

01;11

Расчет спектров самораспыления тонких пленок методом дискретных потоков

© А.А. Барат, В.В. Манухин

Московский энергетический институт (технический университет),
111250 Москва, Россия
e-mail: artyom-b@mail.ru

(Поступило в Редакцию 27 июля 2007 г. В окончательной редакции 28 апреля 2008 г.)

Самораспыление плоскопараллельных слоев описано теоретически на основе совместного использования метода инвариантного погружения и метода дискретных потоков. Получены дифференциальные уравнения для функций прямого и обратного самораспыления, найдены их точные решения. Найденные энергетические распределения самораспыленных ионов и полные коэффициенты самораспыления сравниваются с результатами компьютерного эксперимента. Проанализированы зависимости полных коэффициентов самораспыления от толщины пленки и начальной энергии ионов.

PACS: 68.49.Sf, 72.10.Bg, 02.30.Rz

Введение

Дальнейшее развитие различного рода плазменных технологий требует оценки ресурса конструкционных материалов, взаимодействующих с плазмой. Это возможно только на основе детальной информации относительно коэффициентов распыления, энергетических и угловых распределений распыленных частиц. Поскольку соответствующая экспериментальная задача является чрезвычайно сложной, а разнообразие применяемых материалов весьма велико, необходимо развить теоретические методы описания физического распыления.

Существующие теории распыления достаточно сложно адаптируются к распылению реальных неоднородных материалов (в том числе слоисто-неоднородных), поэтому целью настоящей работы было получение приближенных решений для самораспыления плоскопараллельных слоев в простой модели углового рассеяния. Задача о распылении плоскопараллельного слоя является составной частью задачи о распылении слоистой структуры, а самораспыление (распыление мишени ионами того же вида) является неотъемлемой частью процесса распыления мишени легкими ионами.

Описание физического распыления, вызванного каскадом столкновений, инициированным первичным ионом, обычно ведется на основе кинетического уравнения Больцмана [1]. Стандартными приближениями при решении данного уравнения являются низкий флюенс облучения, отсутствие эффектов анизотропии в аморфной среде, приближенный учет объемных и поверхностных сил связи, применение модельных сечений рассеяния иона, пренебрежение потерями энергии при взаимодействии атомов с электронным газом [1].

Граничными условиями при решении кинетического уравнения Больцмана применительно к распылению являются искомые функции, что существенно усложняет поставленную задачу. Ряд классических работ по теории распыления выполнен в модели „бесконечной среды“ [2],

когда условно выбирается плоскость, из которой стартует первичный ион. При этом каскад столкновений не обрабатывается, при переходе частицы через выбранную условную границу, что вносит погрешность в решение. Согласно [2], функция распределения выбитых атомов по энергии имеет обратно-квадратичный вид: $G(E) \sim 1/E^2$. В работе [3] проведен более точный учет влияния поверхности на характеристики потока выбитых частиц, в результате чего в решении появился поправочный логарифмический множитель

$$G(E) \sim \ln(E_0/E)^{-3/2}/E^2,$$

здесь E_0 — энергия первичного иона. Однако результаты [3] были получены в асимптотическом случае для $E \ll E_0$. Позднее, в работе [4], решение, найденное в [3], было обобщено для случая любых энергий выбитых атомов. В работе применялся метод дискретных потоков, предложенный Чандрасекаром [5,6] для решения уравнения Больцмана.

Одним из методов, позволяющих детально учитывать граничные условия в задачах переноса, является метод инвариантного погружения, впервые предложенный Амбарцумяном для описания отражения света от мутной среды [7]. Данный метод позволяет сформулировать интегро-дифференциальное уравнение непосредственно для функции выхода распыленных атомов, которая измеряется в эксперименте. Метод инвариантного погружения ранее использовался для анализа отражения заряженных частиц от поверхности твердого тела [8] и для описания распыления. Так, в работе [9] сформулированы уравнения для функции распыления, а в [10] — приведено приближенное решение задачи самораспыления полубесконечной мишени.

При анализе самораспыления плоскопараллельного слоя необходимо учитывать наличие двух границ среды, поскольку каскады столкновений обрываются за счет ухода частиц как в верхнюю, так и в нижнюю полуплоскость. Сделать это в рамках методов, развитых в [3,4],

оказывается весьма проблематично. Кроме того, при описании самораспыления необходимо учитывать, что потоки выбитых частиц и рассеянных первичных ионов принципиально неотличимы. В работе [11] показано, что в случае нормального падения первичных ионов, спектры самораспыления и саморассеяния наблюдаются в одном и том же диапазоне энергий, поэтому экспериментально отделить выбитые и рассеянные частицы также невозможно.

В данной работе описание явления самораспыления тонких пленок ведется на основе комбинации метода инвариантного погружения [7,12] для точного учета граничных условий и метода дискретных потоков, предложенного Чандрасекаром, позволяющего перейти от уравнения Больцмана к системе дифференциальных уравнений для описания потоков самораспыленных ионов, движущихся вдоль фиксированных дискретных направлений [4,5].

Теоретический анализ

Введем обозначение $N(x, E, \mu)$ для дифференциальной плотности потока самораспыленных частиц на глубине x , летящих под углом $\theta (\mu = \cos \theta)$ к нормали и имеющих энергию E . В работе рассматривается случай нормального падения первичных ионов, поэтому плотность потока считается интегральной по азимуту. Для $N(x, E, \mu)$ должны выполняться следующие граничные условия ($\mu \geq 0$):

$$\begin{cases} N(0, E, \mu) = 0; \\ N(0, E, -\mu) = \mu F G_1(E_0, \mu_0; E, \mu); \\ N(z, E, \mu) = \mu F G_2(E_0, \mu_0; E, \mu); \\ N(z, E, -\mu) = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь F — плотность потока первичных ионов, E_0 и μ_0 — энергия и направляющий косинус первичных ионов ($\mu_0 = 1$ при нормальном падении), z — толщина слоя. G_1 и G_2 — функции самораспыления плоскопараллельного слоя, определенные для частиц, вылетевших в верхнюю и нижнюю полуплоскость соответственно. Данные функции имеют смысл дифференциальных по углу и энергии коэффициентов самораспыления.

Задача метода инвариантного погружения — получить уравнения для функций G_1 и G_2 непосредственно. В этом случае найденное решение будет удовлетворять граничным условиям для уравнения Больцмана абсолютно точно. В работах [10,12] представлен вывод данных уравнений и найдено приближенное решение в модели углового рассеяния „прямо-вперед“, что существенно ограничивает область применения полученного аналитического выражения для функции G_1 .

В случае, если угловое распределение самораспыленных частиц не представляет интерес и необходимо определить только энергетический спектр, можно ввести в рассмотрение дискретные направления и соответствующие им интегральные по углу плотности дискретных

потоков и для каждой из них получить дифференциальное уравнение на основе метода Чандрасекара [4,5] и инвариантного погружения [7,10]. Решение данной системы уравнений позволит получить достоверные результаты по энергетическим спектрам самораспыления, а также по полным коэффициентам самораспыления плоскопараллельных слоев.

При использовании метода дискретных потоков в численных процедурах число потоков может быть достаточно велико. Однако в аналитических методах приходится ограничивать число потоков ввиду громоздкости задачи. В работе [6] при описании рассеяния света потоков было всего два потока: нисходящий и восходящий. Использование этой модели в самораспылении неприменимо, поскольку из-за ограниченности угла рассеяния ($\leq \pi/2$) невозможен переход частиц из потока в поток. Использование трехпоточного приближения позволяет учесть особенности рассеяния частиц равной массы, и при этом не существенно усложняет решение. Дальнейшее увеличение числа потоков не приведет к заметному изменению в энергетическом спектре распыленных атомов, но при этом затруднит получение аналитического решения.

Разобьем весь диапазон изменения телесных углов на три области и найдем интегральную по углу плотность потока в каждой из них. Поскольку задача нормального падения является плоской, искомые величины определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} N_+(x, E) &= \int_{\sqrt{2}/2}^1 N(x, E, \mu) d\mu; \\ N_-(x, E) &= \int_{-1}^{-\sqrt{2}/2} N(x, E, \mu) d\mu; \\ N_0(x, E) &= \int_{-\sqrt{2}/2}^{\sqrt{2}/2} N(x, E, \mu) d\mu. \end{aligned}$$

Затем в каждой области зададим дискретное направление, соответствующее геометрической середине каждого диапазона ($\theta = 0, \pi/2, \pi$), и на каждой глубине будем рассматривать только три дискретных потока: восходящий (N_-), нисходящий (N_+) и движущийся параллельно границе слоя (N_0).

Очевидно что [5,10] плотность восходящего потока атомов на некотором уровне x является результатом обратного самораспыления атомов слоя толщиной $(z-x)$, расположенного ниже x , нисходящим потоком атомов, т.е.

$$\begin{aligned} N_-(x, E) &= \int_E^{E_0} \left(N_+(x, E') + \exp(-x\Sigma(E')) \right) \\ &\quad \times G_1(z-x, E-E') dE'. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\Sigma(E) = n\sigma(E)$ — произведение концентрации атомов мишени n и полного сечения рассеяния (выбивания) ионов σ ; G_1 — потоковая функция обратного самораспыления, определенная как $G_1(x, E) = N_-(x = 0, E)/F$. Экспоненциальное слагаемое в (2) учитывает частицы, движущиеся на глубине x в нисходящем потоке и не испытавшие ни одного рассеяния. Необходимость явного учета таких частиц обусловлена заданием первого граничного условия в (1).

Введем новую переменную $u = \ln(E_0/E)$. Таким образом, интегральные плотности потоков и функции самораспыления будем искать в следующем виде: $G_1(x, E) = G_1(x, u)/E_0$; $N(x, E) = N(x, u)/E_0$. Тогда выражение (2) запишется как свертка, и в Лаплас-образе по латаргии u будет выглядеть следующим образом:

$$N_-(x, p) = (N_+(x, p) + \exp(-x\Sigma))G_1(z - x, p). \quad (3)$$

При переходе к (3) сделано приближение, в рамках которого принято сечение рассеяния σ — твердых шаров, не зависящих от начальной энергии. Данное приближение ограничивает область начальных энергий ионов, при которых искомые решения будут адекватно работать в диапазоне 100–1000 eV. В ряде работ, например [3], установлено, что в данной области характеристики потока выбитых атомов не чувствительны к степени анизотропии сечения и зависимости сечения от энергии.

Помимо функции самораспыления в верхнюю полуплоскость G_1 можно также определить потоковую функцию самораспыления „на прострел“: $G_2(z, E) = N_+(x = z, E)/F$. Используя принцип инвариантности [5,12], согласно которому: „плотность восходящего потока атомов на поверхности мишени является результатом прохождения слоя толщиной x атомами, приходящими к поверхности x снизу“, найдем уравнение для функции G_2 . Данное утверждение может быть записано в лаплас-образе аналогично (3) следующим образом:

$$G_1(z, p) = G_1(x, p) + N_-(x, p)(G_2(x, p) + \exp(-x\Sigma)). \quad (4)$$

Необходимость явного учета экспоненциального слагаемого в (4) связана с тем, что функция прямого самораспыления G_2 не описывает частицы, прошедшие слой, не испытав рассеяний.

Для получения уравнений для функций G_1 и G_2 проинтегрируем (3) в (4) по глубине x и найдем значение производных в точке $x = 0$ для (3) и в точке $x = z$ для (4). Учитывая граничные условия для дискретных потоков: $N_-(x = z, E) = 0$, $N_+(x = 0, E) = 0$, получим выражения, следующие из (3) и (4) соответственно:

$$\frac{dG_1(z, p)}{dz} - G_1(z, p) \left(\frac{dN_+(z, p)}{dz} \Big|_{z=0} - 1 \right) + \frac{dN_-(z, p)}{dz} \Big|_{z=0} = 0, \quad (5)$$

$$G_2(z, p) = - \frac{dG_1(x, p)}{dx} \Big|_{x=z} - \exp(-z\Sigma). \quad (6)$$

Недостающие производные плотностей потоков по глубине в (5)–(6) можно найти из уравнения Больцмана, как это следано в [4]. Рассмотрим уравнение Больцмана для случая нормального падения первичных ионов и сечения рассеяния „твердых шаров“ ($\sigma = \Sigma/E_0$):

$$\begin{aligned} & \cos\theta \frac{\partial N(z, E, \theta)}{\partial z} + \Sigma N(z, E, \theta) \\ &= \frac{2\Sigma}{E_0} \exp(-z\Sigma) \delta \left(\sqrt{\frac{E}{E_0}} - \cos\psi \right) \\ &+ n \int_E^{E_0} \int_0^{\pi/2} \frac{2\Sigma}{E_1} [N(z, E, \theta - \psi) + N(z, E, \theta + \psi)] \delta \\ &\times \left(\sqrt{\frac{E}{E_1}} - \cos\psi \right) \sin\psi d\psi dE_1. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь n — концентрация атомов среды, ψ — угол рассеяния (выбивания) в лабораторной системе отсчета, δ — дельта-функция Дирака, выражающая связь между углом рассеяния (выбивания) и энергией частицы, следующую из законов сохранения энергии и импульса. После перехода в (7) к единицам латаргии u интегральное слагаемое запишется в виде свертки, и уравнение в лаплас-образе по u будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} & \cos\theta \frac{\partial N(\tau, p, \theta)}{\partial \tau} + N(\tau, p, \theta) \\ &= \int_0^{\pi/2} 2 \cos^{2p-1} \psi \sin\psi [N(\tau, p, \theta - \psi) + N(\tau, p, \theta + \psi)] d\psi \\ &+ 4 \exp(-\tau) \cos^{2p-1} \psi. \end{aligned} \quad (8)$$

В (8) был произведен переход к новой переменной τ — безразмерной толщине слоя. В качестве масштаба толщины была выбрана длина свободного пробега: $\tau = z\Sigma(E)$.

Подставив в выражение (8) значения θ , соответствующие принятым дискретным направлениям $0, \pi/2, \pi$, найдем недостающие производные в выражениях (5), (6). Так, например, для $\theta = \pi$ уравнение (8) переписется следующим образом:

$$\begin{aligned} & - \frac{\partial N_-(\tau, p)}{\partial \tau} + N_-(\tau, p) \\ &= 2N_-(\tau, p) \int_0^{\pi/4} 2 \cos^{2p-1} \psi \sin\psi d\psi \\ &+ 2N_0(\tau, p) \int_{\pi/4}^{\pi/2} 2 \cos^{2p-1} \psi \sin\psi d\psi. \end{aligned} \quad (9)$$

Последнее слагаемое (8), описывающее однократное рассеяние (выбивание) не дает вклада в поток $N_-(\tau, p)$,

поскольку угол рассеяния частицы на частице равной ей массы не превышает $\pi/2$, поэтому при нормальном падении частица не сможет попасть из дискретного потока $N_+(\tau, p)$ в поток $N_-(\tau, p)$, испытав однократное взаимодействие. Интегралы в (9) легко вычисляются:

$$a(p) = \int_0^{\pi/4} 2 \cos^{2p-1} \psi \sin \psi d\psi = \frac{2(1 - 1/2^p)}{p};$$

$$b(p) = \int_{\pi/4}^{\pi/2} 2 \cos^{2p-1} \psi \sin \psi d\psi = 1/(p2^{p-1}).$$

Выражения для двух других дискретных потоков находятся аналогично (9) подстановкой значений $\theta = 0$ и $\theta = \pi/2$. Таким образом, недостающие выражения для производных плотностей дискретных потоков по глубине можно представить в виде:

$$\left. \frac{dN_-(x, p)}{dx} \right|_{x=0} = G_1(\tau, p)(1 - a(p)) - \frac{b(p)^2}{(1 - a(p))} (G_1(\tau, p) + 1), \quad (10)$$

$$\left. \frac{dN_+(x, p)}{dx} \right|_{x=0} = a(p) + \frac{b(p)^2}{2(1 - a(p))} (G_1(\tau, p) + 1), \quad (11)$$

$$\left. \frac{dN_-(x, p)}{dx} \right|_{x=\tau} = -\frac{b(p)^2}{2(1 - a(p))} (G_2(\tau, p) + \exp(-\tau)). \quad (12)$$

Подставив выражения (10)–(12) в (5), (6), получим дифференциальные уравнения для функций G_1 и G_2 :

$$\frac{\partial G_1(\tau, p)}{\partial \tau} + G_1(\tau, p) \left(2(1 - a(p)) - \frac{b(p)^2}{1 - a(p)} \right) - \frac{b(p)^2}{2(1 - a(p))} (G_1^2(\tau, p) + 1) = 0, \quad (13)$$

$$(G_2(\tau, p) + \exp(-\tau))^2 - \frac{2(1 - a(p)) \partial G_1(\tau, p)}{b(p)^2 \partial \tau} = 0. \quad (14)$$

Решая уравнение (13), можно заметить, что оно представляет собой уравнение Риккати с постоянными коэффициентами, которое допускает точное решение [13]:

$$G_1(\tau, p) = (1 - \exp(-2\tau)) G_1^\infty(p) - (f(\tau, p) - \exp(-2\tau)) G_1^\infty(p). \quad (15)$$

Здесь $G_1^\infty(p)$ — лаплас-представление функции самораспыления полубесконечного слоя:

$$G_1^\infty(p) = \left[2(2^{p-1} p)^2 \times \sqrt{2(1 - 2/p + 1/(2^{p-1} p))^2 - (1/(2^{p-1} p))^2} \right]^{-1}, \quad (16)$$

а функция $f(z, p)$ учитывает влияние конечной толщины слоя:

$$f(z, p) = \exp \left[-2\tau \sqrt{(2/p - 1)^2 - 2(2/p - 1)/(2^{p-1} p)} \right]. \quad (17)$$

Рассмотрим теперь процедуру отыскания обратного преобразования Лапласа для выражения (15). Очевидно, что

$$G_1(\tau, u) = (1 - \exp(-2\tau)) G_1^\infty(u) - \int_0^u G_1^\infty(u_1) (f(\tau, u - u_1) - \exp(-2\tau)) du_1. \quad (18)$$

Отметим, что выражение для $G_1^\infty(p)$ совпадает с результатом, полученным в [4].

В работе [4] было рассмотрено асимптотическое представление для (16), которое позволило легко отыскать оригинал преобразования Лапласа. В данной работе удалось решить эту задачу точно. Для отыскания обратного преобразования Лапласа выражение (16) было представлено в виде двойного ряда:

$$G_1^\infty(p) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(2k+i)! (-1)^i 2^{i+k-1}}{(2k-1)! (2k+i)! i!} \times \frac{\exp[-p(2k+i) \ln(2)]}{(p-2)^{2k+i}}. \quad (19)$$

Ряд (19) позволяет легко найти оригинал преобразования Лапласа:

$$G_1^\infty(u) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(2k+i)! (-1)^i 2^{i+k-1}}{(2k-1)! (2k+i)! i!} \times \frac{(u - (2k+i) \ln(2))^{2k+i-1}}{(2k+i-1)!} \exp[2(u - (2k+i) \ln(2))] \times \Phi(u - (2k+i) \ln(2)). \quad (20)$$

Здесь Φ — функция Хевисайда. Как видно из (20), минимальное значение латаргии самораспыленной частицы равно $\ln(4)$, т.е. максимальная энергия самораспыления в случае полубесконечного слоя определяется как $E_{\max} = E_0/4$, что совпадает с результатами [4]. Можно показать, что замена (16) асимптотическим представлением, выполненная в [4], вносит заметную погрешность в искомый спектр.

Для вычисления обратного преобразования Лапласа от выражения $(f(z, p) - \exp(-2z\Sigma))$ из (15) представим его в следующем виде:

$$f(\tau, p) = \exp[-2\tau(1 - 2/p)] \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-2\tau)^m}{m!} \times \left(\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k)!}{(k!)^2 (2k-1) 2^{kp} p (2-p)^{k-1}} \right)^m + [\exp[-2\tau(1 - 2/p)] - \exp(-2\tau)]. \quad (21)$$

Обратное преобразование от второго слагаемого (21) легко вычисляется с помощью таблиц лаплас-преобразования [13]:

$$\exp(-2\tau)(\exp(4\tau/p) - 1) = I_1(4\sqrt{u\tau})\sqrt{\frac{4\tau}{u}}. \quad (22)$$

Здесь I_1 — функция Бесселя мнимого аргумента первого порядка.

Лаплас-оригинал третьего слагаемого также может быть найден аналитически, однако процедура его отыскания достаточно громоздка, поэтому ограничимся приведением конечного результата для выражения (21):

$$\begin{aligned} f(\tau, u) &= I_1(4\sqrt{u\tau})\sqrt{\frac{4\tau}{u}} + \exp(-2\tau) \\ &\times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-2\tau)^m}{m!} q_m(u) + \int_0^u I_1(3\sqrt{(u-u_1)\tau}) \\ &\times \sqrt{\frac{4\tau}{u-u_1}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-2\tau)^m}{m!} q_m(u_1) du_1. \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь функция $q_m(u)$ обозначает m -кратную свертку функции $g(u)$ с самой собой, т.е. например

$$\begin{aligned} q_2(u) &= \int_0^u g(u-u_1)g(u_1)du_1, \\ q_3(u) &= \int_0^u g(u-u_1)q_2(u_1)du_1. \end{aligned}$$

Функция $g(u)$ вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} g(u) &= \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{1}{2^{k-1}} \right. \\ &+ \sum_{i=0}^{k-2} \frac{(-1)^{i+k-1} (u - k \ln 2)^{k-2-i} \exp(2(u - k \ln 2))}{2^{i+1} (k-2-i)!} \Big) \\ &\times \frac{(2k)! \Phi(u - k \ln 2)}{(k!)^2 (2k-1)} + 2\Phi(u - \ln 2). \end{aligned} \quad (24)$$

Для нахождения функции самораспыления „на прострел“ $G_2(\tau, u)$ подставим выражение для производной функции $G_1(\tau, u)$ по координате z из (13) в (14) и получим выражение для лаплас-образа функции $G_2(\tau, u)$:

$$\begin{aligned} G_2(\tau, p) &= \exp\left[-\tau \sqrt{(2/p-1)^2 - 2(2/p-1)/(2^{p-1}p)}\right] \\ &- \exp(-\tau). \end{aligned} \quad (25)$$

Как видно, выражение (25) с точностью до множителя при z совпадает с (18), обратное преобразование Лапласа для которой найдено выше (23), (24). Таким образом,

$$G_2(\tau, u) = f\left(\frac{\tau}{2}, u\right) - \exp(-\tau). \quad (26)$$

Искомая функция самораспыления с учетом плоского потенциального барьера на границе мишени S представляется в виде, аналогичном [12]:

$$\begin{aligned} S_{1(2)}(\tau, \mu_0, E_0, \mu, E) \\ = \int_0^1 \int_E^{E_0} G_{1(2)}(\tau, \mu_0, E_0, \mu_1, E_1) P(\mu_1, E_1, \mu, E) dE_1 d\mu_1. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь P — функция пропускания потенциального барьера, определяющая возможные значения энергии E_1 и направления μ_1 вылета распыленного атома после его прохождения. Выражение для функции P выглядит следующим образом [12]:

$$\begin{aligned} P(\mu_1, E_1, \mu, E) \\ = \delta(E + U - E_1) \delta\left(\mu - \sqrt{\left(1 + \frac{U}{E}\right)\mu_1^2 - \frac{U}{E}}\right). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь δ — дельта-функция Дирака, U — высота плоского потенциального поверхностного барьера.

Поскольку в работе определялись функции самораспыления, интегральные по углу вылета, выражение (27) должно быть проинтегрировано также по косинусу угла вылета частицы μ . Таким образом, подставив (28) в (27) и вычислив интегралы по энергии и углам, получим конечное выражение для энергетических спектров прямого G_T и обратного G_R самораспыления с учетом потенциального барьера на границе мишени:

$$G_{R(T)}(z, E_0, E) = G_{R(T)}(z, E_0, E + U) \left(1 - \sqrt{\frac{1}{2(1 + \frac{U}{E})}}\right). \quad (29)$$

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 показаны энергетические спектры самораспыления в верхнюю полуплоскость в зависимости от толщины слоя. Толщина слоя на графике приведена в безразмерных единицах: $\tau = z\Sigma(E)$. В работе рассмотрены сечения рассеяния „твердых шаров“, которые могут быть вычислены исходя из геометрической трактовки понятия сечения: $\sigma = \pi r^2$, где r — минимальный радиус сближения частиц [15]. Представленные на графике кривые получены на основе расчетов по формулам (18), (29). В расчетах использовалось начальное значение энергии иона 200 eV и высота поверхностного барьера 4.46 eV, характерная для никеля. Как видно, энергетические распределения имеют максимум, связанный с наличием потенциального барьера на границе мишени (второй множитель в формуле (29)).

Положения максимума слабо зависят от толщины пленки, изменяясь в пределах 1 eV в рассмотренном диапазоне толщин, что говорит о сходном поведении энергетических спектров в области низких энергий

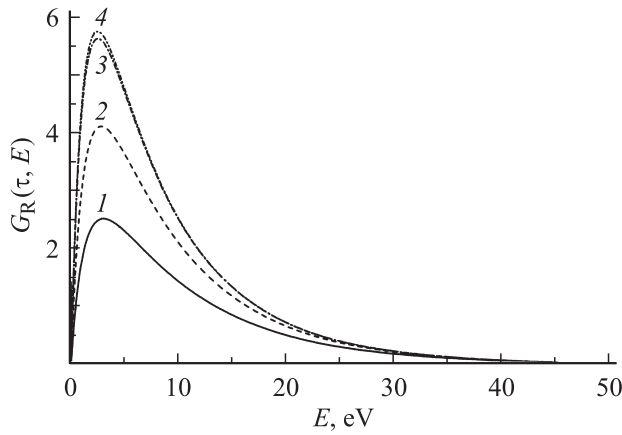


Рис. 1. Энергетические спектры обратного самораспыления слоя никеля в зависимости от толщины пленки: 1 — $\tau = 1$, 2 — 2, 3 — 5, 4 — 10.

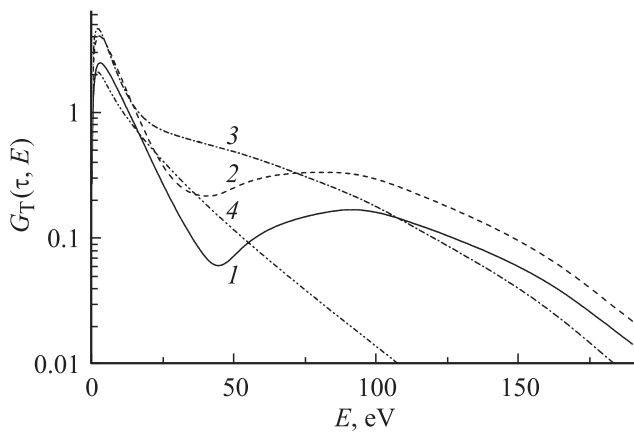


Рис. 2. Энергетические спектры прямого самораспыления слоя никеля в зависимости от толщины пленки. Значения те же, что и на рис. 1.

($E \approx U$). Однако степень спада энергетических спектров в области больших энергий существенно зависит от толщины. Можно заметить, что начиная с некоторого значения энергетический спектр перестает зависеть от толщины пленки и становится для данной начальной энергии иона функцией самораспыления полубесконечного слоя. Так, на рис. 1 энергетические спектры при $\tau = 5$ и $\tau = 10$ практически совпадают.

Как было сказано выше, максимальная энергия самораспыленной в верхнюю полуплоскость частицы может быть оценена как $E_0/4$. Данное соотношение получается в рамках принятой модели углового рассеяния, поскольку обратное выбивание частицы возможно только после двукратного перехода в другой дискретный поток: из N_+ в N_0 и затем в N_- . При каждом переходе максимальная энергия частицы составляет $E \cos^2(\pi/4) = E/2$, т.е. половину от энергии частицы до соударения E . Данный результат совпадает с результатами [4,11].

На рис. 2 показаны энергетические спектры самораспыления „на прострел“, вычисленные при тех же

начальных условиях, что и на рис. 1. Как видно из графика, спектры помимо максимума, обусловленного потенциальным барьером, при малых значениях толщины слоя имеют еще один локальный максимум. В отличие от самораспыления в верхнюю полуплоскость, при котором для отражения необходима двукратная смена потока, прострел пленки возможен и в случае, когда частица слабо меняет начальное направление движения (в пределах $\pi/4$), т.е. двигается в пленке в пределах области, соответствующей нисходящему дискретному потоку. Данные частицы в результате однократного рассеяния (выбивания) могут иметь энергию не менее $E_0 \cos^2(\pi/4) = E_0/2$, а за два рассеяния (выбивания) — соответственно не менее $E_0/4$. Таким образом, при значениях толщины пленок, для которых преимущественный вклад вносят рассеяния первой и второй кратности ($\tau \approx 2$), в спектре будет наблюдаться локальный максимум в высокоэнергетической области ($E > E_0/4$). С ростом толщины пленки большую роль начнут играть рассеяния высокой кратности, и соответственно в результирующем спектре будут преобладать частицы, изменявшие дискретный поток в процессе движения в мишени, и следовательно, имеющие конечную энергию не выше $E_0/4$. Таким образом, максимум спектра самораспыления „на прострел“ будет смещаться в область низких энергий.

Практический интерес для расчета ресурса конструкционных материалов представляют полные коэффициенты самораспыления:

$$Y_{1(2)}(\tau, E_0) = \int_0^{E_0} G_{1(2)}(\tau, E) dE. \quad (30)$$

На рис. 3 показаны зависимости коэффициентов самораспыления от толщины пленки, рассчитанные, согласно (30), с использованием полученных выражений

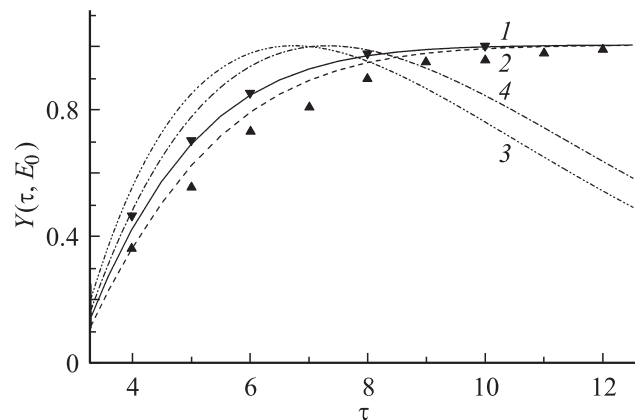


Рис. 3. Зависимости полных коэффициентов прямого и обратного самораспыления никеля от толщины пленки для двух значений энергии первичного иона (1, 3 — Y_1 и Y_2 соответственно, 500 eV; 2, 4 — Y_1 и Y_2 , 10^3 eV). Сравнение с компьютерным экспериментом (Y_1 , \blacktriangledown — 500, \blacktriangle — 10^3 eV) [11].

для G_1 и G_2 (16), (26) и с учетом потенциального поверхностного барьера (29). Для сравнения здесь также приведены результаты компьютерного моделирования в программе SRIM-2006 (J.F. Ziegler, J. Biersack et al.). Значения коэффициентов самораспыления нормированы на единицу с целью проверки правильности нахождения зависимости коэффициентов самораспыления от толщины пленки.

Как отмечалось выше, полный коэффициент самораспыления в верхнюю полуплоскость быстро возрастает и при определенной толщине слоя, названной нами полубесконечной, выходит на плато. Как видно, для начальной энергии иона 500 eV, спектр самораспыления перестает зависеть от толщины пленки при более малых значениях толщинах, чем для случая $E_0 = 10^3$ eV. Совпадение с результатами компьютерного эксперимента оказалось приемлемым в широком энергетическом диапазоне. Однако в случае более высоких начальных энергий $E_0 > 10^3$ eV наблюдается расхождение результатов компьютерного моделирования и расчетных значений. Данное обстоятельство объясняется необходимостью учета анизотропии сечения рассеяния и непригодностью потенциала „твердых шаров“ при данных начальных энергиях иона.

Зависимость полного коэффициента самораспыления „на прострел“ от толщины пленки имеет максимум. Изначально количество выбитых в нижнюю полуплоскость частиц растет за счет того, что в каскад соударения вовлекается все большее число частиц, которые испытывают относительно небольшое количество соударений, позволяющее им покинуть мишень. Затем с ростом толщины пленки растут потери энергии частиц, и полный коэффициент самораспыления уменьшается. Таким образом, понятно, что с ростом начальной энергии ионов максимум данных распределений будет двигаться в область больших значений толщин слоев. Отметим,

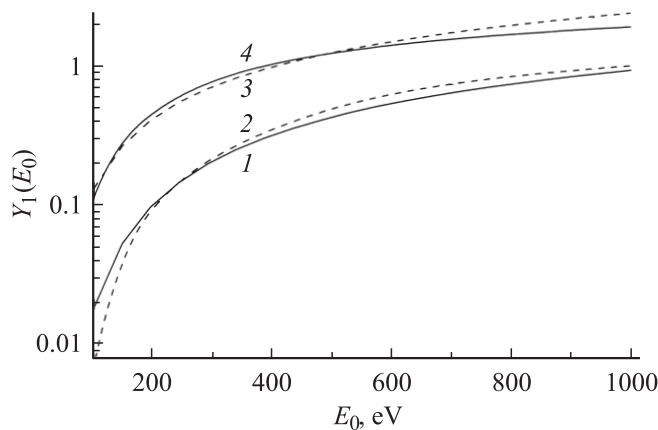


Рис. 4. Зависимости полных коэффициентов обратного самораспыления полубесконечных слоев от энергии первичного иона. 1, 2 — вольфрам, данные [11] и результаты расчетов соответственно; 3, 4 — никель, данные [11] и результаты расчетов соответственно.

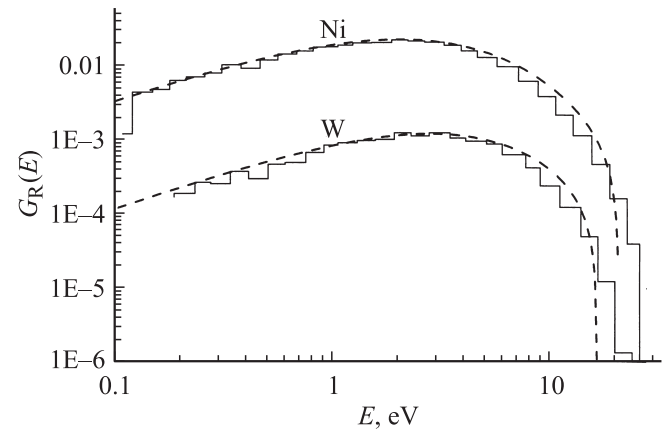


Рис. 5. Энергетические спектры обратного самораспыления полубесконечного слоя никеля (пунктир — расчет по (29), $\theta_0 = 0$). Сравнение с компьютерным экспериментом (сплошная кривая) [11].

что коэффициент самораспыления „на прострел“ пленок, являющихся полубесконечными с точки зрения обратного самораспыления может быть отличен от нуля, что видно из рис. 3.

На рис. 4 показаны полные коэффициенты самораспыления в верхнюю полуплоскость полубесконечного слоя в зависимости от начальной энергии. Поскольку в работе использовалось сечение рассеяния твердых шаров, не зависящее от энергии выбитой частицы, то удалось приближенно описать только возрастающий участок данного распределения. На рисунке приводится сравнение результатов, полученных в работе, с данными [11] для самораспыления вольфрама и никеля энергиями в диапазоне от 100 до 1000 eV. Как видно из графика, получено приемлемое согласие с результатами компьютерного моделирования.

Отметим, что результаты [11] в свою очередь успешно описали данные натуральных экспериментов [16,17]. На рис. 5 представлены рассчитанные энергетические спектры самораспыления никеля и вольфрама ионами с энергией 100 eV при нормальном угле влета ионов в полубесконечную мишень. Результаты расчетов приведены в сравнении с данными компьютерного эксперимента [11].

Найденные в работе выражения позволяют описывать как энергетические спектры самораспыления, так и полные коэффициенты самораспыления. Область применения выражений, полученных в работе, имеет ограничение по минимальной толщине пленки ($\tau > 2$), когда разбиение полного потока частиц на три дискретных потока оказывается несправедливым, и по максимальной энергии первичных ионов ($> 10^3$ eV). Для описания самораспыления слоев ионами высоких энергий необходимо применять более точные выражения для сечений однократного рассеяния (выбивания) атома.

Список литературы

- [1] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. Т. 1. 336 с.
- [2] *Sigmund P.* // Phys. Rev. 1969. Vol. 184. P. 377.
- [3] *Waldeer K.T., Urbassek H.M.* // Appl. Phys. A. 1988. Vol. 45. P. 207.
- [4] *Tolmachev A.I.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 1993. Vol. 83. P. 479.
- [5] *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии. М.: ИЛ, 1956. 431 с.
- [6] *Schuster A.* // Astrophys. J. 1905. Vol. 21. P. 1.
- [7] *Амбарцумян В.А.* // ЖЭТФ. 1943. Т. 13. С. 323.
- [8] *Dashen R.V.* // Phys. Rev. 1964. Vol. A134. P. 1025.
- [9] *Маринюк В.В., Ремизович В.С.* Изв. РАН. Сер. физ. 2006. Т. 64. С. 777.
- [10] *Манухин В.В.* // Tech. Phys. 2005. Vol. 50. N 4. P. 394.
- [11] *Eckstein W., Biersack J.P.* // Cond. Matt. 1986. Vol. 63. P. 109.
- [12] *Манухин В.В.* // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 8. С. 6.
- [13] *Камке Э.* Справочник по дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971. 576 с.
- [14] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984. 801 с.
- [15] *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. 175 с.
- [16] *Saidoh M., Sone K.* // Jpn. J. Appl. Phys. 1983. Vol. 22. P. 1361.
- [17] *Hechtel E., Bohdansky J., Roth J.* // J. Nucl. Mater. 1981. Vol. 103–104. P. 333.