] аналитическая теория обратного рассеяния легких ионов поверхностью твердого тела для случаев многокомпонентного материала и материала с переменными по глубине концентрациями отдельных его компонентов.

В предыдущих наших работах [1,2] была развита аналитическая теория обратного рассеяния поверхностями материалов, состоящих из атомов одного сорта. Вместе с тем легко видеть, что наибольший практический интерес представляет случай обратного рассеяния поверхностью многокомпонентных материалов. Действительно, большинство конструкционных материалов, применяемых в плазменных установках, содержит, как правило, несколько элементов [3]. Кроме того, даже если первоначально такой материал и был однокомпонентным, то в процессе эксплуатации в результате таких процессов, как имплантация, адсорбция, диффузия и др., приповерхностные слои твердого тела начинают включать в себя атомы, первоначально не содержащиеся в исходном материале, т.е. он становится многокомпонентным. И наконец, теоретическое исследование именно многокомпонентных материалов открывает возможности применения процесса обратного рассеяния для анализа состава приповерхностных слоев твердого тела.

Кроме того, поскольку указанные процессы обусловлены наличием границы и они зачастую пространственно неизотропны и неоднородны, то концентрации инородных атомов могут меняться в направлении нормали к поверхности твердого тела. В случае же первоначально однородного многокомпонентного материала под действием процесса селективного распыления [4] относительные концентрации компонентов могут также изменяться и приобретать неоднородный по глубине характер. Таким образом, весьма вероятна ситуация взаимодействия потока ионов с многокомпонентным материалом, концентарция компонентов которого меняется в зависимости от расстояния до поверхности.

В данной работе делается попытка решить следующие задачи: развить аналитическую теорию обратного рассеяния легких ионов поверхностью аморфного твердого тела на случай многокомпонентного материала и материала с переменными по глубине концентрациями отдельных его компонентов.

Как будет видно из дальнейшего, обе сформулированные выше задачи удается решить независимо. Результат для наиболее общей ситуации многокомпонентного материала с переменной плотностью компонентов по глубине получается на основании решения по отдельности обеих поставленных задач.

Рассмотрим первую задачу. Будем искать функцию распределения потока ионов, рассеянных в многокомпонентном материале, в виде

$$f_{ieNs} = f_{ies} + f_{iNs}, \qquad (1)$$

где f_{ieNs} — функция распределения легких ионов; f_{ies} — функция распределения легких ионов без учета ядерного торможения; f_{iNs} — поправка к функции f_{ies}, обусловленная ядерным торможением.

При этом, как показано в работе [1], выполняется условие $F[f_{ies}] \gg F[f_{iNs}]$, где $F[\varphi(v)]$ — произвольный интегральный функционал от функции $\varphi(v)$, v — скорость иона, v_0 — скорость падающих на поверхность ионов и $0 \le v \le v_0$. Функция f_{ieNs} удовлетворяет кинетическому уравнению Больцмана

$$\eta\frac{\partial f_{ieNs}}{\partial z} + (\boldsymbol{\nabla}_v \mathbf{a})\left(\frac{f_{ieNs}}{v}\right) = \sum_{k=1}^{N}\int d\boldsymbol{\Omega}'\int dv'$$
$$\times\, \Sigma_k(v')\rho_k g_k(\boldsymbol{\Omega}'\to\boldsymbol{\Omega}, v'\to v) f_{ieNs}(\boldsymbol{\Omega}', z, v') - \int d\boldsymbol{\Omega}'$$
$$\times \int dv' \Sigma_k(v)\rho_k g_k(\boldsymbol{\Omega}\to\boldsymbol{\Omega}', v\to v') f_{ieNs}(\boldsymbol{\Omega}, z, v), \qquad (2)$$

где η — cos угла, который составляет скорость иона $\mathbf{v}$ с осью z; z — координата, отсчитываемая от поверхности твердого тела по нормали в глубину; $\boldsymbol{\nabla}_v$ — оператор дивергенции в пространстве скоростей; $\mathbf{a}$ — ускорение, действующее на ион за счет внешней силы (в рассматриваемом случае эта сила направлена против скорости иона и обусловлена электронным торможением); $\mathbf{v}' = \boldsymbol{\Omega}'v'$ — скорость иона до столкновения, $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega}v$ — скорость иона после столкновения; $\Sigma_k(v)$ — обратная длина свободного пробега до столкновения иона с атомом k-го сорта; $g_k(\boldsymbol{\Omega}'\to\boldsymbol{\Omega}, v'\to v)$ — индикатрисса рассеяния при столкновении иона с атомом k-го сорта, для которой справедливо выражение [5]:

$$g_k(\mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}, v' \to v) = \frac{(M_k+1)^2}{4\pi}\,\frac{v}{v'^2}$$
$$\times\,\delta\left(\mu_0 - \left(\frac{M_k+1}{2}\,\frac{v}{v'} - \frac{M_k-1}{2}\,\frac{v'}{v}\right)\right),$$
$$v' \in \left[v;\ \frac{M_k+1}{M_k-1}v\right], \qquad (3)$$

где M_k — отношение массы атома k-го сорта к массе иона, в нашем случае $M_k \gg 1$; $\arccos\mu_0$ — угол рассеяния; N — число компонентов в многокомпонентном материале.

В рассматриваемом диапазоне энергий сила, действующая на ион со стороны электронов твердого тела, пропорциональна скорости иона, а коэффициент пропорциональности определяется по правилу Брегга

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m_i}; \quad \mathbf{F} = \sum_{k=1}^{N}\rho_k\mathbf{F}_k = -\mathbf{\Omega}\sum_{k=1}^{N}\rho_k A_k\sqrt{E}\,n,$$

где E — энергия иона; m_i — масса иона; ρ_k — относительная концентрация k-го компонента, т. е. $\sum_{k=1}^{N}\rho_k = 1$; A_k — соответствующий коэффициент для однокомпонентного материала [6,7]; n — атомная плотность многокомпонентного материала.

Для того чтобы найти, какому уравнению удовлетворяет функция f_{ies}, необходимо в уравнении (1) перейти к предельному переходу $\xi_k = 1/M_k \to 0$. Используя формулу (3), нетрудно убедиться, что выполняется соотношение

$$\int d\mathbf{v}' \int\limits_{v}^{\frac{M_k+1}{M_k-1}v} g_k(\mathbf{\Omega} \to \mathbf{\Omega}',\, v \to v')dv' = 1.$$

Для того чтобы преобразовать первое слагаемое в уравнении (2), разложим функцию $f_{ieNs}(\mathbf{\Omega}', z, v')$ в ряд Тейлора по степеням $(v'-v)^i$. Далее, используя свойства дельта-функции, можно провести интегрирование по переменной v' и затем перейти к пределу $\xi_k \to 0$. В результате получим

$$\lim_{\xi\to 0}\int d\mathbf{\Omega}' \int dv' g_k(\mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega},\, v' \to v) f_{ieNs}(\mathbf{\Omega}', z, v')$$
$$\times\,\Sigma_k(v')\rho_k = \frac{1}{2}\Sigma_k(v)\rho_k\int\limits_{-1}^{1} f_{ies}(\mathbf{\Omega},\, z, v)d\eta.$$

Таким образом, уравнение для f_{ies} приобретает вид

$$\eta\,\frac{\partial f_{ies}}{\partial z} - \frac{A_s n}{\sqrt{2m_i}}\,\frac{\partial f_{ies}}{\partial v} + \Sigma_s(v) f_{ies}$$
$$= \frac{1}{2}\Sigma_s(v)\int\limits_{-1}^{1} f_{ies}(\eta, v, z)d\eta, \qquad (4)$$

где $\Sigma_s(v) = \sum_{k=1}^{N}\Sigma_k(v)\rho_k = \sum_{k=1}^{N} s_k\sigma_k(v)\rho_k n$, $\dot{s}_k$ — сечение рассеяния иона на атоме k-го сорта при скорости иона $v = v_0$, $s_k\sigma_k(v)$ — то же при скорости иона v.

Обозначая величину $b = A_s/\sum_{k=1}^{N} s_k\rho_k$, $\sigma_s(v) = \sum_{k=1}^{N} s_k\sigma_k(v)\rho_k/\sum_{k=1}^{N} s_k\rho_k$, получаем, что формально уравнение (4) совпадает с уравнением для функции f_{ie} для однокомпонентного материала из работы [1], поэтому и функция f_{ies} дается соответствующими формулами из работы [1] с заменой величин b, s_0, $\sigma(v)$ на b_s, $\sum_{k=1}^{N} s_k\rho_k$ и $\sum_{k=1}^{N} s_k\sigma_k(v)\rho_k/\sum_{k=1}^{N} s_k\rho_k$. Теперь рассмотрим функцию f_{iNs}. В работе [1] было показано, что функцию f_{iN}, являющуюся аналогом f_{iNs} для однокомпонентного материала, можно представить в виде

$$f_{iN} = -\frac{\xi\sigma(v)v}{2b}\int\limits_{-1}^{1} f_{ie}d\eta,$$

где $\xi \ll 1$ — отношение масс иона и атома, $\sigma(v)$ — безразмерное сечение рассеяния иона на атоме вещества.

Эта формула была получена разложением оператора столкновений в линейном кинетическом уравнении Больцмана, учитывающем как электронное, так и ядерное торможение, по степеням величины ξ с точностью до линейных членов. Как видно, поправка к функции f_{ies}, обусловленная ядерным торможением растет с увеличением ξ, увеличением сечения рассеяния иона на атоме и уменьшением величины электронного торможения, что понятно из физических соображений. Кроме того, известно [5], что с ростом скорости иона вклад ядерного торможения в общее торможение растет. Это согласуется с наличием в формуле для f_{iN} множителя v.

Нетрудно показать, что соответствующая процедура в кинетическом уравнении Больцмана для многокомпонентного материала приводит к следующему результату:

$$f_{iNs} = -v(b_s)^{-1}\sum_{k=1}^{N}\xi_k\sigma_k(v)\rho_k s_k\Big(\sum_{k=1}^{N} s_k\rho_k\Big)^{-1}\int\limits_{-1}^{1} f_{ies}d\eta, \qquad (5)$$

где ξ_k — отношение масс иона и атома k-го сорта.

Величины s_k и $\sigma_k(v)$, как указано выше, рассчитываются по соответствующим формулам работы [1] для однокомпонентного материала. Формулы (1) и (5) с учетом соответствующих формул работы [1] и дают решение задачи об обратном рассеянии легких ионов в многокомпонентном материале.

Перейдем теперь к рассмотрению второй задачи. Предположим, что рассеивающий ионы материал однокомпонентный, но существует градиент концентрации вдоль оси z, который описывается функцией $\psi(z)$

$$n(z) = n_0\psi(z) \qquad (6)$$

и $\psi(z)|_{z=0} = 1$, где $n(z)$ — концентрация атомов вещества, $n_0 = n(z)|_{z=0}$, $\psi(z)$ — безразмерная функция координаты.

В соответствии с подходом, развитым в работе [1], уравнение для функции f_{ie} в этом случае при нормальном падении запишется в виде

$$\eta\frac{\partial f_{ie}}{\partial z} - b\frac{\partial f_{ie}}{\partial v} + \sigma(v)\psi(z)f_{ie} = \frac{1}{2}\sigma(v)\psi(z)\int\limits_{-1}^{1} f_{ie}d\eta \quad (7)$$

с граничными условиями

$$\underset{\eta<0;\,z=0}{f_{ie}} = (2\pi v_0^3)^{-1}\delta(\eta-1)\delta(v-v_0),$$

где $\sigma(v)$ — безразмерная обратная длина свободного пробега иона в веществе, соответствующая атомной концентрации, равной n_0.

Перейдем в уравнении (7) к новым переменным

$$y = \sigma(v)\int\limits_0^z \psi(z')dz'; \quad \omega = b^{-1}\psi(z)\int\limits_0^v \sigma(v')dv'. \quad (8)$$

В этих переменных уравнение (7) можно записать в виде

$$\eta\frac{\partial f_{ie}}{\partial y} - \frac{\partial f_{ie}}{\partial \omega}\Big\{1 - \eta\gamma(\omega, y)\Big\} + f_{ie} = \frac{1}{2}\int\limits_{-1}^{1} f_{ie}d\eta, \quad (9)$$

где

$$\gamma = \frac{\omega}{\psi(z)}\left.\frac{d\psi(z)}{dz}\right|_{z=z(\omega,y)}.$$

Область значений переменных z, ω, в которых справедливо уравнение (9), обсуждалась в работе [1]. Потребуем, чтобы выполнялось неравенство

$$\gamma(\omega, y) \ll 1. \quad (10)$$

Используя значение электронного торможения для легких ионов [6,7], а также данные о сечениях рассеяния легких ионов на атомах вещества [8], неравенство (10) можно переписать в виде

$$\Delta n(z)/n(z) \ll \Big(2.5/E(\text{кэВ})\Big)^{0.5},$$

где $\Delta n(z)$ — изменение концентрации на расстоянии 10 Å.

Как видим, при низких энергиях $E \lesssim 10$ кэВ неравенство (10) не является слишком жестким и вполне удовлетворяет требованиям реальной ситуации.

Следуя методу, примененному в работе [1], будем искать решение уравнения (9) в виде

$$f_{ie} = f_{ie0} + f_{ie1} + f_{ie2},$$

где f_{ie0} и f_{ie1} — функции распределения ионов, соответственно нерассеянных и испытавших одно столкновение; f_{ie2} — испытавших два и более столкновений.

Легко показать, что в случае $\gamma \neq 0$ решение уравнения для f_{ie0} формально имеет такой же вид, как и при $\gamma = 0$. Используя этот результат, можно получить для f_{ie1} выражение

$$\underset{\eta>0}{f_{ie1}} = \left.\underset{\eta>0}{f_{ie1}}\right|_{\gamma=0} + (4\pi)^{-1}\eta(1-\eta)^{-1}(bv_0^3)^{-1}\exp(\omega-\omega_0)$$
$$\times\Bigg\{T(\omega_0-\omega-y/\eta)T(\omega_0-\omega-y)\gamma(\omega,y)\sigma\big(v(\omega)\big)$$
$$\times\Big[\exp(-y)-\exp(-y/\eta)\Big]$$
$$-(\eta)^{-1}\exp(-y/\eta)\int\limits_0^y\gamma\left(\omega+\frac{y}{\eta}-\frac{y'}{\eta},\,y'\right)\exp\big(y'/\eta\big)$$
$$\times\sigma\left(v\left(\omega+\frac{y}{\eta}-\frac{y'}{\eta}\right)\right)\left[\exp(-y)-\exp\left(\frac{y'}{\eta}\right)\right]dy'$$
$$\times T\Big(\omega+\frac{y}{\eta}-\frac{2y'}{\eta}-\omega_0\Big)T\Big(\omega_0-\omega+\frac{y'}{\eta}-\frac{y}{\eta}-y'\Big)\Bigg\},$$

$$\underset{\eta<0}{f_{ie1}} = \left.\underset{\eta<0}{f_{ie1}}\right|_{\gamma=0} + (4\pi)^{-1}|\eta|(1+|\eta|)^{-1}(bv_0^3)^{-1}\exp(\omega-\omega_0)$$
$$\times\Bigg\{T(\omega_0-\omega-y)\exp(-y)\gamma(\omega,y)\sigma\big(v(\omega)\big)+\exp\left(-\frac{y}{\eta}\right)$$
$$\times|\eta|^{-1}\int\limits_\infty^y\gamma\left(\omega+\frac{y}{\eta}-\frac{y'}{\eta},\,y'\right)\sigma\left(v\left(\omega+\frac{y}{\eta}-\frac{y'}{\eta}\right)\right)$$
$$\times\exp\Big(y'\frac{1-\eta}{\eta}\Big)T\Big(\omega_0-\omega+\frac{y'}{\eta}-\frac{y}{\eta}-y'\Big)dy'\Bigg\}, \quad (11)$$

где

$$T(x) = \begin{cases} 0, & \text{если} \quad x<0, \\ 1, & \text{если} \quad x>0, \end{cases}$$

$\left.\underset{\eta>0}{f_{ie1}}\right|_{\gamma=0}$ и $\left.\underset{\eta<0}{f_{ie1}}\right|_{\gamma=0}$ — функции распределения однократно рассеянных ионов, полученные в работе [1] с заменой аргументов на ω и y, определенных формулами (8).

Чтобы найти f_{ie2}, применим P_1-метод сферических гармоник и, представив f_{ie2} в виде

$$f_{ie2} = \frac{1}{4\pi}\left\{F_{ie0}(\omega,y) + 3\eta F_{ie1}(\omega,y)\right\},$$

получим с использованием формул (11) систему уравнений для функций $F_{ie0}(\omega, y)$ и $F_{ie1}(\omega, y)$

$$\frac{\partial F_{ie1}}{\partial y} - \frac{\partial F_{ie0}}{\partial \omega} + \frac{\partial F_{ie1}}{\partial \omega}\gamma(\omega, y) = \int\limits_{-1}^{0} \left\{ f_{ie1}\Big|_{\gamma=0} + \varphi_{i\gamma} \right\} d\eta,$$

$$\frac{1}{3}\frac{\partial F_{ie0}}{\partial y} - \frac{\partial F_{ie1}}{\omega} + \frac{1}{3}\frac{\partial F_{ie0}}{\partial \omega}\gamma(\omega, y) + F_{ie1} = 0, \qquad (12)$$

где

$$\varphi_{i\gamma} = \underset{\eta<0}{f_{ie1}} - \underset{\eta<0}{f_{ie1}}\Big|_{\gamma=0}.$$

Эта система приводит к уравнению

$$\frac{\partial^2 F_{ie1}}{\partial y^2} - 3\frac{\partial^2 F_{ie1}}{\partial \omega^2} + 3\frac{\partial F_{ie1}}{\partial \omega}$$

$$= \frac{\partial}{\partial y}\left\{ \int\limits_{-1}^{0} \left[f_{ie1}\Big|_{\gamma=0} + \varphi_{i\gamma} \right] d\eta \right\} - 3\frac{\partial}{\partial \omega}\psi_1(\omega, y)$$

$$- \frac{\partial}{\partial y}\psi_0(\omega, y), \qquad (13)$$

где

$$\frac{\partial}{\partial \omega}\psi_1(\omega, y) = \frac{\partial \gamma}{\partial \omega}\frac{\partial F_{ie1}}{\partial \omega}\Bigg|_{\gamma=0} + \gamma\frac{\partial^2 F_{ie1}}{\partial \omega^2}\Bigg|_{\gamma=0},$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\psi_0(\omega, y) = \gamma\frac{\partial^2 F_{ie0}}{\partial y \partial \omega}\Bigg|_{\gamma=0},$$

при этом мы пренебрегли членами, пропорциональными $\partial\gamma/\partial y$ (это можно сделать в силу малости $\psi^{-1}\partial\psi/\partial z$).

Уравнение (12) дополняется граничными условиями в форме Маршака [5]. Используя малость величины γ, можно найти, что

$$\underset{\eta<0;y=0}{f_{ie2}} = \underset{\eta<0;y=0}{f_{ie2}}\Bigg|_{\gamma=0} \left\{ 1 - 3\left(\frac{1}{\psi(z)}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)_{z=0} \right.$$

$$\left. \times\, \omega\left[0.876 + \frac{b}{3\sigma^2}\frac{d\sigma(v)}{dv}\right] \right\}. \qquad (14)$$

Нетрудно показать, используя, например, потенциал Борна–Майера [8], что практически для всех элементов выполняется неравенство

$$\frac{b}{3\sigma^2}\frac{d\sigma(v)}{dv} \ll 1,$$

если $E \gtrsim 100$ эВ, где E — энергия иона.

Тогда равенство (14) можно переписать следующим образом:

$$\underset{\eta<0;y=0}{f_{ie2}} = \underset{\eta<0;y=0}{f_{ie2}}\Big|_{\gamma=0}\left\{ 1 - 2.63\frac{\partial \psi}{\partial z}\Bigg|_{z=0} (b)^{-1}\int\limits_{0}^{v}\sigma(x)dx \right\}. \qquad (15)$$

Обсудим полученный результат. Из формулы (14) видно, что в случае, если $\partial\psi/\partial z|_{z=0} > 0$, т. е. плотность атомов в твердом теле растет с глубиной, число обратно рассеянных ионов, испытавших несколько столкновений, убывает по сравнению со случаем, когда плотность атомов постоянна. Этот эффект нетрудно объяснить. Действительно, с одной стороны, при увеличении атомной плотности в твердом теле увеличивается частота столкновений, что приводит к увеличению числа многократно рассеянных ионов. Однако, как нетрудно показать, вблизи границы твердого тела многократно рассеянные ионы движутся преимущественно из глубины твердого тела к границе. Увеличение же частоты столкновений для таких ионов уменьшает вероятность достигнуть границы твердого тела. Указанное обстоятельство и обусловливает уменьшение коэффициента обратного рассеяния многократно рассеянных ионов при увеличении атомной плотности с глубиной (в соответствии с формулой (15)). Напротив, число обратно рассеянных ионов, испытавших одно столкновение (т. е. $\underset{\eta<0;y=0}{f_{ie1}}$), как нетрудно видеть из формулы (11), слабо растет с увеличением глубины атомной плотности. Причина этого заключается в следующем. Как известно, при отсутствии электронного торможения вид уравнения Больцмана в безразмерных переменных не зависит от величины сечения столкновения. Можно показать, что и функция распределения потока обратно рассеянных ионов на границе также не зависит от этой величины. Зависимость от сечения столкновения в решении уравнения Больцмана появляется при введении электронного торможения, поскольку его суммарная величина зависит от длины пробега иона в твердом теле, которая в свою очередь определяется длиной пробега иона до столкновения с атомом твердого тела. Однако в данном случае мы рассматриваем легкие ионы, испытавшие одно столкновение, длина пробега которых в твердом теле, как известно [9], мала. Отсюда и слабое увеличение функции $\underset{\eta<0;y=0}{f_{ie1}}$ при увеличении атомной плотности с глубиной.

Указанный анализ позволяет сделать нетривиальный вывод, что в условиях, когда значительную долю от общего числа обратно рассеянных ионов составляют многократно рассеянные легкие ионы, коэффициент отражения ионов уменьшается при увеличении атомной плотности твердого тела при удалении от поверхности. И, наоборот, коэффициент отражения растет в тех же условиях, если основной поток обратно рассеянных ионов составляют однократно рассеянные ионы.

Опираясь на анализ, проделанный в работе [1], заметим, что первой из названных ситуаций соответствуют большие энергии падающих ионов, последней — малые энергии.

Таким образом, в работе получены аналитические формулы для функции распределения потока обратно рассеянных легких ионов для многокомпонентных материалов и для случая, когда атомная плотность твердого тела изменяется с глубиной.

Список литературы

[1] *Сухомлинов В.С., Фафурина Э.Н.*// ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 4. С. 9–19.
[2] *Сухомлинов В.С.*// ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 12. С. 9.
[3] *Бериш Р., Рот И., Штауденмайер Г.* и др. // Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел / Под ред. Е.С. Машковой. М.: Мир, 1989. С. 259–280.
[4] *Жиглинский А.Г., Кучинский В.В.* Массоперенос при взаимодействии плазмы с поверхностью. М.: Энергоатомиздат, 1991. 205 с.
[5] *Марчук Г.П.* Методы расчета ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1961. 667 с.
[6] *Andersen H.H., Ziegler J.F.* Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements. New York: Pergamon Press, 1977.
[7] *Ziegler J.F.* Helium Stopping Powers and Ranges in All Elements. New York: Pergamon Press, 1977.
[8] *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 271 с.
[9] *Плетнев В.В., Семенов Д.С.* // Взаимодействие ионов и плазмы с поверхностью твердого тела. М.: Энергоиздат, 1986. С. 47–49.