

01;02

Самораспыление тонких пленок (применение метода инвариантного погружения)

© В.В. Манухин

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

(Поступило в Редакцию 6 декабря 2005 г. В окончательной редакции 26 января 2007 г.)

Приведено аналитическое решение задачи о самораспылении тонких однородных пленок. С использованием принципов инвариантного погружения получены интегральные уравнения, описывающие поток расплывшихся атомов. Найдены приближенные решения интегрального уравнения для функций, описывающих спектры атомов, вылетающих с поверхностей пленок, в случае самораспыления.

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

Введение

Настоящая работа посвящена решению задачи ионного распыления однородных мишеней конечной толщины (пленок) с использованием методов инвариантного погружения, которые впервые были предложены В.А. Амбарцумяном для решения проблемы рассеяния света в мутной среде [1], а затем другими авторами использованы для решения задач рассеяния заряженных частиц [2,3].

Обычно задача о самораспылении твердых тел ионной бомбардировкой решается на основе уравнения переноса [4,5], которое для плотности потока атомов на глубине z можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{dN(z, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz} = & -\Sigma N(z, E_0, \mu_0; E, \mu) \\ & + N_0 \omega(E_0, \mu_0; E, \mu) \exp\left(-\frac{zn\Sigma}{\mu_0}\right) \\ & + \int_0^1 \int_E^{E_0} N(z, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \omega(E_1, \mu_1; E, \mu) d\mu_1 dE_1 \quad (1) \end{aligned}$$

с граничными условиями для частиц, налетающих на поверхность мишени

$$\begin{aligned} N(z=0, E_0, \mu_0; E, \mu) &= 0, \quad 0 \leq \mu \leq 1, \\ N(z=z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) &= 0, \quad 0 \leq -\mu \leq 1. \quad (2) \end{aligned}$$

Уравнение записано для рассеянных и выбитых атомов, поэтому здесь $\omega(E_0, \mu_0; E, \mu)$ — суммарное дифференциальное сечение упругого и неупругого рассеяний и выбивания атома. Сложность решения этого уравнения определяется прежде всего формой граничных условий. До настоящего времени не найдено точного аналитического решения уравнения переноса в общем виде. Задача многократно решалась в тех или иных приближениях для безграничной среды [4,5] и для полубесконечных

мишеней (с одной границей) [6,7]. Учет двух границ у распыляемой мишени существенно усложняет задачу.

С точки зрения распыления нас интересует только плотность потока выходящих с поверхностей атомов, т.е. уравнение переноса несет избыточную информацию о плотности потока атомов в глубине мишени. Уравнения, получаемые при использовании принципов инвариантного погружения, содержат в себе граничные условия, описывая при этом величины, которые непосредственно измеряются в эксперименте, что является основным преимуществом этого метода. Эти интегродифференциальные уравнения — нелинейные и неоднородные, тем не менее они представляют собой более пригодное средство для решения большого числа прикладных задач теории переноса.

Постановка задачи

Уравнения Амбарцумяна—Чандрасекара можно получить непосредственно из уравнения переноса (1), используя граничные условия (2) либо применяя эвристические методы теории переноса, которые на основе непосредственного рассмотрения процесса рассеяния, минуя уравнение переноса, позволяют получать известные из традиционной теории или новые соотношения.

Рассмотрим параллельный моноэнергетический поток частиц (N_0 — полный поток частиц) с энергией E_0 , который падает на плоскопараллельную мишень толщиной z_0 (пленку) в направлении $\Omega_0 = \{\mu_0, \varphi_0\}$ (нормаль направлена внутрь материала). Чтобы за время анализа не происходило существенного изменения поверхности материала, будем рассматривать случаи малых флюенсов бомбардирующих ионов. Поскольку мы рассматриваем явление самораспыления, т.е. бомбардировку мишени частицами того же вида, что и составляющие ее атомы, то рассеянные и расплывшиеся частицы будут принципиально не различимы.

Обозначим восходящую часть дифференциальной плотности потока выбитых и рассеянных атомов на по-

верхности мишени через $N_{\text{out}}(z = 0, E_0, \Omega_0; E, \Omega)$. Нисходящую часть дифференциальной плотности потока атомов, выбитых и рассеянных на глубине z_0 , обозначим через $N_{\text{in}}(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega)$. Введем вспомогательные функции: самораспыления $G_1(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega)$ и самораспыления на прострел $G_2(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega)$. Эти функции описывают энергетические и угловые спектры атомов на поверхности мишени (еще не преодолевших поверхностного барьера) и связаны с дифференциальной плотностью потока атомов следующими соотношениями [8,9]:

$$G_1(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega) = \frac{\mu}{N_0} N_{\text{out}}(z = 0, E_0, \Omega_0; E, \Omega), \quad (3)$$

$$G_2(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega) = \frac{\mu}{N_0} N_{\text{in}}(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega). \quad (4)$$

Здесь $\mu_0 = \cos(\theta_0)$; $\mu = |\cos(\theta)|$; θ_0 и θ — полярные углы.

Описывая процессы, приводящие к распылению атомов мишени, можно сформулировать следующие принципы [8].

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

$$\begin{aligned} N_{\text{out}}(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) &= \frac{N_0}{\mu} \exp\left(-\frac{zn\Sigma}{\mu_0}\right) \\ &\times G_1(z_0 - z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) \\ &+ \frac{1}{\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{in}}(z, E_0, \Omega_0; E_1, \Omega_1) \\ &\times G_1(z_0 - z, E_1, \Omega_1; E, \Omega) d^2\Omega_1 dE_1. \end{aligned} \quad (5)$$

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

$$\begin{aligned} N_{\text{in}}(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) &= \frac{N_0}{\mu} G_2(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) \\ &+ \frac{1}{\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{out}}(z, E_0, \Omega_0; E_1, \Omega_1) \\ &\times G_1(z, E_1, \Omega_1; E, \Omega) d^2\Omega_1 dE_1. \end{aligned} \quad (6)$$

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

приходящими к поверхности z снизу

$$\begin{aligned} N_{\text{out}}(z = 0, E_0, \Omega_0; E, \Omega) &= \exp\left(-\frac{zn\Sigma}{\mu}\right) \\ &\times N_{\text{out}}(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) + \frac{N_0}{\mu} G_1(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) \\ &+ \frac{1}{\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{out}}(z, E_0, \Omega_0; E_1, \Omega_1) \\ &\times G_2(z, E_1, \Omega_1; E, \Omega) d^2\Omega_1 dE_1. \end{aligned} \quad (7)$$

4) Плотность нисходящего потока атомов на нижней поверхности слоя является результатом прохождения (с учетом выбивания атомов) слоя толщиной $(z_0 - z)$ атомами, приходящими к поверхности z сверху

$$\begin{aligned} N_{\text{in}}(z_0, E_0, \Omega_0; E, \Omega) &= \exp\left(-\frac{(z_0 - z)n\Sigma}{\mu}\right) \\ &\times N_{\text{in}}(z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) + \frac{N_0}{\mu} G_2(z_0 - z, E_0, \Omega_0; E, \Omega) \\ &\times \exp\left(-\frac{zn\Sigma}{\mu_0}\right) + \frac{1}{\mu} \int_0^1 \int_0^{2\pi} \int_E^{E_0} N_{\text{in}}(z, E_0, \Omega_0; E_1, \Omega_1) \\ &\times G_2(z_0 - z, E_1, \Omega_1; E, \Omega) d^2\Omega_1 dE_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь n — концентрация атомов в мишени; Σ — полное сечение взаимодействия атомов (далее будем считать, что Σ не зависит от энергии атомов). Графическое представление перечисленных принципов приведено на рис. 1. В дальнейшем будем использовать плоскую геометрию, поэтому от сферических углов перейдем к полярным углам.

Ранее рядом авторов [10,11] было показано, что распыление — это поверхностное явление, поэтому необходимо точно и правильно учитывать граничные условия. Предположим наличие вблизи поверхности материала плоского потенциального барьера. Существование такого барьера определяется тем фактом, что выбитый атом, двигаясь формально уже вне мишени, все еще взаимодействует с атомами мишени. Законы, описывающие движение атома в твердом теле и в области потенциального барьера, будут различны, поэтому удобно представить распыляемую мишень как двуслойную (рис. 2). Конечно, поверхностный потенциальный барьер оказывает воздействие как на частицы, вылетающие с поверхности, так и на частицы, влетающие в мишень. В настоящей работе пренебрегается влиянием поверхностного потенциального барьера на частицы, влетающие в мишень, поскольку их энергия существенно превышает величину барьера, и не рассматриваются случаи скользящего падения. Тогда, согласно принципу (3), выходящий поток атомов можно рассматривать как результат пропускания атомов „слоем“ потенциального барьера, приходящих

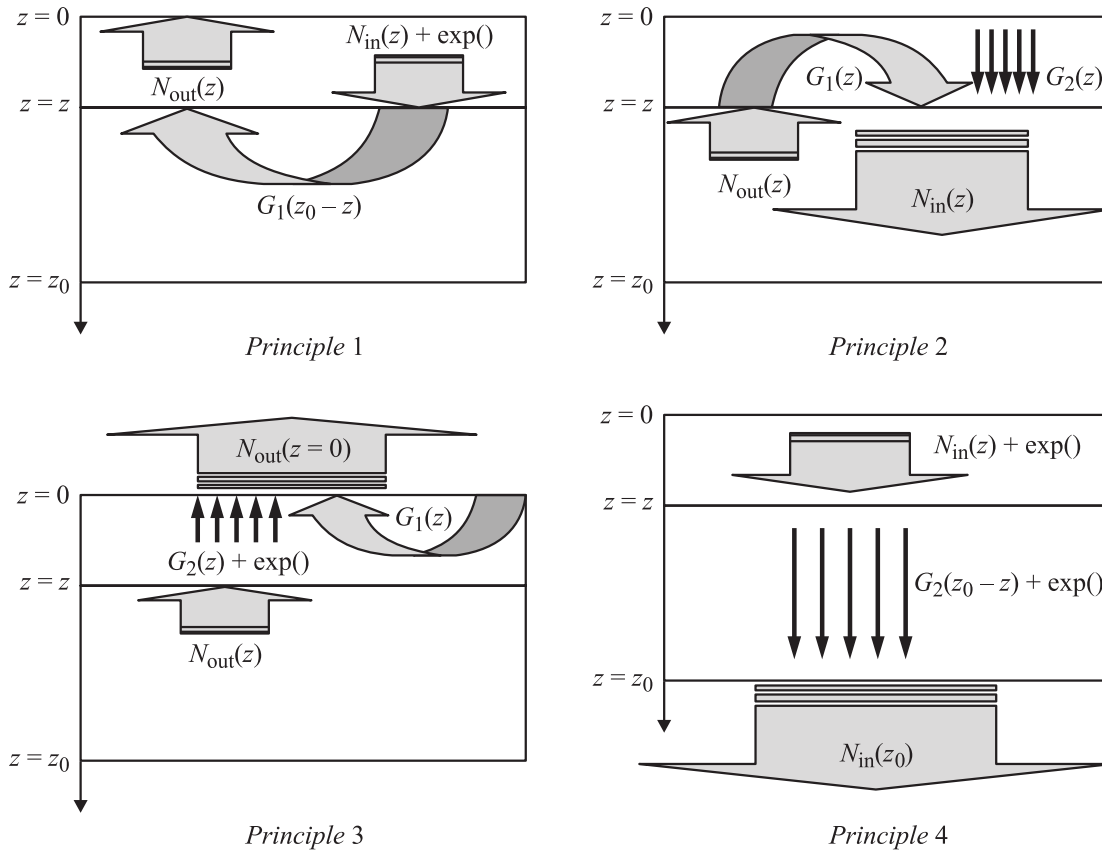


Рис. 1. Графическая интерпретация принципов инвариантного погружения.

к поверхности этого слоя снизу. Используя математическую запись этого принципа (в плоской геометрии), функцию самораспыления можно определить следующим образом:

$$S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \int_E^{E_0} \int_0^1 G_1(z, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) P(E_1, \mu_1; E, \mu) dE_1 d\mu_1. \quad (9)$$

Здесь $P(E_1, \mu_1; E, \mu)$ — функция, определяющая вероятность для атома, имеющего на поверхности энергию E_1 и движущегося в направлении $\Omega_1 = \{\mu_1, \varphi\}$ из мишени (см. рис. 2), преодолеть барьер и вылететь с поверхности с энергией E и в направлении $\Omega = \{\mu, \varphi\}$ [10]:

$$P(E_1, \mu_1; E, \mu) = \delta(E + U - E_1) \times \delta\left(\cos\theta - \left[\left(1 + \frac{U}{E}\right) \cos^2\theta_1 - \frac{U}{E}\right]^{1/2}\right), \quad (10)$$

где $\delta()$ — дельта-функция Дирака; U — энергия поверхностной связи атомов. Отметим, что функция $P(E_1, \mu_1; E, \mu)$ не зависит от координаты.

Наличие потенциального барьера с нижней стороны пленки может приводить к отражению атомов от потенциального барьера. Однако поскольку значение барьера

мало, то отразиться от него могут только атомы с низкой энергией или атомы, движущиеся в плоскости границы. Очевидно, такие атомы не смогут вылететь с противоположной стороны пленки.

Аналогичным образом используя принцип инвариантности (4), можно определить функцию самораспыления на прострел

$$T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \int_E^{E_0} \int_0^1 G_2(z_0, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) P(E_1, \mu_1; E, \mu) dE_1 d\mu_1. \quad (11)$$

Наличие верхнего потенциального барьера в функции $T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ не учитывается.

Поскольку функции $G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ описывают энергетические и угловые спектры атомов, еще не преодолевших поверхностный потенциальный барьер, а функции $S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ характеризуют реально измеряемые энергетические и угловые спектры распыленных атомов, то далее будем называть $S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ функциями самораспыления и самораспыления на прострел, а $G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ — вспомогательными функциями самораспыления.

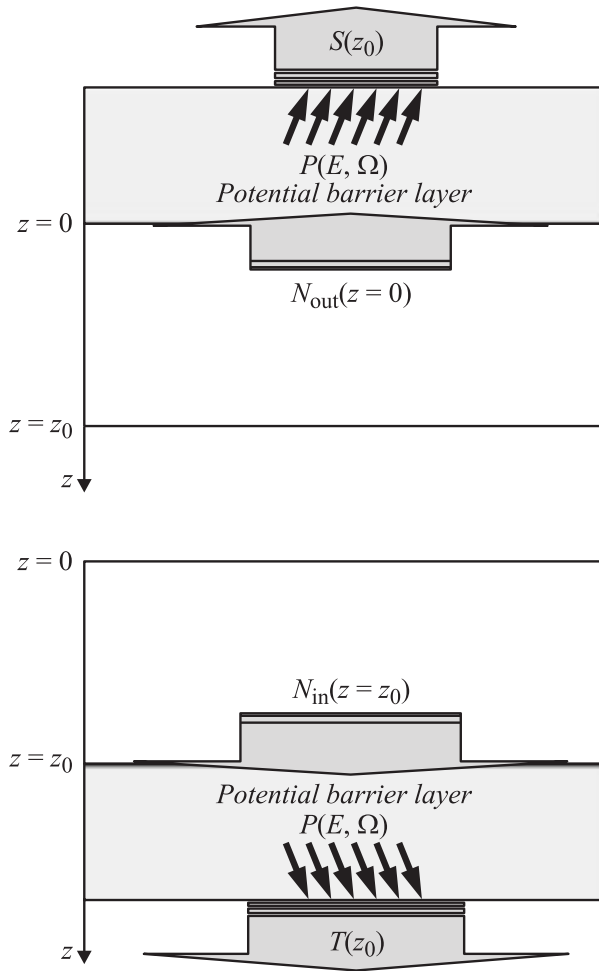


Рис. 2. Графическое представление метода учета поверхностного потенциального барьера.

Аналитические процедуры определения неизвестных функций $G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ из уравнения переноса с использованием принципов инвариантности приведены в книге Чандрасекара [8]. Следуя алгоритму, приведенному в [8], продифференцируем по z уравнения, выражающие принципы инвариантности, переходя к пределу при $z \rightarrow 0$ либо к пределу $z \rightarrow z_0$. Так, например, дифференцируя уравнения (5) и (8) и используя граничные условия (2), получим

$$\left[\frac{dN_{out}(z, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz} \right]_{z=0} = \frac{1}{\mu} \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 d\mu_1 \times \left\{ \left[\frac{dN_{in}(z, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1)}{dz} \right]_{z=0} G_1(z_0, E_1, \mu_1; E, \mu) \right\} - \frac{N_0}{\mu} \left[\frac{n\Sigma}{\mu_0} G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) + \frac{dG_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz_0} \right]; \quad (12)$$

$$0 = \frac{1}{\mu} \int_E^{E_0} dE_1 \int_0^1 d\mu_1 \left\{ \left[\frac{dN_{in}(z, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1)}{dz} \right]_{z=0} \times G_2(z_0, E_1, \mu_1; E, \mu) \right\} + \left[\frac{dN_{in}(z, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1)}{dz} \right]_{z=0} \times \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) - \frac{N_0}{\mu} \left[\frac{n\Sigma}{\mu_0} G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) + \frac{dG_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz_0} \right]. \quad (13)$$

Производные, встречающиеся в уравнениях (12) и (13), можно определить из уравнения переноса (1). Подставив производные в уравнения (12) и (13), после несложных преобразований получим

$$\Sigma \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) + \frac{1}{n} \frac{dG_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz_0} = \omega^b(E_0, \mu_0; E, \mu) + \int_0^1 \int_E^{E_0} G_1(z_0, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \omega(E_1, \mu_1; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 + \int_0^1 \int_E^{E_0} \omega(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) G_1(z_0, E_1, \mu_1; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 + \int_0^1 \int_E^{E_0} \int_0^1 \int_E^{E_0} G_1(z_0, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \omega^b(E_1, \mu_1; E_2, \mu_2) \times G_1(z_0, E_2, \mu_2; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 \frac{d\mu_2}{\mu_2} dE_2; \quad (14)$$

$$\frac{\Sigma}{\mu_0} G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) + \frac{1}{n} \frac{dG_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)}{dz_0} = \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) \omega(E_0, \mu_0; E, \mu) + \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) \times \int_0^1 \int_E^{E_0} G_1(z_0, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \omega^b(E_1, \mu_1; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 + \int_0^1 \int_E^{E_0} \omega(E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) G_2(z_0, E_1, \mu_1; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 + \int_0^1 \int_E^{E_0} \int_0^1 \int_E^{E_0} G_1(z_0, E_0, \mu_0; E_1, \mu_1) \omega^b(E_1, \mu_1; E_2, \mu_2) \times G_2(z_0, E_2, \mu_2; E, \mu) \frac{d\mu_1}{\mu_1} dE_1 \frac{d\mu_2}{\mu_2} dE_2. \quad (15)$$

В формулах приняты следующие обозначения: $\omega(E_0, \mu_0; E, \mu)$ — суммарное дифференциальное сечение

упругого рассеяния, неупругого рассеяния и выбивания атома; $\omega^b(E_0, \mu_0; E, \mu)$ — суммарное дифференциальное сечение обратного (после столкновения импульс частицы направлен в другую полусферу) упругого рассеяния и обратного выбивания атома.

Необходимо отметить, что уравнения, описывающие вспомогательные функции самораспыления $G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$, с точностью до обозначений совпадают с уравнениями, описывающими спектры отраженных и прошедших слоев вещества частиц [12], поэтому можно использовать ранее разработанные (например, [13]) методы решения таких уравнений.

Приближенное аналитическое решение

В данной работе считается, что взаимодействие частиц может проходить по двум независимым каналам [4]: упругому и неупругому, которые описываются соответственно упругим ω и неупругим ω_{in} сечениями взаимодействия. Поскольку при столкновении медленных частиц одинаковой массы потери энергии при неупругих взаимодействиях (электронное торможение, перезарядка и др.) пренебрежимо малы [14–15], то неупругим сечением взаимодействия будем пренебрегать.

В записанных выше интегральных уравнениях в качестве ядра выступает сечение взаимодействия атомных частиц. Обычно в качестве сечения взаимодействия используют сечение парного взаимодействия, которое записывают в виде произведения двух функций [5]: вероятности передачи энергии (или рассеяния в заданном направлении) и фактора, отражающего выполнение законов сохранения энергии и импульса. Наличие именно последнего составляющего такого ядра существенно усложняет решение задачи.

При взаимодействии движущегося атома с твердым телом, состоящим из таких же атомов, оказывается, что размер движущегося атома (радиус наименьшего сближения) сравним со средним расстоянием между атомами в мишени. Вследствие этого столкновения нельзя считать парными. Описать сечение непарных взаимодействий очень сложно. Однако можно предположить, что при низких энергиях это сечение практически не будет отличаться от сечения взаимодействия твердых шаров. Кроме того, фактор, отражающий выполнение законов сохранения энергии и импульса не будет играть существенной роли из-за большой неопределенности результата кратных (непарных) соударений. Поэтому предлагается описать сечение взаимодействия в виде

$$\omega_{sc}(E_0, \mu_0; E, \mu) = \omega_r(E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{\Sigma_{cl}}{E_0}. \quad (16)$$

При этом полное сечение взаимодействия атомов не зависит от энергии $\Sigma(E) = \Sigma$. Такое сечение рассеяния достаточно часто используется в подобных задачах и позволяет получать приемлемые аналитические решения [17].

Введя новую переменную $u = \ln(E_0/E)$, будем искать вспомогательные функции самораспыления в виде

$$G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{\mu_0 \mu}{E_0} G_1(z_0, u, \mu_0, \mu),$$

$$G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{\mu_0 \mu}{E_0} G_2(z_0, u, \mu_0, \mu). \quad (17)$$

Поскольку функции $G_1(z_0, u, \mu_0, \mu)$ и $G_2(z_0, u, \mu_0, \mu)$ слабо зависят от углов [4,18], то при интегрировании по угловым переменным можно пренебречь этой зависимостью. Для тонких пленок вероятность процессов, описываемых последними слагаемыми в уравнениях (15) и (16), мала по сравнению с другими слагаемыми. Таким образом, если пренебречь последними слагаемыми, уравнения для функций $G_1(z_0, u, \mu_0, \mu)$ и $G_2(z_0, u, \mu_0, \mu)$ существенно упростятся:

$$(\mu + \mu_0) G_1(z_0, u, \mu_0, \mu) + \frac{\mu \mu_0}{n \Sigma} \frac{dG_1(z_0, u, \mu_0, \mu)}{dz_0}$$

$$= 2 + 2\mu_0 \int_0^u G_1(z_0, u_1, \mu_0, \mu) du_1$$

$$+ 2\mu \int_0^u G_1(z_0, u - u_1, \mu_0, \mu) du_1; \quad (18)$$

$$\mu G_2(z_0, u, \mu_0, \mu) + \frac{\mu \mu_0}{n \Sigma} \frac{dG_2(z_0, u, \mu_0, \mu)}{dz_0}$$

$$= 2 \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) + 2\mu \int_0^u G_2(z_0, u - u_1, \mu_0, \mu) du_1. \quad (19)$$

Применив к интегродифференциальным уравнениям (18) и (19) преобразование Лапласа по переменной u в соответствии со следующим определением:

$$g_1(z_0, p, \mu_0, \mu) = \int_0^\infty G_1(z_0, u, \mu_0, \mu) \exp(-pu) du,$$

$$g_2(z_0, p, \mu_0, \mu) = \int_0^\infty G_2(z_0, u, \mu_0, \mu) \exp(-pu) du \quad (20)$$

получим следующие дифференциальные уравнения для изображений:

$$(\mu + \mu_0) g_1(z_0, p, \mu_0, \mu) + \frac{\mu \mu_0}{n \Sigma} \frac{dg_1(z_0, p, \mu_0, \mu)}{dz_0}$$

$$= \frac{2}{p} + 2(\mu_0 + \mu) \frac{g_1(z_0, p, \mu_0, \mu)}{p}; \quad (21)$$

$$\mu g_2(z_0, p, \mu_0, \mu) + \frac{\mu \mu_0}{n \Sigma} \frac{dg_2(z_0, p, \mu_0, \mu)}{dz_0}$$

$$= \frac{2}{p} \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) + 2\mu \frac{g_2(z_0, p, \mu_0, \mu)}{p}. \quad (22)$$

Решения этих неоднородных уравнений хорошо известны и для граничных условий

$$g_1(z_0 = 0, p, \mu_0, \mu) = 0, \quad g_2(z_0 = 0, p, \mu_0, \mu) = 0$$

записываются в виде

$$g_1(z_0, p, \mu_0, \mu) = \frac{2}{(\mu_0 + \mu)(p - 2)} \times \left[1 - \exp\left(-z_0 n \Sigma \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)\right) - \frac{2 \exp\left(-z_0 n \Sigma \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)\right)}{(\mu_0 + \mu)(p - 2)} \times \left[\exp\left(-\frac{2z_0 n \Sigma}{p} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)\right) - 1 \right]; \right. \quad (23)$$

$$g_2(z_0, p, \mu_0, \mu) = \frac{2}{(\mu - \mu_0)(p - \frac{2\mu}{\mu - \mu_0})} \times \left[\exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu_0}\right) \right] - \frac{2 \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu_0}\right)}{(\mu - \mu_0)(p - \frac{2\mu}{\mu - \mu_0})} \left[\exp\left(-\frac{2z_0 n \Sigma}{\mu_0 p}\right) - 1 \right]. \quad (24)$$

Оригинал произведения изображений

$$\frac{1}{(p - a)} \left[\exp\left(-\frac{b}{p}\right) - 1 \right]$$

(вторые слагаемые в выражениях (23) и (24)) можно представить в виде интегральной свертки

$$f(u, a, b) = \exp(au) \int_0^u \exp(-ax) \sqrt{\frac{b}{x}} I_1(2\sqrt{bx}) dx, \quad (25)$$

где $I_1(x)$ — модифицированная функция Бесселя первого порядка [19].

Таким образом, вспомогательные функции самораспыления можно записать в виде:

$$G_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{2\mu_0\mu}{\mu_0 + \mu} \frac{E_0}{E^2} \times \left[1 - \exp\left(-z_0 n \Sigma \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)\right) (1 + h_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)) \right]; \quad (26)$$

$$G_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{2\mu_0\mu}{E_0(\mu - \mu_0)} \left(\frac{E_0}{E}\right)^{\frac{2\mu}{\mu - \mu_0}} \times \left[\exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu_0}\right) \right] \times (1 + h_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)). \quad (27)$$

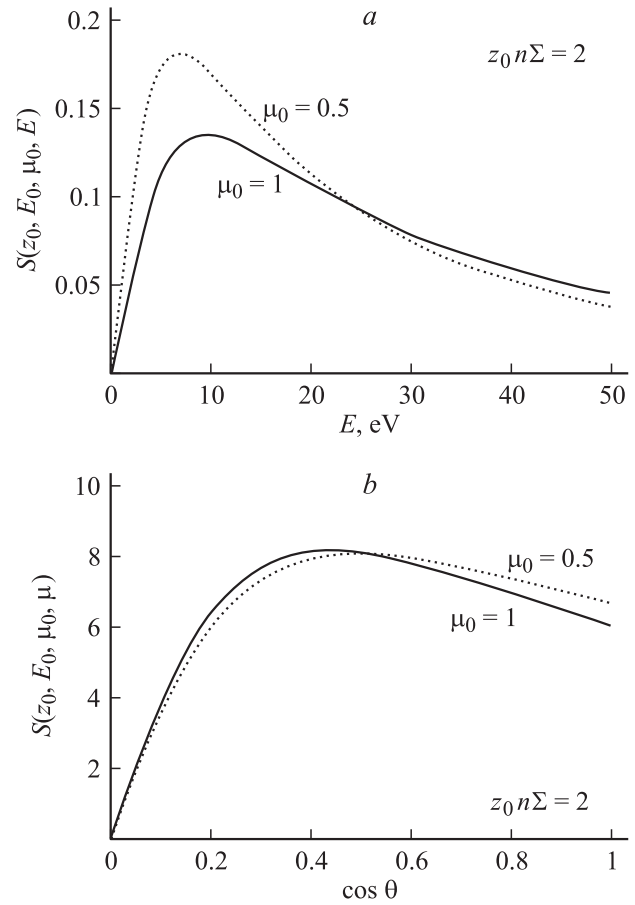


Рис. 3. Спектры самораспыленных атомов никеля ($E_0 = 200$ eV) для различных углов падения атомов: а) энергетический спектр, б) угловой спектр.

Здесь

$$h_1(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \int_0^u \exp(-2x) \sqrt{\frac{2z_0 n \Sigma}{x} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)} \times I_1\left(2\sqrt{2z_0 n \Sigma \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right)x}\right) dx, \quad (28)$$

$$h_2(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \int_0^u \exp\left(-\frac{2\mu x}{\mu - \mu_0}\right) \sqrt{\frac{2z_0 n \Sigma}{\mu_0 x}} I_1\left(2\sqrt{\frac{2z_0 n \Sigma}{\mu_0}x}\right) dx$$

— функции, которые достаточно просто рассчитываются численно.

Для получения функций самораспыления $S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ и $T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$ воспользуемся принципами инвариантности (3) и (4), подставив в формулы (9) и (11) функции G_1 и G_2 . После

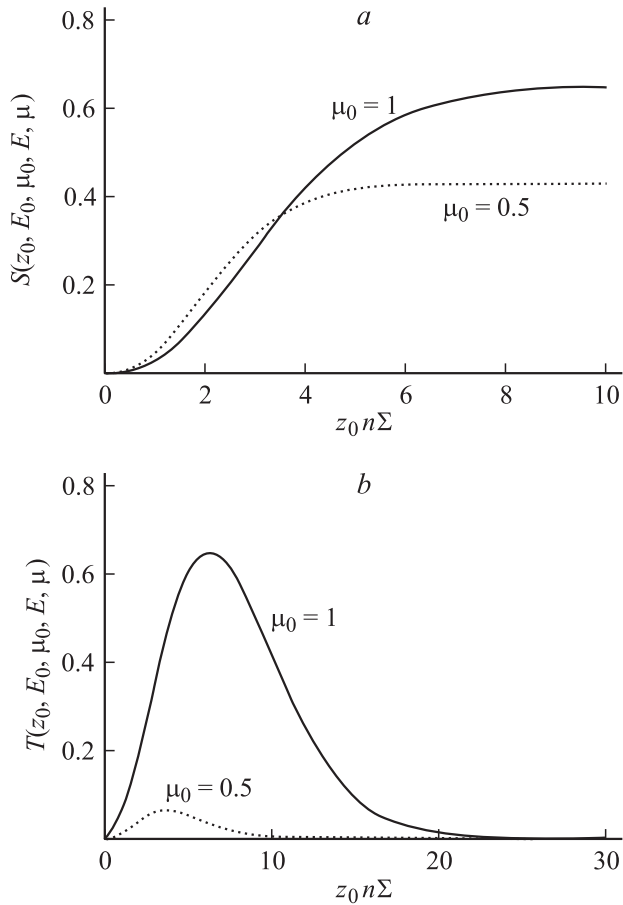


Рис. 4. График зависимости функций самораспыления от толщины мишени из никеля ($E_0 = 200$ eV) для различных углов падения и вылета атомов: *a*) функция самораспыления $S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$, *b*) функция самораспыления на прострел $T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu)$.

интегрирования получим

$$S(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{2\mu_0\mu}{\mu_0 + \eta} \frac{E_0 E}{(E + U)^3} \times \left[1 - \exp\left(-z_0 n \Sigma \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\eta}\right)\right) \right] \times (1 + h_1(z_0, E_0, \mu_0; E + U, \eta)); \quad (29)$$

$$T(z_0, E_0, \mu_0; E, \mu) = \frac{2\mu_0\mu}{(\eta - \mu_0)} \frac{E(E_0)^{\frac{\eta + \mu_0}{\eta - \mu_0}}}{(E + U)^{\frac{3\eta - \mu_0}{\eta - \mu_0}}} \times \left[\exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\eta}\right) - \exp\left(-\frac{z_0 n \Sigma}{\mu_0}\right) \right] \times (1 + h_2(z_0, E_0, \mu_0; E + U, \eta)), \quad (30)$$

$$\text{где } \eta = \eta(E, \mu, U) = \sqrt{\frac{E\mu^2 + U}{E + U}}.$$

Выражения (29) и (30) представляют собой энергетические и угловые спектры распыленных (и рассеянных) атомов в случае обратного самораспыления и самораспыления на прострел мишеней толщиной z_0 .

Проинтегрировав выражения (29) и (30) по энергии E , получим угловые спектры распыленных атомов. Энергетические спектры рассчитываются путем интегрирования выражений (29) и (30) по косинусам углов вылета. Результаты расчетов энергетических и угловых спектров обратного распыленных атомов приведены на рис. 3. На рис. 4 представлены рассчитанные по формулам (29) и (30) зависимости функций самораспыления от безразмерной толщины распыляемых пленок.

Заключение

На основе принципов инвариантного погружения была сформулирована и приближенно решена задача о самораспылении однородных тонких пленок. Получены аналитические выражения для дифференциальных по толщине мишени спектров распыленных атомов. Достаточно грубое описание сечения взаимодействия, а также линеаризация [3] уравнений (15) и (16) приводят к расходящемуся ($\sim E^{-2}$) классическому энергетическому спектру атомов мишени [4]. Однако использование модели поверхностного барьера позволяет избежать расходимости в энергетических спектрах распыленных атомов. Эти же приближения приводят к тому, что в функции самораспыления на прострел (в этой функции учитываются только распыленные и рассеянные атомы) отсутствуют атомы, вылетающие в направлении $\mu = \mu_0$. Более точное описание сечения взаимодействия позволит избежать этих недостатков.

Результаты работы показывают, что применение принципов инвариантного погружения для описания явления распыления оказывается возможным и, более того, позволяет решать задачи с ограниченной геометрией мишеней, что достаточно проблематично при решении уравнения переноса.

Список литературы

- [1] Амбарцумян В.А. // ЖЭТФ. 1943. Т. 13. С. 323.
- [2] Dashen R.V. // Phys. Rev. 1964. Vol. 134. P. 1025.
- [3] Афанасьев В.П., Лубенченко А.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 1997. № 9. С. 12–22.
- [4] Sigmund P. // Phys. Rev. 1969. Vol. 184. P. 377.
- [5] Williams M.M.R. // Philosophical Magazine A. 1981. Vol. 43. N 5. P. 1221.
- [6] Waldeer K.T., Urbassek H.M. // Nucl. Instr. and Meth. 1987. Vol. B18. P. 518.
- [7] Tolmachev A.I. // Nucl. Instr. and Meth. 1993. Vol. B83. P. 479.
- [8] Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. М.: ИЛ, 1956. 431 с.

- [9] Ремизович В.С., Маринюк В.В. // Мат. 14-й Междунар. конф. „Взаимодействие ионов с поверхностью“. Т. 1. М., 1999. С. 384.
- [10] Falcone G. // Rad. Eff. 1987. Vol. 1. P. 147.
- [11] Kelly R. // Nucl. Instr. Meth. 1987. Vol. 18. P. 388.
- [12] Afanas'ev V.P., Lubenchenko A.V. // Surface Investigation. 1999. Vol. 14. P. 821.
- [13] Лубенченко А.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2003. № 4. С. 22–31.
- [14] Оцуки Ё.Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.
- [15] Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск: Изд-во БГУ, 1978. 320 с.
- [16] Распыление твердых тел ионной бомбардировкой / Под ред. Р. Бериша. М.: Мир, 1984. 336 с.
- [17] Маринюк В.В., Ремизович В.С. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 10. С. 29–35.
- [18] Vicanek M., Jimenez Rodriguez J.J., Sigmund P. // Nucl. Instr. and Meth. 1989. Vol. B36. P. 124.
- [19] Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1978. 320 с.