01;02;11

Влияние неупругих потерь энергии на развитие каскадов атом-атомных столкновений

© В.В. Маринюк, В.С. Ремизович

Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет),
115409 Москва, Россия
e-mail: remixa@online.ru

(Поступило в Редакцию 12 июля 2000 г. В окончательной редакции 26 декабря 2000 г.)

Теоретически исследуется вопрос о влиянии неупругих потерь энергии (ионизационного торможения) частиц на развитие каскадов атом-атомных столкновений в бесконечной среде. Основное внимание уделено изучению угловых и энергетических распределений первичных ионов и каскадных атомов при наличии торможения. Аналитические расчеты проведены в предположении, что однократное рассеяние частиц происходит по закону твердых шаров, а значение электронной тормозной способности среды определяется формулой Линдхарда. Было показано, что учет торможения (непосредственно при решении транспортного уравнения Больцмана) принципиально изменяет полученные ранее угловые и энергетические спектры ионов и каскадных атомов. Более того, именно торможение является определяющим фактором, ответственным за анизотропию угловых распределений низкоэнергетических первичных ионов и каскадных атомов.

Введение

Существующие теории распыления аморфных материалов в режиме линейных каскадов базируются на решении транспортного уравнения Больцмана [1–4]. Основной успех в создании аналитических теорий распыления достигнут в пренебрежении всякими неупругими потерями энергии атомов [5–12]. Можно выделить три основных механизма неупругих потерь энергии атомов. Во-первых, потери энергии за счет столкновений с атомными электронами (ионизационное торможение). Для атомных частиц эти потери можно считать практически непрерывными. Во-вторых, потери энергии при пересечении атомами границы мишени за счет наличия поверхностного потенциального барьера. И в-третьих, дискретные потери энергии при выбивании каждого атома.

Зигмунд [5,6] предложил следующую приближенную процедуру учета ионизационного торможения атомов: энергетическое распределение распыленных атомов (полученное из решения транспортного уравнения в пренебрежении торможением) корректируется умножением на величину $\nu(T_0)/T_0$, представляющую собой долю начальной энергии атома T_0, которая идет на образование каскада атом-атомных столкновений. Другими словами, согласно Зигмунду, наличие ионизационного торможения приводит лишь к умножению конечного результата на постоянный множитель, не зависящий ни от энергии, ни от направления движения распыленных атомов. Позднее Вильямс корректно учел ионизационное торможение при вычислении полного числа смещенных атомов [13,14]. Было показано, что если учитывать ионизационное торможение непосредственно при решении транспортного уравнения, то полное число смещенных атомов оказывается конечным, в то время как без учета торможения это число бесконечно. Что касается второго и третьего механизмов неупругих потерь энергии, то способы их корректного учета изложены, например, в [1]. Однако они также не реализованы ни в одной из теорий [5–12].

Картина образования атомов в каскадах столкновений наиболее просто выглядит в бесконечной среде с источниками ионов, равномерно распределенными по всему объему мишени. В ряде работ именно такая постановка задачи использовалась для теоретического описания энергетического и углового распределений распыленных атомов [6–8] (так называемый равновесный спектр [1]). Для обратностепенных потенциалов межатомного взаимодействия ($V(r) \propto r^{-1/m}$) в отсутствие торможения равновесный спектр распыленных атомов пропорционален $1/T^{2-2m}$ (при $T \to 0$) [1,2,6] и не интегрируем при значениях параметра $m \leqslant 1/2$. Это обстоятельство приводит к бесконечному полному коэффициенту распыления, что говорит о неприменимости приближения равновесного спектра без учета неупругих потерь энергии к проблеме распыления. Обычно расходимость энергетических распределений атомов устраняется феноменологическим введением поверхностного потенциального барьера в конечном результате (полученном из решения транспортного уравнения без учета поверхностного барьера) [15]. Можно ожидать, однако, что при корректном учете неупругих потерь энергии вопроса о расходимости энергетического спектра атомов отдачи вообще не возникнет. Кроме того, представляет значительный интерес вопрос об анизотропии углового распределения выбитых атомов. Известно, что в отсутствие неупругих потерь энергии угловое распределение каскадных атомов изотропизуется с уменьшением энергии частиц. Именно этим обстоятельством обычно обосновывается приближение изотропных каскадов в теории распыления Зигмунда [2].

Таким образом, до сих пор остается открытым вопрос о влиянии неупругих потерь энергии частиц на формирование энергетических и угловых спектров атомов отдачи.

Данной работой мы хотим отчасти восполнить этот пробел и корректно учесть ионизационное торможение атомов непосредственно при решении транспортного уравнения Больцмана.

Постановка задачи

В соответствии с моделью, использованной Зигмундом [6], Розендалем и Сандерсом [7,8], будем предполагать, что источник ионов равномерно распределен по всему объему безграничной мишени так, что в единицу времени в единичном объеме испускается одна частица в направлении $\mathbf{\Omega}_0$ с энергией T_0. В этом случае дифференциальная плотность потока как рассеянных ионов $N_{\text{ion}}(\mathbf{\Omega}, T)$, так и выбитых атомов $N_{\text{rec}}(\mathbf{\Omega}, T)$ зависит от направления движения частиц $\mathbf{\Omega}$ и их энергии T и не зависит от пространственных координат (так называемый равновесный спектр [1]). Причем единичный вектор скорости частиц $\mathbf{\Omega}$ будем отсчитывать от направления испускания первичных ионов $\mathbf{\Omega}_0$. Тогда угловая зависимость величин $N_{\text{ion}}(\mathbf{\Omega}, T)$ и $N_{\text{rec}}(\mathbf{\Omega}, T)$ будет характеризоваться косинусом угла Θ между векторами $\mathbf{\Omega}$ и $\mathbf{\Omega}_0$ $(0 < \Theta < \pi)$

$$N_{\text{ion}}(\mathbf{\Omega}, T) \equiv N_{\text{ion}}(\mu, T), \quad N_{\text{rec}}(\mathbf{\Omega}, T) \equiv N_{\text{rec}}(\mu, T),$$

$$\mu = \cos\Theta = \mathbf{\Omega}_0\mathbf{\Omega}. \tag{1}$$

Для описания процесса неупругих потерь энергии ионов и атомов мы будем использовать хорошо известную модель непрерывного замедления [16]. Предполагая, кроме этого, что выбитые атомы взаимодействуют только с покоящимися атомами мишени (режим линейных каскадов [1–4]), мы можем записать для величин $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ и $N_{\text{rec}}(\mu, T)$ следующую систему транспортных уравнений Больцмана [1]:

$$w_{el}^{ia}(T)N_{\text{ion}} = \iiint d\mathbf{\Omega}' dT' w_1^{ia}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T) N_{\text{ion}}(\mu', T')$$

$$+\frac{\partial}{\partial T}\{\bar{\varepsilon}_{\text{ion}}(T) N_{\text{ion}}(\mu, T)\} + \frac{\delta(1-\mu)}{2\pi}\delta(T - T_0), \tag{2}$$

$$w_{el}^{aa}(T)N_{\text{rec}} = \iiint d\mathbf{\Omega}' dT' \{w_1^{aa}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T)$$

$$+ w_2^{aa}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T)\} N_{\text{rec}}(\mu', T')$$

$$+\frac{\partial}{\partial T}\{\bar{\varepsilon}_{\text{at}}(T) N_{\text{rec}}(\mu, T)\}$$

$$+\iiint d\mathbf{\Omega}' dT' w_2^{ia}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T) N_{\text{ion}}(\mu', T'). \tag{3}$$

В уравнениях (2), (3) введены следующие обозначения: w_{el}^{aa} (w_{el}^{ia}) — полная вероятность упругого рассеяния движущегося атома (иона) с энергией T на покоящемся атоме на единицу пути; $w_1^{aa(ia)}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T)$ — вероятность упругого рассеяния движущегося атома (иона) из состояния $(\mathbf{\Omega}', T')$ в состояние $(\mathbf{\Omega}, T)$ на единице пути; $w_2^{aa(ia)}(\mathbf{\Omega}', T' \to \mathbf{\Omega}, T)$ — вероятность атома (иона) с энергией T', двигающегося в направлении $\mathbf{\Omega}'$, выбить на единице пути атом с энергией T в направлении $\mathbf{\Omega}$; $\bar{\varepsilon}_{\text{ion(at)}}(T)$ — электроная тормозная способность среды для иона (атома) с энергией T. Величины $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ и $N_{\text{rec}}(\mu, T)$ определяют угловое и энергетическое распределения первичных ионов и выбитых атомов соответственно. Причем атомы могут как выбиваться первичными ионами, так и образовываться в каскадах атом-атомных стоклновений, которым в уравнении (3) отвечает член, содержащий вероятность w_2^{aa}.

Как видно из уравнения (2), вычисление плотности потока первичных ионов $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ является самостоятельной задачей и никак не связано с решением уравнения для атомов отдачи. Напротив, для нахождения плотности потока выбитых атомов $N_{\text{rec}}(\mu, T)$ необходимо в первую очередь определить величину $N_{\text{ion}}(\mu, T)$, которая входит в неоднородность в уравнении (3). Ситуация несколько упрощается в случае, когда первичные ионы являются частицами того же сорта, что и атомы мишени (самораспыление). В этом случае наряду с уравнением (2) для $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ удается получить замкнутое уравнение и для плотности потока всех атомов (как испущенных источником, так и образованных в каскадах)

$$N_{\text{at}}(\mu, T) = N_{\text{ion}}(\mu, T) + N_{\text{rec}}(\mu, T). \tag{4}$$

Далее мы рассмотрим только случай самораспыления. При самораспылении входящие в (2), (3) тормозные способности $\bar{\varepsilon}_{\text{ion}}(T)$ и $\bar{\varepsilon}_{\text{at}}(T)$, а также вероятности рассеяния ионов и атомов совпадают

$$\bar{\varepsilon}_{\text{ion}}(T) = \bar{\varepsilon}_{\text{at}}(T) = \bar{\varepsilon}(T), \tag{5a}$$

$$w_{1(2)}^{ia}(\dots) = w_{1(2)}^{aa}(\dots)$$

$$= n_0 \frac{d\sigma_{1(2)}}{d\mathbf{\Omega}}\left(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega}; T'\right)\delta(T - T'(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega})^2), \tag{5b}$$

$$w_{el}^{ia}(T) = w_{el}^{aa}(T) = n_0\sigma_{el}(T), \tag{5c}$$

где n_0 — концентрация атомов среды; $\sigma_{el}(T)$ — полное сечение упругого рассеяния атома; $d\sigma_1/d\mathbf{\Omega}$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния атома; $d\sigma_2/d\mathbf{\Omega}$ — дифференциальное сечение рассеяния атома отдачи. Наличие δ-функции в выражении (5b) является следствием законов сохранения энергии и импульса при упругом столкновении частиц [17].

Складывая почленно уравнения (2) и (3), с учетом (5a)–(5c) получаем следующее уравнение для величины $N_{\text{at}}(\mu, T)$:

$$n_0\sigma_{el}(T)N_{\text{at}}(\mu, T) = n_0 \int_T^{T_0} dT' \iint d\mathbf{\Omega}' \left\{\frac{d\sigma_1}{d\mathbf{\Omega}}(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}'; T')\right.$$

$$\left. + \frac{d\sigma_2}{d\mathbf{\Omega}}(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}'; T')\right\}\delta\left(T - T'(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}')^2\right) N_{\text{at}}(\mu', T')$$

$$+\frac{\partial}{\partial T}\{\bar{\varepsilon}(T) N_{\text{at}}(\mu, T)\} + \frac{\delta(1-\mu)}{2\pi}\delta(T - T_0). \tag{6}$$

Важно отметить, что для описания каскадов атом-атомных столкновений в случае самораспыления должна использоваться именно величина $N_{\rm at}(\mu, T)$ (4), поскольку выбитые атомы мишени не отличимы от первичных частиц, испущенных источником. Что касается плотности потока первичных ионов $N_{\rm ion}(\mu, T)$, то, как видно из (2) и (5,a)–(5,c), она удовлетворяет уравнению

$$n_0\sigma_{el}(T)N_{\rm ion}(\mu, T) = n_0\int\limits_T^{T_0} dT' \iint d\mathbf{\Omega}'\frac{d\sigma_1}{d\mathbf{\Omega}}(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}'; T')$$

$$\times\,\delta\left(T - T'(\mathbf{\Omega}\mathbf{\Omega}')^2\right)N_{\rm ion}(\mu' T')$$

$$+\frac{\partial}{\partial T}\left\{\bar\varepsilon(T)N_{\rm ion}(\mu, T)\right\} + \frac{\delta(1-\mu)}{2\pi}\delta(T - T_0). \qquad (7)$$

Величина $N_{\rm ion}(\mu, T)$, как и прежде, определяет угловой и энергетический спектры только первичных ионов, испущенных источником, без учета каскадных процессов в случае, когда массы иона и атома мишени равны. По разности величин $N_{\rm ion}(\mu, T)$ и $N_{\rm at}(\mu, T)$ можно судить, например, о влиянии торможения на эффективность размножения атомов в каскадах.

Решение основных интегродифференциальных уравнений

Прежде чем приступать к решению уравнений (6), (7), необходимо определить конкретный вид сечений упругого рассеяния $d\sigma_1$ и $d\sigma_2$ и электронной тормозной способности среды $\bar\varepsilon(T)$. Для теоретического описания процессов рассеяния и выбивания атомов наиболее часто используются два типа сечений упругого рассеяния. К первому типу относятся линдхардовские сечения рассеяния для обратно степенных потенциалов межатомного взаимодействия ($V(r) \propto r^{-1/m}$) [18]. Эти сечения, конечно, наиболее адекватно описывают процессы однократного рассеяния атомов, но в некоторых случаях очень сильно усложняют решение транспортного уравнения. В частности, при учете ионизационного торможения атомов не удается получить аналитическое решение транспортного уравнения Больцмана с линдхардовскими сечениями. Ко второму типу наиболее часто используемых сечений можно отнести сечение рассеяния твердых шаров. Это сечение хотя и не учитывает сильной анизотропии однократного рассеяния атомов, зато значительно расширяет круг аналитически решаемых задач [1,9,11]. Далее мы будем предполагать, что однократное рассеяние атомов происходит по закону твердых шаров

$$\frac{d\sigma_1}{d\mathbf{\Omega}}(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega}; T) = \frac{d\sigma_2}{d\mathbf{\Omega}}(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega}; T) = \frac{\sigma}{\pi}(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega})\eta(\mathbf{\Omega}'\mathbf{\Omega});$$

$$\sigma_{el}(T) = \sigma \qquad (8)$$

($\eta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\eta(x) = 0$ при $x < 0$).

Как видно из (8), одной из особенностей сечения твердых шаров является его независимость от энергии. Что касается электронной тормозной способности среды, то значение величины $\bar\varepsilon(T)$ для атомов средних энергий определяется формулой Линдхарда [19], которую можно записать в виде

$$\bar\varepsilon(T) = \frac{2\sqrt{T_0 T}}{R_0}, \quad R_0 \equiv R(T_0) = \int\limits_0^{T_0}\frac{dT}{\bar\varepsilon(T)}. \qquad (9)$$

Здесь R_0 — полный неупругий пробег атома с энергией T_0. Согласно стандартной процедуре [20], решение уравнений (6), (7) будем искать в виде разложения по полиномам Лежандра $P_l(\mu)$

$$N_{\rm ion}(\mu, T) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}N_{\rm ion}^{(l)}(T)P_i(\mu);$$

$$N_{\rm at}(\mu, T) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{4\pi}N_{\rm at}^{(l)}(T)P_l(\mu). \qquad (10)$$

Угловые моменты $N_{\rm ion}^{(l)}(T)$ и $N_{\rm at}^{(l)}(T)$ связаны с величинами $N_{\rm ion}(\mu, T)$ и $N_{\rm at}(\mu, T)$ обычными соотношениями

$$N_{\rm ion}^{(l)}(T) = 2\pi\int\limits_{-1}^{1} d\mu P_l(\mu)N_{\rm ion}(\mu, T);$$

$$N_{\rm at}^{(l)}(T) = 2\pi\int\limits_{-1}^{1} d\mu P_l(\mu)N_{\rm at}(\mu, T). \qquad (11)$$

Как видно из (15b), нулевые моменты $N_{\rm ion}^{(0)}(T)$ и $N_{\rm at}^{(0)}(T)$ определяют энергетические спектры рассеянных ионов и атомов отдачи соответственно, безотносительно к направлению движения частиц. Подставляя разложения (10) в уравнения (6), (7), нетрудно получить следующие интегродифференциальные уравнения для угловых моментов $N_{\rm ion}^{(l)}(T)$ и $N_{\rm at}^{(l)}(T)$:

$$n_0\sigma N_{\rm ion}^{(l)}(T) = n_0\sigma\int\limits_T^{T_0}\frac{dT'}{T'}P_l\left(\sqrt{T/T'}\right)N_{\rm ion}^{(l)}(T')$$

$$+\frac{d}{dT}\left\{\bar\varepsilon(T)N_{\rm ion}^{(l)}(T)\right\} + \delta(T - T_0), \qquad (12)$$

$$n_0\sigma N_{\rm at}^{(l)}(T) = 2n_0\sigma\int\limits_T^{T_0}\frac{dT'}{T'}P_l\left(\sqrt{T/T'}\right)N_{\rm at}^{(l)}(T')$$

$$+\frac{d}{dT}\left\{\bar\varepsilon(T)N_{\rm at}^{(l)}(T)\right\} + \delta(T - T_0), \qquad (13)$$

где величина $\bar\varepsilon(T)$ определяется выражением (9).

Уравнения (12), (13) в принципе позволяют рассчитать все угловые моменты $N_{\rm ion}^{(l)}(T)$ и $N_{\rm at}^{(l)}(T)$. Здесь мы ограничимся выражением только двух первых угловых моментов ($l = 0.1$). Этой информации вполне достаточно, чтобы судить как об особенностях энергетических распределений ионов и атомов ($N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$ и $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$), так и об анизотропии углового распределения частиц. Действительно, из разложений (10) видно, что средний косинус угла многократного рассеяния ионов и атомов определяется именно двумя первыми угловыми моментами функций $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ и $N_{\text{at}}(\mu, T)$

$$\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{ion})}_T = \frac{N^{(1)}_{\text{ion}}(T)}{N^{(0)}_{\text{ion}}(T)}, \quad \langle\cos\Theta\rangle^{(\text{at})}_T = \frac{N^{(1)}_{\text{at}}(T)}{N^{(0)}_{\text{at}}(T)}. \tag{14}$$

Понятно, что если величина $\langle\cos\Theta\rangle_T$ близка к единице, то угловое распределение частиц резко анизотропно и в разложениях (10) необходимо удерживать очень большое число членов. Если же $\langle\cos\Theta\rangle_T$ мал по сравнению с единицей, то распределение частиц практически изотропно и величины $N_{\text{ion}}(\mu, T)$ и $N_{\text{at}}(\mu, T)$ определяются своими нулевыми угловыми моментами.

Введем вместо угловых моментов $N^{(l)}_{\text{ion}}(T)$ и $N^{(l)}_{\text{at}}(T)$ новые неизвестные функции $F_l(\xi)$ и $\Phi_l(\xi)$ согласно равенствам:

$$N^{(l)}_{\text{ion}}(T) = \frac{R_0}{2\sqrt{T_0T}}F_l(\xi), \quad N^{(l)}_{\text{at}}(T) = \frac{R_0}{2\sqrt{T_0T}}\Phi_l(\xi),$$
$$\xi = \sqrt{T/T_0} \leqslant 1. \tag{15}$$

После этого, подставляя выражения (15) в уравнения (12), (13) и учитывая явный вид тормозной способности (9), получим следующие интегродифференциальные уравнения для $F_l(\xi)$ и $\Phi_l(\xi)$:

$$F_l(\xi) = 2\xi\int\limits_\xi^1 \frac{d\xi'}{\xi'^2}P_l(\xi/\xi')F_l(\xi') + (n_0\sigma R_0)^{-1}\frac{dF_l(\xi)}{d\xi}, \tag{16}$$

$$\Phi_l(\xi) = 4\xi\int\limits_\xi^1 \frac{d\xi'}{\xi'^2}P_l(\xi/\xi')\Phi_l(\xi') + (n_0\sigma R_0)^{-1}\frac{d\Phi_l(\xi)}{d\xi}, \tag{17}$$

где сингулярные слагаемые $\delta(1-\xi)$ в правых частях уравнений (16), (17) (соответствующие слагаемым $\delta(T - T_0)$ в уравнениях (12), (13)) мы заменили равнозначными граничными условиями

$$F_l(\xi = 1) = 1, \quad \Phi_l(\xi = 1) = 1. \tag{18}$$

Далее разделим уравнения для $F_0(\xi)$ и $\Phi_0(\xi)$ на ξ, а уравнения для $F_1(\xi)$ и $\Phi_1(\xi)$ — на ξ^2 и продифференцируем затем по ξ. В результате интегродифференциальные уравнения (16), (17) сводятся к обычным дифференциальным уравнениям второго порядка, решение которых не вызывает трудностей [21]. Окончательно для функций $F_l(\xi)$, $\Phi_l(\xi)$ ($l = 0.1$) получаем

$$F_0(\xi) = 1 - \lambda\xi^2 J^{(2)}(\xi;\lambda), \tag{19a}$$

$$F_1(\xi) = \frac{2(\lambda-1)}{\lambda^2} + \frac{\lambda^2\xi^2 - 2\lambda\xi + 2}{\lambda^2}\exp\{-\lambda(1-\xi)\}, \tag{19b}$$

$$\begin{aligned}\Phi_0(\xi) = {} & \frac{1}{12}\left(\lambda^2+6\lambda+6\right)\left(\lambda^2\xi^2+6\lambda\xi+2\right) \\ & - \frac{\lambda}{12}\xi^2\left(\lambda^2\xi^2+8\lambda\xi+12\right)\Big[(\lambda+4)\exp\{-\lambda(1-\xi)\} \\ & + \left(\lambda^2+6\lambda+6\right)J^{(2)}(\xi;\lambda)\Big],\end{aligned} \tag{20a}$$

$$\begin{aligned}\Phi_1(\xi) = {} & \frac{1}{3}(\lambda+3)(\lambda\xi+1) - \frac{\lambda}{3}\xi^3(\lambda\xi+4) \\ & \times\Big[\exp\{-\lambda(1-\xi)\} + (\lambda+3)J^{(3)}(\xi;\lambda)\Big],\end{aligned} \tag{20b}$$

где введены обозначения:

$$\lambda = n_0\sigma R_0, \tag{21}$$

$$\begin{aligned}J^{(n)}(\xi;\lambda) &= \int\limits_\xi^1 \frac{dt}{t^n}\exp\{-\lambda(t-\xi)\} \\ &= \lambda^{n-1}e^{\lambda\xi}\big[\Gamma(1-n;\lambda\xi) - \Gamma(1-n;\lambda)\big],\end{aligned} \tag{22}$$

где $\Gamma(a;y)$ — неполная гамма-функция [22].

Безразмерный параметр λ характеризует относительные вклады двух физических процессов в формирование углового и энергетического распределения частиц: торможения и рассеяния атомов. При $\lambda \ll 1$ преобладает торможение частиц, так что атомы вплоть до своей остановки отклоняются лишь на небольшие углы и, как следствие, выбивание атомов практически отсутствует ($F_l \approx \Phi_l \approx 1$ при $\lambda \ll 1$). Наоборот, при $\lambda \gg 1$ (слабое торможение) атомы интенсивно рассеиваются на большие углы и, следовательно, могут эффективно образовывать каскады атом-атомных столкновений.

Влияние торможения на угловые и энергетические распределения первичных ионов и каскадных атомов

Проанализируем сначала угловые и энергетические распределения частиц и отсутствие торможения ($\bar{\varepsilon}(T) = 0$). Как видно из (9), для этого нужно перейти в выражениях (19), (23), (24) к пределу $R_0 \to \infty$ ($\lambda \to \infty$)

$$N_{\text{ion}}(\mu, T{<}T_0; R_0{\to}\infty) = \frac{1}{4\pi n_0\sigma}\Big(\frac{1}{T} + 3\mu\frac{1}{\sqrt{T_0T}} + \dots\Big), \tag{23a}$$

$$N_{\text{at}}(\mu, T{<}T_0; R_0{\to}\infty) = \frac{1}{4\pi n_0\sigma}\Big(\frac{2T_0}{T^2} + 3\mu\frac{2\sqrt{T_0}}{T^{3/2}} + \dots\Big). \tag{23b}$$

Формула (23b) с точностью до общего численного множителя совпадает с результатом Розендаля и Сандерса (для низкоэнергетических атомов) для не зависящего от энергии линдхардовского сечения (параметр

$m = 0$) [7,8]. Как видно из (23a) и (23b), в отсутствие торможения энергетические спектры рассеянных ионов $N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$ и атомов отдачи $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$ не интегрируемы (расходятся $\propto 1/T$ и $1/T^2$ соответственно). Кроме того, из (23a), (23b) следует, что анизотропия углового распределения как рассеянных ионов, так и выбитых атомов исчезает при малых энергиях частиц (т.е. при $T \to 0$). Действительно, в отстутствие торможения средний косинус угла многократного рассеяния ионов и атомов с учетом (14) имеет вид

$$\langle\cos\Theta\rangle^{\text{ion}}_T = \langle\cos\Theta\rangle^{\text{at}}_T = \sqrt{\frac{T}{T_0}} \quad (R_0 \to \infty). \tag{24}$$

Полная анизотропия ионов и атомов при $T \to 0$ объясняется тем, что в отсутствие торможения частицы могут иметь энергию $T = 0$, только испытав бесконечное число столкновений.

Здесь следует отметить следующее обстоятельство. В отсутствие торможения энергетические спектры (23a), (23b) рассеянных ионов ($\propto 1/T$) и атомов отдачи ($\propto 1/T^2$) обусловлены предположением о независимости сечения рассеяния от энергии. Для зависящих от энергии линдхардовских сечений (с $m \neq 0$) в отсутствие торможения энергетические спектры рассеянных ионов и атомов отдачи (при $T \ll T_0$) пропорциональны $N^{(0)}_{\text{ion}}(T;m) \propto 1/T^{1-2m}$, $N^{(0)}_{\text{at}}(T;m) \propto 1/T^{2-2m}$ [1,2,6,7]. Что касается анизотропии угловых распределений частиц, то в отсутствие торможения она исчезает с уменьшением энергии атомов при любом значении параметра m в линдхардовском сечении ($0 \leqslant m \leqslant 1$) [7,8]. Следовательно, полная изотропизация низкоэнергетических распределений атомов связана именно с пренебрежением ионизационным торможением атомов и не зависит от вида сечения однократного рассеяния.

Обратимся теперь к результатам (15), (19), (20) и выясним, как влияет учет торможения на угловые и энергетические спектры рассеянных ионов и атомов отдачи. Выражения (15), (19), (20) справедливы во всем интервале энергий $0 < T < T_0$. На рис. 1, 2 представлены рассчитанные по формулам (15), (19),(20) энергетические спектры атомов отдачи $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$ и рассеянных ионов $N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$, а также зависимости средних косинусов $\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{at})}_T$ и $\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{ion})}_T$ от энергии для некоторых значений параметра λ. Для сравнения там же приведены указанные зависимости для случая чисто упругого рассеяния ($\lambda \to \infty$). Как видно из графиков, влияние торможения на энергетические спектры наиболее сильно проявляется в области низких энергий частиц. Чем меньше значение параметра λ (т.е. чем сильнее торможение), тем медленнее рост энергетических зависимостей $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$ и $N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$. Что касается влияния торможения на анизотропию угловых распределений частиц, то оно велико во всем интервале энергий $0 < T < T_0$. Заслуживает внимания тот факт, что угловые и энергетические распределения рассеянных ионов и атомов отдачи с увеличением параметра λ достаточно медленно стремятся к своим предельным значениям для случая чисто упругого рассеяния (сравните графики для $\lambda = 10$ и $\lambda = \infty$).

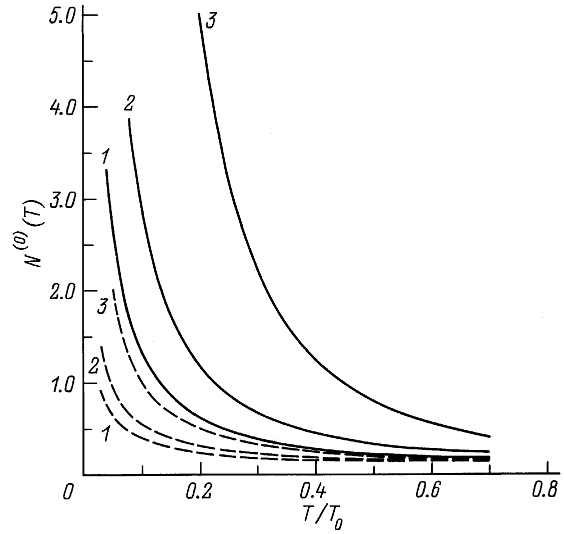

Рис. 1. Рассчитанные по формулам (19), (23), (24) энергетические спектры рассеянных ионов $N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$ (штриховые кривые) и атомов отдачи $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$ (сплошные кривые). Энергия измеряется в единицах T_0; $N^{(0)}_{\text{ion}}(T)$, $N^{(0)}_{\text{at}}(T)$ — в произвольных единицах. $\lambda = 5$ (*1*), 10 (*2*), ∞ (*3*) (отсутствие торможения, $N^{(0)}_{\text{ion}}(T) \sim 1/T$, $N^{(0)}_{\text{at}} \sim 1/T^2$).

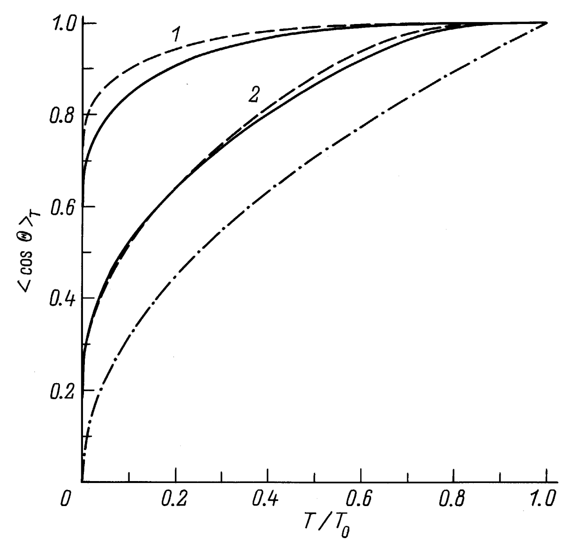

Рис. 2. Рассчитанные по формулам (18), (19), (23), (24) зависимости средних косинусов углов многократного рассеяния ионов $\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{ion})}_T$ (штриховые кривые) и атомов отдачи$\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{at})}_T$ (сплошные кривые) от приведенной энергии T/T_0. $\lambda = 1$ (*1*), 10 (*2*), ∞ (штрихпунктир) (отсутствие торможения), $\langle\cos\Theta\rangle^{(\text{ion})}_T = \langle\cos\Theta\rangle^{(\text{at})}_T = \sqrt{T/T_0}$.

Основной интерес, однако, представляют распределения низкоэнергетических частиц, так как именно в области малых энергий проявляется расходимость энергетических спектров атомов и исчезает анизотропия угловых распределений. Устремляя $T/T_0 \to 0$, из выражений (15), (19), (20) находим

$$N_{\mathrm{ion}}(\mu; T \ll T_0) \approx \frac{R_0}{2\sqrt{T_0 T}} \left(1 + 3\mu \frac{2(\lambda + e^{-\lambda} - 1)}{\lambda^2} + \ldots\right), \quad (25)$$

$$N_{\mathrm{at}}(\mu; T \ll T_0) \approx \frac{R_0}{2\sqrt{T_0 T}} \left(\frac{\lambda^2 + 6\lambda + 6}{6} + 3\mu \frac{\lambda + 3}{3} + \ldots\right). \quad (26)$$

Как видно из (25), (26), ионизационное торможение принципиально изменяет энергетический и угловой спектр как первичных ионов, так и атомов отдачи. Учет торможения устраняет расходимость низкоэнергетических спектров, т. е. превращает неинтегрируемые энергетические спектры (23a), (23b) в интегрируемые (25), (26). Зависимости $N_{\mathrm{ion}}(\mu; T \ll T_0)$ и $N_{\mathrm{at}}(\mu; T \ll T_0)$ от энергии $\propto 1/\sqrt{T}$. Кроме того, если в отсутствие торможения учет каскадов изменяет низкоэнергетический спектр частиц с $1/T$ на $1/T^2$ [1], то при наличии торможения энергетические спектры ионов и атомов отдачи (при $T \ll T_0$) обнаруживают одинаковую функциональную зависимость $\propto 1/\sqrt{T}$. И наконец, наличие ионизационного торможения не позволяет частицам полностью изотропироваться. Действительно, средние косинусы углов многократного рассеяния низкоэнергетических ионов и атомов, согласно (14) и (25), (26), равны

$$\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{ion})}_{T\to 0} = \frac{2(\lambda + e^{-\lambda} - 1)}{\lambda^2},$$

$$\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{at})}_{T\to 0} = \frac{2(\lambda + 3)}{\lambda^2 + 6\lambda + 6}. \quad (27)$$

Величина $\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{ion})}_{T\to 0}$ больше, чем $\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{at})}_{T\to 0}$, при любых значениях параметра λ. Это означает, что угловое распределение низкоэнергетических атомов каскада всегда более изотропно, чем угловое распределение низкоэнергетических первичных ионов. Как видно из (27), при $\lambda \sim 1$ угловые распределения низкоэнергетических ионов и атомов отдачи существенно анизотропны. В этом случае наличие торможения мешает изотропизации каскада и в разложениях (10) для $N_{\mathrm{ion}}(\mu, T)$ и $N_{\mathrm{at}}(\mu, T)$ необходимо удерживать большое число членов. С увеличением λ угловые распределения низкоэнергетических ионов и атомов отдачи приближаются к изотропным. При больших значениях λ средние косинусы $\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{ion})}_{T\to 0}$, $\langle \cos\Theta \rangle^{(\mathrm{at})}_{T\to 0}$ стремятся к нулю, но остаются конечными при любом сколь угодно большом значении λ. Другими словами, наличие даже слабого торможения приводит к тому, что анизотропия углового распределения ионов и атомов отдачи не исчезает полностью с уменьшением энергии частиц.

Заключение

Основываясь на решении транспортного уравнения Больцмана в приближении бесконечной среды (с равномерно распределенным по всему объему источником ионов), показано, что учет ионизационного торможения (непосредственно в самом уравнении) принципиально изменяет энергетические и угловые распределения как первичных ионов, так и атомов отдачи. Для не зависящего от энергии сечения рассеяния твердых шаров в случае равных масс ионов и атомов получены следующие новые результаты.

1. Наличие торможения превращает расходящиеся энергетические спектры первичных ионов и атомов отдачи ($\propto 1/T$ и $1/T^2$ соответственно) в интегрируемые ($\propto 1/\sqrt{T}$ при $T \ll T_0$). Это говорит о том, что низкоэнергетические распределения ионов и атомов определяются зависимостью от энергии не только сечения рассеяния частиц, но и электронной тормозной способности среды $\bar{\varepsilon}(T)$.

2. При учете торможения низкоэнергетические части спектров первичных ионов и атомов отдачи ($T \ll T_0$) обнаруживают одинаковую функциональную зависимость от энергии ($\propto 1/\sqrt{T}$). Это обстоятельство косвенно подтверждает тот факт, что при наличии торможения число атомов в каскаде, инициированном одним первичным ионом, конечно [13,14].

3. Наличие торможения не допускает полной изотропизации угловых распределений первичных ионов и атомов отдачи при малых энергиях частиц, в то время как в отсутствие торможения угловое распределение стремится к изотропному при $T/T_0 \to 0$. Более того, именно торможение является определяющим фактором, ответственным за анизотропию угловых спектров ионов и выбитых атомов.

Поскольку процесс каскадообразования атомов является одним из основных механизмов распыления [2,3], то проведенные выше теоретические исследования убедительно показывают необходимость учета ионизационного торможения при расчетах угловых и энергетических спектров распыленных атомов.

Авторы глубоко признательны Е.С. Машковой за постоянный интерес к работе и критические замечания.

Список литературы

[1] *Williams M.M.R.* // Progress in Nuclear Energy. 1979. Vol. 3. P. 1–65.

[2] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.

[3] Фундаметнальные и прикладные аспекты распыления твердых тел. Сб. статей / Под ред. Е.С. Машковой. М.: Мир, 1989. 349 с.

[4] *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* // Поверхность. 1995. № 3. С. 5–25.

[5] *Sigmund P.* // Phys. Rev. 1969. Vol. 184. P. 383–417.

[6] *Sigmund P.* // Rev. Roum. Phys. 1972. Vol. 17. Pp. 823–847, 969–992, 1079–1094.

[7] *Sanders J.B., Roosendaal H.E.* // Rad. Eff. 1975. Vol. 24. P. 161–172.

[8] *Roosendaal H.E., Sanders J.B.* // Rad. Eff. 1980. Vol. 52. P. 137–144.

[9] *Waldeer K.T., Urbassek H.M.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 1987. Vol. 18. P. 518–524.
[10] *Waldeer K.T., Urbassek H.M.* // Appl. Phys. A. 1988. Vol. 45. P. 207–215.
[11] *Williams M.M.R.* // Phil. Mag. A. 1981. Vol. 43. P. 1221–1234.
[12] *Толмачев А.И.* // Поверхность. 1994. № 8. С. 102–106.
[13] *Williams M.M.R.*// J. Phys. D. 1978. Vol. 11. P. 801–821.
[14] *Williams M.M.R.* // Rad. Eff. 1976. Vol. 30. P. 47–54.
[15] *Thompson M.W.* // Phil. Mag. 1968. Vol. 18. P. 377–385.
[16] *Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И.* Столкновение быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
[17] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1988. 216 с.
[18] *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M.* // K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 1968. Vol. 36. N 10.
[19] *Lindhard J., Scharff M.* // Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 128–130.
[20] *Дэвисон Б.* Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960. 520 с.
[21] *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976. 576 с.
[22] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.