

01;02;05

## Принципы инвариантного погружения в задаче о самораспылении твердых тел

© В.В. Манухин

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

(Поступило в Редакцию 20 мая 2004 г. В окончательной редакции 8 сентября 2004 г.)

Принципы инвариантного погружения применены к описанию явления самораспыления твердых тел. Получены интегральные уравнения, описывающие поток распыленных атомов с учетом граничных условий. Получены приближенные решения интегрального уравнения для функции, описывающей энергетические и угловые спектры атомов, вылетающих с поверхности материала, в случае самораспыления.

Принципы инвариантного погружения впервые были предложены В.А. Амбарцумяном для решения проблемы рассеяния света в мутной среде [1]. Уравнения, получаемые при использовании данного подхода, содержат в себе граничные условия, что является основным преимуществом этого метода. Кроме того, получаемые уравнения описывают величины, которые непосредственно измеряются в эксперименте.

Применение принципов инвариантного погружения при описании пропускания и отражения света и заряженных частиц от слоев различных материалов [1–3] позволило сделать существенный шаг в развитии теории рассеяния заряженных частиц в твердых телах.

При использовании принципов инвариантного погружения в распылении, как и в случаях описания характеристик рассеяния заряженных частиц твердым телом (пропускание и отражение), необходимо учитывать условие: рассматриваемые флюенсы бомбардирующих ионов должны быть таковыми, чтобы за время анализа не происходило существенного изменения поверхности материала.

Пусть параллельный моноэнергетический пучок частиц с энергией  $E_0$  падает на плоскопараллельную мишень толщиной  $z_0$  в направлении  $\Omega_0 = \{\mu_0, \varphi_0\}$  (нормаль направлена внутрь материала). Полный поток частиц —  $N_0^a$ . Поскольку мы рассматриваем явление самораспыления, т. е. бомбардировку мишени частицами того же вида, что и составляющие ее атомы, то распыленные и распыленные частицы будут принципиально неразличимы.

Обозначим восходящую часть дифференциальной плотности потока атомов на поверхности мишени через  $N_{\text{out}}^a(z=0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$ , а нисходящую часть дифференциальной плотности потока атомов на глубине  $z_0$  через  $N_{\text{in}}^a(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$ . Введем вспомогательные функции самораспыления  $G(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  и пропускания  $T_a(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$ , описывающие энергетические и угловые спектры атомов на поверхности мишени и связанные с дифференциальной плотностью

потока атомов следующими соотношениями [4,5],

$$G(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \frac{\mu}{N_0^a} N_{\text{out}}^a(z=0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi), \quad (1)$$

$$T_a(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \frac{\mu}{N_0^a} N_{\text{in}}^a(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi). \quad (2)$$

Здесь  $\mu_0 = \cos(\theta_0)$ ;  $\mu = \cos(\theta)$ ;  $\theta_0$  и  $\theta$  — полярные углы;  $\varphi_0$  и  $\varphi$  — азимутальные углы. Описывая процессы, приводящие к распылению атомов мишени, можно сформулировать следующие принципы [4].

1) Плотность восходящего потока атомов на некотором уровне  $z$  является результатом распыления (и рассеяния) атомов слоя толщиной  $(z_0 - z)$ , расположенного ниже  $z$ , нисходящим потоком атомов

$$N_{\text{out}}^a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \frac{1}{4\pi\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{in}}^a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_1) \times G(z_0 - z, E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi) d\mu_1 d\varphi_1 dE_1. \quad (3)$$

2) Плотность нисходящего потока атомов на некотором уровне  $z$  является результатом распыления (и рассеяния) атомов слоя толщиной  $z$ , расположенного выше  $z$ , восходящим потоком атомов и пропускания атомов слоем толщиной  $z$ , расположенным выше  $z$ ,

$$N_{\text{in}}^a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \frac{N_0^a}{4\mu} T_a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) + \frac{1}{4\pi\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{out}}^a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_1) \times G(z, E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi) d\mu_1 d\varphi_1 dE_1. \quad (4)$$

3) Плотность восходящего потока атомов на поверхности мишени является результатом прохождения (с учетом выбивания атомов) слоя толщиной  $z$  атомами, приходящими к поверхности  $z$  снизу,

$$N_{\text{out}}^a(z=0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \frac{1}{4\pi\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{in}}^a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_1) \times T_a(z, E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi) d\mu_1 d\varphi_1 dE_1. \quad (5)$$

Графическое представление вышеперечисленных принципов приведено на рис. 1.

Ранее рядом авторов [6,7] было показано, что распыление — это поверхностное явление, поэтому необходимо точно и правильно учитывать граничные условия. Предположим наличие на поверхности материала плоского

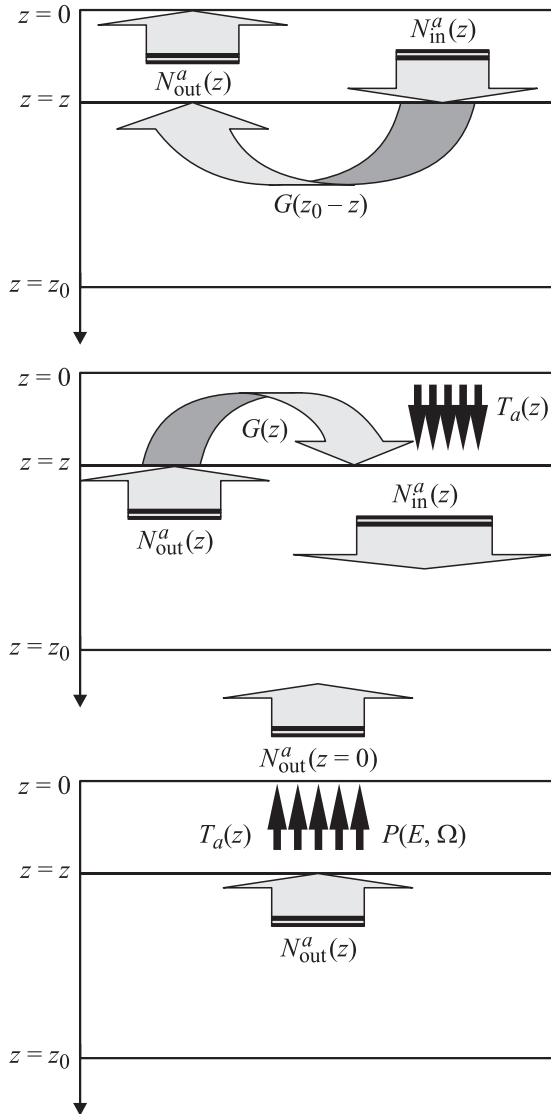


Рис. 1. Графическая интерпретация принципов инвариантного погружения.

потенциального барьера. Поскольку законы, описывающие движение атома в твердом теле и в области потенциального барьера, будут различны, то удобно представить распыляемую мишень как двухслойную (рис. 1). Тогда, согласно принципу 3, выходящий поток атомов можно рассматривать как результат пропуска атомов „слоем“ потенциального барьера, приходящих к поверхности этого слоя снизу. Используя математическую запись этого принципа, функцию самораспыления можно определить следующим образом:

$$S(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = \mu \cdot \iiint G(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_0) \times P(E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi) dE_1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} d\varphi_1. \quad (6)$$

Здесь  $P(E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi)$  — функция, определяющая вероятность для атома, имеющего на поверхности энергию  $E_1$  и движущегося в направлении  $\Omega = \{\mu_1, \varphi_1\}$  от поверхности, преодолеть барьер и вылететь с поверхности с энергией  $E$  и в направлении  $\Omega = \{\mu, \varphi\}$  [6]

$$P(E_1, \Omega_1; E, \Omega) = \delta(E + U - E_1) \delta(\varphi - \varphi_1) \times \delta\left(\cos\theta - \left[\left(1 + \frac{U}{E}\right) \cos^2\theta_1 - \frac{U}{E}\right]^{1/2}\right), \quad (7)$$

где  $\delta()$  — дельта-функция Дирака,  $U$  — энергия поверхностной связи атомов.

Поскольку функция  $G(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  описывает энергетические и угловые спектры атомов еще не преодолевших поверхностный потенциальный барьер, а функция  $S(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  характеризует реально измеряемые энергетические и угловые спектры распыленных атомов, то далее будем называть  $S(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  — функцией самораспыления, а  $G(z_0, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  — вспомогательной функцией самораспыления.

Аналитические процедуры определения неизвестной функции  $G(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  из уравнения переноса с использованием принципов инвариантности приведены в [4]. В данном случае используем метод, предложенный Амбарцумяном [1] для задачи рассеяния света и развитый Афанасьевым [3] для задач рассеяния заряженных частиц. Применение этого феминологического метода объясняется тем, что он более нагляден и приводит к тем же результатам, что и метод [4].

Увеличим толщину слоя бомбардируемой мишени, добавив сверху слой такой толщины  $dz$ , что в нем может произойти не более одного столкновения движущейся частицы с покоящимися атомами (считаем, что происходят только парные соударения и движущиеся частицы не взаимодействуют друг с другом). Тогда вспомогательная функция самораспыления  $G(\dots)$  изменится на величину, определяемую процессами, приведенными на рис. 2, где светлый кружок и символ  $\omega$  соответствуют рассеянию

частицы, а темный кружок и символ  $\delta$  соответствуют выбиванию атома.

Считаем, что изменение вспомогательной функции самораспыления  $G(z + dz, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) - G(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  будет пропорционально  $dz$ . В таком случае она может быть представлена математическим выражением (в символьной форме), которое является отображением процессов, представленных на рис. 2, а,

$$\frac{G(z + dz) - G(z)}{n \cdot dz} = - \left( \frac{\Sigma(E_0)}{\mu_0} + \frac{\Sigma(E)}{\mu} \right) G + \omega^b + \mathbf{G} \cdot \omega + \omega \cdot \mathbf{G} + \mathbf{G} \cdot \omega^b \cdot \mathbf{G}. \quad (8)$$

В формулах приняты следующие обозначения:  $z$  — толщина мишени;  $n$  — концентрация атомов в мишени;  $\Sigma(E)$  — полное суммарное сечение упругого и неупругого рассеяния атома на атоме;  $\omega(E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  — суммарное дифференциальное сечение упругого рассеяния, неупругого рассеяния и выбивания атома;  $\omega^b(E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  — суммарное дифференциальное сечение обратного упругого рассеяния и обратного выбивания атома. Величины, записанные выделенным шрифтом, представляют собой интегральные операторы, например,

$$\begin{aligned} \omega \mathbf{G} &= \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \omega(E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_1) \cdot G(z, E_1, \mu_1, \varphi_1; E, \mu, \varphi), \\ \mathbf{G} \omega^b \mathbf{G} &= \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_E^{E_0} dE_2 \\ &\times \int_0^1 \frac{d\mu_2}{\mu_2} \int_0^{2\pi} d\varphi_2 G(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E_1, \mu_1, \varphi_1) \\ &\times \omega^b(E_1, \mu_1, \varphi_1; E_2, \mu_2, \varphi_2) \cdot G(z, E_2, \mu_2, \varphi_2; E, \mu, \varphi). \end{aligned} \quad (9)$$

Если же мы увеличиваем толщину мишени  $z$ , добавляя слой  $dz$  снизу мишени, то изменение вспомогательной функции самораспыления будет определяться процессами, показанными на рис. 2, б. Математически это изменение может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} &\frac{G(z + dz) - G(z)}{n \cdot dz} \\ &= \exp\left(-\frac{z\Sigma(E_0)n}{\mu_0}\right) \left[ \omega^b \exp\left(-\frac{z\Sigma(E)n}{\mu}\right) + \omega^b \mathbf{T}_a \right] \\ &+ \mathbf{T}_a \omega^b \exp\left(-\frac{z\Sigma(E)n}{\mu}\right) + \mathbf{T}_a \omega^b \mathbf{T}_a. \end{aligned} \quad (10)$$

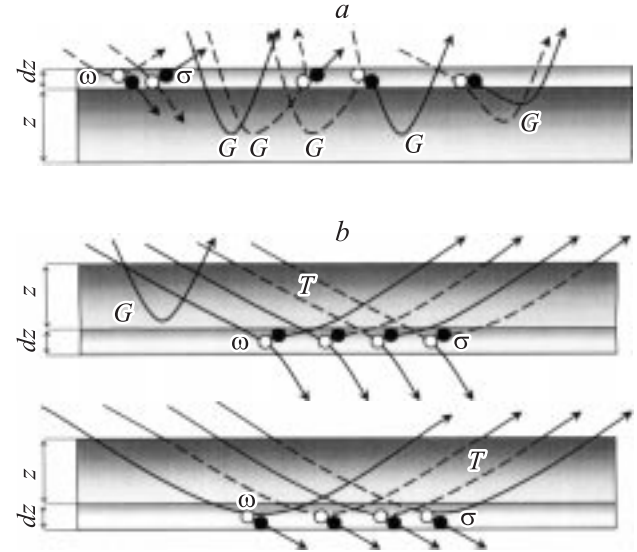


Рис. 2. Схематичное представление процессов, приводящих к изменению функции самораспыления при добавлении слоя толщиной  $dz$ : а — сверху, б — снизу.

Учитывая, что оба изменения толщины произведены на одну и ту же величину, то и изменение вспомогательной функции самораспыления будет эквивалентным. Основываясь на этом утверждении, можно получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} &G(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) \cdot \left( \frac{\Sigma(E_0)}{\mu_0} + \frac{\Sigma(E)}{\mu} \right) \\ &= \omega \mathbf{G} + \mathbf{G} \omega - \mathbf{T}_a \omega^b \exp\left(-n \cdot z \frac{\Sigma(E)}{\mu}\right) \\ &+ \omega^b(E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) \\ &\times \left[ 1 - \exp\left(-n \cdot z \left( \frac{\Sigma(E_0)}{\mu_0} + \frac{\Sigma(E)}{\mu} \right) \right) \right] \\ &- \omega^b \mathbf{T}_a \exp\left(-n \cdot z \frac{\Sigma(E_0)}{\mu_0}\right) + \mathbf{G} \omega^b \mathbf{G} - \mathbf{T}_a \omega^b \mathbf{T}_a. \end{aligned} \quad (11)$$

В этом уравнении, так же как в (4), величины, записанные выделенным шрифтом, представляют собой интегральные операторы.

В уравнение (11) входит функция пропускания  $T_a(z, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$ , для которой также необходимо записать уравнение. Однако поскольку в дальнейшем мы будем рассматривать полубесконечные мишени ( $z \rightarrow \infty$ ), а  $T_a(z \rightarrow \infty, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = 0$ , то в данной работе этого делать не будем.

В случае распыления (самораспыления) полубесконечной ( $z \rightarrow \infty$ ) мишени спектры обратно распыленных атомов будут описываться уравнением (в приближении

плоской геометрии)

$$\begin{aligned}
G(E_0, \mu_0; E, \mu) & \left( \frac{\Sigma(E_0)}{\mu_0} + \frac{\Sigma(E)}{\mu} \right) = \omega(E_0, \mu_0; E, \mu) \\
& + \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \omega(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \cdot G(E_1, \mu_1; E, \mu) \\
& + \frac{1}{\mu_0} \int_E^{E_0} dE_1 \omega_{in}(E_0; E_1) \cdot G(E_1, \mu_0; E, \mu) \\
& + \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} G(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \cdot \omega(E_1, \mu_1; E, \mu) \\
& + \frac{1}{\mu} \int_E^{E_0} dE_1 G(E_0, \mu_0; E_1, \mu) \cdot \omega_{in}(E_1; E) \\
& + \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \int_E^{E_0} dE_2 \int_0^1 \frac{d\mu_2}{\mu_2} G(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \\
& \times \omega(E_1, \mu_1; E_2, \mu_2) \cdot G(E_2, \mu_2; E, \mu). \quad (12)
\end{aligned}$$

Здесь и далее вместо функции  $G(z \rightarrow \infty, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi)$  будем использовать обозначение  $G(E_0, \mu_0; E, \mu)$  (в приближении плоской геометрии аргумент  $\varphi$  исчезает), а вместо функции  $S(z \rightarrow \infty, E_0, \mu_0, \varphi_0; E, \mu, \varphi) = S(E_0, \mu_0; E, \mu)$ .

При написании этого уравнения предполагалось, что взаимодействие может проходить по двум независимым каналам: упругому и неупругому, которые описываются соответственно упругим  $\omega$  и неупругим  $\omega_{in}$  сечениями взаимодействия; суммарное дифференциальное сечение упругого рассеяния и выбивания атома (упругая часть  $\omega$ ), а также суммарное дифференциальное сечение обратного упругого рассеяния и обратного выбивания атома  $\omega^b$  определяются одним и тем же упругим сечением взаимодействия  $\omega(E_0, \mu_0; E, \mu)$ .

Поскольку упругое сечение взаимодействия включает в себя сечение упругого рассеяния  $\omega_{sc}$  и сечение упругого выбивания атома  $\omega_r$ , то его можно представить в виде

$$\begin{aligned}
\omega(E_0, \mu_0; E, \mu) & = [\omega_{sc}(E_0, \mu_0; E, \mu) + \omega_r(E_0, \mu_0; E, \mu)] \\
& \times \delta \left( \cos(\theta - \theta_0) - \sqrt{\frac{E}{E_0}} \right). \quad (13)
\end{aligned}$$

Необходимо отметить, что уравнения, описывающие вспомогательную функцию самораспыления  $G(\dots)$ , с точностью до обозначений совпадают с уравнениями, описывающими спектры отраженных и прошедших слоев вещества частиц [8], поэтому можно воспользоваться ранее разработанными [9] методами решения таких уравнений.

В настоящее время решить уравнение (12) в общем виде не представляется возможным. Однако, используя ряд приближений, можно получить решения, правильно описывающие закономерности самораспыления.

Как известно из экспериментов по распылению [10], большая часть выбитых атомов покидают поверхность мишени с низкими энергиями. Учитывая этот факт и ограничиваясь областью низких энергий, будем искать решения уравнения (12), используя сечение рассеяния твердых шаров для описания упругого взаимодействия атомов. В этом случае сечение упругого рассеяния и сечение упругого выбивания атомов будут описываться одинаковыми выражениями

$$\omega_{sc}(E_0, \mu_0; E, \mu) = \omega_r(E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{\Sigma_{el}}{E_0}. \quad (14)$$

При этом полное сечение упругого рассеяния  $\Sigma_{el}$  не будет зависеть от энергии. Предположим также, что сечение неупругого взаимодействия не зависит от начальной энергии и может быть представлено в виде

$$\omega_{in}(E_0, E) = \Sigma_{in} \cdot \omega_{in}(E_0 - E). \quad (15)$$

Учитывая все выше сказанное, уравнение (12) можно переписать в более простом виде

$$\begin{aligned}
G(E_0, \mu_0; E, \mu) & \cdot \left( \frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right) \cdot (\Sigma_{el} + \Sigma_{in}) \\
& = \frac{2\Sigma_{el}}{E_0} \delta \left( \cos(\theta - \theta_0) - \sqrt{\frac{E}{E_0}} \right) + \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \frac{2\Sigma_{el}}{E_0} \\
& \times \delta \left( \cos(\theta_1 - \theta_0) - \sqrt{\frac{E_1}{E_0}} \right) \cdot G(E_1, \mu_1; E, \mu) + \int_E^{E_0} dE_1 \\
& \times \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} G(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \frac{2\Sigma_{el}}{E_1} \delta \left( \cos(\theta - \theta_1) - \sqrt{\frac{E}{E_1}} \right) \\
& + \frac{\Sigma_{in}}{\mu_0} \int_E^{E_0} dE_1 \omega_{in}(E_0 - E_1) \cdot G(E_1, \mu_0; E, \mu) \\
& + \frac{\Sigma_{in}}{\mu} \int_E^{E_0} dE_1 G(E_0, \mu_0; E_1, \mu) \cdot \omega_{in}(E_1 - E) \\
& + \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1} \int_E^{E_0} dE_2 \int_0^1 \frac{d\mu_2}{\mu_2} G(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \\
& \times \frac{2\Sigma_{el}}{E_1} \delta \left( \cos(\theta_2 - \theta_1) - \sqrt{\frac{E_2}{E_1}} \right) \cdot G(E_2, \mu_2; E, \mu). \quad (16)
\end{aligned}$$

Будем искать вспомогательную функцию самораспыления в виде

$$E_0 \cdot G(E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{\mu_0 \mu}{\mu_0 + \mu} G_u(u, \mu_0, \mu), \quad (17)$$

введя новую переменную  $u = \ln(E_0/E)$ . Тогда уравнение для функции  $G_u$  запишется в виде

$$\begin{aligned} G_u(u, \mu_0, \mu) \cdot (1 + \lambda) &= 2\delta\left(\cos(\theta - \theta_0) - \exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right) \\ &+ 2\mu \int_0^u du_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1 + \mu} \delta\left(\cos(\theta_1 - \theta_0) - \exp\left(-\frac{u_1}{2}\right)\right) \\ &\times G_u(u - u_1, \mu_1, \mu) + 2\mu_0 \int_0^u du_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1 + \mu_0} \\ &\times G_u(u_1, \mu_0, \mu_1) \cdot \delta\left(\cos(\theta - \theta_1) - \exp\left(-\frac{u - u_1}{2}\right)\right) \\ &+ \frac{\lambda \cdot \mu}{\mu_0 + \mu} \int_0^u du_1 \omega_{in}(u_1) \cdot G_u(u - u_1, \mu_0, \mu) \\ &+ \frac{\lambda \cdot \mu_0}{\mu_0 + \mu} \int_0^u du_1 G_u(u_1, \mu_0, \mu) \cdot \omega_{in}(u - u_1) \\ &+ 2\mu_0 \mu \int_0^u du_1 \int_0^1 \frac{d\mu_1}{\mu_1 + \mu_0} \int_0^u du_2 \int_0^1 \frac{d\mu_2}{\mu_2 + \mu} G_u(u_1, \mu_0, \mu_1) \\ &\times \delta\left(\cos(\theta_2 - \theta_1) - \exp\left(-\frac{u_2 - u_1}{2}\right)\right) \cdot G_u(u - u_2, \mu_2, \mu), \end{aligned} \quad (18)$$

где  $\lambda = \Sigma_{in}/\Sigma_{el}$ ,  $\omega_{in}(u) = E_0 \omega_{in}(E_0 - E)$ .

Далее, учитывая, что в случае столкновения частиц равной массы (мы рассматриваем самораспыление) угол рассеяния как выбитой, так и рассеянной частицы не может быть более  $\pi/2$ , а функция самораспыления определена на интервале углов  $0 \leq \mu_0 \leq 1$ ,  $0 \leq |\mu| \leq 1$ , используем разложение функций по полиномам Якоби  $\psi_n(x)$  [11], ортогональным на интервале  $(0, 1)$ ,

$$G_u(u, \mu_0, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} g_u(u) \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu), \quad (19)$$

$$\begin{aligned} &\delta\left(\cos(\theta - \theta_0) - \exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (2n + 1) \psi_n\left(\exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right) \cdot \psi_n(\mu_0) \cdot \psi_n(\mu). \end{aligned} \quad (20)$$

Такие разложения оказываются возможными, поскольку многочлены Якоби являются частным случаем матричных элементов представлений группы унитарных

матриц второго порядка [12]. Подставим эти разложения в уравнение (18). Если использовать приближение „многократной смены нормали“ [9]

$$\frac{1}{\mu + \mu_1} \approx \frac{1}{2\mu}, \quad (21)$$

то интегрирование по переменной  $\mu_1$  легко выполняется с учетом ортогональности полиномов Якоби

$$\int_0^1 \psi_n(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m} \frac{1}{2n + 1}, \quad (22)$$

где  $\delta_{n,m}$  — символ Кронекера.

В результате оказывается возможным записать уравнение для коэффициентов разложения по полиномам

$$\begin{aligned} g_n(u) \cdot (1 + \lambda) &= 2(2n + 1) \psi_n\left(\exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right) \\ &+ 2 \int_0^u du_1 g_n(u_1) \psi_n\left(\exp\left(-\frac{u - u_1}{2}\right)\right) \\ &+ \lambda \int_0^u du_1 \omega_{in}(u_1) \cdot g_n(u - u_1) + \frac{1}{2(2n + 1)} \\ &\times \int_0^u \int_0^u du_1 du_2 g_n(u_1) \psi_n\left(\exp\left(-\frac{u_2 - u_1}{2}\right)\right) g_n(u - u_2). \end{aligned} \quad (23)$$

При записи этого уравнения учтено, что для свертки двух функций справедливо соотношение

$$\int_0^x f_1(x - t) f_2(t) dt \equiv \int_0^x f_2(x - t) f_1(t) dt. \quad (24)$$

Применив к интегральному уравнению (23) преобразование Лапласа по переменной  $u$  в соответствии со следующим определением:

$$g_n(p) = \int_0^{\infty} g_n(u) \exp(-pu) du, \quad (25)$$

получаем следующее алгебраическое уравнение для изображений коэффициентов разложения

$$\begin{aligned} g_n(p) \cdot (1 + \lambda W(p)) &= 2(2n + 1) \psi_n(p) \\ &+ 2g_n(p) \psi_n(p) + \frac{1}{2(2n + 1)} g_n(p) \psi_n(p) g_n(p). \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь  $\psi_n(x)$  и  $W(p)$  — изображения, определяемые формулами

$$\psi_n(p) = \int_0^{\infty} \psi_n\left(\exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right) \exp(-pu) du, \quad (27)$$

$$W(p) = \int_0^{\infty} \omega_{in}(u) (1 - \exp(-pu)) du. \quad (28)$$

Конкретный вид изображения  $W(p)$  зависит от вида функции  $\omega_{in}(u)$ . Функцию  $\psi_n(x)$  можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned}\psi_0(p) &= \frac{1}{p}, \\ \psi_1(p) &= \frac{1}{p} - \frac{4}{2p+1}, \\ \psi_{n+1}(p) &= \frac{1+2n}{1+n}(\psi_n(p) - 2\psi_n(p+1/2)) \\ &\quad - \frac{n}{1+n}\psi_{n-1}(p), \quad n > 1.\end{aligned}\quad (29)$$

В квадратном уравнении (26) только один корень имеет физический смысл

$$\begin{aligned}g_n(p) &= (2n+1) \left\{ \left[ \frac{1+\lambda W(p)}{\psi_n(p)} - 2 \right] \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\left[ \frac{1+\lambda W(p)}{\psi_n(p)} - 2 \right]^2 - 4} \right\}.\end{aligned}\quad (30)$$

Используя теорему Эйфроса [13], находим оригинал для коэффициентов разложения

$$g_n(u) = \int_0^\infty \frac{2}{x} I_1(2x) \cdot \exp(2x) f_n(u, x) dx, \quad (31)$$

где  $I_1(x)$  — модифицированная функция Бесселя первого порядка [14];  $f_n(u, x)$  оригинал от изображения

$$F_n(p) = \exp\left(-x \frac{1+\lambda W(p)}{\psi_n(p)}\right). \quad (32)$$

В соответствии с этим решением искомая функция  $G(E_0, \mu_0; E, \mu)$  может быть представлена в виде

$$\begin{aligned}G(E_0, \mu_0; E, \mu) &= \frac{1}{E_0} \frac{\mu\mu_0}{\mu_0 + \mu} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu) \\ &\quad \times \int_0^\infty \frac{2}{x} I_1(2x) \exp(2x) f_n\left(\ln\left(\frac{E_0}{E}\right), x\right) dx.\end{aligned}\quad (33)$$

Используя определение функции самораспыления (6), которая описывает энергетический и угловой спектры распыленных атомов, прошедших поверхностный барьер, получим

$$\begin{aligned}S(E_0, \mu_0; E, \mu) &= \frac{E}{E_0} \frac{\mu\mu_0}{\mu_0 + \mu^*} \frac{\mu}{\sqrt{(\mu^2 E + U)(E + U)}} \\ &\quad \times \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu^*) \\ &\quad \times \int_0^\infty \frac{2}{x} I_1(2x) \exp(2x) f_n\left(\ln\left(\frac{E_0}{E+U}\right), x\right) dx, \\ \mu^* &= \sqrt{\frac{\mu^2 E + U}{E + U}}.\end{aligned}\quad (34)$$

К сожалению, на данный момент найти оригинал изображения (32) в общем виде не удалось. В случае отсутствия неупругих потерь энергии  $\lambda \rightarrow 0$  приближенное решение для энергетического спектра имеет вид

$$S(E_0, \mu_0; E) \approx \frac{\mu_0}{\mu_0 + c} \frac{E_0 E I_1\left(2 \ln\left(\frac{E_0}{E+U}\right)\right)}{(E+U)^3 \ln\left(\frac{E_0}{E+U}\right)}. \quad (35)$$

Здесь  $c$  — некоторая аппроксимирующая константа, которая в расчетах принималась равной  $c = E/(E+U)$ . Анализируя уравнение (12) и учитывая, что рассеиваемые и выбиваемые атомы могут двигаться только в пределах полусферы по отношению к направлению движения первичной частицы, можно сделать предположение, что вклад последнего слагаемого будет незначительным. Пренебрегая последним слагаемым в уравнении (12), сводим нелинейное интегральное уравнение к линейному уравнению. Как показано в работах [3,15], подобная процедура линеаризации позволяет получить достаточно хорошие результаты.

Решая линеаризованное уравнение (12), для коэффициентов разложения  $g_n(p)$  получим следующее выражение:

$$g_n(p) = 2(2n+1) \left[ \frac{1+\lambda W(p)}{\psi_n(p)} - 2 \right]^{-1}. \quad (36)$$

Используя теорему Эйфроса, решение для вспомогательной функции самораспыления  $G(E_0, \mu_0; E, \mu)$  можно представить в виде

$$\begin{aligned}G(E_0, \mu_0; E, \mu) &= \frac{2}{E_0} \frac{\mu\mu_0}{\mu_0 + \mu} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu) \\ &\quad \times \int_0^\infty \exp(2x) f_n\left(\ln\left(\frac{E_0}{E}\right), x\right) dx,\end{aligned}\quad (37)$$

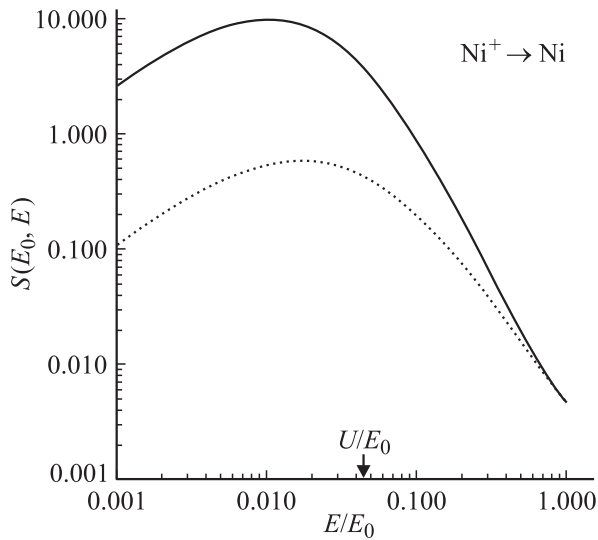
где  $f_n(u, x)$  — оригинал изображения (32).

При этом энергетический и угловой спектры распыления атомов будут определяться выражением

$$\begin{aligned}S(E_0, \mu_0; E, \mu) &= \frac{E}{E_0} \frac{\mu\mu_0}{\mu_0 + \mu^*} \frac{\mu}{\sqrt{(\mu^2 E + U)(E + U)}} \\ &\quad \times \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu^*) \\ &\quad \times \int_0^\infty \exp(2x) f_n\left(\ln\left(\frac{E_0}{E+U}\right), x\right) dx,\end{aligned}\quad (38)$$

где  $\mu^*$  определяется так же, как в выражении (34).

Анализируя выражения (34) и (38), можно сделать однозначный вывод о том, что угловые спектры распыленных атомов принципиально не изотропны. Однако при определенных условиях отличие углового спектра распыленных атомов от изотропного спектра оказывается незначительным.



**Рис. 3.** График зависимости энергетического спектра распыленных атомов никеля при бомбардировке ионами никеля с энергией 100 эВ (нормальное падение): сплошная линия — расчет по формуле (35), пунктир — расчет по формуле (39).

Пренебрегая неупругими потерями энергии, получаем для энергетического спектра решение, подобное тем, что получаются из уравнения переноса,

$$S(E_0, \mu_0; E) \approx \frac{\mu_0}{\mu_0 + c} \left( \frac{E_0 \cdot E}{(E + U)^3} - \frac{0.047E\psi_1(\mu_0)}{E_0^2} \left( \frac{E_0}{E + U} \right)^{1.35} \right). \quad (39)$$

Расчеты по формулам (35) и (39) приведены на рис. 3. Сравнивая результаты расчетов, можно отметить несколько закономерностей: 1) энергетические спектры имеют максимум; 2) спектры совпадают в области высоких энергий; 3) в области низких энергий энергетический спектр, рассчитанный по формуле (35), расположен выше спектра, рассчитанного по формуле (39), и имеет максимум при более низких энергиях.

Отличия в спектрах можно объяснить тем, что в решении (35) учитываются атомы, меняющие направление своего движения („смена нормали“) несколько раз. В силу того, что углы рассеяния и выбивания не могут превышать  $90^\circ$ , сменить нормаль может только небольшая часть атомов, потеряв при этом практически всю энергию. Учет таких атомов в спектре (35) приводит к смещению максимума распределения и его росту в низкоэнергетической области.

Приведенные выше приближенные решения не учитывают неупругих потерь энергии частиц, учет которых должен привести не только к уменьшению потока распыляемых атомов, но и к изменению формы спектра [16]. Однако поскольку рассматриваются тяжелые частицы низких энергий, то неупругие потери энергии малы [17] и ими можно пренебречь.

Решения (33) и (37) имеют достаточно простой вид, но при расчетах по этим формулам возникают трудности с нахождением обратного преобразования Лапласа функции  $F_n(p)$ . Используя разложение  $g_n(p)$  по степеням  $1/(1 + \lambda W(p))$ , функция  $G(E_0, \mu_0; E, \mu)$  может быть представлена в ином, более удобном для численных расчетов виде [8]

$$G(E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{1}{E_0} \frac{\mu \mu_0}{\mu_0 + \mu} \int_0^\infty \int_0^u T_{in}(x, u - \varepsilon) A(x, \varepsilon, \mu_0, \mu) dx d\varepsilon. \quad (40)$$

Здесь  $T_{in}(x, u)$  — неупругая функция пропускания атомов, определяемая как

$$T_{in}(x, u) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp(-x\lambda W(p)) \exp(pu) dp, \quad (41)$$

$A(x, u, \mu_0, \mu)$  — распределение атомов по упругим пробегам  $x$ , которое является оригиналом от изображения

$$A(x, p, \mu_0, \mu) = \exp(-x) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \rho_{n,k}(p) \frac{x^{k-1}}{(k-1)!} \psi_n(\mu_0) \psi_n(\mu). \quad (42)$$

Коэффициенты для нелинейного уравнения определяются итерационным методом

$$\begin{aligned} \rho_{n,1}(p) &= 2(2n+1) \cdot \psi_n(p), \\ \rho_{n,2}(p) &= 2\rho_{n,1}(p) \cdot \psi_n(p), \\ \rho_{n,k}(p) &= 2\rho_{n,k-1}(p) \cdot \psi_n(p) \\ &+ \frac{\psi_n(p)}{2(2n+1)} \sum_{i=1}^{k-2} \rho_{n,i} \cdot \rho_{n,k-1-i}, \quad k \geq 3. \end{aligned} \quad (43)$$

Для линеаризованного уравнения эти коэффициенты определяются более простым способом

$$\begin{aligned} \rho_{n,1}(p) &= 2(2n+1) \cdot \psi_n(p), \\ \rho_{n,k}(p) &= 2\rho_{n,k-1}(p) \cdot \psi_n(p) = (2n+1)2^k \psi_n(p)^k, \quad k \geq 2. \end{aligned} \quad (44)$$

Отметим, что решение в виде (40) является следствием аддитивности упругого и неупругого сечений взаимодействия частиц.

Несмотря на грубое приближение, получен вид энергетического спектра распыленных атомов, соответствующий физическому смыслу явления. Кроме того, показано, что в области малых энергий (порядка энергии поверхностной связи атомов) энергетический спектр распыленных атомов существенно отличается от зависимости  $E^{-2}$ . Более точные решения полученных уравнений требуют применения вычислительной техники

и, естественно, не обладают той наглядностью, как в случае чисто аналитического решения.

Результаты работы показывают, что применение принципов инвариантного погружения для описания явления распыления оказывается возможным, более того, позволяет получить новые интересные результаты.

## Список литературы

- [1] *Амбарцумян В.А.* // ЖЭТФ. 1943. Т. 13. С. 323.
- [2] *Dashen R.V.* // Phys. Rev. 1964. Vol. A134. P. 1025.
- [3] *Афанасьев В.П., Лубенченко А.В.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 1997. № 9. С. 12.
- [4] *Чандрасекар С.* Перенос лучистой энергии. М.: ИЛ, 1956. 431 с.
- [5] *Ремизович В.С., Маринюк В.В.* // Материалы Четырнадцатой Междунар. конф. „Взаимодействие ионов с поверхностью“. Т. 1. М., 1999. С. 384.
- [6] *Falcone G.* // Rad. Eff. 1987. Vol. 1. P. 147.
- [7] *Kelly R.* // Nucl. Instr. Meth. 1987. Vol. 18. P. 388.
- [8] *Afanas'ev V.P., Lubenchenko A.V.* // Surface Investigation. 1999. Vol. 14. P. 821.
- [9] *Лубенченко А.В.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2003. № 4. С. 22–31.
- [10] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.
- [11] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984. 831 с.
- [12] *Виленкин Н.Я.* Специальные функции и теория представления групп. М.: Наука, 1965. 643 с.
- [13] *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука, 1965. 489 с.
- [14] *Никифоров А.Ф., Уваров В.Б.* Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1978. 320 с.
- [15] *Afanas'ev V.P., Naueks D.* // Z. Phys. B. Cond. Mat. 1991. Vol. 83. P. 65.
- [16] *Маринюк В.В., Ремизович В.С.* // ЖТФ. Т. 71. Вып. 10. С. 29–35.
- [17] *Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф.* Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск: Изд-во БГУ, 1978. 320 с.