

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙ

539.188

ТЕОРИЯ РАСПЫЛЕНИЯ

Д. Фальконе

(Физический факультет Университета Калабрии, Косенца, Италия)

(*La Revista del Nuovo Cimento. 1990. V. 13, No. 1. Pp. 1 — 52*)

Исторический обзор и теоретический аппарат. — Распыление как поверхностное явление. — Унифицированная теория распыления.

1. Введение

При столкновении ускоренных частиц с твердым телом процесс передачи энергии при соударениях обычно завершается образованием поверхностных и объемных радиационных дефектов. Микроскопический процесс, приводящий к эмиссии атомных частиц мишени при бомбардировке, называется *распылением*. Этот процесс впервые наблюдался в 1852 г. Гроувом [1], который заметил, что в экспериментах с электрическим разрядом в газах обнаруживался металлический налет на стеклах разрядной трубы.

После этих первых наблюдений потребовалось столетие, чтобы возобновился экспериментальный и теоретический интерес к этому явлению: пионерские работы Венера создали существенную предпосылку этого интереса. Рост повышенного внимания устойчиво держался много лет, а в последнее десятилетие можно наблюдать и его значительное усиление. Более точное заключение может быть выведено из анализа [4] научной продукции, касающейся распыления, за период с 1965-го по 1985 г., сделанного Оливой. Его анализ обобщен на рис. 1. Олива разделил работы по распылению на три категории. К первой относятся теоретические работы и исследования с помощью компьютерного моделирования. Ко второй категории — работы, касающиеся использования экспериментальных результатов и проведения измерений с целью выяснения модели или подтверждения теории. И к последней категории он причислил работы, в которых распылительная методика используется в основных приложениях. Наиболее очевидным результатом этого анализа является признание того факта, что число статей по практическим применениям распыления быстро растет, в то время как число фундаментальных исследований, по-видимому, находится на стационарном уровне. Более того, если мы тщательнее рассмотрим первые две категории, мы заметим, что на протяжении последнего десятилетия большинство опубликованных статей этого сорта посвящены исследованиям, выполненным с помощью компьютерного моделирования. Другими словами, теоретические работы и экспериментальные исследования, направленные на выяснение модели или подтверждение теории, почти исчезли. Причины этого, конечно, различны, но разумно

© Societá Italiana di Fisica 1990

© Перевод на русский язык,

Российская академия наук,

"Успехи физических наук" 1992

включить в них и отсутствие теоретических приближений, содержащих единый взгляд на явление. Действительно, в противоположность традиционным

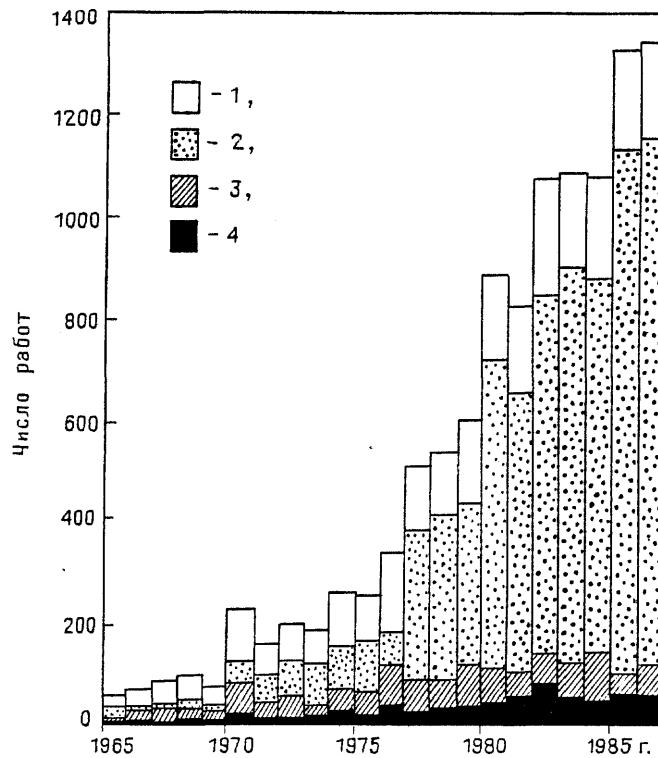


Рис. 1. Статистика научных публикаций в области изучения распыления за период приблизительно в 20 лет. Разделение произведено на теоретические, экспериментальные и прикладные работы (с любезного согласия автора [4]). 1 — полное число работ, 2 — прикладные работы, 3 — экспериментальные работы, 4 — теоретические работы

тенденциям в других областях физических исследований, где единство подходов представляет правило, а не исключение, теоретики, изучающие распыление, создали модели и теории, направленные на объяснение отдельных специфических черт этого явления. К настоящему времени неясно, то ли эта особенность работ по распылению является внутренне присущей чертой явления, то ли это следствие относительной краткости развития исследований в этой области. Тем не менее ясно, что новые усилия для разработки новых теоретических подходов и постановки экспериментов, поддерживающих теории, весьма желательно.

Может быть, полезно начать с анализа развития теоретических моделей и при этом выделить принципиальные нововведения, стимулировавшие основательные улучшения теоретических подходов. Данная работа является попыткой, конечно, субъективной и неполной, проанализировать развитие аналитических теорий, касающихся столкновительного распыления. Будучи конспективной, статья направлена на рассмотрение теоретических аспектов явления распыления, вызванного ионной бомбардировкой аморфной и поликристаллических одноэлементных мишней (размер физической мишени предполагается всегда большим по сравнению со средним пробегом первичных ионов). Более того, среди различных типов распыленных частиц (нейтральных атомов, возбужденных нейтральных атомов, ионов, возбужденных или невозбужденных молекул, кластеров и проч.) мы будем изучать составляющие

наиболее значительную часть нейтральные атомы. Эта категория частиц наиболее изучена и общее мнение сводится к тому, что другие типы распыленных частиц могут быть рассмотрены с помощью адекватным образом модифицированных моделей, описывающих нейтральные атомы. Ограничение нашей статьи случаем столкновительного распыления объясняется существующей ситуацией в развитии теории, когда только этот тип распыления может быть описан в рамках единой теории.

Очевидно, что из-за нашего выбора мы упустили из рассмотрения ряд интересных аспектов явления распыления и заинтересованный читатель отсылается к некоторым текущим обзорным статьям или книгам по этой теме [5—13, 92—96, 110]^(1*).

Во втором разделе мы представляем историческое развитие и эволюцию как математических, так и физических концепций, приведших к созданию стандартной транспортной теории [14, 15]. Аспекты распыления, связанные с наличием поверхности, и следствия, вытекающие из развития теории Фальконе и Зигмунда [16], содержатся в разделе 3. И в заключение в разделе 4 представлена унифицированная теория распыления [17 — 20] и даны некоторые комментарии.

2. Исторический обзор и теоретический аппарат

Основной целью данной главы является попытка описания развития основных концепций, необходимых для построения современной аналитической теории распыления. Мы подчеркнем, что хотя большая часть физических идей возникла очень давно, формулировка современной аналитической теории в основном связана с развитием теоретического аппарата Линдхарда^(2*).

2.1. Предшественники: Кейвелл и Гаррисон^(3, 4*). С микроскопической точки зрения для того, чтобы распыление имело место, часть кинетической энергии первичной частицы должна быть передана частицам мишени, которые только после этого могут покинуть мишень в качестве распыленных частиц. Другими словами, мы можем выделить в процессе распыления две стадии: на первом шаге влетающая частица в процессе своего замедления в твердом теле передает энергию и импульс атомам мишени и инициирует движение атомов мишени, называемых атомами отдачи; на второй стадии часть атомов отдачи может покинуть твердое тело. Описание явления распыления на основе двух стадий впервые появилось в статьях Кейвелла [21, 22].

Кейвелл, исходя из сходства со столкновительной теорией замедления нейтронов, рассматривал первичную частицу как *твердую сферу*, которая теряет энергию, благодаря столкновениям с атомами мишени как замедлителями. Первичная частица может передать значительную часть своей энергии в одном столкновении атому мишени, который становится движущимся атомом отдачи и может ударить другой атом мишени, произвести вторичные, третичные и т.д. атомы отдачи. Когда возникают движущиеся атомы отдачи, в соответствии с вышеупомянутым описанием, должны появляться и такие атомы, которые покидают поверхность. Поскольку Кейвелл понял, что распыление — это явление *радиационного дефектообразования*, он предположил, что *все атомы, смещенные вблизи поверхности*, распыляются. Точнее, Кейвелл использовал теорию замедления нейтронов для того, чтобы рассчитать энергию, потерянную первичной частицей в твердом теле. Затем эту энергию он связал с числом смещенных атомов и, в конце концов, выделил из них атомы, смещенные вблизи поверхности, с помощью введения соответствующей *вероятности вылета*.

Поскольку, по мнению автора настоящей статьи, теория распыления Кейвелла содержала почти полную характеристику основных аспектов явления, опишем подход Кейвелла подробно.

Рассмотрим ион с начальной энергией E и массой M_1 проникающий в твердотельную мишень, состоящую из атомов с массой M_2 . Элементарная теория столкновений нейтронов [23] дает, что после n столкновений начальная энергия атома уменьшится до значения

$$E_n = E \exp(-n\xi), \quad (2.1)$$

где

$$\xi = 1 - \frac{(M_1 - M_2)^2}{2M_1 M_2} \ln \frac{M_1 + M_2}{M_1 - M_2}. \quad (2.2)$$

Поскольку в одном столкновении максимальная доля энергии налетающей частицы, передаваемая *первоначально покоящемуся* атому мишени, составляет

$$\gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \quad (2.3)$$

средняя энергия $(n+1)$ -го атома отдачи дается выражением

$$\langle E_{n+1} \rangle = \gamma E \exp(-n\xi). \quad (2.4)$$

Если за среднее число смещенных атомов, созданных атомом отдачи с энергией $\langle E \rangle$ в твердом теле, имеющим энергию смещения атомов E_d , принять [24]

$$n_0 = \left(\frac{\langle E \rangle}{E_d} \right)^{1/2}, \quad (2.5)$$

то число смещенных атомов, созданных атомом отдачи в n -м столкновении первичного атома, будет

$$n_s = \left(\frac{\langle E_n \rangle}{E_d} \right)^{1/2} = \left(\frac{\gamma E}{E_d} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{(n-1)\xi}{2} \right]. \quad (2.6)$$

Из этих n_s смещенных атомов, следуя Кейвеллу, будет распылена только следующая часть

$$n_y = n_s \exp(-\alpha n^{1/2}), \quad (2.7)$$

где α — параметр. Уравнение (2.7), представляющее функцию выхода в данной модели, было получено [22] в предположении, что средняя глубина, с которой распыляются атомы, определяется продвижением атома, совершающего случайные блуждания.

Окончательно число распыленных атомов

$$Y = \left(\frac{\gamma E}{E_d} \right)^{1/2} \sum_{n=1}^{n_e} \exp(-\alpha n^{1/2}) \exp \left[-\frac{(n-1)\xi}{2} \right], \quad (2.8)$$

где

$$n_l \approx \frac{1}{\xi} \ln \frac{\gamma E}{E_d}, \quad (2.9)$$

определяет последнее столкновение, в котором возникает смещенный атом.

Более подробное изложение и дальнейшее обобщение приведенных уравнений может быть найдено в оригинальной работе [22] ^(5*).

Анализ вышеприведенной формулировки очень полезен. Теория Кейвелла направлена на изучение распыления, произведенного при проникновении атомных частиц в вещество с низкой скоростью. Тем не менее, он предполагал, что теория, применимая в случае замедления быстрых нейтронов в веществе, соответствующим образом описывает и замедление атомов с низкой скоростью. Ясно, что аналогия между замедлением быстрых нейтронов и медленных ионов в веществе сомнительна и должна быть пересмотрена в более адекватной теории распыления.

Теория полностью пренебрегает взаимодействием между первичным ионом и электронами атомов мишени, рассматривая столкновения типа столкновений билльярдных шаров. Это замечание о проникновении медленных атомных частиц в вещество относится и к другим авторам, современникам Кейвелла, и представляет аспект теории Кейвелла, в направлении которого в дальнейшем должна быть произведена модификация. Результаты теории зависят от модели радиационных дефектов, использованной для рассмотрения передачи энергии, потерянной первичной частицей, смещенным атомным частицам мишени (см. уравнение (2.5)). В этом случае ясно, что улучшение модели радиационного повреждения может улучшить теорию.

В то время, когда Кейвелл представил свою теорию, экспериментальные данные были весьма ограничены, и фактически отсутствовали данные о глубине возникновения распыленных атомов. Тем не менее, Кейвелл положил, что распыленные атомы возникают на расстояниях, очень близких к поверхности, и использовал модель случайных блужданий для получения адекватного выражения. Это приближение также было использовано почти всеми последующими авторами. Главным пунктом этого приближения является то, что те атомы, которые выбиты и будут распылены, испытывают несколько упругих столкновений в процессе движения из места их возникновения в твердом теле до поверхности. Недавние экспериментальные данные о глубине зарождения распыленных атомов (см. ниже) говорят нам, что эта точка зрения на явление распыления неверна.

Мы закончим анализ теории Кейвелла напоминанием, что эта теория предсказала наличие порога распыления для ионов, бомбардирующих мишень при нормальном падении

$$E_{th} = \frac{E_d}{\gamma}, \quad (2.10)$$

который рассматривался автором в качестве верхней оценки этой величины.

Гаррисон [25] сделал попытку улучшить концептуальный подход Кейвелла. Действительно, Гаррисон отказался от теории столкновений нейтронов и предположил, что механизм распыления адекватно описывается соответствующим линейным транспортным уравнением Больцмана. Поскольку эта теория не дала аналитического результата, мы не обсуждаем подробно ее формулировку, но напоминаем, что использование большинства транспортного уравнения, когда это соответствующим образом сделано (транспортная теория Зигмунда [15]), оказалось очень подходящим для описания ряда ха-

рактеристик распыления. Гаррисон является автором интуитивного подхода, а неудача в получении аналитического результата в его формулировке заключается скорее в неудаче адекватного параллельного развития концепций прохождения частиц через вещество. Другими словами, правильное описание явления распыления требует развития новых общих положений о проникновении медленных атомных частиц в вещество. Это было еще невозможно в то время, когда Гаррисон предложил свой подход. В следующем разделе мы обсудим этот новый физический и математический аппарат подробно.

2.2. Теоретический подход Линдхарда. Проникновение медленных атомных частиц в вещество в общем случае представляет широкую область физики, и в этой статье мы ограничим наше обсуждение теми вопросами, которые имеют непосредственное отношение к современному аналитическому рассмотрению явления распыления.

При проникновении частицы в твердое тело взаимодействие между первичной частицей и атомами мишени, следуя работам Линдхарда [26—28], может быть в хорошем приближении разделено на два *некоррелирующих* акта: бинарные упругие столкновения между первичной частицей и атомом мишени (упругие или с ядерными потерями энергии и рассеянием) и выделенные отдельно электронные энергетические потери, определяющие процесс непрерывного замедления, но не влияющие на изменение направления движения первичной частицы^(6*). В то время, как в области высоких скоростей разделение электронных и ядерных процессов в шестидесятые годы признавалось почти всей научной общественностью, в области низких скоростей это разделение принималось с большим трудом. Действительно, трудность принятия линдхардовского разделения может быть оправдана измерениями, которые показывали, что в области низких скоростей в каждом столкновении в одно и то же время имели место как процесс рассеяния, так и электронные и ядерные потери. Тем не менее, как показал Линдхард [26, 27], в теории прохождения медленных атомных частиц через вещество *электронные процессы входят в расчеты через члены, определяющие непрерывное торможение, тогда как статистика упругих потерь и рассеяния определяет основную структуру уравнений*.

В следующей части этой главы мы опишем основные элементы линдхардовского теоретического аппарата.

2.2.1. Потенциал межатомного взаимодействия. Взаимодействие между первичной частицей и атомом мишени является типичной проблемой многих тел и возможным описанием взаимодействия может явиться использование самосогласованного потенциала Хартри—Фока [30, 31]. Благодаря тому, что движение частиц в самосогласованном потенциале может рассматриваться в большей части пространства как квазиклассическое, то может быть использовано квазиклассическое (или Томаса—Ферми) приближение в методе Хартри—Фока [32, 33]. Другими словами, взаимодействие между двумя частицами с зарядом $Z_1 e$ и $Z_2 e$, где e — заряд электрона, а Z_1 и Z_2 — атомные номера сталкивающихся частиц, может быть описано соответствующим образом статистической моделью Томаса—Ферми. В пределах точности данной модели межатомный потенциал взаимодействия между двумя частицами может быть описан следующим экранированным кулоновским потенциалом [34, 35]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} f\left(\frac{r}{a}\right), \quad (2.11)$$

где r — расстояние между двумя частицами, $f(r/a)$ — функция Томаса—Ферми [36], а a — радиус экранирования. Линдхард и соавторы [28] пришли к тому же самому заключению, а единственное отличие в двух конечных формулах для потенциала содержалось в выражении для радиуса экранирования. Выбор между радиусами экранирования Фирсова и Линдхарда не может быть мотивирован какими-либо научными аргументами. В данной статье мы примем линдхардовский радиус экранирования, который имеет следующий вид

$$a = \frac{0,8853a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}, \quad (2.12)$$

где $a_0=0,529 \text{ \AA}$ — боровский радиус.

2.2.2. Степенное сечение столкновений. Теперь рассмотрим процесс рассеяния двух частиц в классическом представлении. Мы ограничимся случаем, в котором ударяемая частица (M_2) покоятся перед столкновением в лабораторной системе. Если Φ_1 и Φ_2 — углы рассеяния двух частиц в лабораторной системе, а θ — угол рассеяния в системе центра масс, соотношение между ними может быть записано формулой [37]

$$\operatorname{tg} \Phi_1 = \frac{M_1 \sin \theta}{M_1 + M_2 \cos \theta}, \quad (2.13)$$

$$\Phi_2 = \frac{\pi - \theta}{2}. \quad (2.14)$$

В проблеме прохождения частиц через вещество и в особенности в области изучения радиационных повреждений важной физической величиной является энергия T , передаваемая первичной частицей ударяемому атому. Простые расчеты показывают, что справедливо следующее соотношение

$$T = \gamma E \sin^2 \frac{\theta}{2} = T_m \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2.15)$$

Кажется очевидным, что все основные величины, определяющие процесс рассеяния, могут быть выражены через известный угол θ . К сожалению, основное выражение для угла рассеяния θ для сферически симметричного потенциала не может быть рассчитано аналитически, если рассматривается экранированный кулоновский потенциал [37, 38]. Можно получить некоторые полезные соотношения при малых углах рассеяния. В этом случае мы можем записать [28, 34]

$$\theta = -\frac{1}{\mu v^2} \frac{\partial}{\partial b} \int_{-\infty}^{\infty} dz V((b^2 + z^2)^{1/2}), \quad (2.16)$$

где μ — приведенная масса, v — скорость налетающей частицы, b — прицельный параметр и z — координата, в направлении которой движется первичная частица.

Если мы подставим соотношение (2.11) в уравнение (2.16), то получим [28]

$$\theta = -d \int_0^{\infty} dz \left\{ \frac{b^2}{(b^2 + z^2)^{3/2}} \left[f\left(\frac{(b^2 + z^2)^{1/2}}{a}\right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(b^2 + z^2)^{1/2}}{a} f'\left(\frac{(b^2 + z^2)^{1/2}}{a}\right) \right] \right\}, \quad (2.17)$$

где величина

$$d = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{\mu v} \quad (2.18)$$

называется *диаметром столкновения* [29]. f' является производной от f по прицельному параметру.

Если мы введем новую переменную

$$\alpha = \arccos \frac{b}{(b^2 + z^2)^{1/2}}, \quad (2.19)$$

то получим

$$\theta = \frac{d}{b} g\left(\frac{b}{a}\right), \quad (2.20)$$

где

$$g\left(\frac{b}{a}\right) = \int_0^{\pi/2} d\alpha \cos \alpha \cdot \left(f\left(\frac{b}{a \cos \alpha}\right) + \frac{b}{a \cos \alpha} f'\left(\frac{b}{a \cos \alpha}\right) \right). \quad (2.21)$$

Следуя Линдхарду [26 — 28], мы введем безразмерную энергетическую переменную

$$\varepsilon = \frac{a}{d} = \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} E \quad (2.22)$$

и запишем выражение (2.20) в виде

$$\theta_\varepsilon = \frac{a}{b} g\left(\frac{b}{a}\right). \quad (2.23)$$

Произведение θ и ε является функцией только одной переменной b/a . Это позволяет нам, производя обратное преобразование, получить дифференциальное поперечное сечение, являющееся функцией только одной переменной, и этот результат справедлив для всех экранированных кулоновских потенциалов. Численные расчеты поперечного сечения можно найти в оригинальной статье [28]. Поскольку мы интересуемся аналитическими выражениями, мы продолжим изложение, выбирая следующую форму функции экранирования [28]

$$f\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{k_s}{s} \left(\frac{a}{r}\right)^{s-1}, \quad (2.24)$$

где k_s — константа, а $s = 1, 2, \dots, \infty$. Для этого конкретного выбора мы можем записать выражение для угла рассеяния в простой форме

$$\theta = k_s \gamma_s \left(\frac{a}{b}\right)^s \quad (2.25)$$

с

$$\gamma_s = \int_0^{\pi/2} d\alpha \cos^s \alpha = \frac{\Gamma(1/2)\Gamma((s+1)/2)}{2\Gamma(s/2+1)}, \quad (2.26)$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера [39].

Уравнение (2.25) позволяет получить аналитический вид дифференциального сечения $d\sigma(\theta)$. Действительно, по определению [37]

$$d\sigma(\theta) = 2\pi b \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\theta, \quad (2.27)$$

и мы получаем, используя соотношение (2.25),

$$d\sigma(\theta) = \pi a^2 \left(\frac{K_s \gamma_s}{\epsilon} \right)^{2/s} d \left(\frac{1}{\theta} \right)^{2/s} \quad (2.28)$$

и, записывая через переданную энергию

$$d\sigma(T) = \frac{\pi}{2} a^2 \lambda_s \epsilon^{-2/s} T_m^{1/s} T^{-1-(1/s)} dT, \quad (2.29)$$

где

$$\lambda_s = \frac{2}{s} \left(\frac{k_s \gamma_s}{2} \right)^{2/s}. \quad (2.30)$$

При получении уравнения (2.29) мы использовали соотношение (2.15) в пределе малых углов рассеяния.

Соотношение (2.29) называется *линдхардовским степенным поперечным сечением* и, хотя оно было получено для далеких столкновений (приближение малых углов рассеяния), можно показать, что оно достаточно корректно даже для близких столкновений. Обычно это степенное сечение используется в форме, предложенной Зигмундом [40],

$$d\sigma(T) = C_m E^{-m} T^{-1-m} dT, \quad (2.31)$$

где

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a^2 \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^m \left(\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)^{2m}, \quad (2.32)$$

с $m=1/s$. В табл. I показаны несколько используемых значений константы λ_m для различных значений m .

Таблица I. Значения λ_m для различных величин m .

m	1	1/2	1/3	1/4	1/5	0
λ_m	0,5	0,327	1,309	1,4	2,92	24

данной

статье мы также предположим, что движение частиц, проникающих в вещество, может быть адекватно описано классической механикой [29, 37]. Если мы также предположим, что все упругие столкновения в твердом теле являются парными, тогда, так же как и в предыдущих разделах, мы можем получить все основные величины, необходимые для описания процесса рассеяния. Следующим шагом является создание теоретического аппарата, описывающего ядерные и электронные энергетические потери. При замедлении частиц в веществе частицы предполагаются точечными, испытывающими столкновения в соответствии с определенными сечениями. Таким образом, необходимо определить статистику столкновений. Будем считать, что вероятность того, что частица, которая замедляется в твердом теле, испытывает столкновение при прохождении малого пути ΔR пропорциональна ΔR и не зависит от предыдущей истории частицы. Такая статистика столкновений

2.2.3. Прохождение частиц через неупорядоченные материалы. В

адекватно описывает замедление частиц в неупорядоченном веществе и относится к тем материалам, которые мы будем рассматривать в данной статье. Опираясь на последнее предположение, можно показать, что вероятность испытать столкновение частице, проходящей путь ΔR , есть

$$Nd\sigma\Delta R, \quad (2.33)$$

где N — плотность числа атомов в мишени (атом/см³), $d\sigma$ — поперечное сечение, характеризующее вероятность столкновения.

Если поперечное сечение в соотношении (2.33) является сечением, дифференциальным по переданной энергии T , то средние энергетические потери частицы в упругих столкновениях могут быть вычислены по формуле [29]

$$\langle \Delta E \rangle = N\Delta R \int_0^{T_m} T d\sigma(T). \quad (2.34)$$

Для бесконечно малого пройденного пути мы можем записать [26, 29, 40]

$$\left(\frac{dE}{dR} \right)_n = NS_n(E), \quad (2.35)$$

где

$$S_n(E) = \int_0^{T_m} T d\sigma(T). \quad (2.36)$$

Выражение (2.36) представляет *сечение ядерного торможения* в то время, как (2.35) — *ядерное торможение*. Обе величины играют центральную роль в современных теориях прохождения частиц через вещество и, особенно, в области низких скоростей. Обе величины имеют отношение к проблеме упругих энергетических потерь.

Если мы введем в формулу (2.35) степенное сечение (2.31), то мы получим [26, 40]

$$S_n(E) = \frac{1}{1-m} C_m \gamma^{1-m} E^{1-2m}. \quad (2.37)$$

Аналогичные подходы могут быть развиты и для рассмотрения электронных энергетических потерь. Действительно, если мы обозначим через $d\sigma_e$ сечение, дифференциальное по энергии $\sum_i T_{e,i}$, переданной электронной подсистеме (каждый электрон определен индексом i), то, используя вышеприведенную процедуру, мы получим

$$\left(\frac{dE}{dR} \right)_e = NS_e(E), \quad (2.38)$$

где

$$S_e(E) = \int \left(\sum_i T_{e,i} \right) d\sigma_e. \quad (2.39)$$

Соотношение (2.39) определяет *электронное сечение торможения*, а (2.38) — *электронное торможение*.

Конкретная форма выражения сечения электронного торможения зависит

от того, в какой области начальных скоростей производится рассмотрение [41]. В области низких скоростей, определяемой неравенством

$$v < v_0 Z_1^{2/3}, \quad (2.40)$$

где v_0 — скорость электрона на первой боровской орбите, почти все теории предсказывают [41] следующую форму величины S_e

$$S_e \propto v^p, \quad (2.41)$$

где p — число между 1 и 2. Теория Линдхарда—Шарффа [42], которую мы будем использовать в данной статье, дает величину p , равную 1, и коэффициент пропорциональности K :

$$K = \xi_e 8\pi e^2 \frac{a_0}{v_0} \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}, \quad (2.42)$$

где $\xi_e \approx Z_1^{1/6}$. Несмотря на частое использование пропорциональности сечения электронного торможения начальной скорости, следует подчеркнуть, что экспериментально наблюдаемая зависимость S_e от v следует этому закону лишь приблизительно. Теоретические результаты будут всегда искажены из-за этого приближения.

Используя совместно электронное и ядерное торможение, мы можем записать соотношение

$$\frac{dE}{dR} = N(S_n(E) + S_e(E)), \quad (2.43)$$

которое хорошо демонстрирует основное разделение на части энергетических электронных и ядерных потерь. Как уже обсуждалось, две части энергетических потерь не являются эквивалентными в теоретическом аппарате Линдхарда, поскольку сечение электронного торможения входит в теорию как добавочный член, в то время, как выбор статистики столкновений определяет вид уравнений и способ включения в теорию упругих энергетических потерь. Этот аспект будет освещен в следующем разделе данной главы.

Уравнение (2.43) также позволяет оценить путь $R(E)$, проходимый частицей до ее остановки в веществе. Действительно, мы можем записать [26, 40]

$$R(E) = \int_0^E \frac{dE'}{N(S_n(E') + S_e(E'))}. \quad (2.44)$$

При $S_e = 0$ и использовании степенного сечения (2.44) получаем

$$R(E) = \frac{1-m}{2m} \gamma^{m-1} \frac{E^{2m}}{NC_m}. \quad (2.45)$$

Для полноты понимания и большей ясности линдхардовского подхода требуется ознакомить читателя с интегро-дифференциальными уравнениями [26, 27], используемыми для описания прохождения атомных частиц с низкой скоростью через вещество. Мы начнем с *теории пробегов* [26, 40].

Согласно подходу Линдхарда мы введем распределение пробегов $P(E, R)$ таким образом, что $P(E, R)dR$ представляет вероятность того, что ион с начальной энергией E затормозится до остановки после прохождения пути (R, dR) . Можно суммировать аргументы, позволяющие получить интег-

ро-дифференциальное уравнение для функции $P(E, R)$ [26, 27]. Примем, что энергетические потери частицы после прохождения пути происходят в результате n случайных столкновений; уравнение баланса может быть записано в предположении, что n столкновений могут быть реализованы двумя различными путями: во-первых, процесс n столкновений может иметь место при прохождении пути $R - \Delta R$, а во-вторых, частица может испытать ($n - 1$) столкновений при прохождении пути $R - \Delta R$, а последнее столкновение в оставшемся отрезке ΔR . Поскольку обе ситуации возможны, уравнение баланса принимает следующую форму [26, 40]:

$$\begin{aligned} P(E, R) = & (1 - N\Delta R \int d\sigma_{n,e})P(E, R - \Delta R) + \\ & + N\Delta R \int_i d\sigma_{n,e} P(E - T - \sum_i T_{e,i}, R - \Delta R), \end{aligned} \quad (2.46)$$

где $N\Delta R d\sigma_{n,e}$ — вероятность процесса столкновения, при котором передается энергия $\sum_i T_{e,i}$ электронам и энергия T — ударяемым атомам. Последняя идет на увеличение кинетической энергии атомов.

В пределе $\Delta R \rightarrow 0$ уравнение (2.46) превращается в следующее

$$-\frac{\partial}{\partial R}P(E, R) = N \int_i d\sigma_{n,e} (P(E, R) - P(E - T - \sum_i T_{e,i}, R)). \quad (2.47)$$

Если $d\sigma$ описывает упругие столкновения и $d\sigma_e$ — соответствующие неупругие столкновения, то предположение об отсутствии корреляции между упругими и неупругими столкновениями позволяет преобразовать уравнение (2.47) в следующий вид

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial R}P(E, R) = & N \int d\sigma (P(E, R) - P(E - T, R)) + \\ & + N \int_i d\sigma_e (P(E, R) - P(E - \sum_i T_{e,i}, R)). \end{aligned} \quad (2.48)$$

И окончательно, если мы предположим, что электронные энергетические потери $\sum_i T_{e,i}$, всегда малы по сравнению с начальной энергией и с упругими энергетическими потерями, мы получаем хорошо известное интегро-дифференциальное уравнение для функции P [26, 40]

$$-\frac{\partial}{\partial R}P(E, R) = N \int d\sigma (P(E, R) - P(E - T, R)) + NS_e(E) \frac{\partial}{\partial E}P(E, R). \quad (2.49)$$

Уравнение (2.49) имеет структуру, о которой говорилось ранее: электронные процессы входят в уравнение только через сечение торможения, в то время как статистика упругих энергетических потерь и рассеяние определяют форму интегро-дифференциального уравнения.

Уравнение (2.49) может быть решено аналитически [26, 40]. Здесь мы только обсудим отношение этого уравнения к соотношению (2.44).

По определению, распределение $P(E, R)$ нормировано следующим образом

$$\int_0^\infty dR P(E, R) = 1. \quad (2.50)$$

Если мы введем пространственные моменты распределения

$$R^n(E) = \int_0^\infty dR R^n P(E, R), \quad (2.51)$$

уравнение (2.49) превращается в следующее

$$nR^{n-1}(E) = N \int d\sigma (R^n(E) - R^n(E - T)) + NS_e(E) \frac{d}{dE} R^n(E). \quad (2.52)$$

Для $n = 1$ использование уравнения (2.50) позволяет получить

$$1 = n \int d\sigma (R^1(E) - R^1(E - T)) + NS_e(E) \frac{d}{dE} R^1(E), \quad (2.53)$$

где $R^1(E) = \langle R(E) \rangle$ — средний пробег.

Окончательно, если $T \ll E$ мы получаем такое решение

$$\langle R(E) \rangle = \int_0^E \frac{dE'}{N(S_n(E') + S_e(E'))}. \quad (2.54)$$

Поскольку это решение полностью аналогично соотношению (2.44), мы делаем вывод, что в приближении далеких столкновений величина $R(E)$, определенная соотношением (2.44), равна среднему пробегу (см. (2.54)).

Практически, полезной величиной для последующего обсуждения является теряемая энергия в зависимости от пройденного пути, которая может быть получена из уравнения (2.54) в случае $S_e(E) = 0$.

Если E_0 — начальная энергия частицы, движущейся в твердом теле по прямой в направлении оси x , то соотношение между пройденным путем x и энергией $E(x)$ для точки x может быть записано как

$$x = \int_{E(x)}^{E_0} \frac{dE}{NS_n(E)}. \quad (2.55)$$

Принимая во внимание соотношение (2.45), мы получаем

$$E(x) = E_0 \left(1 - \frac{x}{R(E)}\right)^{1/2m}. \quad (2.56)$$

В пределе $m \rightarrow 0$

$$E(x) = E_0 \exp(-NC_0 x). \quad (2.57)$$

В уравнении (2.57) физический смысл величины

$$R_0 = \frac{1}{NC_0} \quad (2.58)$$

заключается в том, что это есть средний пробег для частиц, движущихся с очень малой скоростью в веществе. Действительно, в рамках линдхардовского подхода для $S_e(E) = 0$ и степенного сечения пространственные моменты имеют следующий скейлинг:

$$R^n(E) \propto \left(\frac{E^{2m}}{NC_m}\right)^n, \quad (2.59)$$

где коэффициент пропорциональности зависит только от отношения M_2/M_1 и величины m . Для частиц, движущихся при энергиях порядка энергии распыляющихся частиц (несколько эВ), подходящим значением для величины m предполагается [15] значение $m = 0$.

Для дальнейших расчетов необходимы две следующие величины: средний пробег и средний проективный пробег.

Существенное усовершенствование в изучении прохождения медленных атомных частиц через вещество может быть произведено с помощью введения *распределения точек остановки*, замедляющих частиц [26, 40]. Действительно, мы можем определить [40] функцию $F(E, e, x)$ так, что Fdx представляет вероятность того, что ион с начальной скоростью $v = (E, e)$ при $x = 0$ остановится на глубине (x, dx) . Если предположить, что мишень *безгранична*, мы находим [40], используя уравнение баланса и ту же процедуру, что приведена выше

$$\begin{aligned} -\cos \theta \frac{\partial}{\partial x} F(E, e, x) &= N \int d\sigma(v, v_1) (F(E, e, x) - \\ &- F(E - T, e_1, x)) + NS_e(E) \frac{\partial}{\partial E} F(E, e, x), \end{aligned} \quad (2.60)$$

где θ — угол между вектором v и направлением нормали поверхности, e_1 — единичный вектор, определяющий направление скорости рассеянного иона и

$$d\sigma(v, v_1) = d\sigma(T) \frac{d^2 e_1}{2\pi} \delta(ee_1 - \cos \Phi_1) \quad (2.61)$$

— дифференциальное сечение рассеяния частицы со скоростью v в состояние со скоростью $(v_1, d^3 v_1)$. Условия нормировки теперь

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx F(E, e, x) = 1. \quad (2.62)$$

Если при рассеянии предполагается азимутальная симметрия, то стандартный метод решения уравнения (2.60) опирается на разложение по полиномам Лежандра угловой части и нахождение моментов пространственного распределения по пути [43]. Из уравнения для первого момента

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x F(E, e, x) = F^1(E, e), \quad (2.63)$$

которое определяет *средний пробег*, мы можем найти следующее уравнение для *проективного пробега* $R_p(E)$

$$1 = N \int d\sigma(T) (R_p(E) - \cos \Phi_1 R_p(E - T)) + NS_e(E) \frac{d}{dE} R_p(E). \quad (2.64)$$

Соотношение между двумя последними величинами

$$\langle x \rangle = R_p(E) \cos \theta. \quad (2.65)$$

Для $S_e(E) = 0$ и степенного сечения решение для проективного пробега может быть записано как

$$R_p(E) = A_p \frac{E^{2m}}{NC_m}, \quad (2.66)$$

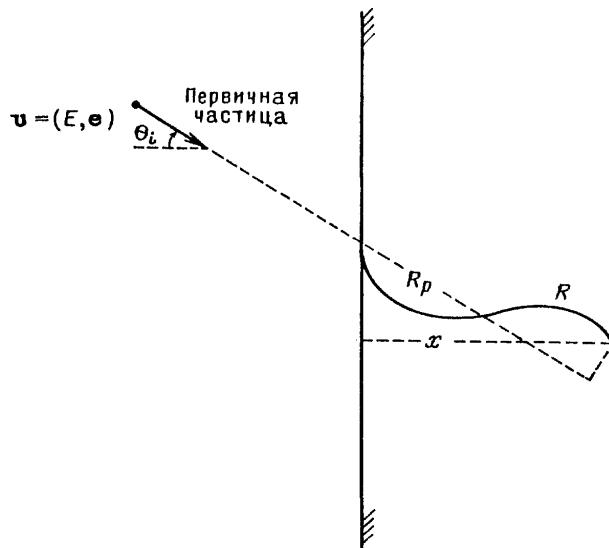


Рис. 2. Параметры прохождения частиц через вещество: R — длина пути, R_p — проективный пробег, x — глубина проникновения частиц.

где A_p зависит только от отношения M_2/M_1 и m . Отношение $R_p(E)/\langle R(E) \rangle$, которое зависит только от отношения M_2/M_1 и от m , называется *корректировкой пробега*. На рис. 2 показаны параметры прохождения частиц, описанные в данном разделе. Более подробное изложение теоретического подхода Линдхарда может быть найдено в оригинальных статьях [26 — 28] (см. также [40, 43, 44]).

2.3. Теория Брандта и Лауберта. Теория распыления, представленная в 1967 г. Брандтом и Лаубертом [45], была первой попыткой использования некоторых линдхардовских концепций в распылении. Она, однако, основывалась на таком же подходе, что и теория Кейвелла (полное разделение между функцией, описывающей смещенные атомы, и функцией, описывающей эмиссию атомов из мишени). Упоминание в этой статье теории Брандта и Лауберта вызвано следующими причинами: хотя их подход оказался слишком простым по сравнению с последующими теориями, они доказали, что использование даже части линдхардовских концепций, может достаточно улучшить некоторые результаты более проработанных теорий. Действительно, полученная ими формула для коэффициента распыления такова

$$Y = \frac{1}{4 \cos \theta_i} \frac{l_0 N S_n(E)}{E_d} (f(y) - g(S_e(E))), \quad (2.67)$$

где θ_i — угол между направлением движения первичной частицы и внешней нормалью поверхности, l_0 — константа, характеризующая материал мишени, E_d — энергия смещения, g — функция, учитывающая электронные возбуждения для энергетических потерь, f — функция безразмерной переменной

$$y = \frac{E}{l_0 N S_n(E)}. \quad (2.68)$$

Наиболее относящимся к делу результатом теории Брандта и Лауберта является их вывод о пропорциональности коэффициента распыления ядерному торможению. Этот результат является общим с результатами более аккуратных теорий [15—17] и хорошо доказан при соответствующих физических

условиях многими экспериментами [46]. В случае пренебрежения электронными потерями энергии уравнение (2.67) переходит в следующее

$$Y = \frac{1}{4 \cos \theta_i} \frac{l_0 N S_n(E)}{E_d} f(y). \quad (2.69)$$

В этом виде коэффициент распыления наиболее удобен для последующего сравнения. Данная общая форма коэффициента распыления, которая к тому же корректно получена, хорошо подходит для сопоставления расчетов со многими экспериментальными данными. Здесь мы подчеркиваем, что в области малых скоростей и не для легких ионов, т.е. когда электронные потери энергии пренебрежимы, коэффициент распыления пропорционален ядерному торможению и некоторой универсальной функции.

2.4. Теория Зигмунда. Теория Зигмунда, так же как и теория Гаррисона, основана на соответствующем линейном транспортном уравнении Больцмана. Тем не менее, сравнение между этими двумя теориями не может быть произведено дальше. Действительно, хотя Гаррисон адаптировал нейтронную диффузионную теорию для рассмотрения явления распыления и использовал прямую форму линейного больцмановского транспортного уравнения, Зигмунд непосредственно записал основные уравнения в обращенном виде. Транспортные уравнения Зигмунда не имеют нелинейного аналога [47] и удобны для полного использования теоретического аппарата Линдхарда. Это последнее свойство позволило теории дать также аналитические результаты.

Вследствие центрального положения теории Зигмунда в ряду теорий распыления многие аспекты ее могут быть найдены в нескольких обзорных статьях (изучение оригинальных статей также может быть полезным и служить источником указаний на некоторые вопросы распыления ^(7*)). В данном разделе мы обсудим только коэффициент распыления в отношении его к выводам предыдущих авторов. Дальнейшие обсуждения могут быть найдены в следующей главе статьи.

Основной величиной транспортной теории Зигмунда является функция распределения $G(r, v, v_0, t)$ которая определяет плотность движущихся атомов в реальном пространстве r и в пространстве скоростей v_0 . Более точно, величина $G d^3 v_0 dx$ представляет среднее число атомов, движущихся в момент времени t в слое (x, dx) со скоростью $(v_0, d^3 v_0)$, если в момент времени $t = 0$ некоторый атом начал движение на плоскости $x = 0$ (при значении $x = 0$ предполагается наличие поверхности). Поскольку число атомов со скоростью $(v_0, d^3 v_0)$, проходящих через плоскость x в интервал времени dt , дается соотношением

$$G(x, v, v_0, t) d^3 v_0 |v_{0x}| dt, \quad (2.70)$$

где v_{0x} есть x — компонента вектора скорости v_0 , то коэффициент распыления может быть записан как

$$Y = \int_0^\infty d^3 v_0 |v_{0x}| \int_0^\infty dt G(0, v, v_0, t). \quad (2.71)$$

Интегрирование по скорости атомов отдачи распространено на все значения скоростей, имеющих отрицательную компоненту, достаточно большую для

того, чтобы преодолеть поверхностные силы связи. Для бесконечной мишени и в приближении изотропных потоков атомов выражение Зигмунда для коэффициента распыления выглядит следующим образом

$$Y_0 = \frac{\Gamma F_D(E, e, x=0)}{8NC_0U}, \quad (2.72)$$

где Γ — константа, равная 0,608, F_{Ddx} — средняя энергия, переданная атомам отдачи на глубине (x, dx) первичным ионом с начальной энергией E и начальным направлением e [43], U — высота плоского поверхностного потенциального барьера; кроме того, C_0 — константа степенного сечения для $m=0$ полагалась равной 1,808 Å [15].

Для того чтобы произвести сравнение соотношения (2.72) с предыдущими теориями более ясно, мы запишем функцию F_D для случая, когда начальный ион падает на мишень по нормали, а упругие энергетические потери являются доминирующими:

$$F_D(E) = aNS_n(E), \quad (2.73)$$

где a — параметр, зависящий только от m и M_2/M_1 .

В этом случае, как и в теории Брандта и Лауберта, коэффициент распыления пропорционален ядерному торможению. Однако так же и в этом случае сравнение не может быть распространено дальше. Для понимания основных различий между этими двумя подходами мы обсудим зависимость коэффициента распыления от угла падения иона. В рамках линейной каскадной теории явления распыления простые соображения, основанные на использовании пробегов, как это было сделано в теории Брандта и Лауберта, ведут к зависимости $1/\cos\theta_i$ от угла падения. Этот результат, применимый только для случая $M_1 \ll M_2$, основан на предположении, что выделенная в веществе энергия в результате первых столкновений (прямое столкновение иона с атомом мишени), не уносится от траектории частицы быстрыми атомами отдачи. Поскольку атомы отдачи могут иметь значительные пробеги, ясно, что замена величины F_D величиной S_n не возможна в общем случае.

Пропорциональность коэффициента распыления функции F_D также является лучшим доказательством сильной связи между транспортным и столкновительным подходами к рассмотрению явления распыления: хотя F_D является типичной функцией дефектов, она появляется в транспортном уравнении. Это наводит на мысль, что независимо от начального подхода к распылению, либо в транспортной, либо в столкновительной формулировке, при одинаковых физических условиях должен быть получен один и тот же результат. И более важно для дальнейшего исследования, что в области применимости результатов Зигмунда другие столкновительные теории распыления должны воспроизвести результаты транспортного подхода Зигмунда.

Возможные усовершенствования теории Зигмунда связаны с техническими вопросами и обсуждались самим автором теории [47, 48]. Изучение роли поверхности в явлении кажется исторически обусловленным. Подход Зигмунда отражает линдхардовские построения, которые ориентированы только на вопросы прохождения частиц через вещество. Атомы отдачи, которые будут распылены, и атомы отдачи, которые движутся в объеме, подчиняются одной и той же физике: глубина зарождения распыляемых атомов связана в интерпретации Зигмунда с пробегом медленных частиц в веществе. В следующих

главах мы покажем, что правильная интерпретация роли поверхности в распылении может устраниТЬ некоторые недоразумения транспортной формулировки и развить новые идеи в изучении явления распыления.

2.5. Томпсоновский энергетический спектр. Для объяснения своих пионерских экспериментов по изучению энергетических спектров распыленных частиц Томпсон в 1968 г. развиЛ столкновительную теорию распыления [14]. В рамках его формулировки и с использованием системы обозначений [16], удобной для дальнейших обсуждений, энергетический спектр распыленных частиц может быть записан так:

$$J_0(E_1) = \frac{\Gamma F_D(E, e, x=0)}{4NC_0} \frac{E_1}{(E_1 + U)^3}, \quad (2.74)$$

где E_1 — энергия распыленных частиц.

Главные характеристики этого спектра легко выделяются. Спектр дает положение максимума E_p , которое зависит только от величины поверхностной энергии связи U

$$E_p = \frac{U}{2}. \quad (2.75)$$

Для $E_1 \gg U$ спектр Томпсона дает энергетическую зависимость обратно пропорциональную квадрату энергии и эта зависимость в значительной степени воспроизводит энергетическое распределение атомов отдачи в линейном столкновительном каскаде [40]. Кроме того, форма поверхностного потенциального барьера, как и в теории Зигмунда, предполагалась плоской.

Окончательно, энергетический спектр Томпсона связан с зигмундовским коэффициентом распыления хорошо известным соотношением

$$Y_0 = \int_0^\infty dE_1 J_0(E_1). \quad (2.76)$$

Учитывая последнее соотношение мы будем ссылаться на транспортную теорию как на теорию Зигмунда—Томпсона. Однако мы хотим подчеркнуть, что два подхода были разработаны с использованием различных приближений (транспортного и столкновительного приближений), хотя они относятся к одной и той же физической ситуации.

2.6. “Подозрительный” недостаток. Как упоминалось во введении, число оригинальных работ или обзоров, касающихся явления распыления, весьма значительно. Однако, исключая обзор Келли [12] или более современный — Экштайна [49]^(8*) проблема нахождения теоретического выражения для средней энергии распыленных атомов $\langle E_1 \rangle$ в рамках теории Зигмунда—Томпсона никогда не была решена [20]. Действительно, через два десятилетия после опубликования теории отсутствует вытекающее из транспортной теории выражение для $\langle E_1 \rangle$. Взглянем более пристально на причины. В принципе, нет ничего сложного в определении средней энергии распыленных атомов в теории Зигмунда—Томпсона. Используя соотношение (2.76), мы получаем

$$\langle E_1 \rangle = Y_0^{-1} \int_0^\infty dE_1 E_1 J_0(E_1). \quad (2.77)$$

Однако беглый взгляд на выражение (2.77) показывает, что средняя энергия здесь не может быть рассчитана, поскольку интеграл расходится.

В следующем разделе мы покажем, что эта проблема может быть решена корректно только с помощью более точного учета поверхности в модели распыления.

3. Распыление как поверхностное явление

В последние годы ряд экспериментов [50 — 55] был нацелен на получение более точной информации о глубине зарождения распыленных частиц. Эта величина играет важную роль в моделировании многократных взаимодействий и бинарных соударений [11,13, 56 — 58], а также при рассмотрении углового распределения атомов, распыленных из сегрегированных сплавов [59 — 63]. Теоретическая формулировка проблемы распыления, которая содержит точную информацию о глубине зарождения распыленных частиц, впервые была предложена только в 1981 г. Фальконе и Зигмундом [16]. В данной главе мы обсудим эту теорию и произведенные модификации, с помощью которых в первоначальный подход были включены правильные представления о роли поверхности в распылении.

3.1. Теория Фальконе и Зигмунда. При описании механизма распыления мы четко выделим два этапа. На первом шаге описывается процесс передачи энергии и импульса от первичной частицы атомам мишени и, таким образом, процесс генерации смещенных атомов. На втором шаге часть смещенных атомов при определенных условиях покидает поверхность. Наиболее общий подход к теоретическому изучению распыления, в котором предполагается четкое разделение этих двух шагов при рассмотрении, содержится в работе Фальконе и Зигмунда [16].

Следуя этим авторам, примем, что когда первичная частица, стартующая с плоскости $x=0$ с энергией E в направлении e , проникает в твердотельную мишень, она генерирует линейный каскад столкновений, при этом можно определить функцию $D(E, e, E_0, e_0, x)$. Такую, что $D dx dE_0 d_2 e_0$ есть среднее число атомов мишени, вовлеченных в движение первичной частицей, прошедшей путь (x, dx) с начальной энергией (E_0, dE_0) в угловом интервале $(e_0, d^2 e_0)$. Мы назовем эту функцию функцией повреждений.

Кроме того, если мы определим величиной $P(E_0, e_0, x; E_1, e_1) dE_1 d^2 e_1$ вероятность того, что атом каскада (E_0, e_0, x) вылетит с поверхности с энергией (E_1, dE_1) угловом интервале $(e_1, d^2 e_1)$, то двойное дифференциальное распределение распыленных частиц может быть записано следующим образом

$$J(E_1, e_1) = \int dx dE_0 d^2 e_0 D(E, e; E_0, e_0, x) P(E_0, e_0, x; E_1, e_1). \quad (3.1)$$

Мы назовем функцию P — *функцией выхода*. Из соотношения (3.1) коэффициент распыления может быть получен с помощью следующего интеграла

$$Y = \int dE_1 d^2 e_1 J(E_1, e_1). \quad (3.2)$$

Поскольку соотношение (3.1) по существу эквивалентно линейному транспортному уравнению [64], предположение, что соотношение (3.1) может описывать явление распыления эквивалентно предположению, что явление может быть описано соответствующим линейным транспортным уравнением. После того, как получено соотношение (3.1), возникает проблема определения адек-

ватных выражений для D и P . В работе [16] для описания распыления в области применимости теории Зигмунда—Томпсона авторы предложили для D и P следующие выражения:

$$D(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0, x) = \frac{\Gamma F_D(E, \mathbf{e}, x)}{E_0^2}, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} P(E_0, \theta_0, \chi_0, x; E_1, \theta_1, \chi_1) = \\ = \delta\left(E_1 - E_0 \exp\left(\frac{NC_0 x}{\cos \theta_0}\right)\right) \delta(\chi_1 - \chi_0) \delta(\cos \theta_1 - \cos \theta_0), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где E_0, θ_0, χ_0 — соответственно энергия, полярный и азимутальный углы относительно нормали поверхности, атома мишени, пришедшего в движение на глубине (x, dx) , а E_1, θ_1, χ_1 — соответствующие величины на поверхности; δ — дельта-функция Дирака.

Выражение для функции D в форме соотношения (3.3) было получено Зигмундом [15, 44] и представляет хорошо известный результат линейной каскадной теории, когда используется степенное сечение. Основной способ нахождения этой функции, а именно — поиск асимптотического решения уравнения баланса — был развит благодаря Робинсону [65]. В приложении А мы вывели основное уравнение и получили некоторые решения, дающие D .

Выражение (3.4) в противоположность этому основано на использовании соотношения (2.57), а именно, оно основано на предположении, что движение атома отдачи перед распылением происходит вдоль прямой линии, и, таким образом, атом отдачи непрерывно теряет энергию в процессе своего движения к поверхности.

Если добавляется предположение о наличии плоского поверхностного потенциального барьера, то соотношение (3.4) для P становится таким

$$\begin{aligned} P = \delta\left(E_1 + U - E_0 \exp\left(-\frac{NC_0 x}{\cos \theta_0}\right)\right) \delta(\chi_1 - \chi_0) \times \\ \times \delta\left(\cos \theta_1 - \left[\left(1 - \frac{U}{E_1}\right) \cos^2 \theta_0 - \frac{U}{E_1}\right]^{1/2}\right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Соотношения (3.1) — (3.5) позволяют получить следующее выражение для коэффициента распыления

$$Y = \frac{\Gamma}{8U} \int_0^\infty dx F_D(E, \mathbf{e}, x) 4E_4(NC_0 x), \quad (3.6)$$

где

$$E_n(z) = \int_1^\infty dt \frac{\exp(-zt)}{t^n} \quad (3.7)$$

— интегральная показательная функция [39]. Для точного получения зигмундовской формулы коэффициента распыления из соотношения (3.6) мы должны пренебречь зависимостью F_D от пути и положить [16]

$$F_D(E, \mathbf{e}, x) \approx F_D(E, \mathbf{e}, x = 0). \quad (3.8)$$

Это приближение, конечно, не является обязательным для вывода более общих формул коэффициента распыления, тем не менее его применимость для расчета коэффициентов распыления надежно установлена: коэффициент распыления определяется энергией, выделенной вблизи поверхности.

В рамках этого приближения вышеуказанная формула позволяет также получить томпсоновский энергетический спектр [16]. И, наконец, из формулы (3.6) может быть получен средний пробег распыленных атомов

$$\langle x \rangle = \frac{\int_0^{\infty} dx x \frac{\Gamma F_D(0)}{8U} \cdot 4E_4(NC_0 x)}{\int_0^{\infty} dx \frac{\Gamma F_D(0)}{8U} \cdot 4E_4(NC_0 x)} = \frac{4}{5} \frac{1}{NC_0}. \quad (3.9)$$

Из различных применений этой теории мы упомянем только распространение ее на случай сложных мишеней [66] и рассмотрение явления сегрегации [67].

3.2. Поверхностный характер процесса распыления. В предыдущем разделе было сказано, что при получении выражения для P мы приняли предположение о том, что атомы каскада перед распылением теряют свою энергию непрерывно. Однако хорошо известно [26 — 28], что упругие энергетические потери при низких скоростях происходят, по существу, случайным образом. Более того, при определении P предполагалось, что атомы каскада перед распылением движутся по прямой линии (авторы работы [46] поддержали это предположение, заметив, что для однородного и изотропного источника, аналогичного источнику, определяемому функцией D , потеря из-за рассеяния какого-то количества частиц, движущихся в данном направлении, компенсируется эквивалентной добавкой). Корректность обоих предположений признается с трудом, но самое главное — в стандартной транспортной теории они отсутствуют. Эти трудности могут быть сняты с помощью правильной интерпретации поверхностного характера распыления.

3.2.1. Корректный вид функции выхода. Решить первую проблему — значит, показать эквивалентность между стандартной транспортной теорией и теорией Фальконе—Зигмунда. Чтобы сделать это, мы должны показать, что формула (3.5) может быть получена с использованием тех же предположений, что заложены в транспортной теории. Это доказательство было приведено в работе [68]. Главный ее результат состоит в том, что показана эквивалентность в случае, если изменить интерпретацию величины

$$L_0 = \frac{1}{NC_0}, \quad (3.10)$$

а именно, вместо пробега низкоэнергетических частиц в твердом теле (см. (2.58)) считать эту величину средней длиной свободного пробега^{(9)*} [69]. Точнее, было показано [68], что соотношение (3.5) могло бы быть получено при тех же предположениях, что используются в транспортной теории (прохождение через неупорядоченное вещество и наличие только парных упругих столкновений между движущимися и покоящимися атомами). Кроме того, как и в транспортном подходе, было предположено, что во время выхода (движение из точки зарождения распыленного атома в твердом теле к поверхности) распыляемый каскадный атом может терять энергию в упругих процессах (энергия, теряемая при преодолении поверхностного потенциального барьера всегда добавляется к этим потерям).

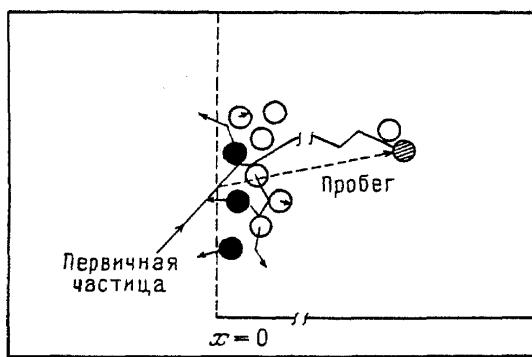


Рис. 3. Процесс распыления в линейном режиме. Черные кружки — атомы отдачи, принимающие участие в распылении

я? В рамках подхода, описанного в предыдущей главе, потери невозможны, и мы приходим к выводу, что при выходе наиболее вероятным является движение по прямой линии (без рассеяния) и без каких-либо потерь энергии в упругих процессах. Другими словами, только *поверхностный характер распыления совместим с такой функцией выхода, которая основана на законе сохранения энергии атомов каскада в процессе их эмиссии*.

Выражение, описывающее уменьшение энергии (см. формулу (2.57)) и лежащее в основе формулы (3.5), совместимо с характером движения атомов в объеме материала, но не отражает адекватно процесс выхода частиц при распылении. Правильное выражение функции выхода в процессе распыления должно быть [17] таким

$$P(E_0, e_0, x; E_1, e_1) = \exp\left(-\frac{x}{L_0 \cos \theta_0}\right) \delta(E_1 + U - E_0) \times \\ \times \delta(\chi_1 - \chi_0) \delta\left(\cos \theta_1 - \left[\left(1 - \frac{U}{E_1}\right) \cos^2 \theta_0 - \frac{U}{E_1}\right]^{1/2}\right), \quad (3.11)$$

где L_0 определяется соотношением (3.10). Численное различие между L_0 и R_0 будет обсуждено ниже. В следующем разделе статьи в качестве функции выхода мы всегда будем иметь в виду формулу (3.11).

3.2.2. Максимальная энергия распыленных частиц и порог распыления

Соотношение (3.11) с математической точки зрения отражает поверхностный характер теории распыления, основанной на модели парных упругих столкновений, и представляет ту основную новизну, которой отличается эта теория от предыдущих. Это хорошо иллюстрируется тем результатом, который мы собираемся обсудить в этом разделе.

Если мы обозначим через A (заметим, что эту величину не следует путать с величиной γ , определенной соотношением (2.3)) максимальную часть энергии первоначальных частиц, которая может перейти к атомам отдачи, распыленным после одного столкновения, то *независимо от явного вида функции D* , максимальная энергия распыленных частиц E_M всегда выражается следующим соотношением

$$E_M = AE - U. \quad (3.12)$$

На рис. 3 показана схема распыления, возможная на основании новой интерпретации. Демонстрируется, что распыленные частицы зарождаются именно в первом монослое. Это показано экспериментально [50 — 55], а также при изучении глубины зарождения распыленных атомов методом моделирования [11, 13, 56, 57]. Здесь сразу же возникает противоречие: если распыляемые частицы зарождаются в первом монослое, то как реализуется возможность энергетических потерь в других столкновени-

Уравнение (3.12) является особенно важным для столкновительной теории распыления, поскольку может быть проверено экспериментально. Оно позволяет сделать вывод, что при одинаковых начальных условиях, исключая равенство начальных энергий, все пары точек (E , E_M) лежат на одной прямой. Наклон этой прямой дает информацию о парных столкновениях между первичным ионом и поверхностными атомами мишени, а точка пересечения прямой с осью E_M — величину U . Другими словами, в соотношении (3.12) содержится ряд полезных спектроскопических данных. Кроме того, благодаря своей общности формула (3.12) может быть использована для установления предела применимости модели парных столкновений (см. раздел 4).

И, наконец, по определению, из соотношения (3.12) мы получаем общую формулу для порога распыления

$$E_{th} = \frac{U}{A}. \quad (3.13)$$

Порог распыления во всех доступных нам теориях рассчитывается с помощью выражения для коэффициента распыления и, следовательно, зависит (см. также ниже) от того, какое соотношение для D использовано. Здесь мы показали, что вид соотношения для порога распыления является следствием применения модели парных столкновений и поверхностного характера распыления. Дальнейшее обсуждение двух последних величин производится в следующей главе. Следующий раздел посвящен модификациям, введенным в стандартную транспортную теорию, посредством использования корректного выражения для функции выхода.

3.3. Классические результаты транспортной теории: критический анализ. В этом разделе мы рассчитаем некоторые основные величины, которые мы впоследствии сравним с результатами транспортной теории Зигмунда—Томпсона. Для этого мы примем во всех расчетах для величины D выражение (3.3) и для P выражение (3.11).

3.3.1. Пространственный профиль эрозии мишени за счет распыления. Если мы подставим соотношения (3.3) и (3.11) в формулу (3.1), то двойное дифференциальное распределение распыленных частиц, включая пространственное распределение, запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} J(E_1, \theta_1, x) = & \frac{\Gamma}{4\pi} \frac{1}{(E_1 + U)^2} \int \int dx d\theta \cos \theta_0 \cdot F_D(x) \times \\ & \times \exp \left(-\frac{x}{L_0 \cos \theta_0} \right) \delta \left(\cos \theta_1 - \left[\left(1 - \frac{U}{E_1} \right) \cos^2 \theta_0 - \frac{U}{E_1} \right]^{1/2} \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Дальнейшее интегрирование по угловым переменным дает зависимость энергетического спектра атомов от глубины

$$J(E_1, x) = \frac{\Gamma}{2(E_1 + U)^2} \int_0^\infty dx F_D(x) G \left(\frac{x}{L_0}, U, E_1 \right), \quad (3.15)$$

где

$$G \left(\frac{x}{L_0}, U, E_1 \right) = E_2 \left(\frac{x}{L_0} \right) - \left(\frac{U}{E_1 + U} \right)^{1/2} E_2 \left(\frac{x}{L_0} \left(\frac{E_1 + U}{U} \right)^{1/2} \right), \quad (3.16)$$

а $E_2(z)$ — показательная интегральная функция (см. соотношение (3.7)).

Принимая во внимание (3.12) и производя интегрирование, получаем

$$Y = \frac{\Gamma}{8U} \int_0^\infty dx F_D(x) Y\left(\frac{x}{L_0}, \omega\right), \quad (3.17)$$

где

$$Y\left(\frac{x}{L_0}, \omega\right) = Y_1\left(\frac{x}{L_0}\right) + Y_2\left(\frac{x}{L_0}, \omega\right), \quad (3.18)$$

а

$$Y_1\left(\frac{x}{L_0}\right) = \frac{4}{3} \left(E_2\left(\frac{x}{L_0}\right) + \frac{x}{L_0} E_1\left(\frac{x}{L_0}\right) - \frac{x}{L_0} E_3\left(\frac{x}{L_0}\right) \right), \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} Y_2\left(\frac{x}{L_0}, \omega\right) = & \frac{4}{3\omega} \left(\frac{x}{L_0} E_2\left(\frac{x}{L_0} \omega^{1/2}\right) - 3E_2\left(\frac{x}{L_0}\right) - \right. \\ & \left. - \frac{x}{L_0} E_1\left(\frac{x}{L_0} \omega^{1/2}\right) + \frac{8}{3\omega^{3/2}} E_2\left(\frac{x}{L_0} \omega^{1/2}\right) \right), \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\omega = \frac{AE}{U} = \frac{E}{E_{th}}. \quad (3.21)$$

Если мы пренебрежем пространственной зависимостью F_D , то функция $Y(x/L_0, \omega)$ представит пространственный профиль эрозии за счет распыления. По сравнению с предыдущим выражением для этой величины [16] здесь есть дополнительный член $Y_2(x/L_0, \omega)$, который зависит, кроме всего прочего, от величины ω . При $E \gg E_{th}$ $Y_2 = 0$ и функция $Y(x/L_0, \omega)$ переходит в $Y_1(x/L_0)$. Эта последняя величина равна $4E_4(x/L_0)$ и, если мы положим $L_0=R_0$, то она дает пространственный профиль эрозии из-за распыления в соответствии с расчетами Фальконе—Зигмунда [16] (см. соотношение (3.6)). Далее, при больших начальных энергиях средняя глубина выхода

$$\langle x \rangle = \frac{4}{5} L_0. \quad (3.22)$$

Из предыдущего рассмотрения вытекает, что результаты стандартной транспортной теории непосредственно применимы только при начальных энергиях, значительно больших по сравнению с порогом. Этот результат подтверждается также расчетами коэффициента распыления, приведенными в следующем разделе.

3.3.2. Обобщенный коэффициент распыления. Если мы пренебрегли пространственной зависимостью F_D и применяем приближение, использованное в соотношении (3.8), то после окончательного интегрирования мы получаем следующее выражение для коэффициента распыления [20, 69]:

$$Y = Y_0 \left(1 - \frac{1}{\omega}\right)^2, \quad (3.23)$$

где Y_0 — коэффициент распыления по Зигмунду (см. выражение (2.72)).

Соотношение (3.23) содержит распространение стандартной формулы ко-

эффективности распыления на область низких энергий [20, 69]. Чтобы продемонстрировать это обстоятельство, мы привели в сравнении с экспериментальными данными результаты расчетов по формуле Зигмунда и по формуле (3.23) коэффициентов распыления Ni, бомбардируемого по нормали к поверхности ионами Ar. Величина E_{th} была выбрана равной 60 эВ в соответствии с наименьшей энергией иона, до которой были измерены коэффициенты распыления Ni при нормальной бомбардировке ионами [71].

Рис. 4 отчетливо демонстрирует степень улучшения стандартной транспортной теории в низкоэнергетической области. Аналогичные результаты могут быть получены и для других комбинаций ион—мишень [20, 69].

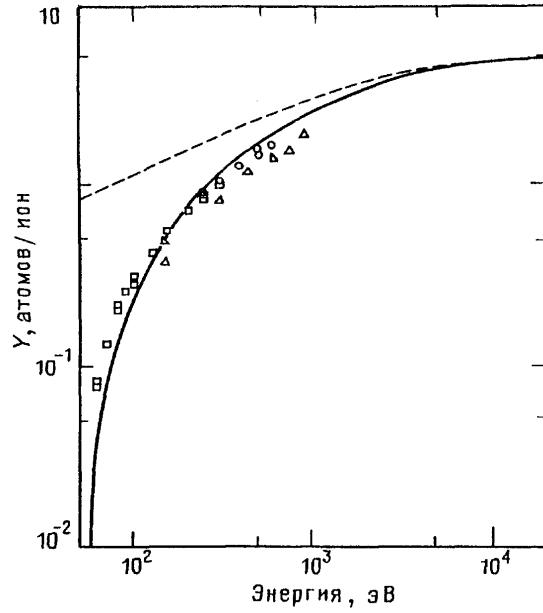


Рис. 4. Коэффициент распыления Ni в зависимости от начальной энергии бомбардирующих ионов Ar. Экспериментальные данные из работы [70]. Пунктир — коэффициент распыления Зигмунда. Сплошная кривая — расчет по формуле (3.23) при значении $E_{th} = 60$ эВ

При больших начальных энергиях ($E \gg E_{th}$) уравнение (3.23) переходит в зигмундовский коэффициент распыления.

3.3.3. Средняя энергия распыленных атомов. Предыдущие результаты позволяют нам получить выражение для средней энергии распыленных атомов в рамках стандартной транспортной теории. Действительно, по определению запишем

$$\langle E_1 \rangle = Y^{-1} \int_0^{AE-U} dE_1 E_1 J_0(E_1), \quad (3.24)$$

где Y дается формулой (3.23), а $J_0(E)$ — томpsonовский энергетический спектр. После подстановки соответствующих величин и взятия простого интеграла, мы получаем [20]

$$\langle E_1 \rangle = 2Ug(\omega), \quad (3.25)$$

где

$$g(\omega) = \left(\ln \omega + \frac{2}{\omega} - \frac{1}{2\omega^2} - \frac{3}{2} \right) \left(1 - \frac{1}{\omega} \right)^{-2}. \quad (3.26)$$

Для $E \gg E_{th}$ уравнение (3.25) переходит в следующее

$$\langle E_1 \rangle = 2U \left(\ln \omega - \frac{3}{2} \right). \quad (3.27)$$

Аналитическое выражение средней энергии распыленных атомов (3.27) непосредственно связано с теорией Зигмунда—Томпсона. Этот результат — прямое следствие существования точного значения максимума энергии распыленных частиц. С другой стороны, он связан с поверхностным характером распыления и с использованием модели парных столкновений.

4. Унифицированная теория распыления

Теория, описанная в предыдущей главе, была использована для воспроизведения некоторых результатов и расширения области применимости теории Зигмунда и Томпсона. Ее формализм основан на модели столкновительных каскадов, генерируемых первичным ионом, которые определяются двумя физическими условиями (*условиями линейности*): во-первых, плотность движущихся атомов в каскаде в любой момент времени мала по сравнению с плотностью атомов в твердом теле, во-вторых, в каждом парном столкновении ударяемый атом перед столкновением всегда поконится. Все теории, описанные в предыдущей главе, основывались на предположении о том, что столкновительные каскады развиваются всегда. Назовем этот режим — *режимом Зигмунда—Томпсона*. Поскольку этот режим подразумевает выполнение двух приведенных выше условий, этот режим является также и линейным.

Легко убедиться, что существует ряд физических условий, не включенных в предыдущее рассмотрение. Например, в случае распыления тяжелых материалов бомбардировкой легкими ионами, отношение масс M_2/M_1 столь велико, что при низких и средних (порядка кэВ) начальных энергиях каскады не возникают и распылиться могут только атомы мишени, пришедшие в движение при непосредственном столкновении с падающим ионом (первично выбитые атомы). Аналогично, в случае очень низких начальных энергий не могут развиваться каскады, и только первичные атомы отдачи могут быть кандидатами на распыление. Мы назовем режим, в котором кандидатами на распыление могут быть только первично выбитые атомы, *режимом одного столкновения*^{(10)*}. Ясно, что режим одного столкновения является также линейным режимом, поскольку оба физических условия линейности здесь выполняются. Другими словами, режим одного столкновения и режим Зигмунда—Томпсона являются двумя реализациями более общего режима (линейного режима). Эта связь видна наиболее ясно, когда есть уравнения, описывающие линейные режимы (см. приложение А). Другим является случай, когда одно или оба условия линейности не выполнены. Все такие физические ситуации будут отнесены к *нелинейным режимам*. В данной статье мы не будем обсуждать эти режимы.

Далее будет показано, как расширяется представленная в предыдущих разделах теория на другие линейные столкновительные режимы. Трудности, которые при этом возникают, являются скорее техническими, а не принципиальными.

4.1. Общая формулировка. Проблема создания теории распыления, применимой для всех случаев распыления, по-видимому, в настоящее время принципиально неразрешима. Тем не менее, попытка сформулировать теорию, которая бы позволила описать все линейные режимы, в рамках существующего формализма возможна, и уже реализуется. В данной главе мы представляем обобщение уже обсужденного формализма, который здесь рассматривается в качестве попытки унификации линейной теории столкновительного распыления.

Сначала опишем основные черты предлагаемого формализма. Наша теория применима к распылению мишеней со случайно распределенными атомами, которые могут быть представлены *точечными частицами*, как и первичный ион. Движение каждой атомной частицы может быть описано с помощью классической механики и использования модели парных столкновений атомных частиц. В согласии со стандартной транспортной и столкновительной теориями, мы введем одно общее ограничение: атомная частица, для того чтобы распылиться, должна преодолеть поверхностный потенциальный барьер, являющийся плоским с высотой U . Это предположение не может обоснованно быть применено для всех физических систем, но оно, по-видимому, может достаточно хорошо описать случаи, рассмотренные в данной статье. Тем не менее, в общем случае это предположение не является необходимым.

Основной математический аппарат аналогичен описанному в предыдущей главе. Мы предполагаем, что все случаи распыления могут быть адекватно описаны следующим двойным дифференциальным распределением эмиттированных частиц:

$$J(E_1, \mathbf{e}_1) = \int dx dE_0 d^2\mathbf{e}_0 D(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0, x) P(E_0, \mathbf{e}_0, x; E_1, \mathbf{e}_1), \quad (4.1)$$

где функция выхода P всегда дается выражением (3.11)

$$\begin{aligned} P(E_0, \mathbf{e}_0, x; E_1, \mathbf{e}_1) = & \exp\left(-\frac{x}{L_0 \cos \theta_0}\right) \delta(E_1 + U - E_0) \times \\ & \times \delta(\chi_1 - \chi_0) \delta\left(\cos \theta_1 - \left[\left(1 - \frac{U}{E_1}\right) \cos^2 \theta_0 - \frac{U}{E_1}\right]^{1/2}\right), \end{aligned} \quad (4.2)$$

а выражение для функции дефектов выбирается в зависимости от рассматриваемого режима. Согласно этой формулировке, явление распыления имеет некоторую универсальную черту, заключающуюся в его поверхностном характере. С математической точки зрения это выражается соотношением (4.2). Другими словами, все каскадные атомы, которые должны распылиться, следуют одному и тому же правилу: они не рассеиваются и не теряют энергию в упругих столкновениях после начала своего движения из стартовой точки в твердом теле. Распыленные частицы возникают в первом монослое. Отклонения от этой картины статистически маловероятны или же они связаны с отсутствием учета в теории эволюции и модификации поверхностной топографии [72].

Все возможные режимы могут быть описаны с помощью использования различных выражений для D . В настоящее время представлено ограниченное число выражений для этой функции.

Теперь с помощью предлагаемой теории получим первый и наиболее общий результат. Для всех столкновительных режимов, в которых движущиеся частицы могут только замедляться (диссипативные столкновения: отсутствует при столкновении возможность получения энергии) и, если A есть макси-

мальная доля энергии первичных частиц, которая может быть передана атомам мишени для их дальнейшего распыления в одном столкновении, то максимальная энергия E_M , которая может быть вынесена из мишени распыленной частицей, определится следующим образом

$$E_M = AE - U. \quad (4.3)$$

Этот результат является следствием поверхностного характера распыления и используемой модели парных столкновений. Чтобы понять этот результат, необходимо учесть, что при условии диссипативных столкновений, столкновения с максимальной передаваемой энергией всегда происходят между первичным ионом и частицей мишени, и что такие столкновения присутствуют во всех линейных режимах. Поскольку уравнение (4.3) не изменяется и при многократном взаимодействии, то для такого рода экспериментов последнее соотношение является весьма полезным инструментом получения спектральной информации: выражение (4.3) дает информацию о парных столкновениях на поверхности и о поверхностном потенциальном барьере. В действительности, как указано в разделе 3, при одинаковых начальных условиях, исключая начальную энергию, все пары точек (E , E_M) должны лежать на одной прямой. Наклон этой прямой характеризуется величиной A и содержит информацию о парных упругих столкновениях между падающим ионом и поверхностными атомами мишени. В соответствии с теорией парных упругих столкновений, величина должна зависеть от M_1 , M_2 и некоторых геометрических параметров [37, 38]. При изменении комбинации ион—мишень и изменении геометрической конфигурации, можно изучать функциональную зависимость величины A от различных параметров.

Пересечение этой прямой с осью E_M дает величину U . Определение правильной величины U является нерешенной проблемой явления распыления. Обычно используется энергия сублимации [14, 15], но правильность этого выбора не доказана. В последние годы ряд авторов [73, 74] рассмотрели возможность использования других величин. Поскольку соотношение (4.3) не зависит от рассматриваемого столкновительного режима, представляется более адекватный способ определения точной физической величины U . Окончательно из формулы (4.3) мы можем, по определению, получить порог распыления

$$E_{th} = \frac{U}{A}. \quad (4.4)$$

В результате использования уравнения (4.3) может быть рассчитан порог распыления при самых различных физических условиях.

4.2. Двойное дифференциальное распределение распыленных атомов. Для дальнейшего анализа теории необходимо иметь выражение для функции D . Связанные с ней физические величины, такие как энергетический спектр, коэффициент распыления и др., могут быть получены относительно простым интегрированием. Тем не менее, для сохранения общей структуры теории мы попытаемся получить там, где это возможно, соотношения, не зависящие от явного вида D . Однако реализация этой возможности подразумевает с самого начала введение в теорию дальнейших предположений.

В соответствии с поверхностным характером распыления и, согласно с результатами, полученными для режима Зигмунда—Томпсона, мы предполагаем, что при расчетах характеристик распыления применимо следующее приближение

$$D(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0, x) \approx D(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0, x = 0). \quad (4.5)$$

С использованием данного приближения из соотношений (4.1) и (4.2) может быть получено следующее общее выражение для двойного дифференциального распределения распыленных частиц

$$\begin{aligned} J(E_1, \mathbf{e}_1) &= L_0 \frac{E_1}{E_1 + U} \cos \theta_1 \times \\ &\times D(E, \mathbf{e}; E_0 = E_1 + U, \chi_1 = \chi_0, \cos \theta_0 = g, x = 0), \end{aligned} \quad (4.6)$$

где

$$g = g(E_1, \theta_1, U) = \left(\frac{E_1 \cos^2 \theta_1 + U}{E_1 + U} \right)^{1/2}. \quad (4.7)$$

Соотношение (4.6) дает простой рецепт получения распределения эмитированных атомов, если известно распределение каскадных атомов внутри мишени. И, наоборот, с помощью выражения (4.6) можно получить прямую информацию о каскадах внутри твердого тела по распыленным атомам. Другими словами, явление распыления проливает свет на ряд свойств бомбардируемого твердого тела.

4.3. Изотропный случай. Наиболее исследовано поведение функции D в случае изотропного распределения каскадных атомов по скоростям, а именно, если функция D может быть упрощенно представлена формулой

$$D_{is}(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0, x = 0) = \frac{1}{4\pi} D(E, \mathbf{e}; E_0, x = 0). \quad (4.8)$$

В этом случае двойное дифференциальное распределение распыленных частиц приводится к виду [17]

$$J_{is}(E_1, \mathbf{e}_1) = \frac{L_0}{4\pi} \frac{E_1}{E_1 + U} \cos \theta_1 D(E, \mathbf{e}; E_0 = E_1 + U, x = 0), \quad (4.9)$$

а энергетический спектр

$$J_{is}(E_1) = \frac{L_0}{4} \frac{E_1}{E_1 + U} D(E, \mathbf{e}; E_0 = E_1 + U, x = 0). \quad (4.10)$$

Кроме того, положение максимума энергетического спектра определяется величиной E_1 являющейся решением уравнения [17]

$$\frac{D}{D'} = - \frac{E_1(E_1 + U)}{U}, \quad (4.11)$$

где D' — производная от D по переменной E_1 . Соотношение (4.11) показывает, что положение максимума энергетического спектра, в основном, зависит от физики процесса генерации повреждений в материалах, а именно от вида функции D .

Используя соотношение (4.3), мы получаем следующий вид коэффициента распыления [17]:

$$Y_{\text{is}}(E_1) = \frac{L_0}{4} \int_U^{AE} dE_0 \left(1 - \frac{U}{E_0}\right) D(E, e; E_0, x=0). \quad (4.12)$$

Теперь приведем два приложения результатов этого раздела.

4.3.1. Режим распыления Зигмунда—Томпсона. Этот режим определяется зигмундовским выражением для функции D (ср. формулу (3.3))

$$D = \frac{\Gamma F_D(E, e, x)}{E_0^2}. \quad (4.13)$$

В этом случае соотношение (4.10) приводится к выражению для томпсоновского энергетического спектра

$$J_{\text{is}}(E_1) = J_0(E_1) = \frac{\Gamma L_0 F_D(E, e, x=0)}{4} \frac{E_1}{(E_1 + U)^3}, \quad (4.14)$$

с положением максимума спектра при обычном значении

$$E_p = \frac{U}{2}. \quad (4.15)$$

И, наконец, коэффициент распыления, выраженный соотношением (4.12), становится

$$Y_{\text{is}} = Y_0 \left(1 - \frac{1}{\omega}\right)^2, \quad (4.16)$$

где Y_0 — коэффициент распыления Зигмунда, а величина ω дается формулой (3.21). Результаты этого раздела подробно обсуждались в разделе 3.

4.3.2. Распыление бомбардировкой легкими ионами. Когда легкие ионы ударяют по тяжелым твердотельным мишениям, первичные ионы теряют свою энергию преимущественно посредством неупругого электронного возбуждения, в то время, как сечения упругих столкновений относительно малы. Вследствие этого каскады не могут развиваться, или, более точно, линейная протяженность столкновительных каскадов всегда мала по сравнению с величиной пробега первичных ионов. В хорошем приближении распыление при бомбардировке легкими ионами относится к категории режима одного столкновения. Первый большой интерес к распылению твердых тел бомбардировкой низкоэнергетическими легкими ионами возник из-за необходимости изучения этого процесса при взаимодействии плазмы с поверхностью в термоядерных установках [75]^(11*). Действительно, твердотельные стенки, окружающие магнитно-удерживаемую горячую плазму, непрерывно бомбардируются низкоэнергетическими дейтериевыми, тритиевыми и гелиевыми ионами, а также нейтралами из плазмы. Распыление, протекающее при такой бомбардировке, может стать главным источником примесей, которые загрязняют плазму. Теория и эксперимент полезны здесь для определения таких условий для плазмы и поверхности, при которых распыление минимально. Дальнейший интерес появился из необходимости понимания процесса эрозии поверхности твердого тела, находящегося вне атмосферы Земли и бомбардируемого солнечным ветром, состоящим преимущественно из протонов в области энергий, порядка нескольких килоэлектрон-вольт [76].

Теоретические попытки объяснения распыления легкими ионами в рамках предыдущих работ на основе стандартной транспортной теории неизменно

терпели неудачи. С другой стороны, добились определенного успеха модели [77 — 79], основанные на механизмах, связанных с обратным рассеянием^(12*). Физическая картина, лежащая в основе этого механизма, следующая: после бомбардировки некоторые ионы рассеиваются и в процессе своего движения в направлении к поверхности могут генерировать первично выбитые атомы мишени, которые способны эмитироваться из поверхности, если их энергия достаточна для преодоления поверхностного потенциального барьера. Приведенный механизм, кажется, наводит на мысль, что подход для рассмотрения распыления легкими ионами должен отличаться от того, который используется для других линейных режимов.

Мы покажем, что этот случай распыления может быть также описан в рамках нашего подхода и что все различие между разными линейными режимами состоит в различии используемых выражений для D [18].

Приближенное выражение для D для случая нормального падения низкоэнергетических легких ионов на тяжелую мишень было предложено в 1983 г. Фальконе и Оливой [80, 81] (см. также приложение А):

$$D = \frac{C_{1/2}}{4\pi KR(E)} \frac{1}{E_0^{3/2}} \ln \frac{AE}{E_0}, \quad (4.17)$$

где (ср. соотношение (2.32))

$$C_{1/2} = \frac{\pi}{2} \lambda_{1/2} a \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^{1/2} \cdot 2Z_1 Z_2 e^2, \quad (4.18)$$

$$R(E) = \frac{2E}{NS_e(E)}. \quad (4.19)$$

Кроме того, K дается выражением (2.42) и a — выражением (2.12).

Обращаясь к формуле (4.10), мы сразу же получаем следующий энергетический спектр [17]

$$J(E_1) \propto \frac{E_1}{(E_1 + U)^{5/2}} \ln \frac{AE}{E_1 + U}. \quad (4.20)$$

Для того чтобы получить точное выражение для коэффициента распыления, мы должны определить выражение для A . При нормальном падении общепринят следующий порог распыления [18]

$$E_{th} = \frac{U}{\gamma(1 - \gamma)}, \quad (4.21)$$

где γ определяется формулой (3.3). Далее, в соответствии с формулами (4.3) и (4.4) мы получаем следующее выражение для A :

$$A = \gamma(1 - \gamma). \quad (4.22)$$

Используя величину A , даваемую соотношением (4.22), и интегрируя по энергии выражение (4.20), получаем следующее выражение для коэффициента распыления

$$Y = \frac{6,031 \cdot 10^{-3} v_0}{\xi_e v_U} \frac{M_1}{M_2} \frac{L_0 NS_e(E) F(\omega_1)}{E}, \quad (4.23)$$

где

$$F(\omega_1) = \ln \omega_1 + \frac{3}{\omega_1^{1/2}} - \frac{1}{3\omega_1^{3/2}} - \frac{8}{3}. \quad (4.24)$$

Кроме того,

$$\omega_1 = \frac{\gamma(1-\gamma)E}{U}, \quad (4.25)$$

$$v_U = \left(\frac{2U}{M_2} \right)^{1/2}. \quad (4.26)$$

На рис. 5 сравниваются экспериментальные данные [70] о коэффициенте распыления мишени из W ионами He с результатами расчета по формуле

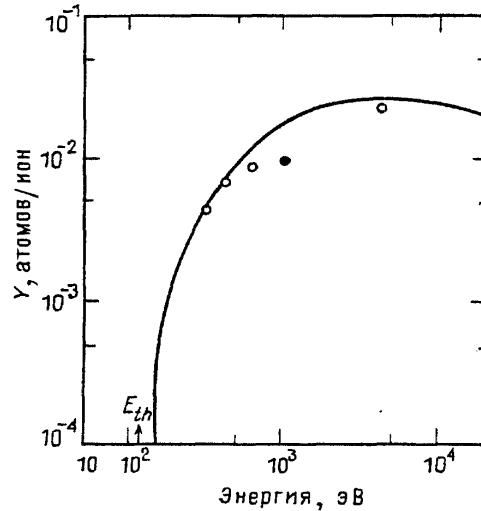


Рис. 5. Коэффициент распыления W в зависимости от начальной энергии бомбардирующих ионов He. Экспериментальные данные из работы [70]. Сплошная кривая — расчет по формуле (4.23)

(4.23) при значении $U = 8,68$ эВ. Рис. 5 (см. также ссылку [18]) демонстрирует хорошее согласие между теорией и экспериментом. Величина, описываемая соотношением (4.23), пропорциональна $S_e(E)$ и, поскольку коэффициент распыления по Зигмунду пропорционален $S_n(E)$, то это, по-видимому, указывает на тот факт, что линейность всегда отражена в коэффициенте распыления пропорциональностью торможению (ядерному или электронному).

4.4. Включение анизотропных эффектов: простейший случай. Основное уравнение для функции дефектов может быть получено в линейном режиме (см. приложение А). К сожалению, единственное имеющееся аналитическое решение является асимптотическим и не описывает должным образом низкоэнергетический режим. Чтобы получить аналитические результаты, включающие анизотропные эффекты, и применяемые при низких энергиях, мы примем в данном разделе следующую формулу для D [19]

$$D = D_{is} \cos^k \theta_0, \quad (4.27)$$

где D_{is} представляет изотропную часть D , а показатель k описывает степень анизотропности ($k = 0$ — изотропный случай). Соотношение (4.27) обобщает выражение для D , успешно использованное в работе [82] с показателем сте-

пени $k = 2$ для объяснения полученных в последнее время энергетических спектров распыленных частиц. Однако, мы подчеркиваем, что никогда не было доказано, что соотношение (4.27) является решением уравнения (A.31) приложения.

В соответствии с основным выражением для двойного дифференциального распределения распыленных частиц (4.6) мы получаем

$$J(E_1, \mathbf{e}_1) = L_0 \frac{E_1}{E_1 + U} D_{is}(E, \mathbf{e}; \chi_1 = \chi_0, x = 0) \times \\ \times \cos \theta_1 \left(\frac{E_1 \cos^2 \theta_1 + U}{E_1 + U} \right)^{k/2} \quad (4.28)$$

и после дальнейшего интегрирования мы приходим к следующей формуле коэффициента распыления

$$Y = \frac{L_0}{4} \int_U^{AE} dE_0 D_{is}(E_0) \frac{2}{2+k} \left[1 - \left(\frac{U}{E_0} \right)^{1+(k/2)} \right]. \quad (4.29)$$

Для получения этой последней формулы мы приняли во внимание соотношение (4.3).

Для записи в явном виде искомых физических величин мы должны определить вид D_{is} . В соответствии с работой [82] мы принимаем для D_{is} выражение (4.13) и получаем

$$J(E_1, \mathbf{e}_1) = \frac{\Gamma L_0 F_D}{4\pi} \frac{E_1}{(E_1 + U)^3} \cos \theta_1 \left(\frac{E_1 \cos^2 \theta_1 + U}{E_1 + U} \right)^{k/2}, \quad (4.30)$$

$$Y = Y_0 \frac{4}{4+k} \left[1 - \frac{4+k}{2+k} \left(\frac{1}{\omega} \right) + \frac{2}{2+k} \left(\frac{1}{\omega} \right)^{2+(k/2)} \right]. \quad (4.31)$$

В соотношении (4.31) Y_0 — зигмундовский коэффициент распыления и ω дается формулой (3.21).

При больших начальных энергиях ($E \gg E_{th}$) соотношение (4.31) преобразуется в следующее

$$Y = Y_0 \cdot \frac{4}{4+k}. \quad (4.32)$$

Теперь обсудим более подробно случай $k = 2$. Для такой величины k двойное дифференциальное распределение распыленных частиц

$$J(E_1, \mathbf{e}_1) = \frac{\Gamma L_0 F_D}{4\pi} \frac{E_1}{(E_1 + U)^4} \cos \theta_1 (E_1 \cos^2 \theta_1 + U). \quad (4.33)$$

Соотношение (4.33) находится в согласии с выражением, выведенным Б. Гаррисон [82], и используется для объяснения экспериментальных результатов, полученных в последнее время.

Положение максимума этого распределения определяется следующей формулой [82]:

$$E_p = \frac{2 \cos^2 \theta_1 - 3 + (4 \cos^4 \theta_1 - 4 \cos^2 \theta_1 + 9)^{1/2}}{4 \cos^2 \theta_1}, \quad (4.34)$$

которая приводится к соотношению, дающему томпсоновское положение максимума при $\theta_1 = 0$. Однако с ростом полярного угла происходит сдвиг максимума в сторону низких энергий и эта тенденция не зависит от выбора U [81].

Интегрирование соотношения (4.33) по угловым переменным позволяет получить следующую формулу для энергетического спектра

$$J(E_1) = J_0(E_1) \cdot 2 \left(1 + \frac{E_1}{E_1 + U} \right), \quad (4.35)$$

где J_0 — томпсоновский энергетический спектр.

Интегрирование соотношения (4.33) по энергетической переменной с учетом (4.3) дает

$$J(\theta_1) = \frac{L_0 \Gamma F_D}{2U} \cos \theta_1 \cdot H(\theta_1, \omega), \quad (4.36)$$

где

$$\begin{aligned} H(\theta_1, \omega) = & \cos^2 \theta_1 \left[\left(1 - \frac{1}{\omega} \right) - \left(1 - \frac{1}{\omega^2} \right) + \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{\omega^3} \right) \right] + \\ & + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\omega^2} \right) - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{\omega^3} \right). \end{aligned} \quad (4.37)$$

При высоких начальных энергиях соотношение (4.37) может быть приближенно представлено формулой Б. Гаррисон [81]

$$J(\theta_1) = \frac{L_0 \Gamma F_D}{4\pi} \cos \theta_1 \cdot \frac{2 \cos^2 \theta_1 + 1}{3}. \quad (4.38)$$

И, наконец, интегрирование функции (4.36) по угловой переменной приводит к следующему выражению для коэффициента распыления [19]

$$Y = Y_0 \cdot \frac{4}{6} \left(1 - \frac{3}{2\omega} + \frac{1}{2\omega^3} \right), \quad (4.39)$$

где Y_0 — снова зигмундовский коэффициент распыления.

Обсуждение и сравнения результатов, даваемых формулой (4.39) с экспериментальными данными, можно найти в работе [19].

4.5. Перспективы и заключение. К началу моих исследований по распылению (около 1980 г.) у коллег, занимающихся этим вопросом, существовало представление, что стандартная транспортная теория способна для линейных режимов описать все физические величины, касающиеся этого явления. Некоторые из нерешенных проблем были скорее технического, а не фундаментального характера (см. статью Зигмунда в монографии [6]) и успех этой теории был столь велик, что вопреки самим авторам, теория использовалась с некоторыми техническими модификациями для описания распыления без выяснения области ее применимости. Единственное внутреннее противоречие теории, а именно, расходимость выражения для величины средней энергии распыленных атомов, было, однако, полностью оставлено без внимания. Ликвидация этой расходимости не является единственным необходимым условием полной последовательности теории, однако, если она должным образом реализована, то позволяет прийти в движение новым идеям в теории распыления.

Возможность последовательного подхода возникла в теории Фальконе и Зигмунда, которая сделала возможным получение прямой информации о глубине выхода распыленных частиц. Другими словами, эта теория позволила изучать поверхностный аспект явления качественно. Первым шагом в направлении количественного определения поверхностной сущности распыления явилось [68] установление связи между средней длиной свободного пробега и глубиной зарождения распыленных частиц. С помощью этой интерпретации глубины выхода устанавливается, что наиболее вероятным способом движения атомов, которые должны распылиться, является движение по прямой без столкновений. Следовательно, благодаря поверхностному характеру распыления (атомы вылетают безусловно из первого монослоя) атомы каскада, которые будут распылены, не могут терять энергию, так что общее выражение для функции вылета дает соотношение (4.2) (предположение о плоском поверхностном потенциальном барьере является в теории вторым по значению).

Мы также отмечали, что величина R_0 в теории Фальконе—Зигмунда отличается от величины L_0 в соотношении (4.2), причем количественно. Нашей целью теперь является расчет величины этого различия.

Частицы, движущиеся через твердое тело, представляются точечными частицами, испытывающими упругие столкновения, характеризуемые определенным сечением. Поскольку распыленные частицы возникают в первом монослое, *сечение распыления* (сечение столкновения двух точечных частиц, в результате которого возникает распыленная частица) должно быть константой, равной

$$\sigma_0 = N^{-2/3}, \quad (4.40)$$

и мы можем записать

$$L_0 = \frac{1}{N\sigma_0} = N^{-1/3}. \quad (4.41)$$

В отличие от этого величина (ср. (2.58))

$$R_0 = \frac{1}{NC_0}$$

с константой $C_0 = 1,808 \text{ \AA}^2$. Теперь рассчитаем величины L_0 и R_0 для случая мишени из железа (этот результат похож на результаты для других мишеней).

Для Fe $N = 8,48 \cdot 10^{22}$ атом/ \AA^3 и мы получаем $L_0 = 2,276 \text{ \AA}$ и $R_0 = 6,522 \text{ \AA}$. Отличие между двумя величинами порядка 3, что важно для количественного анализа. Вероятность правильного выбора из этих двух величин весьма высока. Он может быть сделан с помощью сопоставления теоретических и экспериментальных величин для средних глубин выхода распыленных частиц. Анализ экспериментальных и рассчитанных с помощью ЭВМ величин дал

$$\langle x \rangle / \lambda = 0,80 \pm 0,10, \quad (4.42)$$

где λ — среднее межатомное расстояние. Поскольку, по крайней мере, в режиме Зигмунда—Томпсона мы получили значение (ср. формулы (3.9) и (3.22))

$$\langle x \rangle = 0,8R_0 \quad (4.43)$$

и

$$\langle x \rangle = 0,8L_0,$$

(4.44)

то мы приходим к заключению, что глубина зарождения распыленных частиц, выраженная через среднюю длину свободного пробега, имеет правильную физическую интерпретацию.

Если L_0 определяется формулой (4.41), то все наши предыдущие расчеты коэффициента распыления завышают результат (мы использовали величину, даваемую формулой (2.58)) и общее согласие, полученное при сравнении экспериментальных данных и результатов транспортной теории, или ее обобщения, хуже, чем это утверждалось ранее. В действительности, определенное заключение о согласии результатов, рассчитанных по транспортной теории (или теории, представленной автором), и результатов, полученных из эксперимента, сделать пока нельзя. В выражении для коэффициента распыления имеются и другие величины: Γ , F_D , U , а также порог, который рассчитан пока не очень хорошо [83, 84]. Точность определения величин Γ и F_D зависит от того, насколько хорошо определена функция дефектов (мы не имеем адекватного решения для полубесконечных мишеней), а точное определение поверхности энергии связи и порога распыления связано со свойствами поверхности, важными для распыления. (В табл. II дано несколько используемых величин.) Для упомянутых выше величин мы имеем на основе модели парных столкновений два основных результата (сравните формулы (4.3) и (4.4)), которые могут быть использованы для получения более точной информации о них. Большая часть этой работы еще должна быть проделана. Более того, благодаря своему общему характеру область применимости соотношений (4.3) и (4.4) эквивалентна области применимости модели парных столкновений в теории распыления.

Что касается распространения рассмотренной унифицированной теории на некоторые нелинейные режимы, то мы считаем, что этот вопрос в настоящее время полностью открыт. Несомненным мнением автора является то, что поверхностный характер распыления является универсальным свойством явления, хотя математическая формулировка этого может отличаться от даваемой формулой (4.2).

И наконец, следует сказать, что, хотя в настоящее время представлен общий и последовательный подход к изучению явления распыления для ли-

нейных режимов, должны анализироваться и другие интересные поверхностные и объемные явления.

Автор выражает благодарности коллегам Б.Д. Гаррисон, Ф. Гулло, Д.Э.

Элемент	<i>Z</i>	<i>M</i>	<i>U</i>
Na	11	22,990	1,12
Mg	12	24,312	1,54
Al	13	26,982	3,36
Ca	20	40,080	1,83
Tl	22	47,900	4,89
V	23	50,942	5,33
Cr	24	51,996	4,12
Mn	25	54,938	2,92
Fe	26	55,847	4,34
Co	27	58,933	4,43
Ni	28	58,71	4,46
Cu	29	63,546	3,52
Zn	30	65,37	1,35
Ga	31	69,72	2,82
Ge	32	72,59	3,88
As	33	74,922	1,26
Zr	40	91,22	6,33
Nb	41	92,906	7,59
Mo	42	95,94	6,83
Ag	47	107,87	2,97
Ta	73	180,95	8,10
W	74	183,85	8,68
Au	79	196,97	3,80

Гаррисону (мл.), Р. Келли, А. Оливе, В. Пирронелло, П. Зигмунду и З. Шроубеку, с которыми он имел приятную возможность совместно работать и обсуждать многие проблемы явления распыления. Особую благодарность я хочу выскажать П. Зигмунду, который ввел автора в проблему распыления и снабдил его первыми важными сведениями и аппаратом для начала разработки ряда ключевых проблем и теоретических подходов. Необходимо также особо поблагодарить З. Шроубека за его постоянную поддержку в процессе работы над теорией и за внимание и критические замечания, выраженные при чтении рукописи.

Приложение. Основные уравнения для функции дефектов

В этом приложении мы получим основное уравнение для функции дефектов D в линейном режиме, а также приведем некоторые решения этого уравнения.

Подход, который мы собираемся предложить, развит в основном благодаря работам Робинсона [65], Линдхарда [26 — 28], Сандерса [85], Зигмунда [40, 44, 86] и Винтербона [43]. При описании технических вопросов и определений мы фактически следуем Зигмунду [44]. Согласно этому автору, мы можем определить функцию D (по терминологии Зигмунда — плотность числа выбитых атомов) так, что $D(E, e; E_0, e_0) dE_0 de_0$ — среднее число атомов, пришедших в движение с начальной энергией (E_0, dE_0) и направлением, лежащим в телесном угле (e_0, d^2e_0) , в каскаде столкновений, генерированном первичным ионом с начальной энергией E и направлением движения e .

Используя процедуру Линдхарда для уравнений баланса, мы можем получить для D следующее уравнение [87]

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} \delta \left(ee_0 - \left(\frac{E_0}{\gamma E} \right)^{1/2} \right) = S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} D(E, e; E_0, e_0) + \\ + \int d\sigma(v, v', v'') [D(E, e; E_0, e_0) - \\ + D(E - T, e'; E_0, e_0) - H(T, e'', E_0, e_0)], \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

где $d\sigma(E, E_0)$ сечение потери энергии, $d\sigma(v, v', v'')$ — дифференциальное сечение упругих столкновений между первичной частицей с начальной скоростью $v = (E, e)$, скоростью после столкновения $v' = (E - T, e')$ и выбитой частицей со скоростью $v'' = (T, e'')$, которая перед столкновением покоялась; H — функция, аналогичная D , но отнесенная к системе, где ион и мишень имеют равные массы; уравнение для H

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} \delta \left(ee_0 - \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \right) = S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} H + \\ + \int d\sigma(v, v', v'') (H - H' - H''), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где $H = H(E, e; E_0, e_0)$, $H' = H(E - T, e'; E_0, e_0)$ и $H'' = H(T, e''; E_0, e_0)$.

Для получения решения уравнения (A.1) мы должны вначале решить уравнение (A.2). Методики решения такого типа уравнений детально описаны в работе [43]. Первым шагом здесь является разложение угловой части в ряд

по полиномам Лежандра

$$H(E, \mathbf{e}; E_0, \mathbf{e}_0) = H(E, E_0; \mathbf{e} \mathbf{e}_0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) H_l(E, E_0) P_l(\mathbf{e} \mathbf{e}_0). \quad (\text{A.3})$$

Подстановка соотношения (A.3) в уравнение (A.2) позволяет получить уравнения для соответствующих коэффициентов.

При $S_e(E) = 0$ имеем

$$\begin{aligned} \int d\sigma(E, T) [H_l(T, e_0) - H_l(E-T, e_0) P_l(\cos \Phi_1) - \\ - H_l(T, E_0) P_l(\cos \Phi_2)] = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} P_l\left(\left(\frac{E_0}{E}\right)^{1/2}\right), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

где Φ_1 и Φ_2 — углы рассеяния в лабораторной системе первичной частицы и атома отдачи соответственно. Выражения для этих углов через переданную энергию T следующие [85]

$$\cos \Phi_1 = A(1-t)^{1/2} - \frac{B}{(1-t)^{1/2}}, \quad (\text{A.5})$$

$$\cos \Phi_2 = \left(\frac{t}{\gamma}\right)^{1/2}, \quad (\text{A.6})$$

где

$$A = \frac{M_1 + M_2}{2M_1}, \quad B = \frac{M_1 - M_2}{2M_1} \quad (\text{A.7})$$

$$t = \frac{T}{E} \quad (\text{A.8})$$

Для получения уравнения (A.4) мы использовали соотношение (2.61) и похожее выражение

$$d\sigma(v, v'') = d\sigma(E, T) \frac{d^2 e_2}{2\pi} \delta(ee_2 - \cos \Phi_2) \quad (\text{A.9})$$

совместно со следующим представлением дельта-функции

$$\delta(x - y) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2} P_l(x) P_l(y). \quad (\text{A.10})$$

Уравнение (A.4) теперь может быть решено для линндхардовского степенного сечения (сравните (2.31)); получаем

$$k_l(E, E_0) = \int_0^1 dt t^{-1-m} [H_l - H_l P_l(\cos \Phi_1) - H'_l P_l(\cos \Phi_2)], \quad (\text{A.11})$$

где

$$k_l(E, E_0) = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} \frac{E^{2m}}{C_m} P_l\left(\left(\frac{E_0}{E}\right)^{1/2}\right). \quad (\text{A.12})$$

Уравнение (A.11) может быть решено с помощью преобразования Лапласа. Мы вводим переменную

$$U = \ln(E/E_0) \quad (\text{A.13})$$

и применяем преобразование Лапласа к обеим частям уравнения (A.11) в соответствии со следующим определением:

$$H_f(s) = \int_0^\infty du \exp(-su) H_f(u). \quad (\text{A.14})$$

Имеем

$$H_f(s) = \frac{k_l(s)}{-m^{-1} - g_l(s) - f_l(s)}, \quad (\text{A.15})$$

где $g_l(s)$ и $f_l(s)$ - изображения преобразования Лапласа от оригиналов

$$g_l(u) = (1 - \exp(-u))^{-1-m} \exp(-u) P_l\left(\exp\left(-\frac{u}{2}\right)\right), \quad (\text{A.16})$$

$$f_l(u) = \exp(mu) P_l(\exp(-u/2)). \quad (\text{A.17})$$

Мы используем функции (A.15) для решения уравнения (A.1). Используя процедуру аналогичную той, что была применена для вывода уравнения (A.2), мы найдем следующее уравнение для определения коэффициентов при полиномах Лежандра

$$\begin{aligned} k_l^d(E, E_0) = & \int_0^\gamma dt t^{-1-m} (D_l(E, E_0) - D_l(E - T, E_0) P_l(\cos \Phi_1) - \\ & - D_l(T, E_0) P_l(\cos \Phi_2)), \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

где

$$k_l^d(E, E_0) = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma_d(E, E_0)}{dE_0} \frac{E^{2m}}{C_m} P_l\left(\left(\frac{E_0}{\gamma E}\right)^{1/2}\right). \quad (\text{A.19})$$

Индекс d относится к системе, в которой частицы мишени и первичная частица различаются.

Соотношение (A.18) через переменную u может быть выражено следующим образом

$$k_l^d = -\frac{D_l}{m\gamma^m} - \int_0^u dv g_l^d(u-v) D_l(v) - \int_0^u dv f_l^d(u-v) H_f(v), \quad (\text{A.20})$$

где

$$\begin{aligned} g_l^d = & \exp(-u)(1 - \exp(-u))^{-1-m} \theta(\exp(-u) - 1 + \gamma) \times \\ & \times P_l(A \exp(-u/2) + B \exp(u/2)), \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$f_l^d(u) = \exp(mu) \theta(\gamma - \exp(-u)) P_l(\gamma^{-1/2} \exp(-u/2)), \quad (\text{A.22})$$

где $\theta(x)$ — единичная ступенчатая функция и $v = \ln T/E_0$. После использования преобразования Лапласа соотношение (A.20) превращается в следующее^(13*):

$$D_l(s) = \frac{k_l^d(s) + f_l^d(s)H_l(s)}{-\gamma_m^{-m} - g_l^d(s)}, \quad (\text{A.23})$$

где $H_l(s)$ определяется выражением (A.15).

Оценка результата обратного преобразования Лапласа (A.23) в компактной форме никогда не была произведена. Тем не менее, как показано Робинсоном [65] и Зигмундом [44, 86], асимптотические решения для $D_l(E, E_0)$ могут быть получены из выражения (A.23). В общем виде для функции $F(s)$, у которой имеются полюса S_n , мы можем записать [88]

$$F(u) = \sum_n \exp[s_n u] \operatorname{Res} F(s = s_n), \quad (\text{A.24})$$

где $\operatorname{Res} F$ — вычет функции F , вычисленный в полюсе. Заметим, что полюса берутся по убыванию порядка. Асимптотическое разложение коэффициентов $D_l(E, E_0)$ может быть записано как

$$D_l(E, E_0) \approx \left(\frac{E}{E_0}\right)^{s_0} \operatorname{Res} D_l(s = s_0), \quad (\text{A.25})$$

где s_0 — наивысший положительный полюс.

В действительности у функции (A.23) для $l = 0$ наивысший положительный полюс $s = 1$, в то время как для $l = 1$ он равен $s = 1/2$. Аналитические вычисления дают следующие выражения для первых двух коэффициентов:

$$D_0(E, E_0) \approx H_0(E, E_0) = \frac{\Gamma_m}{4\pi} \frac{E}{E_0^2}, \quad (\text{A.26})$$

$$D_1(E, E_0) \approx \frac{\Gamma_m}{4\pi} \frac{1}{E_0} \left(\frac{M_1 E}{M_2 E_0} \right)^{1/2}, \quad (\text{A.27})$$

где

$$\Gamma_m = \frac{m}{\psi(1) - \psi(1-m)} \quad (\text{A.28})$$

с $\psi(x)$ — логарифмической производной гамма-функции Эйлера [39].

Таким образом, асимптотическое решение уравнения (A.1) может быть записано как

$$\begin{aligned} D(E, e; E_0, e_0) &\approx D_0(E, E_0) + 3e_0 e D_1(E, E_0) \approx \\ &\approx \frac{\Gamma_m}{4\pi E_0} \left[\frac{E}{E_0} + \frac{3}{(2M_2 E_0)^{1/2}} e_0 e P \right], \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

где $P = M_1 v$ — импульс первичной частицы.

Если мы также включим сечение электронного торможения в уравнение (A.1), то, как показано Зигмундом [44, 48], формула (A.29) переходит в следующую:

$$D(E, e; E_0, e_0) \approx \frac{\Gamma_m}{4\pi E_0} \left[\frac{v(E)}{E_0} - \frac{3}{(2M_2 E_0)^{1/2}} e_0 e P \right], \quad (\text{A.30})$$

где $v(E)$ — энергия, перешедшая в кинетическую энергию атомов вещества [27].

Уравнение (A1) может быть дальше обобщено с помощью включения пространственной зависимости. Мы определим функцию $D(E, e; E_0, e_0, x)$ таким образом, что $DdE_0 d^2e_0 dx$ — среднее число атомов, пришедших в движение на глубине (x, dx) с энергией (E_0, dE_0) и направлении, заключенном в телесном угле (e_0, d^2e_0) , в каскаде столкновений, генерированном первичной частицей с энергией E , движущейся в направлении e . Метод баланса позволяет получить следующее уравнение [87]

$$\begin{aligned} \cos \theta_i \frac{\partial}{\partial x} D(E, e; E_0, e_0, x) + \frac{N d\sigma(E, E_0)}{2\pi dE_0} \delta \left(e e_0 - \left(\frac{E_0}{\gamma E} \right)^{1/2} \right) \delta(x) = \\ = N S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} D(E, e; E_0, e_0, x) + N \int d\sigma(v, v', v'') (D(E, e; E_0, e_0, x) - \\ - D(E - T, e'; E_0, e_0, x) - H(T, e''; E_0, e, x)). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Получая вначале распределение импульса по глубине и используя упомянутую технику, решение уравнения (A.31) может быть получено в следующем виде [43, 48]:

$$D(E, e; E_0, e_0, x) \approx \frac{\Gamma_m}{4\pi E_0} \left[\frac{F_D(E, e, x)}{E_0} + \frac{3}{(2M_2 E_0)^{1/2}} e_0 F_p(E, e, x) \right], \quad (\text{A.32})$$

где $F_p(E, e, x)$ — импульс, переданный одним первичным ионом с энергией E и направлением движения e на глубине (x, dx) веществу [89, 90]. Формула (A.32) дает единственное полученное решение уравнения (A.31).

A.1. Уравнение для распределения первичных атомов отдачи. Уравнение (A.1) при $H = 0$ является уравнением для атомов отдачи, генерированных непосредственно первичным ионом, а именно, уравнением распределения первичных атомов отдачи. Конкретно, если мы обозначим через $D_p dE_0 d^2e_0$ — среднее число первичных выбитых атомов, пришедших в движение с энергией (E_0, dE_0) в направлении, лежащем в телесном угле (e_0, d^2e_0) , благодаря первичному иону с начальной энергией E и направлением движения e , уравнение будет таким

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \frac{d\sigma(E, e_0)}{dE_0} \delta \left(e e_0 - \left(\frac{E_0}{\gamma E} \right)^{1/2} \right) = S_e(E) \frac{\partial}{\partial E} D_p(E, e; E_0, e_0) + \\ + \int d\sigma(v, v', v'') [D_p(E, e; E_0, e_0) - D_p(E, T, e'; E_0, e_0)]. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Используя ту же процедуру, что и раньше, мы получаем следующее уравнение для коэффициентов Лежандра:

$$\frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} P_l \left(\left(\frac{E_0}{\gamma E} \right)^{1/2} \right) = S_l(E) \frac{\partial}{\partial E} D_{p,l}(E, E_0) + \\ + \int d\sigma(E, E_0) (D_{p,l}(E, E_0) - P_l(\cos \Phi_1) D_{p,l}(E - T, E_0)), \quad (\text{A.34})$$

где мы запишем $\cos \Phi_1$ как [91]

$$\cos \Phi_1 = \left(1 + \frac{1+\mu}{2} t \right) \frac{1}{(1-t)^{1/2}}, \quad (\text{A.35})$$

a

$$\mu = \frac{M_2}{M_1}. \quad (\text{A.36})$$

A.2. Низкоэнергетические легкие ионы в тяжелых материалах. В случае, когда легкий ион ударяет по тяжелой мишени, отношение масс μ столь велико, что передаваемая энергия в парном упругом столкновении мала по сравнению с энергией налетающей частицы. Тогда в соотношении (A.34) может быть использовано разложение по T [91]

$$D_{p,l}(E - T, E_0) \approx D_{p,l}(E, E_0) - T \frac{\partial}{\partial E} D_{p,l}(E, E_0). \quad (\text{A.37})$$

В дополнении к этому для легких ионов и тяжелых мишеней сечение ядерного торможения $S_n(E)$ всегда может быть принято [91] много меньшим, чем сечение электронного торможения $S_e(E)$.

Последнее предположение совместно с разложением (A.37) позволяет получить следующее решение уравнения (A.34):

$$D_{p,l}(E, E_0) = \int_{E_0/\gamma}^E dE' \frac{h(E')}{S_e(E')} \exp \int_{-E}^{E'} dE'' \frac{\delta(E'')}{S_e(E'')}, \quad (\text{A.38})$$

где

$$h(E, E_0) = \frac{1}{4\pi} \frac{d\sigma(E, E_0)}{dE_0} P_l \left(\left(\frac{E_0}{\gamma E} \right)^{1/2} \right), \quad (\text{A.39})$$

$$\sigma_l = \int d\sigma(E, T) (1 - P_l(\cos \Phi_1)). \quad (\text{A.40})$$

Для $l = 0$ мы находим

$$D_{p,0}(E, E_0) = \frac{1}{4\pi} \int_{E_0/\gamma}^E dE' \frac{d\sigma(E', E_0)}{dE_0} \frac{1}{S_e(E')}, \quad (\text{A.41})$$

что является изотропным решением, найденным Зигмундом [44].

Явные выражения для функций (A.41) зависят от выбора сечения упругих столкновений иона с атомом мишени и использованного электронного торможения.

Следуя Шиотту [91], мы предполагаем для $S_e(E)$ линдхардовскую форму

сечения торможения (сравните (2.41)) и для $d\sigma$ степенное сечение Линдхарда с $m = 1/2$

$$d\sigma(E, E_0) = C_{1/2} \frac{1}{E^{1/2}} \frac{dE_0}{E_0^{3/2}}. \quad (\text{A.42})$$

При таком выборе соотношение (A.41) может быть записано следующим образом [44]:

$$D_{p,0}(E, E_0) \approx \frac{C_{1/2}}{4\pi k} \frac{1}{E_0^{3/2}} \ln \frac{\gamma E}{E_0}. \quad (\text{A.43})$$

В соответствии с выводами Фальконе и Оливы [80, 81] приближенное решение, включающее пространственную зависимость, выглядит так

$$D_{p,0}(E, e_0, x) \approx \frac{D_{p,0}(E, E_0)}{x_{\max}}, \quad (\text{A.44})$$

где $x_{\max} = R_p \cos \theta_1$ — максимальная глубина образования дефектов. Кроме того, поскольку соотношение (4.44) учитывает многократное рассеяние на плоскости $x=0$ (поверхность), решение поправлено [81] включением коррекции длины пути

$$D_p(E, E_0, x) \approx \frac{R_p}{R} \frac{D_{p,0}(E, E_0)}{x_{\max}}. \quad (\text{A.45})$$

Таким образом, приближенное решение в изотропном пределе для низкоэнергетических легких ионов в тяжелых мишениях может быть записано так [81]

$$D_p(E, e; E_0, e_0, x) \approx \frac{C_{1/2}}{4\pi k} \frac{1}{\cos \theta_i} \frac{1}{R(E)} \frac{1}{E_0^{3/2}} \ln \frac{\gamma E}{E_0}. \quad (\text{A.46})$$

Соотношение (A.46) для атомов, которые могут быть распылены, в случае нормального падения сводится к выражению (4.17).

Дополнение автора к русскому переводу статьи^(14*)

Вид функции выхода, в которой использован средний свободный пробег атомов, — основной новый результат, представленной выше теории. Это отражает поверхностный характер явления распыления. В данном кратком дополнении мы уточним природу столкновительного среднего свободного пробега [108]^(15*).

Если решить уравнения Зигмунда, описывающие распыление, последовательно используя концепцию среднего свободного пробега, то коэффициент распыления для линдхардовского степенного сечения после использования преобразования Лапласа вычисляется точно [88]

$$Y(E) = \frac{m}{2(1-m)} \gamma^{-m} \frac{1}{N\sigma_{\text{irr}}^{(m)}(u)} \left(\frac{1}{2\pi i} \int_{k-i\infty}^{k+i\infty} e^{us} F(s) ds \right), \quad (1)$$

где

$$F(s) = \left(\frac{1}{s-2m} - \frac{1}{s-2m+1} \right) \frac{1}{2-g(s)}, \quad (2)$$

$$1 - 2g(s) = \frac{s}{s-m} \left(1 - \frac{\Gamma(s)\Gamma(1-m)}{\Gamma(s-m)} \right). \quad (3)$$

В соотношении (1) величина в скобках представляет формулу обращения преобразования Лапласа Римана—Фурье [88], u — определена в (A. 13) и

$$\sigma_{tr}(E) = \int_{\Omega} d\sigma(E, \Omega)(1 - \cos \theta) \quad (4)$$

— транспортное сечение. Для линдхардовского степенного сечения формула (4) может быть записана следующим образом:

$$\sigma_{tr}^{(m)}(E) = \frac{\pi a^2 \lambda_m}{1-m} e^{-2m}, \quad (5)$$

где при $m = 0$

$$\sigma_{tr}^{(m=0)} = \pi a^2 \lambda_0 = 2C_0. \quad (6)$$

Обращаясь к соотношению (1), мы можем, в качестве основного результата, сделать вывод о том, что зигмундовский коэффициент распыления пропорционален низкоэнергетической транспортной длине свободного пробега

$$\lambda_{tr}^{(m)}(u) = \frac{1}{N\sigma_{tr}^{(m)}(u)}. \quad (7)$$

Асимптотическое приближение формулы (1) в случае $m = 0$ есть

$$Y(E, \eta) \sim \frac{3}{2\pi^2} \lambda_{tr}^{(m=0)} \frac{F_D(E, \eta, x=0)}{u}, \quad (8)$$

которое после использования соотношения (6) дает точно зигмундовский результат. Выражение (8) может быть также найдено в работе Вильямса [109].

Предыдущий анализ имеет несколько следствий для теории, представленной выше. Здесь мы, в частности, упоминаем, что, хотя формула (4.1) остается применимой, функция выхода, а именно (4.2), должна быть обобщена в виде

$$P(E_0, \theta_0, \chi_0, x; E_1, \theta_1, \chi_1) = \delta(E_1 + u - E_0) \times \\ \times e^{-x/\lambda_{tr}^{(m=0)}(E_0) \cos \theta_0} \delta(\chi_1 - \chi_0) \delta \left(\cos \theta_1 - \left[\left(1 + \frac{u}{E_1} \right) \cos^2 \theta_0 - \frac{u}{E_1} \right]^{1/2} \right). \quad (9)$$

Это подразумевает, что постоянный столкновительный средний свободный пробег L_0 является здесь транспортным средним свободным пробегом, зависящим от энергии.

Для линдхардовского степенного сечения и значения $m = 0$ все результаты, представленные в обзоре, точно воспроизводятся, исключая величину L_0 , которая теперь имеет вид

$$L_0 = \lambda_{tr}^{(m=0)} = \frac{1}{2NC_0}. \quad (10)$$

Дальнейшие обсуждения и следствия применения соотношения (9) будут содержаться в [108].

(Перевод с англ. В.В. Плетнева. Под редакцией В.А. Молчанова)

ПРИМЕЧАНИЯ

⁽¹⁾ К этому списку мы добавим несколько обзорных работ, опубликованных в последнее время [92 — 96, 110]. (*Примеч. пер.*)

⁽²⁾ Отметим, что многие промежуточные выкладки, опущенные Линдхардом и др., в работах, упоминаемых в этой статье, воспроизведены Бондерупом в его "Лекционных записках" [111]. (*Примеч. ред. пер.*)

⁽³⁾ Имя Donald E. Garrison будет транслитерироваться в переводе как Д. Гаррисон. (*Примеч. пер.*)

⁽⁴⁾ Имя Barbara J. Garrison будет (в дальнейшем) транслитерироваться как Б. Гаррисон. Транскрипция фамилий Д. Гаррисона и Б. Гаррисон почти одинакова, но не идентична. (*Примеч. пер.*)

⁽⁵⁾ Другие теории, базирующиеся на описанной модели, приведены в книге Плещивцева [99]. (*Примеч. ред. пер.*)

⁽⁶⁾ Приведем ссылку также на более ранние работы Фирсова, касающиеся рассеяния ионов на атомах и неупругих потерь в атом-атомных столкновениях при низких скоростях [102, 103]. (*Примеч. пер.*)

⁽⁷⁾ См., например, статью Зигмунда в книге [93]. (*Примеч. пер.*)

⁽⁸⁾ См. также книгу Экштайна [96]. (*Примеч. пер.*)

⁽⁹⁾ Аналогичный результат был получен с помощью представления функции $J(E_1, e_1)$ (3.1) в виде ряда по номерам поколений каскадов [97, 98]. Функция выхода P в этом случае соответствует ядру транспортного оператора в интегральном транспортном уравнении. (*Примеч. ред. пер.*)

⁽¹⁰⁾ В монографии [6], переведенной на русский язык, этот режим называется режимом первичного прямого выбивания. (*Примеч. пер.*)

⁽¹¹⁾ См., например, работы [100, 104, 107]. (*Примеч. пер.*)

⁽¹²⁾ См. рисунок 1.8 в книге [93]. (*Примеч. пер.*)

⁽¹³⁾ Результат (A.23) был независимо получен А.И. Толмачевым другим методом [105]. Обобщение этого результата на случай, когда закон взаимодействия ионов с атомами мишени отличается от закона взаимодействия атомов мишени между собой, приведен в работе [106]. (*Примеч. ред. пер.*)

⁽¹⁴⁾ Дополнение датировано 11 сентября 1991 г. (*Примеч. ред. перев.*)

⁽¹⁵⁾ Ссылки [108, 109] добавлены автором к переводу. (*Примеч. ред. перев.*)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Grove W.R.//Trans. Roy. Soc. London.* **1852**. V. 142. P. 87.
2. *Wehner G.K.//Phys. Rev.* **1954**. V. 93. P. 633.
3. *Wehner G.K.//J. Appl. Phys.* **1954**. V. 25. P. 270.
4. *Oliva A. //ASI—NATO—Portugal.* 1987.
5. *Varga P., Betz G., Viehbock F.P. (Eds.): Symposium on Sputtering. Inst. für allgem. Physik. — Wien: technische Universität.* 1980.
6. Behrisch R. (Ed.): *Sputtering by Ion Bombardment I.* — Berlin: Springer-Verlag, 1981. — (Перевод: Распыление твердых тел ионной бомбардировкой/Под ред. Р. Бериша. — М.: Мир, 1984).
7. Behrisch R. (Ed.): *Sputtering by Ion Bombardment II.* — Berlin: Springer-Verlag, 1983. — (Перевод: Распыление твердых тел ионной бомбардировкой/Под ред. Р.Бериша. Вып. II. — М.: Мир, 1986).
8. *Thompson D.A.//Rad. Eff.* **1981**. V. 56. P. 105.
9. *Thompson M.W.//Phys. Rep.* **1981**. V. 69. P. 335.
10. *Claussen C. Thesis.* — University of Odense, 1982.
- [11] *Harrison D.E., Jr.//Rad. Eff.* **1983**. V. 70. P. 1.
12. *Kelly R. //Ibidem.* **1984**. V. 80. P. 273.
13. *Biersack J.P., Eckstein W.//Appl. Phys.* **1984**. V. A34. P. 78.
14. *Tompson M.W.//Phil. Mag.* 1968. V. 18. P. 377.
15. *Sigmund P.//Phys. Rev.* **1969**. V. 184. P. 383.
16. *Falcone G., Sigmund P.//Appl. Phys.* **1981**. V. 25. P. 307.
17. *Falcone G.//Surf. Sci.* **1987**. V. 187. P. 212.
18. *Falcone G., Gullo F.//Phys. Lett. A.* **1987**. V. 125. P. 432.
19. *Falcone G.//Ibidem.* 1988. V. 129. P. 188.
20. *Falcone G.//Phys. Rev. B.* **1988**. V. 38. P. 6398.
- [21] *Keywell F.//Phys. Rev.* **1952**. V. 87. P. 160.
22. *Keywell F.//Ibidem.* **1955**. V. 97. P. 1611.
23. *Fermi E. Nuclear Physics.* — Chicago: University of Chicago Press, 1950.
24. *Selitz F.//Disc Farad. Soc.* **1949**. V. 5. P. 271. — (Перевод: Зейтц Ф. О нарушенном порядке в твердых телах под действием быстрых тяжелых частиц//Действие излучений на полупро-

- водники и изоляторы. — Сб. переводов/Под ред. С.М. Рывкина. — М.: ИЛ, 1954. — С. 9.)
25. *Harrison D.E.*//*Phys. Rev.* **1956**. V. 102. P. 1473.
26. *Lindhard J., Scharff M., Schiott H.*//*Mat.-Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **1963**. V. 33. P. 1.
27. *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M., Thomsen P.W.*//*Ibidem. P.* 1.
28. *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M.*//*Ibidem. 1968*. V. 36. P. 1.
29. *Bohr N.*//*Ibidem. 1948*. V. 18. P. 1. — (Перевод: *Бор Н.* Прохождение заряженных частиц через вещества. — М.: ИЛ, 1950).
30. *Hartree D.*//*Proc. Cambridge Phil. Soc.* **1928**. V. 24. P. 89.
- [31] *Fock V.*//*Zs. Phys.* **1930**. Bd. 61. S. 126.
32. *Thomas L.*//*Proc. Cambridge Phil. Soc.* **1927**. V. 23. P. 542.
33. *Fermi E.*//*Zs. Phys.* **1928**. Bd. 48. S. 73.
34. *Фарсов О.Б.*//*ЖЭТФ*. **1957**. Т. 32. С. 1464.
35. *Фарсов О.Б.*//*Ibidem. T.* 33. С. 696.
36. *Gombas P.*//*Encyclopedia of Physics*. V. 36. — Berlin: Springer-Verlag, 1956. — P. 109.
37. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. — 3-е изд. — М.: Физматгиз, 1965.
38. *Lehmann C.*//*Interaction of Radiation with Solids*. — Amsterdam: North-Holland, 1977 — (Перевод: *Лейман К.* Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. — М.: Атомиздат, 1979).
39. Abramowitz M., Stegun J.A. (Eds.): *Handbook of Mathematical Functions*. — New York: Dover, 1972. — (Перевод: Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами/Под ред. М. Абрамовича, И. Стигана. — М.: Наука, 1979).
40. *Sigmund P.*//*Rev. Roum. Phys.* **1972**. V. 17. P. 823.
- [41] *Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф.* Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. — Минск: Изд-во Белгосуниверситета, 1979.
42. *Lindhard J., Scharff M.*//*Phys. Rev.* **1961**. V. 124. P. 128.
43. *Winterbon K.B., Sigmund P., Sanders J.B.*//*Mat.-Fys. Medd. K. Dan Vidensk Selsk.* 1970. V. 37. P. 1.
44. *Sigmund P.*//*Rev. Roum. Phys.* **1972**. V. 17. P. 969.
45. *Brandt W., Laubert R.*//*Nucl. Instr. Meth.* **1967**. V. 47. P. 201.
46. *Andersen H.H., Bay H.L.*//[6]. — P. 145. — (В переводе с. 194).
47. *Sigmund P.*//*Ibidem.* — P. 8. — (В переводе с. 23).
48. *Sigmund P.*//*Theory of Sputtering* (не опубликовано).
49. *Eckstein W.*//*Nucl. Instr. Meth. B*. 1987. V. 18. P. 344.
50. *Dunke M.F., Tombrello T.A., Welter R.A., Housley R.M., Cirling E.C.*//*Surf. Sci.* **1983**. V. 124. P. 474.
- [51] *Morita K., Tsuchiya T., Hayashibara M., Jtoh N.*//*J. Nucl. Mater.* **1983**. V. 116. P. 63.
52. *Marita K., Ohno H., Hayashibara M., Itoh N.*//*Nucl. Instr. and Meth.* **1984**. V. 2. P. 596.
53. *Krauss A.R., Gruen D.M., Dewald A.B.*//*J. Nucl. Mater.* **1984**. V. 121. P. 398.
54. *Lam N.Q., Hoff H.A., Wiedersich H., Rehn L.E.*//*Surf. Sci.* **1985**. V. 149. P. 517.
55. *Pellm M.J., Young C.E., Gruen D.M., Aratono Y., Dewald A.B.*//*Ibidem. V.* 152. P. 477.
56. *Harrison D.E., Kelly P.W., Garrison B.J., Winograd N.*//*Ibidem. 1978*. V. 76. P. 311.
57. *Robinson M.T.*//*J. Appl. Phys.* **1983**. V. 54. P. 2650.
58. *Rosen M., Mueller G.P., Fraser W.A.*//*Nucl. Instr. and Meth.* **1983**. V. 209/210. P. 63.
59. *Olson R.R., Wehner G.K.*//*J. Vac. Sci. and Technol.* **1977**. V. 14. P. 319.
60. *Olson R.R., King M.E., Wehner G.K.*//*J. Appl. Phys.* **1979**. V. 50. P. 3677.
- [61] *Andersen H.H., Stenum R., Sorensen T., Whitlow H.J.*//*Nucl. Instr. and Meth.* **1983**. V. 209/210. P. 487.
62. *Kang H.J., Matsuda Y., Shimizu R.*//*Surf. Sci.* **1984**. V. 127. P. L179.
63. *Ichimura S., Shimizu H., Murakami H., Ishida Y.*//*J. Nucl. Mater.* **1984**. V. 128/129. P. 601.
64. *Lindhard J., Nielsen V.*//*Mat.-Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **1971**. V. 38, No. 9. P. 1.
65. *Robinson M.T.*//*Phil. Mag.* **1965**. V. 12. P. 145.
66. *Sigmund P., Oliva A., Falcone G.*//*Nucl. Instr. and Meth.* **1982**. V. 194. P. 541.
67. *Kelly R., Oliva A.*//*Ibidem. 1986*. V. 13B. P. 283.
68. *Falcone G.*//*Phys. Rev. B*. **1986**. V. 33. P. 263.
69. *Falcone G.*//*Rad. Eff. Expr.* **1987**. V. 1. P. 147.
70. *Matsunami N., Yamamura Y., Hitikawa Y., Jtoh N., Kazumata Y., Miyagawa S., Morita K., Shimizu R.*//*Report NIPPPJ-AM-14.* — Nagoya, Japan, 1980.
- [71] *Laeyraud N., Wehner G.K.*//*J. Appl. Phys.* **1961**. V. 32. P. 365.
72. *Carter G., Navinsek B., Witton J.L.*//[7]. — (В переводе с. 310).
73. *Kelly R.*//*Nucl. Instr. Meth. B*. 1987. V. 18. P. 388.
74. *Garrison B.J., Winograd N., Lo D., Tombrello T.A., Harrison D.E., Webb P.P.*//*Surf. Sci.* **1987**. V. 129. P. L180.
75. *Mc. Craken G.M., Scott P.E.*//*Nucl. Fusion*. **1979**. V. 19. P. 889.
76. *Tombrello T.A.*//*Pad. Eff.* **1982**. V. 65. P. 149.
77. *Weissmann R., Sigmund P.*//*Ibidem. 1973*. V. 19. P. 7.

78. Weissmann R., Behrisch R.//*Ibidem*. P. 69.
79. Littmark U., Fedder S./Nucl. Instr. and Meth. **1982**. V. 194. P. 607.
80. Falcone G., Oliva A.//App1. Phys. A. **1983**. V. 32. P. 201.
- [81] Falcone G., Oliva A.//Rad. Eff. Lett. **1984**. V. 86. P. 57.
82. Garrison, B.J./Nucl. Instr. and Meth. B. **1986**. V. 17. P. 305.
83. Falcone G., Kelly R., Oliva A./*Ibidem*. **1987**. V. 18. P. 399.
84. Oliva A., Kelly R., Falcone G./*Ibidem*. V. 19/20. P. 101.
85. Sanders J.B./Thesis. University of Leiden, **1968**.
86. Sigmund P./Rad. Eff. **1969**. V. 1. P. 15.
87. Falcone G., Oliva A. (не опубликовано).
88. Doetsch G. Theory and Application of Laplace Transform. — Berlin: Springer 1964. — (Перевод: Дёч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. — М.: Наука, 1965).
89. Littmark U. Thesis. — University of Copenhagen, **1974**.
90. Littmark U., Sigmund P./J. Phys. D. 1975. V. 8. P. 241.
- [91] Schott H.E./Ma1.-Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk. **1966**. V. 35, No. 9. P. 1.

ЛИТЕРАТУРА, ДОБАВЛЕННАЯ ПРИ ПЕРЕВОДЕ

92. Mashkova E.S., Molchanov V.A./Rad. Eff. and Defects in Solids. **1989**. V. 108. P. 307.
93. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел/Сб. перев. под ред. Е.С. Машковой. — М.: Мир, 1989.
94. Плещивцев Н.В. Применение ионных пучков для технологических целей//Итоги науки и техники. Сер. "Физические основы лазерной и пучковой технологии". 1989. Т. 5. С. 55.
95. Мартыненко Ю.В., Рязанов А. И., Фирсов О.Б., Явлинский Ю.Н. //Вопросы теории плазмы. Вып. 12/Под ред. М.А. Леонтовича, Б.Б. Кадомцева. — М.: Энергоатомиздат, 1982. — С. 205.
96. Eckstein W./Computer Simulation of Ion-Solid Interaction. — Berlin: Heidelberg: Springer-Verlag, 1991. — (Готовится перевод в издательстве "Мир").
97. Плетнев В.В./ФТТ. 1978. Т. 20. С. 3379.
98. Pletnev V.V., Semenov D.S. Telkovsky V.G./Rad. Eff. **1984**. V. 83. P. 113.
99. Плещивцев Н.В. Катодное распыление. — М.: Атомиздат, 1968.
100. Гусева М.И., Мартыненко Ю.В./Физ. плазмы. 1976. Т. 2. С. 593.
- [101] Bonderup E./Penetration of Charged Particles through Matter. — Lecture Notes. Institute of Physics. — Denmark: University of Aarhus, 1978.
102. Фирсов О.Б./ЖЭТФ. 1958. Т. 34. С. 447.
103. Фирсов О.Б./ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
104. Габович М.Д., Плещивцев Н.В., Семашко Н.Н. Пучки ионов и атомов для УТС и технологических целей. — М.: Энергоатомиздат, 1986.
105. Экштайн В., Книжник Г.С., Машкова Е.С., Молчанов В.А., Толмачев А.И., Фаязов И.М./Поверхность. 1990. № 11. С. 27.
106. Толмачев А.И./Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. С. 2409.
107. Кучинский В.В. Поверхность. **1982**. №4. С. 93.
108. Falcone G., Forlano L., Aiello D., Piperno F. (to be published).
109. Williams M.M.R./Prog. Nucl. Energy. **1979**. V. 3. P. 1.
110. Итоги науки и техники. Сер. "Пучки заряженных частиц и твердое тело." Т. 5. — М.: ВИНИТИ АН СССР, 1991.