ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2021, № 7, с. 104–107

УДК 539.1.01

ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ КАСКАДНОГО РАЗМНОЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ОТ ВИДА АТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА

А. И. Толмачев[a], *, Л. Форлано[b], **

[a]Российский новый университет, Москва, 105005 Россия

[b]Университет Калабрии, Козенца, 87036 Италия

**e-mail: tolmachev.alex@rambler.ru*

***e-mail: forlano@vegachess.com*

Поступила в редакцию 18.09.2020 г.
После доработки 20.11.2020 г.
Принята к публикации 25.11.2020 г.

Теоретически рассмотрено каскадное размножение атомов в твердотельной мишени для различных видов сечения рассеяния. Решение транспортного уравнения в одних случаях найдено в аналитическом виде, в других сводится к численному интегрированию. Получены выражения для энергетического распределения и полного числа каскадных атомов, а также для полной энергии каскада как функций глубины мишени и вида атомного взаимодействия. Результаты теории обобщают теорию каскадных ливней Ландау–Румера на случай произвольных видов атомных потенциалов – от потенциала твердых сфер до кулоновского.

Ключевые слова: теоретический анализ, каскадное размножение, атомный потенциал, сечение рассеяния.

DOI: 10.31857/S1028096021060157

ВВЕДЕНИЕ

Распыление твердых тел под действием ионной бомбардировки представляет собой сложное физическое явление [1, 2]. При столкновении атомов внутри мишени образуются две частицы, каждая со своей энергией и направлением движения, зависящими от закона межатомного взаимодействия. Объяснение наблюдаемых закономерностей распыления возможно в основном только с помощью программ компьютерного моделирования [3, 4].

Для теоретического изучения каскадного размножения в [5, 6] была сделана попытка разделить анализ энергетического и углового распределений: сначала рассмотреть энергетическое распределение каскада частиц, движущихся прямолинейно [5], а затем получить угловое распределение как поправку к прямолинейному решению [6]. Результаты [5, 6] были получены для конкретного вида сечения рассеяния, соответствующего взаимодействию электронов и фотонов. В настоящей работе теория обобщена на случай степенной зависимости сечения рассеяния от переданной энергии. Изменение степенного параметра позволяет рассмотреть широкий класс межатомных взаимодействий – от взаимодействия по закону твердых сфер до резерфордовского взаимодействия, характерного для кулоновского потенциала.

УРАВНЕНИЕ КАСКАДНОГО РАЗМНОЖЕНИЯ

Рассмотрим следующую задачу. Первичный ион с энергией E_0 входит в мишень. В мишени ион испытывает упругие столкновения с неподвижными атомами и выбивает их из положений равновесия. Выбитые атомы, в свою очередь, испытывают столкновения с другими атомами мишени и так далее – возникает каскад. Каскадное размножение атомов продолжается до того момента, когда энергия атома уменьшается до величины $E_{\min}$, недостаточной для разрушения атомной связи. Рассчитаем энергетическое распределение и число каскадных атомов в зависимости от глубины мишени для различных видов межатомного взаимодействия. Предполагается, что массы ионов и атомов равны, что соответствует случаю так называемого самораспыления.

Будем измерять энергию атомов E в относительных единицах $u = E/E_0$, $u_{\min} = E_{\min}/E_0$ и обозначим функцией $f(x,u)$ число атомов с энергией u на нормированной глубине x. Транспортное уравнение для функции распределения $f(x,u)$ имеет вид [7–11]:

$$\frac{\partial f(x,u)}{\partial x}+f(x,u)=\int_u^1 f(x,u')\times \\ \times\left[K(u',u'-u)+K(u',u)\right]du'. \quad (1)$$

Первое слагаемое в левой части уравнения (1) описывает изменение числа атомов между столкновениями. Два слагаемых в правой части уравнения (1) отражают тот факт, что в результате столкновения атома с энергией u' с неподвижным атомом образуются два атома, значения энергии которых u и $u'-u$. Граничное условие к уравнению (1) имеет дельтаобразный вид $f(0,u)=\delta(1-u)$ и указывает на то, что энергия иона, инициирующего каскад, равна E_0.

В качестве сечения рассеяния для столкновения двух атомов выберем сечение, зависящее по степенному закону от переданной энергии T:

$$K(E,T)dT=nE^{-n}T^{n-1}dT, \quad (2)$$

где E – энергия налетающего атома, $n>0$ – степенной параметр. В каскадной теории электронных ливней [5] авторы использовали комбинацию из трех сечений рассеяния (2) с тремя различными значениями степенного параметра: $n=1,2,3$. В атомных столкновениях степенной параметр меняется в пределах $0<n\le 1$, что существенно отличается от случая электронных ливней. При малых значениях энергии ионов имеем $n=1$ и взаимодействие частиц по закону твердых сфер. При больших значениях энергии ионов степенной параметр мал ($n\ll 1$), что соответствует резерфордовскому рассеянию.

ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ

Подстановка (2) в уравнение (1) дает

$$\frac{\partial f(x,u)}{\partial x}+f(x,u)= \\ =n\int_u^1 f(x,u')\frac{u^{n-1}+(u'-u)^{n-1}}{u'^n}du'. \quad (3)$$

Для исследования уравнения вместо переменной u введем новую независимую переменную s, используя преобразование Меллина:

$$f_s(x)=\int_0^1 u^{s-1}f(x,u)du,\quad (1\le s<\infty). \quad (4)$$

Функция $f_s(x)$ однозначно выражается через функцию $f(x,u)$ и наоборот. В результате преобразований получаем

$$\frac{df_s(x)}{dx}+f_s(x)=Q_s f_s(x), \quad (5)$$

$$Q_s=n\int_0^1 \xi^{s-1}\left[\xi^{n-1}+(1-\xi)^{n-1}\right]d\xi= \\ =n\left[\frac{1}{s+n-1}+\mathrm{B}(s,n)\right], \quad (6)$$

где В обозначает бета-функцию [12]. Решение уравнения (5) имеет вид:

$$f_s(x)=\exp(xQ_s)\exp(-x). \quad (7)$$

Таким образом, решение транспортного уравнения (3) сведено к нахождению обратного преобразования Меллина и вычислению интеграла в комплексной плоскости [13, 14]:

$$f(x,t)=\frac{1}{2\pi i}\int_{1-i\infty}^{1+i\infty}\exp(st)f_s(x)ds,\quad t=\ln\frac{1}{u}. \quad (8)$$

Функция $f(x,t)$ представляет собой дифференциальную характеристику – энергетическое распределение каскадных атомов на глубине x. Также представляет интерес интегральная характеристика – число каскадных атомов с энергией в диапазоне $u_{\min}\le u\le 1$ на глубине x:

$$F(x,t_{\max})=\int_0^{t_{\max}} f(x,t)dt,\quad t_{\max}=\ln\frac{1}{u_{\min}}. \quad (9)$$

Другой важной интегральной характеристикой является полная энергия каскада на глубине x:

$$\bar{u}(x)=\int_{u_{\min}}^1 uf(x,u)du=\int_0^{t_{\max}}\exp(-2t)f(x,t)dt. \quad (10)$$

РЕШЕНИЕ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ТВЕРДЫХ СФЕР

В случае взаимодействия частиц по закону твердых сфер решение может быть представлено в аналитическом виде. Подстановка $n=1$ в уравнение (6) дает $Q_s=2/s$,

$$f_s(x)=\exp\left(\frac{2x}{s}\right)\exp(-x), \quad (11)$$

и из таблиц [15] находим функцию распределения:

$$f(x,t)=\left[\delta(t)+\sqrt{\frac{2x}{t}}I_1\left(\sqrt{8xt}\right)\right]\exp(-x). \quad (12)$$

Здесь I_1 обозначает модифицированную функцию Бесселя первого порядка [12], первое слагаемое в скобках относится к первичному иону, инициирующему каскад, второе слагаемое относится к собственно каскаду.

Из интеграла (9) вычисляем число каскадных атомов:

$$F(x,t_{\max})=I_0\left(\sqrt{8xt_{\max}}\right)\exp(-x). \quad (13)$$

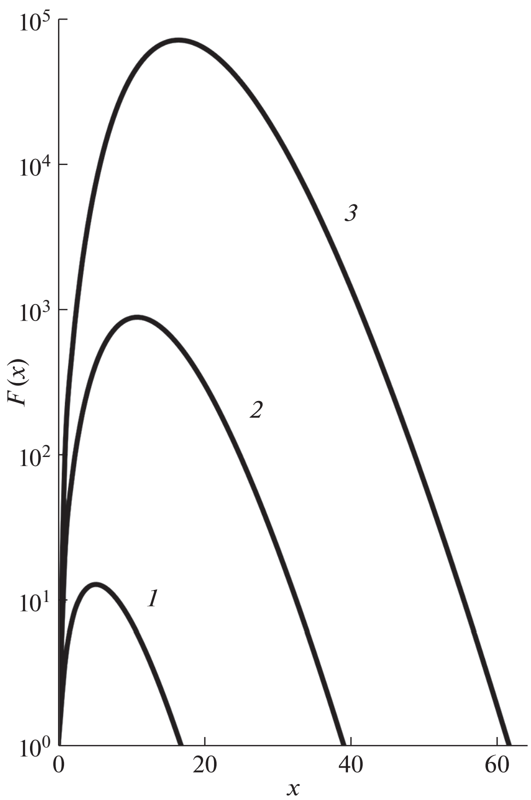

Рис. 1. Зависимость числа каскадных атомов от глубины мишени для энергии ионов E_0: $10E_{\min}$ (*1*); $100E_{\min}$ (*2*); $1000E_{\min}$ (*3*). Значение степенного параметра $n = 0.5$.

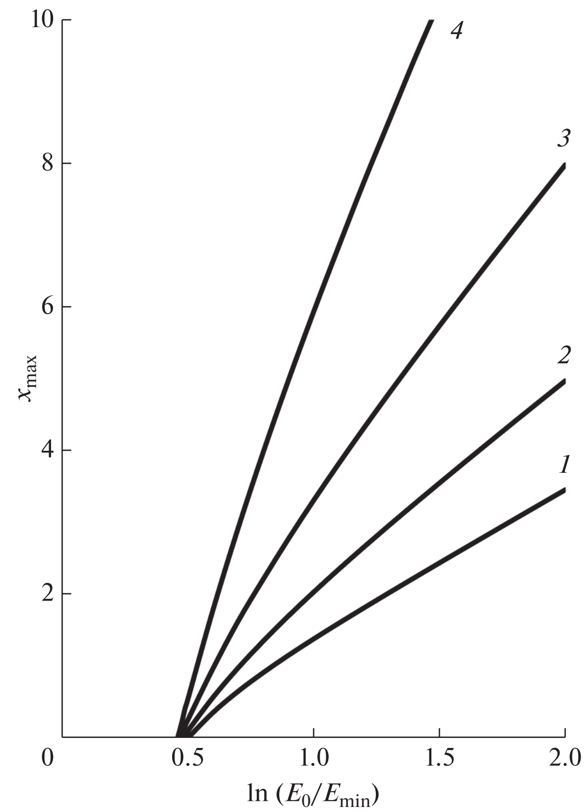

Рис. 2. Зависимость координаты максимума от энергии ионов для значений степенного параметра n: 1 (*1*); 0.4 (*2*); 0.2 (*3*); 0.1 (*4*).

Дифференцирование уравнения (13) по x приводит к трансцендентному уравнению для определения координаты максимума числа каскадных атомов $x_{\max}$:

$$\sqrt{\frac{x_{\max}}{2t_{\max}}} = \frac{I_1\left(\sqrt{8x_{\max}t_{\max}}\right)}{I_0\left(\sqrt{8x_{\max}t_{\max}}\right)}. \quad (14)$$

Асимптотическое разложение функций Бесселя в уравнении (14) показывает, что при больших значениях энергии ионов кривая $x_{\max}\left(t_{\max}\right)$ стремится к прямой линии:

$$x_{\max} = 2t_{\max} - \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad t_{\max} \gg 1. \quad (15)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Распределение числа каскадных атомов по глубине мишени определяется функцией (9), график которой изображен на рис. 1 для степенного параметра $n = 0.5$ и различной энергии ионов. Видно, что число каскадных частиц на заданной глубине увеличивается с ростом энергии ионов до тех пор, пока не достигнута критическая область, после которой дальнейшее увеличение энергии уменьшает число каскадных частиц. Кривая имеет максимум на глубине, для которой производная $dF/dt_{\max}$ обращается в нуль.

Рис. 2 показывает зависимость положения максимума от энергии ионов и значения степенного параметра. Видно, что при значениях $t_{\max} \leq 0.5$ распределение монотонно убывает и не имеет максимума. Максимум появляется на распределении при значениях $t_{\max} > 0.5$, и его положение смещается в сторону больших глубин мишени при уменьшении степенного параметра. Это указывает на то, что при больших значениях энергии ионов частицы испытывают резерфордовское рассеяние, характерное для кулоновского потенциала, и проникают на большую глубину по сравнению с ионами малых энергий, рассеивающимися по закону твердых сфер.

На рис. 3 изображено изменение полной энергии каскада с глубиной мишени, рассчитанное по формуле (10) для взаимодействия по закону твердых сфер. Если бы энергия отсечки была равна нулю, полная энергия каскада на любой глубине была бы равна E_0, что соответствует прямой $\overline{u} = 1$ на рис. 3. Начальные участки всех кривых действительно совпадают с прямой $\overline{u} = 1$. Учет энер-

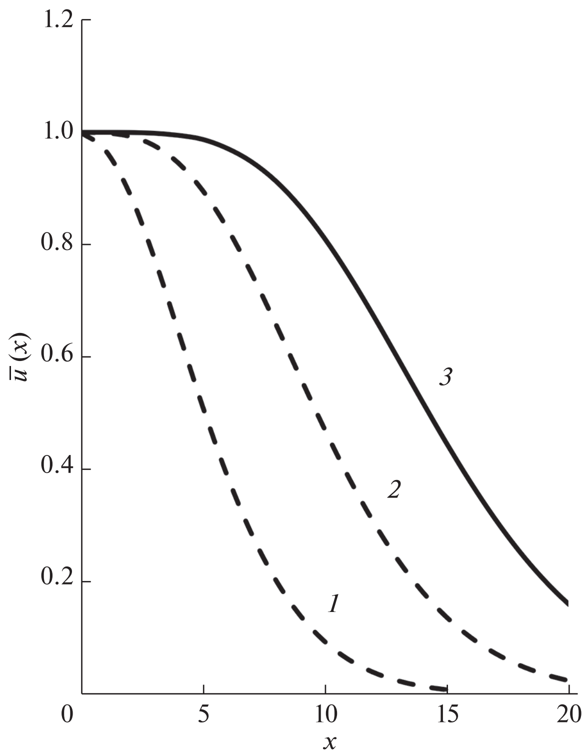

Рис. 3. Зависимость полной энергии каскада от глубины мишени для энергии ионов E_0: $10E_{\min}$ (*1*); $100E_{\min}$ (*2*); $1000E_{\min}$ (*3*). Значение степенного параметра $n = 1$.

гии отсечки приводит к тому, что на некоторой глубине энергия атомов уменьшается настолько, что они выбывают из каскада, что ведет к уменьшению полной энергии. Эффект уменьшения тем сильнее, чем меньше энергия ионов.

Полученные результаты и приведенные рисунки представляют собой обобщение предыдущих теорий каскадного размножения частиц на случай различных видов межатомного взаимодействия. Изменение степенного параметра в сечении рассеяния позволяет рассматривать атомные потенциалы от потенциала твердых сфер до кулоновского. Самостоятельное значение имеют аналитические формулы (11)–(15), которые могут быть использованы для тестирования программ компьютерного моделирования, а также в учебных целях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел. Сб. статей. / Сост. Машкова Е.С. М.: Мир, 1989. 349 с.
2. *Борисов А.М., Машкова Е.С.* Физические основы ионно-лучевых технологий. II. Распыление поверхности твердых тел. М.: МАКС Пресс, 2013. 196 с.
3. *Eckstein W.* Computer Simulation of Ion-Solid Interactions. Berlin: Springer, 1991. 296 p.
4. *Behrish R., Eckstein W.* Sputtering by Particle Bombardment. Berlin: Springer, 2007. 470 p.
5. *Landau L., Rumer G.* // Proceed. Royal Soc. (London). A. 1938. V. 166. № 925. P. 213.
6. *Landau L.* // J. Phys. USSR. 1940. V. 3. P. 237.
7. *Sigmund P.* // Phys. Rev. 1969. V. 184. № 2. P. 383.
8. *Roosendaal H.E., Sanders J.B.* // Rad. Effects. 1980. V. 52. P. 137.
9. *Waldeer K.T., Urbassek H.M.* // Appl. Phys. A. 1988. V. 45. P. 207.
10. *Толмачев А.И.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1991. Т. 55. С. 2409.
11. *Tolmachev A.I.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1994. V. 93. № 4. P. 415.
12. *Abramowitz M., Stegun I.A.* Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. N.Y.: Dover, 1972.
13. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы функций комплексного переменного. М.: Наука, 1973. 736 с.
14. *Свешников А.Г., Тихонов А.Н.* Теория функций комплексной переменной. М.: Наука, 1974. 320 с.
15. *Bateman H., Erdelyi A.* Tables of Integral Transforms. V. 1. N.Y., Toronto, London: McGraw-Hill Book Company, 1954.

Dependence of Parameters of Cascade Particle Multiplication on the Type of Atomic Potential

A. I. Tolmachev[1, *], L. Forlano[2, **]

[1]*Russian New University, Moscow, 105005 Russia*

[2]*University of Calabria, Cosenza, 87036 Italy*

**e-mail: tolmachev.alex@rambler.ru*

***e-mail: forlano@vegachess.com*

The cascade multiplication of atoms in a solid target is considered theoretically for different types of scattering cross section. The solution of the transport equation in some cases is found in an analytical form, in others it is reduced to numerical integration. The formulas are obtained for the energy distribution and the total number of cascade atoms, as well as for the total cascade energy as functions of the target depth and the type of atomic interaction. The theoretical results generalize the Landau–Rumer theory of cascade showers to the case of arbitrary types of atomic potentials, from the hard sphere potential to the Coulomb potential.

Keywords: theoretical analysis, cascade multiplication, atomic potential, scattering cross section.