

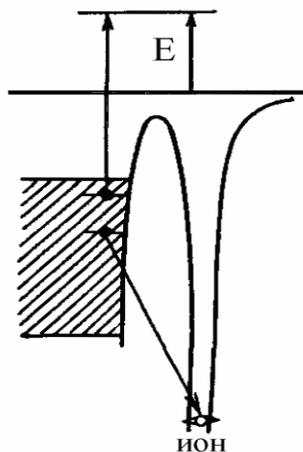
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени  
Д.В.СКОБЕЛЬЦЫНА

А.М. БОРИСОВ, Е.С. МАШКОВА

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИОННО-ЛУЧЕВЫХ  
ТЕХНОЛОГИЙ.

I. ИОННО-ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ



Москва  
Университетская книга  
2011

УДК 537.534

ББК 539

Б82

**Борисов А. М., Машкова Е. С.**

Б82 Физические основы ионно-лучевых технологий.  
I. Ионно-электронная эмиссия : учебное пособие /  
А. М. Борисов, Е. С. Машкова. – М.: Университетская  
книга, 2011. – 142 с.: табл. ил. – ISBN 978-5-91304-196-8.

В пособии приведены основные положения физики взаимодействия ионов с материалами, теории и закономерности ионно-электронной эмиссии материалов и практические применения этого явления. Пособие предназначено для студентов и аспирантов, специализирующихся в области физической электроники и ионно-плазменных технологий, может быть также полезным для специалистов и инженеров, связанных с вопросами взаимодействия плазмы и ионных пучков с поверхностью, разработкой методов обработки материалов потоками заряженных частиц в различных областях науки и техники, в том числе в задачах термоядерного и аэрокосмического материаловедения.

Издание осуществлено при финансовой поддержке Минобрнауки по мероприятию 1.1. «Проведение научных исследований коллективами научно-образовательных центров», контракт № 02.740.11.0389.

© Борисов А. М.,  
Машкова Е. С., 2011  
© НИИЯФ МГУ, 2011  
© Издательство «КДУ».  
Обложка, 2011

ISBN 978-5-91304-196-8

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие .....	8
Введение .....	9
Глава 1. Экспериментальные методы .....	13
1.1. Масс-монохроматор НИИЯФ МГУ .....	13
1.2. Камера столкновений .....	17
1.3. Подготовка мишеней к эксперименту ...	19
1.4. Методика измерения коэффициента ионно-электронной эмиссии .....	22
Глава 2. Основы взаимодействия ионов с материалами .....	27
2.1. Двухчастичные потенциалы взаимодействия .....	27
2.2. Кинематика элементарного акта столкновения без и с учетом неупругой потери энергии .....	34
2.3. Динамика элементарного акта столкновения без и с учетом неупругой потери энергии .....	40
2.4. Понятие сечения взаимодействия .....	51
2.5. Торможение частиц при движении в твердом теле. Упругие и неупругие удельные потери энергии .....	56
2.6. Объемная и поверхностная энергия связи, тепловые колебания атомов .....	64
2.7. Образование радиационных дефектов .	67
2.8. Радиационные эффекты в углеродных материалах.....	71

Глава 3. Потенциальная ионно-электронная эмиссия .....	78
3.1. Основные механизмы.....	78
3.2. Основные закономерности .....	80
Глава 4. Кинетическая ионно-электронная эмиссия. Основные закономерности .....	85
4.1. Зависимости от энергии (скорости) и заряда бомбардирующих ионов .....	85
4.2. Зависимости от атомного номера бомбардирующей частицы и атома мишени .....	87
4.3. Зависимость от угла падения ионов на мишень .....	89
4.4. Зависимость от температуры мишени	91
4.5. Молекулярный эффект .....	93
4.6. Влияние адсорбированных слоёв .....	96
4.7. Энергетические распределения эмитированных электронов .....	97
4.8. Угловые распределения эмитированных электронов .....	99
4.9. Статистические распределения эмитированных электронов .....	100
Глава 5. Механизмы кинетической ионно-электронной эмиссии .....	103
5.1. Эмиссия электронов из неупорядоченных твердых тел .....	103
5.1.1. История вопроса .....	103
5.1.2. Механизм передачи электронам кинетической энергии иона в области скоростей, меньших скоростей связанных электронов ...	105

5.1.3. Коэффициент кинетической ионно-электронной эмиссии .....	111
5.2. Проблемы транспорта вторичных электронов и влияния радиационных нарушений .....	114
5.3. Эмиссия электронов из упорядоченных твердых тел .....	123
Глава 6. Практическое применение ионно- электронной эмиссии.....	132
6.1. Ионная оже - спектроскопия.....	132
6.2. Измерение слабых токов ионов и потоков нейтральных частиц.....	134
6.3. Растровая ионная микроскопия.....	135
6.4. Определение флюенса облучения пучком многозарядных ионов .....	137
6.5. Контроль процессов ионного травления слоистых структур.....	139
6.6. Определение радиационной стойкости углеродных материалов .....	140

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

- $a$  – параметр экранирования потенциала взаимодействия
- $a_B$  – боровский радиус экранирования
- $a_{T-F}$  – параметр экранирования Томаса-Ферми
- $a_{\Phi}$  – параметр экранирования Фирсова
- $a_L$  – параметр экранирования Линдхарда
- $a_0 = \hbar/m_e e^2 = 0.529 \text{ \AA}$  – боровский радиус
- $b = Z_1 Z_2 e^2 / \mu v_0^2$  – минимальное расстояние между взаимодействующими частицами при лобовом столкновении для неэкранированного поля
- $d\sigma$  – дифференциальное сечение рассеяния, дифференциальное сечение передачи энергии,  $-dE/dx$  – удельные потери энергии
- $e$  – заряд электрона
- $E_0$  – начальная энергия бомбардирующей частицы
- $E_1$  – энергия рассеянного иона в элементарном акте столкновения
- $E_2$  – энергия атома отдачи
- $E_d$  – энергия смещения атома
- $E_R = 13,6 \text{ эВ}$  – энергия Ридберга
- $E_s$  – энергия связи поверхностного атома
- $m_e$  – масса электрона
- $M_1$  – масса налетающей частицы (иона, атома)
- $M_2$  – масса атома мишени
- $n_e$  – число электронов проводимости в единице объема
- $n_0$  – число атомов в единице объема мишени
- $p$  – прицельный параметр столкновения
- $Q$  – неупругая потеря энергии в элементарном акте столкновения
- $r$  – расстояние между взаимодействующими частицами

$r_{\min}$  – расстояние наибольшего сближения взаимодействующих частиц  
 $R$  – полный пробег частицы  
 $R_p$  – проективный пробег  
 $R_e$  – средняя длина пути, на котором ион еще способен производить ионизацию  
 $R_T$  – радиус тени позади рассеивающего атома  
 $S_n$  – сечение ядерного (упругого) торможения, приходящееся на один атом  
 $V(r)$  – двухчастичный потенциал взаимодействия  
 $v_0$  – начальная скорость бомбардирующей частицы  
 $v_B = e^2/\hbar$  – скорость электрона на первой боровской орбите атома водорода  
 $Z_1$  – атомный номер бомбардирующей частицы  
 $Z_2$  – атомный номер атома мишени  
 $Y$  – коэффициент распыления  
 $E_F \approx (3\pi^2)^{2/3} a_B^2 n_e^{2/3} E_R$  – энергия Ферми  
 $\varepsilon$  – безразмерная энергия Линдхарда  
 $\gamma$  – коэффициент ионно-электронной эмиссии  
 $\zeta = b/a_B$  – параметр Бора  
 $\nu$  – уровень радиационных нарушений  
 $\theta_1$  – угол рассеяния иона в элементарном акте столкновения в лабораторной системе координат  
 $\theta_2$  – угол вылета атома отдачи в лабораторной системе координат  
 $\Theta$  – температура Дебая  
 $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  – приведенная масса  
 $\rho$  – безразмерный пробег Линдхарда  
 $\rho(r)$  – распределение электронной плотности в атоме  
 $\tau$  – интеграл времени  
 $\Phi(r/a)$  – функция экранирования потенциала взаимодействия  
 $\chi$  – угол рассеяния иона в элементарном акте столкновения в системе центра инерции

## ПРЕДИСЛОВИЕ

В течение многих предыдущих лет в НИИЯФ МГУ проводились и продолжают проводиться исследования рассеяния ионов поверхностями твердых тел, распыления, ионно-электронной и ионно-фотонной эмиссии, образования радиационных дефектов и их влияния на вышеперечисленные процессы. Нами делались попытки осмыслить особенности взаимодействия ионов с твердыми телами как с неупорядоченным расположением атомов – поликристаллическими и аморфными, так и с монокристаллами. Это необходимо еще и потому, что все указанные выше процессы имеют многочисленные практические применения. В связи с деятельностью научно-образовательного центра в НИИЯФ МГУ «Технологии и исследования наноматериалов аэрокосмической техники» и разработкой курсов специальных дисциплин возникла необходимость обобщения накопленного материала в виде учебного пособия

Представленный материал может оказаться полезным не только студентам, но и специалистам в области атомной физики, физической электроники, радиационной физики твердого тела, микро- и нанoeлектроники, вовлеченным в исследования и разработки с использованием ионных пучков.

25 апреля 2011г.

А.М.Борисов, Е.С.Машкова



## ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие ионов с твердыми телами приводит к возникновению взаимосвязанных процессов, основные из которых — рассеяние бомбардирующих частиц (в том числе и с изменением их зарядового состояния), эмиссия заряженных и нейтральных частиц и их комплексов (ионно-ионная эмиссия, ионно-электронная эмиссия, распыление, ионно-стимулированная десорбция с поверхности твёрдого тела), испускание электромагнитного излучения с широким спектром частот (ионно-фотонная эмиссия, ионолюминесценция, рентгеновское излучение), различные радиационные процессы, в том числе, образование дефектов как в объёме твёрдого тела, так и на его поверхности. Схема основных процессов представлена ниже.

Первым этапом всех этих процессов является элементарный акт столкновения иона с атомом твёрдого тела, результатом которого является перераспределение энергии и импульса бомбардирующего иона между рассеянным ионом и атомом отдачи (англ. “target”) мишени. Акт столкновения может привести к возникновению каскада атомных столкновений, а также процессов, сопровождающих перестройку электронных оболочек партнёров столкновения, что и обуславливает всю совокупность вторичных процессов, вызванных взаимодействием ионов с твердым телом. Другими словами, результирующие неупругие процессы, вызывающие выход электронов из твердого тела, зависят как от кинетической, так и потенциальной энергии бомбардирующих частиц. Следует отметить, что

значительной потенциальной энергией могут обладать многозарядные ионы.

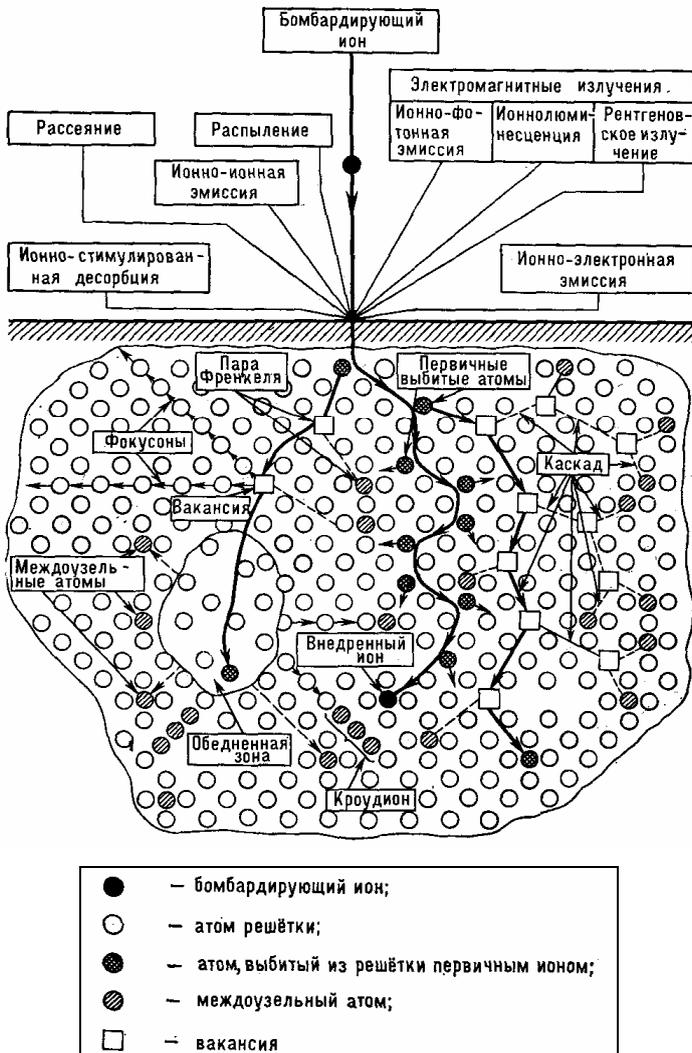


Схема основных процессов взаимодействия ионов с твердым телом

Под ионно-электронной эмиссией подразумевают испускание электронов твердыми телами при бомбардировке их ионами, атомами, молекулами и кластерами. Впервые наблюдалось Виллардом 1899 году в разрядной трубке. Ионно-электронная эмиссия определяется интегральными и дифференциальными характеристиками, а также статистикой вылета электронов. К интегральным характеристикам относится коэффициент ионно-электронной эмиссии  $\gamma = N/N_o$ , равный среднему числу вылетевших электронов, приходящихся на одну бомбардирующую частицу. К дифференциальным характеристикам относят энергетические и угловые распределения эмитированных электронов, распределения по состояниям спинов. В процессе эмиссии электрона из твердого тела обычно выделяют три стадии: возбуждение электрона, движение его к поверхности и выход в вакуум через потенциальный барьер. В зависимости от механизма возбуждения электрона различают потенциальную (ПИЭЭ) и кинетическую (КИЭЭ) ионно-электронные эмиссии. Потенциальная электронная эмиссия является следствием взаимного расположения энергетических уровней взаимодействующих систем, и возбуждение электрона происходит в результате конверсии внутренней энергии налетающей частицы через оже-процессы. Кинетическая электронная эмиссия обусловлена неупругими процессами ионизации и возбуждения атомов твердого тела и бомбардирующих частиц при парных столкновениях в процессе движения ионов в твердом теле, и имеет порог по кинетической энергии  $E_{th}$  (скорости  $v_{th}$ ). Возбужденные электроны при движении в твердом теле испытывают ослабление потока в упругих и

неупругих взаимодействиях с электронами и атомами мишени, а также с различными, в том числе и радиационными дефектами. Наличие поверхности прерывает этот процесс и приводит к выходу электронов из твердого тела с потерей энергии на преодоление потенциального барьера.

Потенциальная и кинетическая ионно-электронные эмиссии обычно считаются независимыми и аддитивными ( $\gamma = \gamma_n + \gamma_k$ ).

Первая глава посвящена описанию масс-монохроматора, создающего ионные пучки с энергиями 5–35 кэВ и методов измерения коэффициента ионно-электронной эмиссии, используемых в НИИЯФ МГУ, а также методов анализа структуры и морфологии поверхностей облучаемых материалов. Во второй главе рассматриваются основы взаимодействия ионов с материалами, включая потенциалы межатомного взаимодействия, кинематику и динамику элементарного акта взаимодействия, упругие и неупругие потери энергии при торможении ионов в твердом теле, образование радиационных дефектов. Третья глава посвящена механизмам и основным закономерностям потенциальной ионно-электронной эмиссии. В четвертой главе приводятся сведения об основных закономерностях кинетической ионно-электронной эмиссии. В главе пятой обсуждаются механизмы кинетической ионно-электронной эмиссии. В шестой главе рассматриваются практические применения кинетической ионно-электронной эмиссии.

# Глава 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Для исследования ионно-электронной эмиссии используют установки, генерирующие сепарированный по массам ионный пучок - ионные масс-монохроматоры, позволяющие производить бомбардировку поверхности мишени ионами заданного типа и массы, и имеющие устройства для регистрации потока бомбардирующих ионов и эмитированных электронов, а также для энергетического анализа вторичных электронов.

Ниже приведено описание установки, используемой в НИИЯФ МГУ для исследования полных коэффициентов КИЭЭ в интервалах углов падения ионов на мишень от  $0^\circ$  (нормальное падение) до  $89^\circ$  при изменении температуры образцов вплоть до  $1000^\circ\text{C}$  в интервале энергий ионов от 5 до 35 кэВ.

## 1.1. Масс-монохроматор НИИЯФ МГУ

Схема масс-монохроматора приведена на рис.1.1. Пучок газовых ионов создается в дуговом источнике ионов (1) с продольным магнитным полем, формируемым соленоидом. Ускорение ионов производится с помощью стабилизированного высоковольтного источника со стабилизацией 0,01 %. Энергия ионного пучка может варьироваться в диапазоне 5-35 кэВ, с разбросом по энергии не более десятка эВ. Благодаря сильфоно-карданному устройству (3) источник ионов можно юстировать как в горизонтальной, так и в вертикальной плоскостях. Для разделения пучка ускоренных ионов по массам и его фокусировки используется электромагнит (6),

создающий секторное неоднородное магнитное поле зигбановского типа:  $H = H_0 \sqrt{\left(\frac{r_0}{r}\right)}$ .

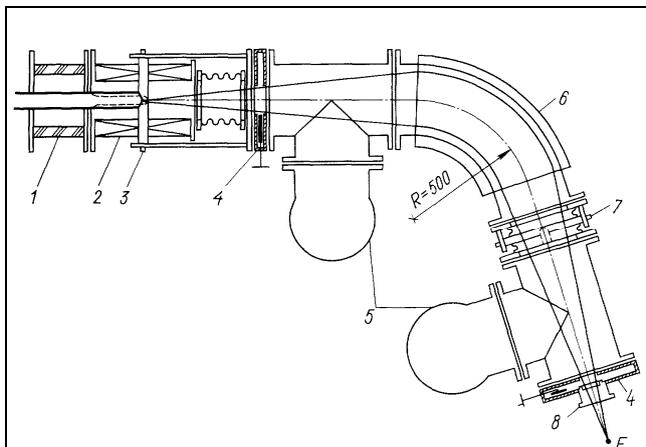


Рис.1.1. 1 - изолятор ионного источника, 2 – соленоид, 3,7 – карданные устройства, 4 –вакуумные шлюзы, 5 – насосы, 6 – магнит, 8 – выходной фланец,  $F$  – точка фокуса

Такое поле обеспечивает стигматическую фокусировку ионов в вертикальной и горизонтальной плоскостях. Питание электромагнита осуществляется стабилизированным источником постоянного тока. Система стабилизации тока электромагнита позволяет стабилизировать ток величиной до 50 А. Магнит имеет форму сектора с углом  $67^\circ$ . Радиус равновесной траектории  $r_0 = 500$  мм, угол отклонения пучка  $74^\circ$ . Угловой разброс ионов пучка не превышает  $\pm 1^\circ$ , плотность тока пучка ионов в фокусе установки для ионов аргона энергии 30 кэВ достигает  $2 \text{ mA/cm}^2$ . Поперечное сечение ионного пучка  $\sim 0.3 \text{ cm}^2$ . С помощью сильфоно-карданного устройства

достигается максимальное значение плотности тока пучка ионов в фокусе установки, где располагается мишень (юстировка осуществляется также в двух плоскостях – горизонтальной и вертикальной). Благодаря шлюзовым устройствам можно без разгерметизации всего объема масс-монохроматора осуществлять подготовительные работы как в источнике ионов (1), так и в камере мишени. Ионный пучок получается в дуговом ионном источнике с продольным магнитным полем (рис. 1.2).

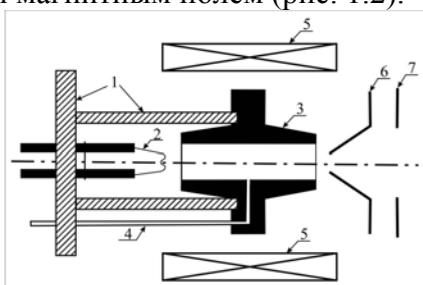


Рис. 1.2. Ионный источник масс-монохроматора НИИЯФ МГУ: 1- керамический изолятор источника; 2 – вольфрамовый катод; 3 – газоразрядный цилиндр; 4 – трубка подачи газа; 5 – соленоид; 6 –вытягивающая линза; 7 – выходная диафрагма

Ионы образуются при электронном ударе в газоразрядном цилиндре (3). Эмиттером электронов служит вольфрамовая нить, которая прикрепляется к катодным вводам (2). Весь катодный блок смонтирован на отдельном фланце, что ускоряет смену нити. Газоразрядный блок находится под стабилизированным положительным потенциалом высоковольтного выпрямителя (максимальная энергия однозарядных ионов до 35 кэВ, стабилизация не хуже  $\pm 0.01\%$ ) и изолирован от основного фланца источника керамическим изолятором (1).

Ионы вытягиваются из газоразрядного цилиндра при помощи линзы (6), которая находится под отрицательным потенциалом относительно земли (0.5 – 8 кэВ), чтобы не допустить ухода электронов. Выходная диафрагма ионного источника (7) находится под потенциалом земли. Продольное магнитное поле создается при помощи соленоида (3). Ионный источник вместе с соленоидом укреплены на карданном подвесе. С помощью двух винтов можно регулировать направление ионного пучка в горизонтальной и вертикальной плоскостях. Ось вращения находится в промежутке между выходом газоразрядной трубки и вытягивающей линзой. Эта конструкция дает возможность подбора оптимальных условий фокусировки масс-монохроматора и максимальной плотности ионного тока на мишень. Две степени свободы поворота источника дает сильфонный переходник, который прифланцован к первому высоковакуумному шлюзу ((3) на рис.1.1). Этот шлюз используется для отсечки камеры источника при замене нити катода. На схеме установки показаны два шлюзовых устройства (4), обеспечивающие вместе с насосами (5) дифференциальную откачку труб ионопровода. Первое шлюзовое устройство диаметра 100 мм отделяет камеру источника от камеры магнита, а второе – камеру магнита от камеры столкновения. Для быстрой смены мишени в камере столкновения без нарушения вакуума в камерах масс-монохроматора между этими частями находится второй высоковакуумный шлюз ((3) на рис 1.1). Вакуум в камере столкновений обеспечивается безмасляной турбомолекулярной системой с насосом Turbovac TW 300H с предельным давлением  $\sim 10^{-7}$  мм.рт.ст.



## 1.2. Камера столкновений

Камера столкновений на масс-монохроматоре НИИЯФ МГУ разрабатывалась для экспериментальных работ по ионно-электронной эмиссии и распылению, а также ионно-фотонной эмиссии (рис.1.3). Камера представляет собой цилиндр из нержавеющей стали, к которому приварены патрубки. Один из них служит для присоединения камеры к масс-монохроматору, другой используется для присоединения к турбомолекулярному насосу. С боковых сторон камеры установлены фланцы. Они предназначены для разгерметизации камеры при подготовительных работах к экспериментам. Боковые фланцы крепятся к камере с помощью изоляторов, чем обеспечивается электрическая изоляция от корпуса камеры. Для пропускания ионного пучка в камеру столкновений на входе установлена диафрагма, которая служит для задания формы ионного пучка, попадающего на мишень. Отверстие диафрагмы имеет прямоугольную форму, причем, высота отверстия меньше его ширины (4 x 8мм). Это связано с тем, что поворот мишени осуществляют вокруг горизонтальной оси, что позволяет облучать мишень при сильно скользящих углах. Пучок ионов после прохождения диафрагмы и супрессорного электрода, подавляющего ток вторичных электронов против направления падения ионов, попадает в цилиндр Фарадея, который электрически изолирован относительно мишени и корпуса камеры и снабжен азотной ловушкой для вымораживания масляных паров из рабочего объема камеры. Кроме основного своего назначения, а именно обеспечения измерения ионного тока, прошедшего на мишень, цилиндр

Фарадея используется как коллектор вторичных электронов при измерении ионно-электронной эмиссии. При этом на цилиндр Фарадея подается положительный потенциал относительно облучаемой мишени, достаточной для вытягивания всех электронов.

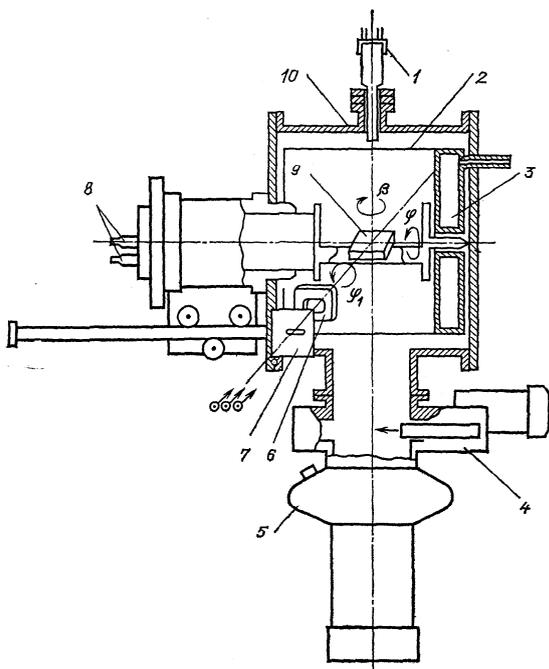


Рис 1.3. Камера столкновений: 1 – вакуумная лампа; 2 – коллектор; 3 – резервуар для жидкого азота; 4 – шлюз; 5 – высоковакуумный агрегат; 6 – электростатическая линза; 7 – диафрагма; 8 – вакуумные выводы; 9 – мишень; 10 – вакуумная камера

Конструкция камеры столкновений и ее оснастки позволяет правильно контролировать

величины ионного тока на мишень и тока ионно-электронной эмиссии с мишени путем подключения измерительных приборов по схеме, приведенной ниже в разделе 1.4 на рис 1.6.

### 1.3. Подготовка мишеней к эксперименту

В проводимых в НИИЯФ МГУ экспериментах использовались и будут использоваться мишени поли- и монокристаллов металлов и полупроводников, а также углеграфитовых материалов. Мишени обычно имеют форму прямоугольных пластинок. Толщина пластинок составляет (иногда на специальной подложке) 3 - 4 мм, ширина – 20 - 22 мм, а длину выбирали в зависимости от требуемого угла падения ионов на мишень – от 30 до 80 мм. Мишени закрепляют в камере столкновений на держателе, позволяющем варьировать углы падения  $\theta$  ионов на мишень в пределах от 0 до  $89^\circ$  с шагом по углу  $0.25 - 0.5^\circ$ , а также изменять температуру мишеней от температуры жидкого азота до  $1000^\circ\text{C}$ . Как до, так и после облучения, как правило, проводится элементный анализ образцов, исследование топографии и кристаллической структуры. Элементный анализ образцов проводится при помощи резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов  ${}^4\text{He}^+$  с энергией 1.5 – 2 МэВ на электростатическом ускорителе НИИЯФ МГУ, а также при помощи спектromетрии атомов отдачи. Глубина анализа методом РОР ионов  $\text{He}^+$  энергии 2МэВ составляет около 1 мкм, что сопоставимо с характерными глубинами модификации поверхностного слоя при облучении ионами с энергиями в десятки кэВ. Удовлетворительным для исследований является также разрешение по глубине метода РОР, составляющее около 0.01 мкм.

Исследования топографии поверхности образцов проводятся на растровом электронном микроскопе (РЭМ) с ускоряющим напряжением 15-20 кэВ и увеличением от  $10^3$  до  $10^5$ . Получаемое изображение сохраняется в виде файла. На рис. 1.4 представлены в качестве примера картины исходной топографии высокоориентированного пиролитического графита и топографии, развивающейся при высокодозной ионной бомбардировке.

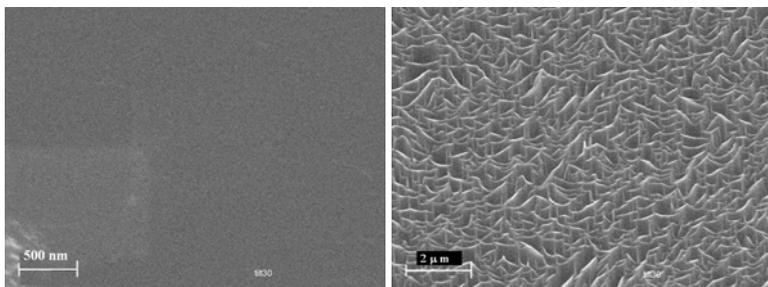


Рис.1.4. Микрофотографии поверхности грани (0001) УПВ-1Т до облучения (слева) и после облучения (справа) при комнатной температуре ионами  $N_2^+$  энергии 30 кэВ

При анализе кристаллической структуры поверхности и тонких пленок используются методы дифракции рентгеновского излучения и электронов.

Рентгеновскую дифрактометрию проводят на дифрактометрах. При оценке глубины анализа исходят из величины линейного коэффициента  $\mu$  поглощения рентгеновского излучения в материалах,  $\mu^{-1} > 10$  мкм (например, для графита  $\mu^{-1} \approx 10^3$  мкм). Толщина измененного ионным облучением поверхностного слоя составляет порядка величины  $10^{-1}$  мкм, поэтому рентгеновский анализ отражает объемные свойства исследуемых материалов.

Для исследования структуры поверхностных слоев материалов используют метод дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО), позволяющий исследовать поверхности массивных образцов. Глубина анализа методом ДБЭО для ровной на атомном уровне поверхности оценивается  $\sim 1$  нм. Для поверхности с развитым рельефом картины ДБЭО, как правило, отражают кристаллическую структуру выступов на поверхности материала, через которые при скользящем движении вдоль поверхности проходят электроны с длиной пути, как и при анализе тонких пленок, не превышающей несколько сотен ангстрем. 50 кВ и токе пучка 50 мкА. Электронограммы фиксируются цифровой видеокамерой через стекло электронографа с флюоресцирующего экрана. На рис. 1.5 в качестве примера приведены дифракционные

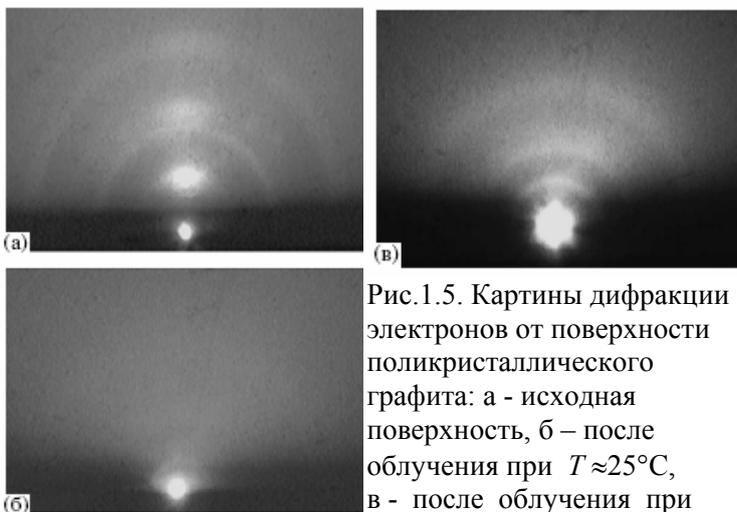


Рис.1.5. Картины дифракции электронов от поверхности поликристаллического графита: а - исходная поверхность, б – после облучения при  $T \approx 25^\circ\text{C}$ , в - после облучения при  $T \approx 300^\circ\text{C}$

картины поверхности поликристаллического графита до облучения и после облучения ионами  $\text{Ag}^+$  энергии

30 кэВ при комнатной и повышенной ( $T \approx 300^\circ\text{C}$ ) температурах образца. На электронограмме поверхности поликристаллического графита до облучения и после облучения при повышенной температуре видна характерная система трех колец. При комнатной температуре облучения диффузное гало свидетельствует об аморфизации поверхностного слоя.

#### 1.4. Методика измерения коэффициента ионно-электронной эмиссии

Облучение мишеней проводят ионами инертных газов, а также атомарного и молекулярного иона азота при плотности тока  $j \approx 0.3 \text{ мА/см}^2$ , флюенсы облучения составляют  $10^{18} - 10^{19} \text{ ион/см}^2$ . Флюенс облучения рассчитывают по формуле:

$$\Phi = \frac{N}{S} \left[ \frac{\text{ион}}{\text{см}^2} \right], \text{ где } S - \text{площадь пятна облучения } [\text{см}^2];$$

$N$  – количество упавших ионов.

$$N = \frac{Q}{q}, \text{ где } Q - \text{заряд, попавший на мишень } [\text{Кл}];$$

$q$  – элементарный заряд иона [Кл].

$$Q = I_{\text{cp}} \cdot t, \text{ где } I_{\text{cp}} - \text{средний ионный ток } [\text{А}];$$

$t$  – время облучения [сек].

Для определения коэффициента ионно-электронной эмиссии  $\gamma = \frac{I_e}{I_i}$  кроме измерения тока

бомбардирующих мишень ионов  $I_i$  необходимо еще и измерения тока вторичных электронов  $I_e$ . Правильное измерение токов обеспечивается электронно-оптической системой, состоящей из входной диафрагмы, находящейся под потенциалом земли, электростатической линзы,

находящейся под отрицательным, относительно земли, потенциалом, входного отверстия в коллекторе вторичных частиц. Электрическая схема измерения токов представлена на рис.1.6.

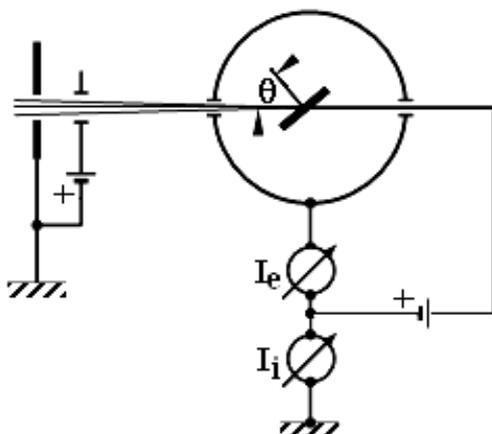


Рис.1.6. Электрическая схема измерения коэффициента ионно-электронной эмиссии

При отладке методики измерений была произведена оценка вклада в ток на коллектор отрицательных ионов магнетронным методом. Магнитное поле создавалось двухсекционным соленоидом, намотанным на специально изготовленный латунный коллектор (рис.1.7 а). Ионный пучок падал на мишень в промежуток между секциями соленоида. Диаметр соленоида был больше примерно в четыре раза отверстия для ввода пучка, что позволяло избежать серьезных нарушений магнитного поля вблизи мишени. При различных углах падения ионов на мишень определялось отношение токов на мишень и коллектор в зависимости от напряженности магнитного поля  $H$ . Во всех случаях при малых напряженностях магнитного поля ( $H \leq 20$  эрстед) отношение токов не изменяется, потом при определенной напряженности, зависящей от потенциала

$U_{\text{км}}$  между мишенью и коллектором это отношение резко падает практически до нуля вне зависимости от угла падения ионов и температуры мишени при  $H \approx 200$  эрстед. На рис.1.7 б приведена зависимость отношения тока на коллектор к току первичных ионов от угла  $\theta$  падения ионов на поликристаллический графит в отсутствие магнитного поля и зависимости этого отношения при фиксированных  $\theta$  от напряженности магнитного поля.

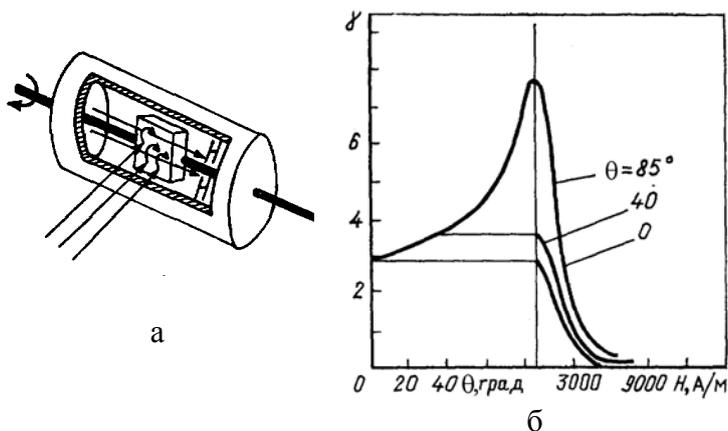


Рис. 1.7. Латунный коллектор (а). Зависимости  $\gamma(\theta)$  при  $H = 0$  (б – слева) и  $I_2(H)/I_0$  (б – справа) для случая облучения графита ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 30 кэВ при  $\theta = 0, 40$  и  $85^\circ$

Эти зависимости представляют собой типичные магнетронные характеристики и показывают, что ошибка в определении коэффициента ионно-электронной эмиссии за счет отрицательных тяжелых частиц (ионов) во всем диапазоне углов не превышает 2-5%. Магнитное поле соленоида использовалось также, чтобы оценить ошибку в измерении тока на коллектор за счет эмиссии быстрых положительных частиц (рассеянных первичных ионов) и медленных вторичных положительных ионов при переполюсовке системы и подачи на коллектор



достаточно большого отрицательного потенциала. Установлено, что при всех условиях вклад тока тяжелых частиц меньше погрешности эксперимента, которая составляет примерно  $\pm 2.5\%$ .

Перед началом серийных экспериментов обычно измеряют и анализируют зависимости  $\gamma$  от плотности ионного тока  $j$  и флюенса облучения бомбардирующих ионов. Плотность тока  $j$  определяют как отношение среднего ионного тока к площади следа, оставляемого ионным пучком на мишени после облучения, см. рис. 1.8. Увеличение или уменьшение  $\gamma$

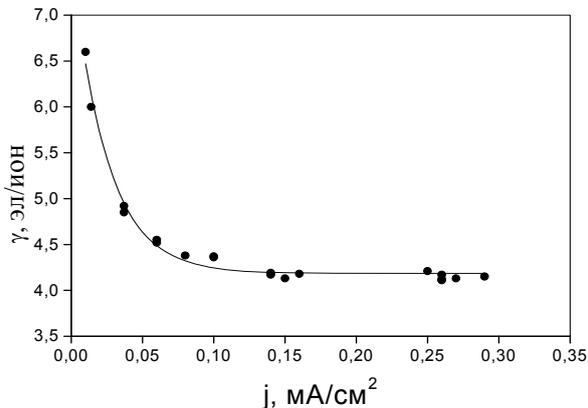


Рис.1.8. Зависимость коэффициента ионно-электронной эмиссии  $\gamma$  от плотности ионного тока  $j$  при облучении графита по нормали ионами  $N_2^+$  энергии 30 кэВ

при изменении плотности ионного тока  $j$  обычно связывают с адсорбцией молекул остаточных газов вакуумной камеры, влияние которой исчезает при достаточно большой плотности тока  $j$ , составляющей, например, при нормальном падении ионов азота  $j > 0,05$  МА/см<sup>2</sup>. Видно, что при  $j < 0,05$  МА/см<sup>2</sup> наблюдается резкое увеличение  $\gamma$  с уменьшением  $j$ .

Стабилизация электронной эмиссии с флюенсом облучения наступает при  $\Phi > 10^{18}$  ион/см<sup>2</sup>. В качестве примера на рис.1.9. приведены данные по зависимости

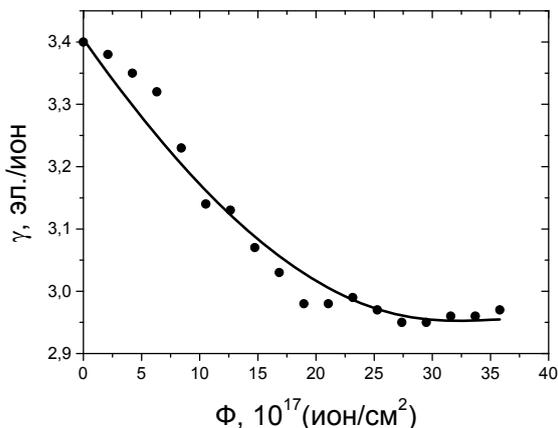


Рис.1.9. Зависимость коэффициента ионно-электронной эмиссии  $\gamma$  от флюенса при облучении графита РОСО-AXF-5Q по нормали ионами  $Ag^+$  энергии 30 кэВ

коэффициента ионно-электронной эмиссии  $\gamma$  от флюенса при облучении графита РОСО-AXF-5Q по нормали ионами  $Ag^+$  энергии 30 кэВ. Одной из причин этого является установление динамически равновесной топографии поверхности облучаемого образца.

Рекомендуемая литература:

1. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М.: Атомиздат, 1980, гл.1.
2. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995, гл.4 и 5.

## **Глава 2. ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ С МАТЕРИАЛАМИ**

В основе рассмотрения взаимодействия атомных частиц (ионов или атомов) с твердыми телами лежит задача о столкновении двух частиц. Она является сложной задачей многих тел, так как происходит взаимодействие частиц, состоящих из ядра и большого числа электронов. Ввиду большой разницы масс электронов и ядер столкновения делят, следуя Бору, на упругие (ядерные) и неупругие (электронные) столкновения. Упругие столкновения характеризуются сохранением кинетической энергии и импульса движущейся частицы и атома твердого тела, с которым произошло взаимодействие. Под неупругими подразумевают столкновения, которые включают возбуждение и ионизацию партнеров столкновения.

### **2.1. Двухчастичные потенциалы взаимодействия**

Рассмотрение взаимодействия, в том числе и процесса ионно-электронной эмиссии, требует знания потенциалов взаимодействия двух частиц с атомными номерами  $Z_1$  и  $Z_2$ . Основным интересом для проблем, рассматриваемых ниже, представляют сферически симметричные потенциалы отталкивания. Отметим, что при анализе взаимодействия ионов с твердыми телами с упорядоченным расположением атомов (монокристаллами), используют не только двухчастичные, но и более сложные потенциалы взаимодействия, так называемые непрерывные потенциалы – потенциал взаимодействия налетающей частицы с атомным рядом или с атомной плоскостью.

Напомним, что взаимодействие между двумя точечными зарядами  $Z_1e$  и  $Z_2e$  описывается потенциалом Кулона

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (2.1)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $r$  – расстояние между частицами. Потенциал изолированного атома с центральным точечным зарядом  $Ze$  имеет вид

$$V(r) = \frac{Ze}{r} \Phi(r/a),$$

где  $\Phi(r/a)$  – функция экранирования, вид которой определяется сферически симметричным распределением плотности  $\rho(r)$  заряда,  $a = a(Z)$  – радиус (длина, параметр) экранирования. Обычно постулируют, что потенциал взаимодействия двух атомов имеет аналогичный вид

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r/a), \quad (2.2)$$

а радиус экранирования является функцией атомных номеров не одного, а обеих взаимодействующих частиц  $a = a(Z_1, Z_2)$ .

Широко используют потенциалы с функциями экранирования, основанными на статистической модели атома Томаса-Ферми. Эта модель основана на предположении, что электроны атома могут рассматриваться как вырожденный электронный газ, находящийся при температуре абсолютного нуля, и заряд электронов в этом газе распределен непрерывно. Таким образом, в модели не учитываются ни строение электронных оболочек, ни индивидуальные свойства электронов. Поэтому модель Томаса-Ферми наиболее пригодна для систем, которые содержат большое число электронов. Функция экранирования

Томаса-Ферми в этой модели определяется соответствующим дифференциальным уравнением Томаса-Ферми

$$d^2\Phi_{TF}(x)/dx^2 = \Phi_{TF}^{3/2}(x)/x^{1/2}, \quad (2.3)$$

где безразмерная величина  $x = r/a_{TF}$  определяется радиусом экранирования Томаса-Ферми  $a_{TF} = 0.8853a_0/Z^{1/3}$  и  $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.529 \text{ \AA}$  – радиус первой боровской орбиты атома водорода (первый боровский радиус),  $m_e$  – масса электрона,  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  –

постоянная Планка. Важным свойством функции экранирования  $\Phi_{TF}(x)$  является ее универсальность, поскольку она зависит только от  $x = r/a_{TF}$ . Согласно этой модели распределение заряда в атоме Томаса-Ферми

$$\rho = (4\pi r^2)^{-1} (Z/r)(x\Phi_{TF})^{3/2}, \quad (2.4)$$

которое получается подстановкой в уравнение Пуассона электронной плотности, определяемой из уравнения (2.3). В качестве примера на рис.2.1 приведено распределение заряда для атома меди (в единицах  $4\pi r^2\rho$  по оси ординат). Видно, что распределение представляет собой гладкую кривую с максимумом, без особенностей, отражающих оболочечную структуру атома, давая тем не менее разумную среднюю величину. Площадь под кривой равна 29, т.е. атомному номеру меди. Кривая для изолированного атома в модели Хартри-Фока показывает четко выраженную оболочечную структуру атома, однако простирается на нереально большие расстояния. Распределение Хартри-Фока для

атома в гранцентрированной кубической решетке меди ближе к реальности.

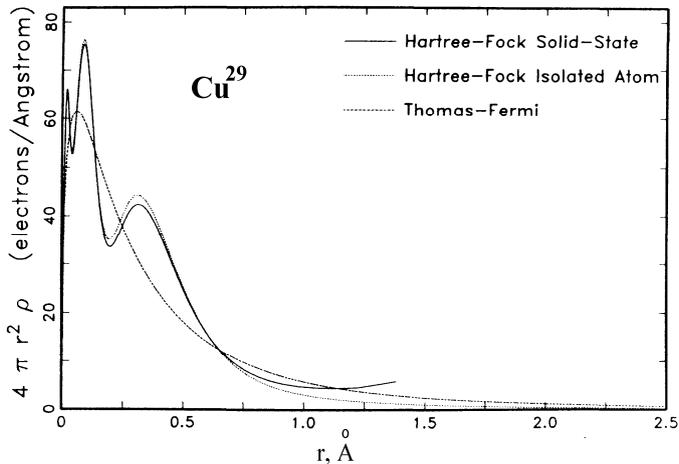


Рис.2.1. Распределение плотности электронов в атоме меди: штрих-пунктир – распределение Томаса-Ферми, пунктир – распределение Хартри-Фока для изолированного атома, сплошная линия – распределение Хартри-Фока для атома в гранцентрированной кубической решетке кристалла меди

О.Б.Фирсов в 1958 г. оценил границы, между которыми заключена энергия электронов при наличии двух ядер, и показал, что в пределах точности модели Томаса-Ферми взаимодействие между двумя атомами (или между ионом и атомом) на расстоянии между ними не больше  $10^{-8}$  см можно описать потенциалом вида (2.2), где  $\Phi = \Phi_{TF}$  - функция экранирования, определяемая уравнением (2.4), а радиус экранирования (радиус экранирования Фирсова) определяется выражением

$$a_{\Phi} = 0.8853 a_0 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}. \quad (2.5)$$

Выбор радиуса экранирования сделан на основе анализа расхождений между экстремальными значениями потенциала для различных аппроксимаций радиуса экранирования при разных отношениях  $Z_1$  и  $Z_2$ . Отметим, что среди исследованных Фирсовым радиусов экранирования было и выражение вида

$$a_L = 0.8853a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}, \quad (2.6)$$

которое также часто используется, его принято называть радиусом экранирования Линдхарда.

На рис.2.2 приведен ряд потенциалов для меди в зависимости от величины постоянной решетки меди  $D = 2.55 \text{ \AA}$ .

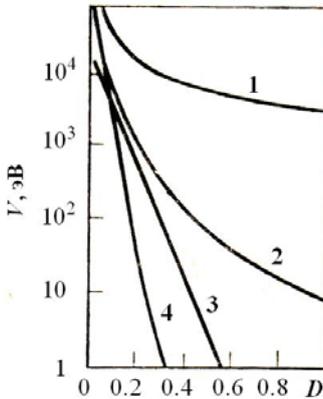


Рис.2.2. Межатомные потенциалы для меди.

- 1 – кулоновский потенциал,
- 2 – потенциал Томаса-Ферми,
- 3 – потенциал Борна-Майера
- 4 – потенциал Бора

$$V(r) = A \exp(-r/a_{\text{ВМ}}),$$

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \cdot \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right)$$

Функция экранирования Томаса-Ферми не имеет аналитического выражения, таблицы можно найти в монографии Гамбоша (1951). Выбор аппроксимации функции экранирования определяется условиями рассматриваемой задачи и требуемой точностью. Хорошей аппроксимацией в области расстояний  $0.7a_{\text{Ф}} < r < 5a_{\text{Ф}}$  является обратноквадратичный потенциал Фирсова

$$V(r) = A/r^2 = (Z_1 Z_2 e^2 / r) 0.45 a_{\Phi} / r, \quad (2.7)$$

где

$$A = 0.45 Z_1 Z_2 e^2 a_{\Phi} = 3.05 Z_1 Z_2 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} 10^{-16}, \text{ эВ см}^2. \quad (2.8)$$

Как будет показано в главе 5, этот потенциал использовали при разработке теории кинетической ионно-электронной эмиссии в области скоростей ионов, меньших скоростей орбитальных электронов ( $v_0 < Z_1^{2/3} v_B$ ), где  $v_B = e^2 / \hbar$  – скорость электрона на первой боровской орбите атома водорода.

Развитие методов компьютерного моделирования взаимодействия ионов с твердым телом и необходимость получения надежных количественных данных стимулировали попытки нахождения потенциалов, учитывающих взаимодействие между двумя частицами (налетающим ионом и атомом твердого тела) более точно, чем это возможно на основе статистической модели атома Томаса-Ферми. Чтобы учесть оболочечную структуру атома и рассчитать потенциал взаимодействия бомбардирующего мишень иона не с изолированным атомом, а с атомом, находящимся в кристаллической решетке твердого тела, Вилсон, Хагмарк и Бирзак (W.D.Wilson, L.G.Haggmark, J.P.Biersack) использовали метод свободного электронного газа и конструировали распределения заряда методом самосогласованного поля Хартри-Фока-Слетера для расчета большого числа индивидуальных межатомных потенциалов взаимодействия. Потенциал Kr–C из этой серии оказался наилучшим средним потенциалом и получил название Kr–C или WHB–потенциала. Функции экранирования в этом потенциале, как и в потенциале Мольера, представлена в виде суммы трех экспонент (см. табл.1.1), в качестве радиуса



экранирования обычно используют радиус экранирования Фирсова (формула (2.5)). Циглер, Бирзак и Литтмарк (J.F.Ziegler, J.P.Biersack, U.Littmark) использовали приближение локальной

Таблица 2.1. Функции экранирования наиболее употребительных потенциалов двухчастичного взаимодействия

Авторы	$\Phi(r/a)$
Мольер	$3.35 \exp(-0.3r/a) + 0.55 \exp(-1.2r/a) + 0.10 \exp(-6.0r/a)$
Ленц-Йенсен	$0.7466 \exp(-1.038r/a) + 0.2433 \exp(-0.3876r/a) + 0.01018 \exp(-0.206r/a)$
Вилсон-Хагмарк-Бирзак (WHB) (Kr-C)	$0.191 \exp(-0.279r/a) + 0.474 \exp(-0.637r/a) + 0.355 \exp(-1.919r/a)$
Циглер-Бирзак-Литтмарк (ZBL) "универсальный"	$0.1818 \exp(-3.2r/a) + 0.5099 \exp(-0.9423r/a) + 0.2802 \exp(-0.4029r/a) + 0.02817 \exp(-0.2016r/a)$

плотности и, как и авторы Kr-C потенциала, распределение заряда Хартри-Фока-Слетера (в качестве примера см. на рис.2.1 распределение электронной плотности в атоме меди в гранцентрированной кубической решетке). Они рассчитали функции экранирования произвольным образом выбранных 522 пар атомов. Затем подобрали такой радиус экранирования

$$a = a_U = 0.8853a_0(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1}, \quad (2.9)$$

при котором все рассчитанные функции стянулись в узкую полосу. Эту полосу аппроксимировали кривой, представляющей собой сумму четырех экспонент (см. табл. 2.1). Потенциал, полученный таким образом, получил название «универсального» или ЦБЛ (ZBL)-потенциала (по имени его создателей). Kr–C потенциал очень близок к потенциалу ZBL, если в качестве радиуса экранирования использовать  $a_U$ . Оба эти потенциала – WHB (Kr–C) и ZBL – успешно используются в современных программах компьютерного моделирования различных процессов взаимодействия ионов с твердыми телами – рассеяния ионов, торможения ионов, образования радиационных дефектов, распыления поверхностей твердых тел. В частности, эти потенциалы используются в широко известных программах, таких как OKSANA, TRIM.SP, SRIM.

## **2.2. Кинематика элементарного акта столкновения без и с учетом неупругой потери энергии**

Под упругими (ядерными) столкновениями подразумевают столкновения, при которых импульс и кинетическая энергия налетающей частицы переходит в поступательное движение атома мишени как целого.

При описании столкновения частиц обычно пользуются двумя системами координат: лабораторной системой и системой центра инерции. Лабораторной системой координат (Л-системой) называют систему, в которой до столкновения покоится рассеивающая частица. Системой центра инерции (Ц-системой) называют систему, в которой

как до, так и после столкновения покоится центр инерции частиц.

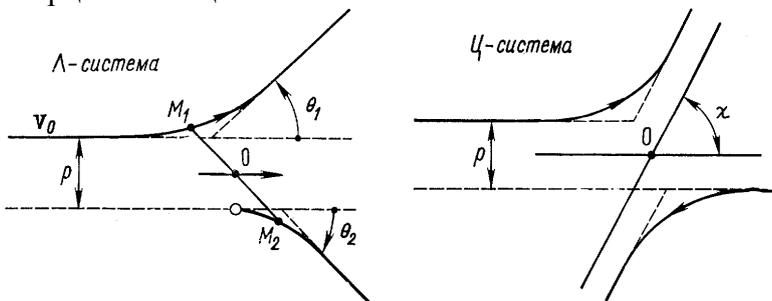


Рис.2.3. Схемы рассеяния в Л- и Ц-системах

Картины рассеяния частиц в рамках классической механики в Л- и Ц-системах представлены на рис. 2.3. В лабораторной системе координат ион массы  $M_1$  со скоростью  $v_0$  налетает на первоначально покоящийся атом мишени, масса которого равна  $M_2$ . Если бы взаимодействие между ионом и атомом мишени отсутствовало, то ион пролетел бы на расстоянии  $p$  от атома мишени. Это расстояние называют прицельным параметром столкновения. В результате взаимодействия ион рассеивается на угол  $\theta_1$  по отношению к направлению его первоначального движения. Что же касается атома мишени, то он после столкновения движется в направлении, составляющем угол  $\theta_2$  с направлением первоначального движения иона. Этот атом называют атомом отдачи. Точкой  $O$  отмечена траектория движения центра инерции в момент наибольшего сближения взаимодействующих частиц. Если столкновение не сопровождается изменением внутреннего состояния частиц, т.е. является упругим, то из законов сохранения кинетической энергии и импульса получаются выражения для энергии иона,

рассеянного на угол  $\theta_1$ , и атома отдачи, летящего в направлении  $\theta_2$ :

$$E_1 = E_0 \left( \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \left\{ \cos \theta_1 \pm \left[ \left( \frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \sin^2 \theta_1 \right]^{1/2} \right\}^2 \quad (2.10)$$

$$E_2 = E_0 \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cos^2 \theta_2 \quad (2.11)$$

Если масса налетающей частицы меньше массы атома мишени  $M_1 < M_2$ , в первой из формул берется знак плюс. Если масса налетающей частицы больше массы атома мишени  $M_1 > M_2$ , берутся оба знака перед корнем, т.е. энергия рассеянной частицы является двузначной функцией угла рассеяния. Энергию  $T = E_0 - E_1$ , потерянную рассеянной частицей в упругом столкновении, можно выразить через энергию атома мишени, приобретенную им в результате столкновения

$$T = T_{\max} \cos^2 \theta_2, \quad (2.12)$$

где

$$T_{\max} = E_0 4M_1M_2 / (M_1 + M_2)^2 \quad (2.13)$$

максимальная переданная энергия в лобовом столкновении.

На рис.2.2 (справа) представлена картина рассеяния в системе центра инерции. Так как в этой системе центр инерции (точка О) покоится, то до рассеяния частицы движутся навстречу друг другу, а после рассеяния – друг от друга. При этом, в силу закона сохранения импульса, импульсы обеих частиц равны и противоположны по направлению. Результат столкновения сводится к повороту скоростей обеих

частиц, остающихся взаимно противоположными и неизменными по значению, на угол  $\chi$ , который является углом рассеяния в Ц-системе. Соотношение между углами  $\theta_1$  и  $\theta_2$  в Л-системе и углом  $\chi$  определяется соотношениями

$$\operatorname{tg}\theta_1 = \sin\chi / (M_1/M_2 + \cos\chi); \quad (2.14)$$

$$\theta_2 = (\pi - \chi) / 2. \quad (2.15)$$

Соотношение между углами рассеяния и скоростями частиц в Л-системе и Ц-системе иллюстрируется рис.2.2. В Л-системе до столкновения частица  $M_1$  движется со скоростью  $v_0$ , а частица  $M_2$  покоится. Поэтому центр инерции движется со скоростью  $v_{ц} = M_1 v_0 / (M_1 + M_2)$  в направлении частицы  $M_2$ . В Ц-системе центр инерции покоится, а частицы  $M_1$  и  $M_2$  движутся со скоростями  $v_{1ц} = M_2 v_0 / (M_1 + M_2)$  и  $v_{2ц} = M_1 v_0 / (M_1 + M_2)$  по направлению друг к другу.

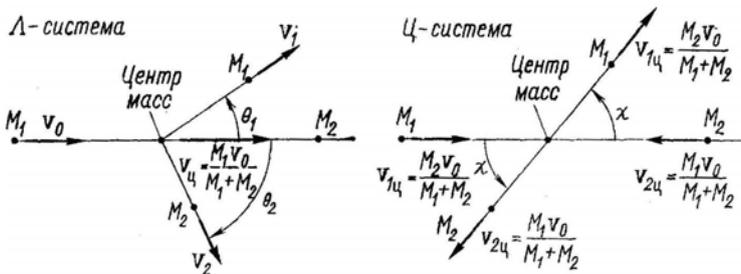


Рис.2.4. Соотношение между углами рассеяния и скоростями в Л- и Ц-системе

Эту ситуацию можно также проиллюстрировать при помощи диаграммы сложения скоростей, приведенной на рис.2.5.

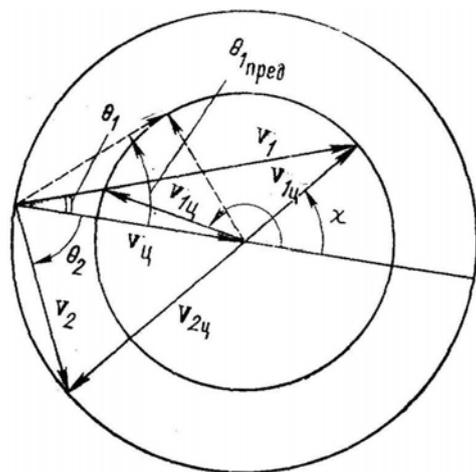


Рис.2.5. Диаграмма сложения скоростей

Вектор скорости рассеянного иона в Л-системе представляет собой сумму векторов скорости центра инерции и рассеянного иона в Ц-системе. Вектор скорости атома отдачи в Л-системе есть сумма векторов скорости центра инерции и атома отдачи в Ц-системе. В случае рассеяния тяжелой частицы легким атомом  $v_{1ц} < v_{ц}$ , что приводит к немонотонной зависимости  $\theta_1$  от  $\chi$  и, следовательно, к двузначной зависимости энергии рассеянной частицы от  $\theta_1$ . Из диаграммы сложения скоростей видно также, что при  $M_1 > M_2$  угол рассеяния в Л-системе не может быть больше, чем

$$\theta_{1пред} = \arcsin(M_2/M_1) \quad (2.16)$$

Векторы скоростей, соответствующие предельному углу рассеяния, показаны на диаграмме сложения скоростей пунктиром. Если масса рассеянной частицы  $M_1$  меньше массы атома мишени  $M_2$ , то соотношение между углами рассеяния в Л – системе и Ц-системе является однозначным. Но если  $M_1 > M_2$ , тогда одному и тому же значению  $\theta_1$  в Л-системе могут

соответствовать два различных угла  $\chi$  в Ц-системе. Потеря энергии рассеянной частицы, выраженная через угол рассеяния  $\chi$  в Ц-системе, равна

$$T = E_2 = T_{\max} \sin^2 \chi / 2, \quad (2.17)$$

и энергия рассеянной частицы

$$E_1 = E_0 - E_2 = E_0 \{1 - [4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2] \sin^2 \chi / 2\}. \quad (2.18)$$

Подчеркнем, что выражения (2.10) – (2.18) основаны только на законах сохранения и поэтому не зависят от конкретного вида потенциала взаимодействия. Если взаимодействие иона с атомом мишени сопровождается потерей энергии на возбуждение электронов и/или ионизацию партнеров столкновений (так называемая неупругая потеря энергии  $Q$ ), то, в предположении, что упругие и неупругие потери энергии не зависят друг от друга, законы сохранения энергии и импульса записываются в виде:

$$E_0 = E_1 + E_2 + Q, \quad (2.19)$$

$$(M_1 E_0)^{1/2} = (M_1 E_1)^{1/2} \cos \theta_1 + (M_2 E_2)^{1/2} \cos \theta_2, \quad (2.20)$$

$$0 = (M_1 E_1)^{1/2} \sin \theta_1 - (M_2 E_2)^{1/2} \sin \theta_2. \quad (2.21)$$

Из законов сохранения (2.19) – (2.21) следуют выражения для энергии рассеянной на угол  $\theta_1$  налетающей частицы и атома отдачи, летящего в направлении  $\theta_2$ :

$$E_1 = E_0 \left( \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \times \left\{ \cos \theta_1 \pm \left[ \left( \frac{M_2}{M_1} \right)^2 - \sin^2 \theta_1 - \left( 1 + \frac{M_2}{M_1} \right) \frac{M_2}{M_1} \frac{Q}{E_0} \right]^{1/2} \right\}^2 \quad (2.22)$$

$$E_2 = E_0 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \times \left\{ \cos \theta_2 \pm \left[ \cos^2 \theta_2 - \frac{M_1 + M_2}{M_2} \frac{Q}{E_0} \right]^{1/2} \right\}^2 \quad (2.23)$$

Учет неупругой энергии приводит к небольшому уменьшению угла рассеяния  $\theta_1$  и атома отдачи  $\theta_2$ , определяемыми формулами (2.14) и (2.15), т.е. в случае чисто упругого столкновения, см. ниже следующий раздел.

### 2.3. Динамика элементарного акта столкновения без и с учетом неупругой потери энергии

Для нахождения результата столкновения, т.е. для определения зависимости угла рассеяния от прицельного параметра требуется решить уравнения движения. Обычно при решении используют Ц-систему, а затем осуществляют переход в Л-систему. В Ц-системе задачу о движении двух частиц сводят к задаче о движении одной частицы с приведенной массой  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  ( $\mu$ -частицы) в поле с потенциалом  $V(r)$  ( $r$  – расстояние между частицами) неподвижного силового центра, расположенного в центре инерции частиц так



называемая относительная система отсчета). Если поле является центральным, т.е. энергия взаимодействия между частицами зависит только от расстояния между ними, то момент количества движения сохраняется и движение происходит в той плоскости, в которой лежит вектор скорости налетающей частицы. Для описания движения  $\mu$ -частицы обычно используют полярные координаты – радиус-вектор  $r$  и угол  $\zeta$ . Схема рассеяния приведена на рис.2.6. Здесь  $p$  – прицельный параметр,

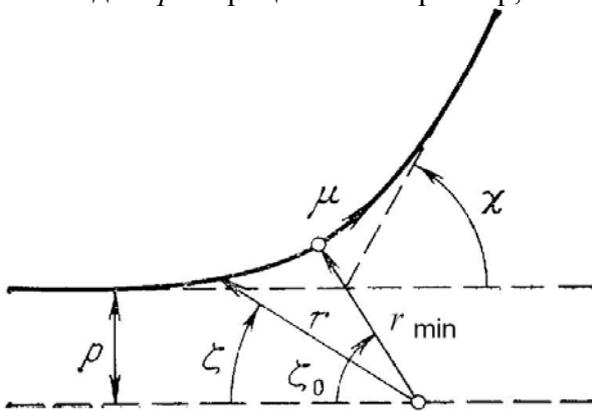


Рис.2.6. Движение  $\mu$ -частицы

т.е. расстояние на котором  $\mu$ -частица прошла бы мимо центра, если бы взаимодействие отсутствовало;  $\chi$  – угол рассеяния;  $r = r_{\min}$  – расстояние между частицей и центром в момент наибольшего сближения;  $\zeta_0$  – угол, соответствующий положению наибольшего сближения. В координатах  $(r, \zeta)$  функция Лагранжа имеет вид

$$L = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\zeta}^2) - V(r) \quad (2.24)$$

и, следовательно, уравнения движения есть

$$\frac{d}{dt}(\mu r^2 \dot{\zeta}) = 0 \quad (2.25)$$

$$\frac{d}{dt}(\mu \dot{r}) - \mu r \dot{\zeta}^2 + \frac{\partial V}{\partial r} = 0 \quad (2.26)$$

Однако, решение задачи о движении  $\mu$ -частицы в центральном поле получают обычно не интегрированием уравнений движения, а исходя из законов сохранения момента количества движения  $M$  и энергии относительного движения  $E_r = \mu v_0^2/2$ :

$$M = \mu r^2 d\zeta/dt = p(2\mu E_r)^{1/2}; \quad (2.27)$$

$$E_r = (\mu/2)(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\zeta}^2) + V(r) = \\ = \mu \dot{r}^2/2 + M^2/2\mu r^2 + V(r) \quad (2.28)$$

Отсюда

$$d\zeta = (M/\mu r^2) dt \quad (2.29)$$

и

$$dr/dt = \{(2/\mu)[E_r - V(r)] - M^2/\mu^2 r^2\}^{1/2}. \quad (2.30)$$

Итак, результатом решения задачи рассеяния являются два интеграла: **интеграл рассеяния**

$$\zeta = \int \frac{(M/r^2) dr}{[2\mu[E_r - V(r)] - M^2/r^2]^{1/2}} + \text{const} \quad (2.31)$$

и **интеграл времени**

$$t = \int \frac{dr}{[(2/\mu)[E_r - V(r)] - M^2/\mu^2 r^2]^{1/2}} + \text{const} \quad (2.32)$$

Интеграл рассеяния определяет уравнение траектории  $r(\zeta)$ , а интеграл времени определяет расстояние частицы от рассеивающего центра как функцию времени. При помощи интегралов рассеяния и времени определяют разность углов, характеризующих начальное и конечное положение движущейся частицы. Интегрирование в (2.31) проводят по всей области изменения радиуса вектора  $r$ , и в силу симметрии задачи интегрирование производят от расстояния наибольшего сближения  $r_{\min}$  до  $\infty$ . Таким образом, угол рассеяния  $\chi$  (см. рис.2.4) получается равным  $\chi = |\pi - 2\zeta_0|$ , или

$$\chi = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{pdr}{r[(1 - V(r)/E_r)r^2 - p^2]^{1/2}} = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{pdr}{r^2 g(r)} \quad (2.33)$$

где  $r_{\min}$  – расстояние между частицами при их наибольшем сближении, определяемое из условия  $g(r) = [1 - V(r)/E_r - p^2/r^2]^{1/2} = 0$  (2.34)

Напомним, что  $E_r$  представляет собой энергию относительного движения, т.е.  $E_r = \mu v_0^2/2 = M_2 E_0/(M_1 + M_2)$ . Точное решение интеграла рассеяния (2.33) возможно лишь в ограниченном числе случаев. Для некоторых потенциалов взаимодействия решение можно получить в элементарных функциях. В частности, для кулоновского потенциала  $V(r) = Z_1 Z_2 e^2/r = A/r$  закон рассеяния имеет вид

$$\chi = \pi - 2 \operatorname{arctg}(2pE_r/A). \quad (2.35)$$

Для обратноквадратичного потенциала  $V(r) = A/r^2$

$$\chi = \pi [1 - (1 + A/p^2 E_r)^{-1/2}]. \quad (2.36)$$

Линейные комбинации потенциалов типа  $V(r) = A/r$  и  $V(r) = A/r^2$  также позволяют получить закон рассеяния в элементарных функциях. В остальных случаях

используют либо численные, либо приближенные аналитические методы расчета. Примером использования численного метода являются расчеты значений расстояний наибольшего сближения, угла рассеяния, энергии, переданной в столкновении, интеграла времени и эффективного дифференциального сечения рассеяния, выполненные с использованием универсального (ZBL) потенциала, таблицы этих значений см. в (Машкова и Молчанов, 1995, Приложение 1).

В приближенных аналитических методах выделяют два основных подхода. Один подход состоит в том, что потенциал взаимодействия полагают точным, но используют приближенное выражение для закона рассеяния. В другом подходе полагают точным закон рассеяния, но используют специальную процедуру подгонки выбранного потенциала к потенциалу, для которого интеграл рассеяния (2.33) берется в известных функциях. Определив угол рассеяния  $\chi$  в Ц-системе согласно (2.33) по формулам перехода (2.14) и (2.15) находят углы в лабораторной системе (Л-системе) координат. При описании рассеяния «вперед» часто используют импульсное приближение. В этом приближении углы полагают достаточно малыми как в Ц-, так и в Л-системе и  $\sin\theta_1$  заменяют величиной  $\theta_1$ , а  $\cos\theta_1$  – единицей, импульс налетающей частицы после рассеяния полагают равным первоначальному импульсу частицы. Импульсное приближение позволяет производить вычисления сразу в Л-системе, не прибегая к Ц-системе. Закон рассеяния в этом приближении имеет вид

$$\theta_1 = -\frac{1}{M_1 v_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V}{\partial p} \partial z = -\frac{p}{E_0} \int_0^{\infty} \frac{dV}{dr} (r^2 - p^2)^{-1/2} dr \quad (2.37)$$

где ось  $z$  выбрана по направлению первоначального импульса частицы. Для обратностепенных потенциалов вида  $V(r) = A/r^n$  при  $n > 0$  получается простое аналитическое выражение

$$\theta_1 = \frac{A\pi^{1/2}}{E_0 p^n} \frac{\Gamma[(n+1)/2]}{\Gamma(n/2)} \quad (2.38)$$

где  $\Gamma(x)$  – гамма-функция. Отметим, что формулы (2.33) – (2.38) определяют характеристики взаимодействующих частиц, когда траектории этих частиц уже вышли на асимптоты. Вопрос о том, на каком минимальном расстоянии позади рассеивающего центра можно пользоваться этими формулами, требует анализа в каждом конкретном случае. Таким образом, вычислив интеграл рассеяния, можно определить направление движения рассеянной частицы и атома отдачи в Л-системе. Тем самым решается задача рассеяния в случае, когда детектор рассеянных частиц находится на большом расстоянии от рассеивающего атома. Это в большой степени относится и к детектированию вторичных электронов, возникающих и выходящих в вакуум в процессе ионно-электронной эмиссии.

При рассмотрении динамики элементарного акта столкновения с учетом неупругих потерь энергии в проведенном выше рассмотрении движения  $\mu$ -частицы полагают, что энергия относительного движения уменьшается и становится равной

$$E_r' = E_r - Q(p), \quad (2.39)$$

где  $E_r' = \mu(v')^2/2$ , а неупругие потери энергии зависит от прицельного параметра столкновения (или эквивалентно от угла рассеяния в Ц-системе). Относительная скорость после столкновения

$$v' = v(1 - Q(p)/E_r)^{1/2} \quad (2.40)$$

Анализ, проведенный на основе векторных диаграмм, аналогичных представленным выше на рис.2.4, показывает (Лейман 1979), что неупругие потери равны нулю при рассеянии вперед ( $\chi = 0$ ) и максимальны при рассеянии назад ( $\chi = \pi$ ). Если неупругий процесс приводит к ионизации, один или более электронов покидают процесс столкновения. Углы рассеяния и отдачи становятся меньше, чем в случае чисто упругого столкновения. Сравни, например, выражение для угла рассеяния

$$\text{tg}\theta_1 = \sin\chi / \{(\cos\chi + (M_1/M_2)(1 - Q(p)/E_r)^{-1/2})\} \quad (2.41)$$

с формулой (2.14). Отметим, что динамика элементарного акта столкновения полностью определяется общими потерями  $Q$  при столкновении безотносительно к тому, как эта величина распределяется между сталкивающимися частицами – налетающим атомом (ионом) и атомом мишени. Это обстоятельство играет важную роль при образовании вторичных электронов в процессе ионно-электронной эмиссии.

Впервые метод оценки энергии неупругой потери энергии  $Q$ , передаваемой электронам при столкновении двух изолированных частиц – налетающего иона (атома) с атомом-мишенью предложил О.Б.Фирсов (1959). Это позволило, в свою очередь, оценить сечение ионизации сталкивающихся частиц и построить теорию кинетической ионно-электронной эмиссии, см. ниже гл.5. Согласно Фирсову переход кинетической энергии относительного движения сталкивающихся частиц в энергию возбуждения электронов является

результатом их торможения, вызванного обменом электронами. При этом предполагается, что электрон, переходя из области действия потенциала одной из взаимодействующих частиц в область действия потенциала другой частицы, переносит с одной частицы на другую импульс, в среднем равный произведению относительной скорости взаимодействующих частиц на массу электрона. Другими словами, при столкновении электронные оболочки взаимодействующих частиц проникают друг в друга и образуют на короткое время «квазимолекулу» с потенциалом  $\phi$ . Движение электронов в первом приближении происходит в самосогласованном поле электронов и ядер, определяемом по модели Томаса-Ферми. При выборе потенциала взаимодействия обычно полагают, что процесс неупругой потери энергии лишь слегка нарушает электронную систему атомов и потенциал, который определяется электронными оболочками, остается практически неизменным. Принимается, что область действия потенциалов взаимодействующих частиц разделяется поверхностью  $S$ . До взаимодействия средняя скорость каждого электрона совпадает со скоростью того атома (иона), в котором он находится. При столкновении к энергии электронов при неподвижных ядрах добавляется кинетическая энергия, связанная с их движением вместе с взаимодействующими частицами. Переходя через поверхность  $S$ , электроны сильно взаимодействуют с полем соответствующего атома (иона), теряя свой начальный импульс и приобретая в среднем импульс, соответствующий скорости этого атома (иона). Плотность потока электронов, пересекающих элемент поверхности  $dS$  в одном

направлении, есть  $nv/4$ , где  $v$  – среднее значение абсолютной скорости электронов. Общий перенос импульса, т.е. сила, действующая на соответствующий атом, будет

$$F = \pm m(\dot{\mathbf{R}}_1 + \dot{\mathbf{R}}_2) \int \frac{nV}{4} dS, \quad (2.42)$$

где  $\mathbf{R}_{1,2}$  – скорости ядер взаимодействующих частиц,  $\mathbf{R}$  – радиус вектор, соединяющий сталкивающиеся частицы

$$n = [2^{3/2}(m_e e \varphi)^{3/2}] / 3\pi^2 \hbar^3 \quad (2.43)$$

- концентрация электронов в модели Томаса-Ферми;

$$v = [3(3\pi^2)^{1/3} \hbar n^{1/3}] / 4m_e \quad (2.44)$$

– абсолютная величина скорости электронов. Такая же сила с обратным знаком действует на вторую взаимодействующую частицу. Работа этих сил при перемещении взаимодействующих частиц на  $d\mathbf{R}_1$  и  $d\mathbf{R}_2$  будет  $\sim -m(\dot{\mathbf{R}}_1 - \dot{\mathbf{R}}_2) d(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)$ . Обозначив  $d\mathbf{R}_1 - d\mathbf{R}_2 = d\mathbf{R}$  для полной работы торможения или неупругой потери энергии на возбуждение электронов получается

$$Q = \frac{m_e^2 e^2}{4\pi} \int \left( \int_S \varphi^2 dS \right) \mathbf{R} d\mathbf{R} \quad (2.45)$$

При дальнейшем рассмотрении Фирсов ограничился малоугловым (импульсным) приближением, считая движение ядер прямолинейным и равномерным. Кроме того, если заряды ядер отличаются не более, чем примерно в четыре раза, поверхность  $S$  можно заменить плоскостью, соединяющей ядра и делящей ее пополам. Для потенциала на этой плоскости Фирсов



использовал выражение через функцию Томаса-Ферми (см. выше раздел 2.1),

$$\varphi = \frac{(Z_1 + Z_2)e}{r} \Phi \left[ 1.13(Z_1 + Z_2)^{1/3} \frac{r}{a_0} \right] \quad (2.46)$$

где  $r$  – расстояние от точки на плоскости до одного из ядер взаимодействующих частиц. В результате было получено выражение для неупругой потери энергии в элементарном акте столкновения двух частиц

$$Q(r_{\min}) = \frac{0.35(Z_1 + Z_2)^{5/3} \hbar / a_0}{\left[ 1 + 0.16(Z_1 + Z_2)^{1/3} r_{\min} / a_0 \right]^5} v_0 \quad (2.47)$$

или в электронвольтах

$$Q(r_{\min}) = \frac{4.3 \times 10^{-8} (Z_1 + Z_2)^{5/3}}{\left[ 1 + 3.1 \times 10^7 (Z_1 + Z_2)^{1/3} r_{\min} \right]^5} v_0$$

где скорость налетающей частицы  $v_0$  выражено в см/с, а  $r_{\min}$  в см.

Несмотря на то, что вышеприведенное рассмотрение содержит ряд предположений, оказалось, что формула (2.47) довольно хорошо описывает экспериментальные результаты определения неупругой потери энергии из данных по рассеянию ионов в газах и твердых телах.

Выражение для неупругой потери энергии при любых прицельных параметрах

$$Q(p) = \frac{\hbar v_0}{\pi a_0^2} (Z_1 + Z_2)^2 \times \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{[1 - V(r) / E_r] dr}{\sqrt{1 - V(r) / E_r - p^2 / r^2}} \cdot \int_{r/2}^{\infty} \frac{\Phi^2(\rho)}{\rho} d\rho \quad (2.48)$$

Соответствующее выражение для неупругой потери энергии (в электронвольтах) в элементарном акте столкновения двух частиц для обратноквадратичной аппроксимации потенциала Фирсова

$$Q(r_{\min}) = \frac{0.3 \times 10^{-7} v_0 Z_1 (\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}) (Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})}{\left[1 + 0.67 \sqrt{Z_1} r_{\min} / a (Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})\right]^3} \times \left[1 - \frac{0,68 V(r_{\min})}{E_r}\right], \quad (2.49)$$

где  $a = 0.8853 a_0 = 0.47 \cdot 10^{-8}$  см,  $Z_1$  и  $Z_2$  соответственно наибольший и наименьший атомные номера взаимодействующих атомов, скорость  $v_0$  в см/с.

Подчеркнем, что динамика неупругого соударения полностью определяется полной неупругой потерей в столкновении независимо от того, как она распределяется между двумя партнерами столкновения. Это обстоятельство оказалось важным при разработке теории кинетической ионно-электронной эмиссии, см. ниже главу 5, раздел 5.1.2. Как отмечалось выше, в зависимости от расстояния наибольшего сближения  $r_{\min}$  часть электронов может стать общими для обеих сталкивающихся частиц, образуя квазимолекулу. В результате этого столкновение может привести к переходу электронов в более высокие состояния через такой коллективный механизм, который сильно отличается от прямого механизма возбуждения при высоких энергиях относительно легких ионов, когда бомбардирующая частица возбуждает электрон атома мишени прямым ударом.

## 2.4. Понятие сечения взаимодействия

До сих пор мы рассматривали закономерности элементарного акта взаимодействия двух частиц. В экспериментах по взаимодействию ионов с твердым телом имеют дело с множеством налетающих частиц, а также с множеством атомов мишени. При переходе от элементарного акта столкновения к взаимодействию потока налетающих частиц с атомами мишени используют понятие дифференциального сечения рассеяния, определяемое отношением числа частиц, рассеянных в единицу времени на заданный угол в элемент телесного угла  $d\Omega$ , характеризуемого выбранными полярным и азимутальным углами рассеяния, к плотности потока падающих частиц. Эта величина имеет размерность площади. В системе центра масс (Ц-системе) ее обозначают как  $\sigma(\chi, \varphi)$ . Схема процесса приведена на рисунке 2.7. Число частиц, рассеянных в элемент телесного угла  $d\Omega$ , определяют при помощи соотношения

$$N_0 \sigma(\chi, \varphi) d\Omega \equiv N_0 d\sigma, \quad (2.50)$$

где  $N_0$  – плотность потока падающих частиц, а

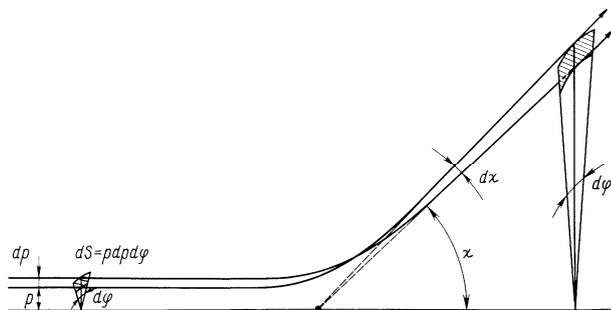


Рис.2.7. Схема рассеяния параллельного потока частиц в Ц-системе на бесконечном расстоянии от рассеивающего центра

$$d\sigma = \sigma(\chi, \varphi) d\Omega. \quad (2.51)$$

Величину  $d\sigma$  также часто называют дифференциальным сечением рассеяния. Кроме эффективного дифференциального сечения рассеяния используют также понятия полного эффективного сечения рассеяния по всем углам

$$\sigma_0 = \int d\sigma = \int \sigma(\chi, \varphi) d\Omega, \quad (2.52)$$

и так называемого полного обрезанного сечения, которое характеризует рассеяние на углы, превышающие какой-либо фиксированный угол.

Зависимость дифференциального сечения рассеяния от углов рассеяния легко получается при однозначной связи угла  $\chi$  и прицельного параметра  $p$ . В этом случае в интервал углов  $\chi$  и  $\chi + d\chi$  рассеиваются те частицы, которые обладают прицельными параметрами в интервале между  $p$  и  $p + dp$ . Число таких частиц равно произведению плотности потока падающих частиц  $N_0$  на площадь элементарной площадки  $(pd\varphi)dp$  (см. рис.2.7), т.е.

$$N_0 p dp d\varphi = N_0 \sigma(\chi, \varphi) d\Omega. \quad (2.53)$$

Так как  $d\Omega = \sin\chi d\chi d\varphi$ , для эффективного дифференциального сечения рассеяния (в дальнейшем будем опускать слово эффективного) получают выражение

$$\sigma(\chi) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p}{\sin\chi} \left| \frac{dp}{d\chi} \right| \quad (2.54)$$

Отметим, что иногда пользуются величиной

$$d\sigma/d\chi = \sigma(\chi)(2\pi\sin\chi)^{-1}, \quad (2.55)$$

называя ее также дифференциальным сечением рассеяния. В Л-системе дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma(\theta) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{p}{\sin\theta} \left| \frac{dp}{d\theta} \right| \quad (2.56)$$

Для кулоновского и обратноквадратичного потенциалов взаимодействия получают простые аналитические выражения. Так, например, для  $V(r) = A/r$  получается формула Резерфорда

$$\sigma(\chi) = (A/4E_r)^2 / \sin^4(\chi/2). \quad (2.57)$$

Для потенциала  $V(r) = A/r^2$  имеем

$$\sigma(\chi) = \frac{\pi^2 A}{E_r} \frac{\pi - \chi}{\chi^2 (2\pi - \chi)^2} \frac{1}{\sin \chi} \quad (2.58)$$

где  $E_r$  энергия относительного движения. В приближении малых углов для степенных потенциалов  $V(r) = A/r^n$  при  $n > 0$  получаются следующие аналитические выражения

$$\sigma(\chi) = \frac{1}{n} \left[ \frac{A\sqrt{\pi}}{E_r} \frac{\Gamma[(n+1)/2]}{\Gamma(n/2)} \right]^{2/n} \chi^{-2(1+1/n)} \quad (2.59)$$

Примеры угловых зависимостей дифференциальных сечений рассеяния в Ц-системе и соответствующих сечений рассеяния и атомов отдачи в Л-системе, рассчитанные с использованием обратноквадратичного потенциала Фирсова (формула (2.7)), приведены на рис. 2.8.

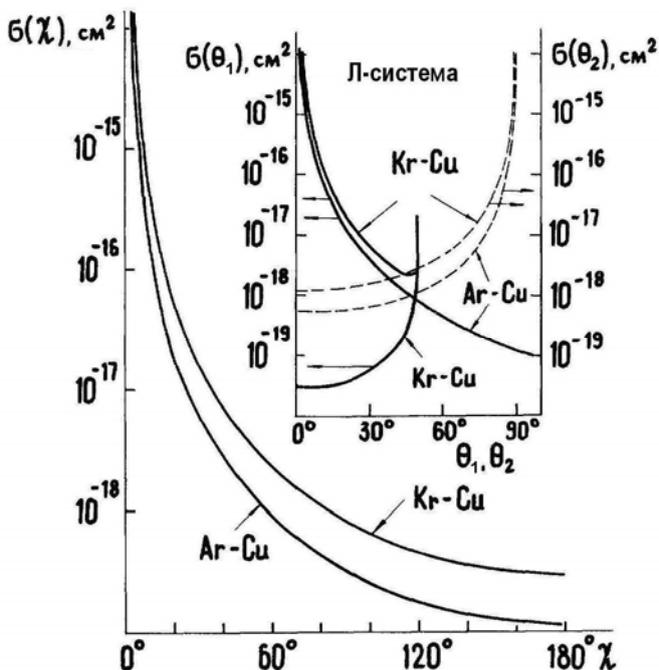


Рис. 2.8. Угловые зависимости дифференциальных сечений рассеяния медной мишенью аргона ( $M_1 < M_2$ ) и криптона ( $M_1 > M_2$ ) энергии 50 кэВ

Иногда дифференциальное сечение рассеяния выражают не в угловых, а в других переменных. Так, часто используют сечение передачи энергии

$$d\sigma(T, T_{\max}) = \sigma(T, T_{\max})dT = (\pi a_n^2/n) (T_{\max}/T)^{1/(n+1)} d(T/T_{\max}), \quad (2.60)$$

где

$$a_n = \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\pi} A \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) / E_r \Gamma\left(\frac{n}{2}\right) \right]^{1/n}, \quad 1 \leq n < \infty.$$

Формула (2.60) следует из формулы (2.59) и (2.17) в приближении малых углов, когда  $T = T_{\max} \cdot \chi^2/4$ .

Связь между дифференциальным сечением рассеяния в Ц-системе, сечениями рассеяния падающего пучка частиц и сечениями отдачи частиц мишени в Л-системе дается выражениями

$$\sigma(\theta_1, \varphi) = \frac{[1 + (M_1/M_2)^2 + 2(M_1/M_2)\cos\chi]^{3/2}}{|1 + (M_1/M_2)\cos\chi|} \sigma(\chi, \varphi) \quad (2.61)$$

$$\sigma(\theta_2, \varphi) = 4\sin(\chi/2)\sigma(\chi, \varphi). \quad (2.62)$$

Когда масса налетающей частицы больше массы атома мишени, сечение рассеяния падающего пучка в Л-системе состоит из двух ветвей (см. рис.2.8). Это связано с тем, что при  $M_1/M_2 > 1$  одному и тому же углу рассеяния  $\theta_1$  в Л-системе соответствуют два угла рассеяния в Ц-системе и существует предельный угол однократного рассеяния. Обычно при расчете числа частиц, рассеянных на угол  $\theta_1$ , суммируют обе ветви сечения. Однако следует иметь в виду, что разные ветви соответствуют частицам с различными энергиями.

Когда углы рассеяния как в Ц-, так и в Л-системе малы, расчеты сечений можно производить сразу в лабораторной системе координат. В этом случае, для степенных потенциалов типа  $V(r) = A/r^n$  при  $n > 0$  дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma(\theta_1) = \frac{1}{n} \left[ \frac{A\sqrt{\pi}\Gamma[(n+1)/2]}{E_0\Gamma(n/2)} \right]^{2/n} \theta_1^{-2(1+1/n)} \quad (2.63)$$

Приближенная формула для дифференциального сечения, справедливая в области действия потенциала Томаса-Ферми (Линдхард, Шарфф, Шиотт 1963) имеет вид

$$d\sigma = \pi a^2 (dt/2t^{3/2}) f(t^{1/2}). \quad (2.64)$$

Здесь  $t = \varepsilon^2 \sin^2 \chi / 2$ ;  $\varepsilon$  – безразмерная энергия, равная отношению радиуса экранирования Линдхарда (см. формулу (2.6)) к минимальному расстоянию между частицами при лобовом столкновении для неэкранированного потенциала  $b = 2Z_1 Z_2 e^2 / \mu v^2$ :

$$\varepsilon = \frac{a_L}{b} = \frac{M_2 E_0 a_L}{(M_1 + M_2) Z_1 Z_2 e^2} \quad (2.65)$$

Для кулоновского потенциала  $f(t^{1/2}) = \frac{1}{2} t^{1/2}$

выражение (2.64) является точным и приводит к формуле Резерфорда. Для обратноквадратичного потенциала  $f(t^{1/2}) = \text{const}$ . Параметр  $t$  по сути дела представляет собой меру сближения взаимодействующих частиц, большим значениям  $t$  соответствуют малые расстояния сближения. Функция  $f(t^{1/2})$  с увеличением  $t$  растет, достигает максимума и затем убывает. Это универсальная функция массы бомбардирующих частиц и их энергии.

## 2.5. Торможение частиц при движении в твердом теле. Упругие и неупругие удельные потери энергии

Рассмотрим процессы потери энергии налетающей частицы при взаимодействии с неупорядоченным веществом, т.е. в предположении, что атомы в материале расположены случайным образом. Выше, в разделах 2.1-2.3, рассматривалось парное взаимодействие бомбардирующей мишень частицы (или атома отдачи, возникающего внутри мишени) с отдельными атомами твердого тела. Судьба частицы, движущейся в материале – это история ее замедления от первоначальной кинетической энергии  $E_0$  до остановки, если мишень достаточно толстая. На



своем пути внутри твердого тела бомбардирующая частица (или атом отдачи) будет терять начальную кинетическую энергию  $E_0$  при последовательных столкновениях с атомами материала и испытывать отклонения от направления первоначального движения. Другими словами совместный эффект упругих и неупругих столкновений в веществе вызывает постепенное торможение и рассеяние частиц. Пусть налетающая частица входит в мишень в точке  $(0,0,0)$ . Она движется по траектории, которая заканчивается в точке остановки  $(x_s, y_s, z_s)$ , см. рис.2.9.

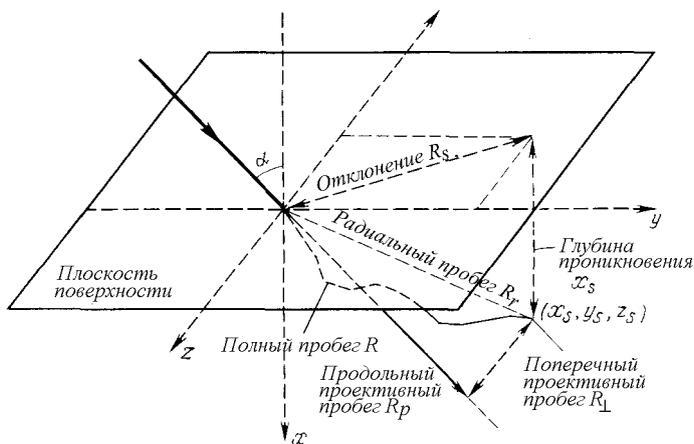


Рис.2.9.Схема движения бомбардирующего иона в твердом теле

На этом рисунке показаны различные геометрические расстояния, при помощи которых описывают проникновение и торможение налетающих частиц в твердом теле, все эти расстояния зависят от начальной энергии частицы  $E_0$ . Полный пробег  $R = \sum l_i$  представляет собой полную длину пути, пройденного частицей ( $l_i$  –длина пробега между последовательными столкновениями). Радиальный

пробег  $R_r$  – расстояние между точкой входа и остановки частицы. Используют также понятия продольного  $R_p$  и поперечного  $R_{\perp}$  проективных пробегов, которые связаны с радиальным пробегом следующим соотношением  $R_r^2 = R_p^2 + R_{\perp}^2$ . Глубина проникновения  $x_s$  представляет собой расстояние от поверхности до точки, в которой частица остановилась, отклонение  $R_s = (y_s^2 + z_s^2)^{1/2}$ . В эксперименте обычно имеют дело с движением не одной отдельной частицы, а с множеством налетающих частиц. Например, с параллельным моноэнергетическим пучком частиц, бомбардирующих мишень. Это означает, что одинаковые налетающие частицы с одинаковой начальной энергией в том же самом материале будут испытывать свою последовательность столкновений и соответствующих отклонений, т.е. будут двигаться по различным траекториям и, следовательно, иметь различные пробеги. Поэтому величины пробегов будут обладать распределениями  $W(R)$  (разбросом) относительно соответствующих средних значений  $\langle R \rangle = \int RW(R)dR$ , рис. 2.10. Мерой разброса пробегов обычно принимают величину

$$\langle (\Delta R)^2 \rangle = \langle (R - \langle R \rangle)^2 \rangle = \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2, \quad (2.66)$$

называемую дисперсией величины  $R$  при заданной начальной энергии  $E_0$ . Типичные распределения пробега  $W(R)$  часто описывают при помощи распределения Гаусса

$$W(R) = \left\{ 2\pi \langle \Delta R^2 \rangle \right\}^{-1/2} \cdot \exp \left\{ - \frac{(R - \langle R \rangle)^2}{2 \langle \Delta R^2 \rangle} \right\}. \quad (2.67)$$

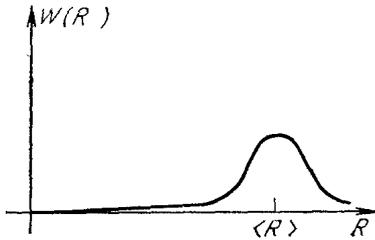


Рис.2.10. Распределение пробега  $W(R)$  относительно среднего значения  $\langle R \rangle$  для налетающих частиц, вылетающих из начала координат с энергией  $E_0$

Пробег  $R(E_0)$  может быть рассчитан при условии, если определены удельные потери энергии  $(-dE/dR)$ , т.е. потери энергии частицы на единице длины пути (так называемая тормозная способность):

$$R(E_0) = \int_0^{E_0} (-dE / dR)^{-1} dE . \quad (2.68)$$

Расчеты распределений пробегов представляют собой нелегкую задачу, даже если выбрать более или менее простую аппроксимацию для потенциала межатомного взаимодействия. Одной из основных целей теоретического описания процесса торможения является отыскание пространственного распределения всех точек остановки частиц, вылетевших из одной и той же исходной точки. С помощью этой величины можно найти средние величины и моменты более высокого порядка. В экспериментах, как правило, частицы вылетают не из точечного источника, а имеют дело с однородным потоком падающих частиц. Тогда задача сводится к одномерной и вычислению распределения  $W(R_p)$  продольного проективного пробега. Обычно при моделировании распределение проективных пробегов налетающих частиц называют распределением пробегов, а распределения глубины проникновения налетающих частиц – распределением глубин. Среднее значение распределения пробегов

называют средним проективным пробегом, а среднее значение распределения глубин – средней глубиной. Упругие и неупругие столкновения движущейся в твердом теле частицы не являются единственным механизмом замедления. Возможны такие процессы потери энергии, как возбуждение ядер и ядерные реакции в атомах мишени, тормозное излучение налетающей частицы, излучение Черенкова. Однако, в диапазоне энергий, рассматриваемом нами, основным видом энергетических потерь для налетающих тяжелых частиц (ионов или атомов) являются потери, обусловленные ядерными столкновениями, т.е. упругими столкновениями с атомом мишени, как целым, и неупругими (электронными) столкновениями, приводящими к возбуждению электронов в оболочках сталкивающихся частиц или к их ионизации, и с электронами проводимости в случае металлов. Следуя Бору, упругие и неупругие столкновения и соответствующие им потери энергии считают независимыми и полагают, что

$$-dE/dR = (-dE/dR)_{\text{упр}} + (-dE/dR)_{\text{неупр}}. \quad (2.69)$$

Если вдоль траектории налетающей частицы происходят лишь небольшие отклонения, то траектория представляет собой практически прямую линию и в случае нормального падения ионов на мишень считают, что  $R \equiv x$ . В области скоростей налетающих частиц, меньших орбитальных скоростей электронов ( $v < Z_1^{2/3} v_B$ ) неупругие потери энергии, как правило, значительно меньше упругих. Расчет упругих удельных потерь энергии основан на соотношении

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right)_{\text{упр}} = n_0 \int_0^{T_{\text{max}}} T d\sigma = n_0 S_n \quad (2.70)$$

где  $n_0$  – число атомов в единице объема мишени;  $T = E_0 - E_1$  – энергия, переданная в упругом столкновении [ $E_1$  определяется формулой (2.10)];  $T_{\max}$  – максимальная переданная энергия (см. формулу (2.13);  $d\sigma$  – дифференциальное сечение передачи энергии;  $S_n$  – сечение ядерного (упругого) торможения, приходящееся на один атом. Чтобы определить сечение передачи энергии, необходимо выбрать потенциал взаимодействия. Использование для расчета обратноквадратичных аппроксимаций потенциала взаимодействия приводит к независимости удельных упругих потерь от скорости частицы и оправдывается простотой получаемых выражений. В качестве примера приведем результат, полученный Линдхардом (J.Lindhard) и Шарффом (M.Sharff), при  $n = 2$

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{упр}}^{LS} = \xi_v \frac{\pi^2}{2} \frac{n_0 M_1}{M_1 + M_2} Z_1 Z_2 e^2 a_L, \quad (2.71)$$

где  $\xi_v = 2/(2.7183 \times 0.8853)$ . Расчеты удельных неупругих потерь, основанные на статистической модели атома Томаса-Ферми, приводят к линейной зависимости от скорости частицы. Линдхард и Шарфф предложили формулу

$$\begin{aligned} \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{неупр}}^{LS} &= \frac{n_0 \hbar^2}{m_e} \frac{8\pi Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \hbar v = \\ &= \xi_e 8\pi e^2 n_0 a_0 Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-3/2} v/v_B \end{aligned} \quad (2.72)$$

где  $\xi_e \approx 1 \div 2$  и изменяется как  $Z_1^{1/6}$ . О.Б.Фирсов, как было рассмотрено выше, получил формулу (2.47) для потерь энергии в элементарном акте столкновения. Базируясь на этой формуле, в НИИЯФ МГУ

Я.А.Теплова получила следующее выражение для удельных неупругих потерь энергии

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{неупр}}^{\Phi} = \frac{0,81n_0\hbar^2}{m_e} 8\pi(Z_1 + Z_2) \frac{\hbar v}{e^2} \quad (2.73)$$

Модель атома Томаса-Ферми, на которой основаны формулы (2.71) - (2.73) описывает в среднем правильно характер зависимости удельных неупругих потерь энергии от скорости налетающей частицы, однако она недостаточна для описания обнаруженной экспериментально  $Z_1$ -осцилляции неупругих потерь.

Обобщенная теория торможения атомных частиц для скоростей частиц, меньших средней орбитальной скорости электронов в атоме (т.е. для  $v < Z_1^{2/3}v_B$ ) согласно статистической модели атома Томаса-Ферми, построена Линдхардом, Шарффом и Шиоттом (так называемая ЛШШ (LSS) – теория). Введя безразмерные пробег

$$\rho = 4\pi R a_L^2 n_0 M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2 \quad (2.74)$$

и энергию  $\varepsilon$ , определяемую формулой (2.65), и приняв, что дифференциальное эффективное сечение рассеяния определяется формулой (2.64), они получили универсальное соотношение для удельных упругих потерь энергии в виде

$$\left(-\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_{\text{упр}} = \int_0^{\varepsilon} \frac{1}{t^{3/2}} f(t^{1/2}) \frac{dt}{\varepsilon} \quad (2.75)$$

где  $t = \varepsilon^2 T / T_{\text{max}}$  ;

функция  $f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/6} [1 + (2\lambda t^{2/3})]^{-3/2}$ ,  $\lambda = 1,309$ .

Для удельных неупругих потерь энергии ЛШШ-теория приводит к соотношению

$$(-d\varepsilon/d\rho)_{\text{неупр}} = k\varepsilon^{1/2}, \quad (2.76)$$

$$\text{где } k = \xi_e \frac{0,0793 Z_1^{1/2} Z_2^{1/2} (M_1 + M_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_1^{3/2} M_2^{1/2}}; \quad \xi_e \approx Z_1^{1/6}.$$

Общий характер зависимости потерь энергии от скорости частицы таков: как упругие, так и неупругие удельные потери энергии по мере увеличения скорости растут, проходят через максимум и затем убывают, см. рис.2.11. Однако, максимум для упругих потерь соответствует значительно более низким скоростям чем максимум для неупругих потерь энергии.

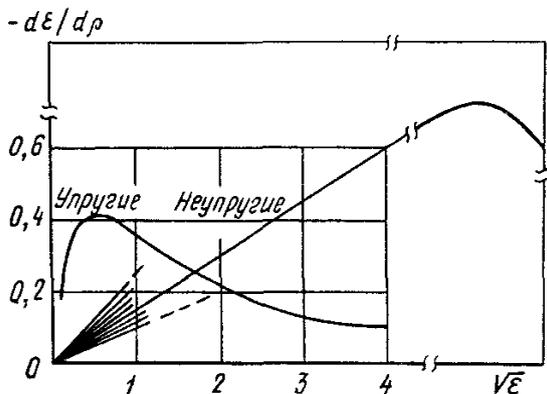


Рис.2.11. Зависимость удельных упругих и неупругих потерь энергии  $d\varepsilon/d\rho$  от  $\varepsilon^{1/2}$

Когда требуется более высокая точность, используют полуэмпирические подходы к расчетам удельных потерь энергии. Так Циглер, Бирзак и Литмарк предложили полуэмпирический подход, основанный на модели атома Хартри-Фока, позволяющий рассчитывать тормозные способности для тяжелых ионов средних энергий со средней погрешностью, лучшей, чем 10%, и для быстрых легких ионов – с

погрешностью, лучшей, чем 2%. Результаты расчетов табулированы и широко используются.

В области высоких скоростей частиц (много больших орбитальных скоростей электронов в атоме) описание торможения было дано Бете (H.Bethe) на основе квантовой теории возмущений и привело к формуле

$$-\frac{dE}{dx} \approx \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} Z_2 n_0 \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right), \quad (2.77)$$

где  $m_e$  – масса электрона,  $I$  – средний потенциал возбуждения. Видно, что формула Бете предсказывает пропорциональность тормозной способности величине квадрата заряда тормозящейся частицы  $(Z_1 e)^2$ . При более строгом подходе появляется поправочный член, пропорциональный  $(Z_1 e)^3$ , что согласуется с рядом экспериментальных данных для относительно легких ионов. Последние 10 лет появилось значительное число работ, посвященных анализу торможения тяжелых ионов скоростей в области максимума неупругих потерь (см. рис.2.11) и более высоких скоростей. Эти работы суммированы и проанализированы в недавней монографии Зигмунда (P.Sigmund, 2004), посвященной торможению тяжелых ионов.

## 2.6. Объемная и поверхностная энергия связи, тепловые колебания атомов

Атомы твердого тела считаются связанными с определенной энергией связи в своих узлах решетки. Энергия, необходимая для того, чтобы удалить атом мишени из узла решетки при упругом столкновении, равна  $E_b$ , так что атом отдачи, покинувший узел решетки будет иметь энергию  $(T - E_b)$ , где  $T$  определяется формулой (2.12). Иногда принимают, что



энергия  $E_b$  должна быть равной энергии образования вакансии, которая представляет собой величину порядка одного или нескольких электронвольт. Во многих программах компьютерного моделирования процессов взаимодействия ионов с твердым телом объемную энергию связи  $E_b$  полагают равной нулю. Поверхностная энергия связи  $E_s$  отличается от объемной энергии связи, и в первом приближении обычно принимается равной теплоте сублимации  $\Delta H_s$ .

Положение атома в кристаллической решетке твердого тела не является строго фиксированным вследствие колебаний решетки. Тепловые колебания атомов твердого тела обычно характеризуют тремя величинами: функцией распределения смещений колеблющегося атома относительно его положения равновесия, среднеквадратичным смещением атома относительно положения равновесия и корреляциями между смещениями. Обычно полагают, что распределение смещений колеблющегося атома относительно его положения равновесия определяется законом Гаусса

$$G(u) = (2\pi\langle u^2 \rangle)^{-1/2} \exp(-u^2/2\langle u^2 \rangle), \quad (2.78)$$

где  $u$  – значение смещения,  $\langle u^2 \rangle$  – средний квадрат теплового смещения. Для определения взаимосвязи между  $\langle u^2 \rangle$  и температурой  $T$  твердого тела используют формулу Дебая-Уоллера

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{M_2 k \Theta} \left( \frac{T^2}{\Theta^2} \int_0^{\Theta/T} \frac{x dx}{e^x - 1} + \frac{1}{4} \right) \quad (2.79)$$

где  $\frac{1}{x} \int_0^x \frac{t}{e^t - 1} dt$ ,  $x = \Theta/T$ , носит название интеграла

Дебая,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\Theta$  – температура Дебая. Значения интеграла Дебая для набора  $x$  табулированы. Слагаемое  $1/4$  в формуле Дебая-Уоллера связано с нулевыми колебаниями. В предельном случае высоких температур

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar^2 T}{M_2 k \Theta^2}, \text{ а низких } \langle u^2 \rangle = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{M_2 k \Theta}. \quad (2.80)$$

Даже при температуре абсолютного нуля из-за наличия нулевых колебаний атомов решетки значение  $\langle u^2 \rangle$  довольно велико.

Подчеркнем, что температура Дебая на поверхности, вообще говоря, не равна температуре Дебая в объеме твердого тела. Атомы на поверхности твердого тела могут иметь большую амплитуду колебаний вследствие расположения на границе твердого тела. Часто различают температуру Дебая, соответствующую колебаниям перпендикулярно поверхности твердого тела  $\Theta_{\perp}$ , и температуру Дебая, соответствующую колебаниям параллельно поверхности твердого тела  $\Theta_{\parallel}$ . Корреляция между смещениями атомов и их положений равновесия учитывается с помощью коэффициентов корреляции  $k_j = \langle u_i u_{i+j} \rangle / \langle u^2 \rangle$ ,  $j = 1, 2 \dots$

Отметим, что тепловые колебания атомов учитываются практически во всех современных программах, моделирующих взаимодействие ионов с твердым телом, и используемых, в частности, для целей ионно-рассеивательной спектроскопии.

## 2.7. Образование радиационных дефектов

Если энергия, переданная в результате упругого столкновения от движущейся частицы (нейтрона, бомбардирующего мишень иона или атома отдачи) атому мишени превышает некоторое значение, то атом мишени, выбитый из узла решетки (оставляя вакансию) движется через твердое тело. Наименьшее значение энергии, которое необходимо передать атому мишени, чтобы он оказался в ближайшей междоузельной позиции, называют энергией смещения  $E_d$ . Энергия смещения составляет величину порядка нескольких десятков электронвольт. Для многих металлов и полупроводников  $E_d \approx 25$  эВ.

В результате могут образоваться так называемые первичные дефекты - вакансия и междоузлие, т.е. стабильная пара Френкеля. Если энергия атома отдачи значительно превышает  $E_d$ , то эти первичные атомы отдачи (primary knock-on atoms) могут, в свою очередь, создавать вторичные атомы отдачи (и соответственно вторичные электроны) и так далее до тех пор, пока энергия этих атомов не приблизится к  $E_d$ . Таким образом возникает каскад атомных смещений.

Удобной для анализа повреждений твердых тел быстрыми ионами является каскадная функция  $N_d$  – среднее число смещенных атомов, порождаемых первичным атомом отдачи с энергией  $E$ . Первые оценки каскадной функции  $N_d(E)$  основывались на теории Кинчина-Пиза (1955), согласно которой полагалось  $N_d(E) = 0$  при  $E \leq E_d$  и  $N_d(E) = 1$  при  $E_d < E < 2E_d$ ,  $N_d(E) = E/2E_d$  при  $E \gg E_d$ . Эти оценки лежат в основе принятого в настоящее время определения уровня первичных радиационных

нарушений в числе смещений на атом мишени  $\nu$  (СНА, displacement per atom –  $dpa$ ),

$$\nu (dpa) = \Phi \sigma_{dam} = \varphi t \sigma_{dam}, \quad (2.81)$$

где  $\Phi$  – флюенс облучения ( $\varphi$  – плотность потока бомбардирующих частиц,  $t$  – время облучения),  $\sigma_{dam}$  – сечение смещения. Одна из первых оценок сечения смещения была сделана Зигмундом (1969)

$$\sigma_{dam} = 0.4 S_n / E_d, \quad (2.82)$$

где  $S_n$  – сечение ядерного (упругого) торможения, приходящееся на один атом. Напомним, что  $S_n$  определяется выражением (2.70), см. раздел 2.5. Выражение для сечения смещения, учитывающее и неупругие потери энергии при столкновении бомбардирующей частицы с атомами мишени согласно конвенции American Society for Testing Materials (ASTM/E521-89: “Standard Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation”, p.167, 1989) имеет вид

$$\sigma_{dam} = \int_{T'=T_d}^{2.5T_d} d\sigma(T') + 0.4 \int_{2.5T_d}^{T_{max}} \frac{T_{dam}(T')}{T_d} d\sigma(T'), \quad (2.83)$$

где  $T_d = E_d$ ,  $T_{max}$  определяется формулой (2.13). Энергия  $T_{dam} = T - Q(T)$  учитывает, что в процессе замедления первичного атома отдачи, часть его энергии конвертируется в возбуждение электронов. Таким образом,  $T_{dam}$  является не полной энергией, переданной атому мишени в упругом соударении ( $T$  – энергия атома отдачи, определяемая формулой (2.12)), и составляет только ее часть, а  $Q(T)$  представляет собой интеграл удельных неупругих потерь энергии по путям всех первичных атомов

отдачи, всех вторичных и т.д. Отношение  $T_{\text{dam}}/T$  уменьшается с ростом энергии атома отдачи и уменьшением массы атома твердого тела, в котором замедляются атомы отдачи. Уровень первичных радиационных нарушений  $\nu(dpa)$ , как бы его не оценивать, представляет собой меру числа образовавшихся дефектов. В зависимости от температуры первичные дефекты, мигрируя в кристаллической решетке твердого тела, могут аннигилировать путем рекомбинации, а также объединяться в более устойчивые вторичные дефекты. Хотя только часть первично образовавшихся дефектов ответственна в конечном счете за наблюдаемые изменения свойств материала при его облучении, определение уровня первичных радиационных нарушений  $\nu(dpa)$  полезно для сопоставления данных, полученных для разных бомбардирующих мишень частиц, разных энергий, потоков и флюенсов. При некотором критическом уровне радиационных нарушений кристаллическое состояние облучаемого материала может стать неустойчивым и происходит переход в сильно разупорядоченное (аморфизированное) состояние.

При высоких флюенсах ионного облучения оценку уровня первичных радиационных нарушений необходимо производить с учетом распыления облучаемого материала. Действительно, вследствие распыления поверхности материала происходит движение границы поверхности (см. рис.2.12) со скоростью  $v = Y\phi/n_0$ , где  $Y$ - коэффициент распыления, равный среднему числу всех распыленных частиц, приходящихся на одну бомбардирующую частицу,  $n_0$ - концентрация атомов мишени.

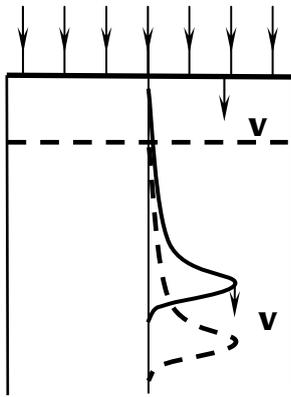


Рис.2.12. Движение границы поверхности при распылении

Движение границы поверхности приводит к ограничению уровня первичных радиационных нарушений  $v$  и, естественно, процесса накопления радиационных дефектов. Равновесное состояние поверхностного слоя глубиной образования дефектов  $R_d$  определяется временем  $t_d$  распыления этого слоя после начала облучения

$$R_d = Y\phi t_d / n_o \quad (2.84)$$

Для энергий ионов порядка кэВ, когда их взаимодействие хорошо описывается обратно-квадратичным потенциалом и величина  $S_n$ , определяющая дефектообразование от его глубины не зависит. В результате при равновесных (steady-state) условиях  $v_{st}$  уменьшается линейно с глубиной  $x$  мишени и равняется нулю при  $x = R_d$

$$v_{st} = v_o (1 - x / R_d), \text{ при } x < R_d, \quad (2.85)$$

где, используя выражение для сечения смещения согласно выражению (2.82), получаем

$$v_o = (0.4 S_n R_d) / (E_d Y) \quad (2.86)$$

Поскольку коэффициент распыления пропорционален удельным упругим (ядерным) потерям энергии, то  $v_o$  оказывается от них не зависящим. Зависимость  $v_o$  от энергии бомбардирующего иона определяется энергетической зависимостью  $R_d$ , которая согласно

экспериментальным данным в интересующей нас области энергий прямо пропорциональна  $E$ . Таким образом, при высоких флюенсах ионного облучения предельный уровень первичных радиационных нарушений, измеряемый в  $dpa$ , уменьшается с уменьшением энергии бомбардирующего иона.

При использовании для коэффициента распыления известной формулы Зигмунда

$$Y = \frac{0.076 \cdot \alpha \cdot S_n}{C_o E_c}, \quad (2.87)$$

где  $C_o = 1.807 \text{ \AA}^2$  сечение упругих соударений низкоэнергетических каскадных атомов,  $\alpha$  – коэффициент, зависящий от соотношения масс атомов мишени и падающего иона,  $E_s$  - поверхностная энергия связи, формула (2.81) принимает вид

$$v_0 = \frac{R_d}{\Delta x} \cdot \frac{5.26}{\alpha(M_2/M_1)} \cdot \frac{E_c}{E_d}, \quad (2.88)$$

где  $\Delta x = 1/nC_o$  – характеристическая глубина выхода распыленных атомов ( $\approx 5 \text{ \AA}$ ).

Стационарный уровень радиационных повреждений, достигаемый при достаточно больших флюенсах ионного облучения, определяется согласно этой формуле отношением глубин взаимодействия атомов с твердым телом  $R_d/\Delta x$  и характерных энергий  $E_s/E_d$  твердого тела.

## 2.8. Радиационные эффекты в углеродных материалах

В качестве наглядного примера рассмотрим радиационные дефекты в углеродных материалах. Углеродные материалы - поликристаллические графиты, углерод-углеродные композиционные материалы (УУКМ), стеклоуглероды - являются

распространенными конструкционными материалами. В связи с широким их использованием в ракетно-космической технике, ядерных и термоядерных реакторах большое внимание уделяют исследованиям их поведения в радиационных полях различной природы (электромагнитные поля, потоки нейтронов и заряженных частиц). Так, в планируемом большом термоядерном реакторе ИТЭР графиты и углерод-углеродные композиты, благодаря высоким термомеханическим свойствам, являются основными кандидатными материалами для диверторных пластин. В космическом пространстве среди различных форм радиации существуют также, создаваемые горячей плазмой магнетосферы Земли, потоки тяжелых ионов с энергиями в интервале  $10^3$ - $10^5$  эВ. Изменения физических и функциональных свойств материалов аэрокосмической техники и соответственно радиационной защиты таких материалов являются важной задачей в связи с приготовлением новых космических проектов, таких как конструирование станций на Луне, полеты на Марс и Юпитер. Для долговременных полетов флюенсы облучения могут быть больше, чем  $\sim 10^{17}$  см<sup>-2</sup>.

Углеродные материалы часто выделяют в отдельный класс материалов при исследованиях радиационных повреждений и их влияния на физические свойства материалов. Практически все виды радиационного воздействия приводят к зависящим от температуры облучаемой мишени структурным изменениям углеродных материалов, таким как изменения параметров кристаллической решетки, изменения степени кристалличности, концентрации дефектов, топографии поверхности,



радиационная усадка и вторичное распухание. Также как и в других твердых телах

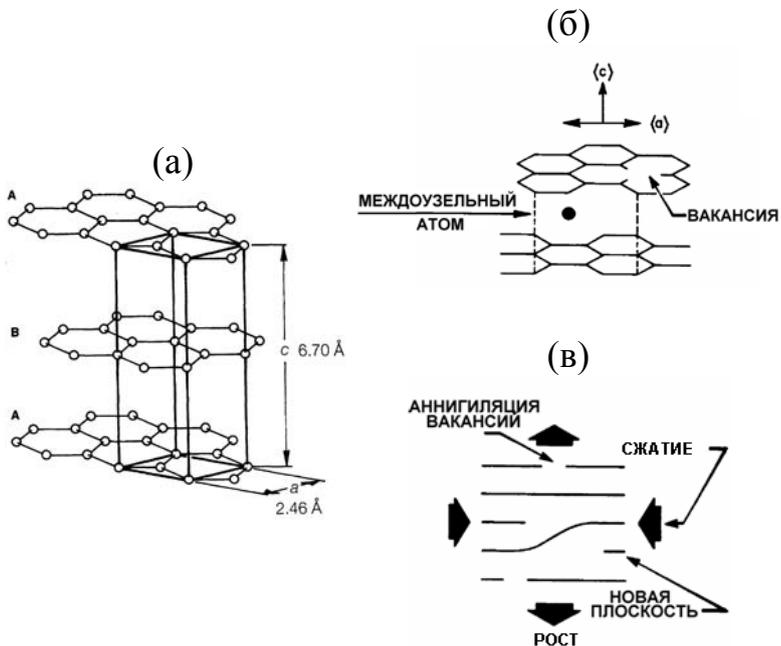


Рис. 2.13. Кристаллическая решетка графита (а), точечные радиационные дефекты (б), размерные изменения графита (в)

первичные радиационные дефекты в кристаллической решетке графитов (см. рис.2.13) – смещенные атомы и вакансии, обусловлены каскадным механизмом атомных смещений в результате торможения в материале первичных высокоэнергетических частиц (нейтронов, ионов, осколков деления, электронов и др.). Смещенные атомы и вакансии в зависимости от температуры мишени, при которой происходит облучение, частично рекомбинируют или остаются в виде точечных дефектов или образуют более сложные дефекты – кластеры смещенных атомов и вакансий. В

слоистой структуре графитов преимущественно происходит двумерная диффузия смещенных атомов в пространстве между атомными плоскостями графита. Часть смещенных атомов рекомбинирует с вакансиями, другая часть образует линейные молекулы  $C_2$ ,  $C_3$  или  $C_4$ , которые, в свою очередь, могут образовывать ядра дислокационных петель – новые графитовые плоскости. В результате может происходить рост кристаллитов графита вдоль оси  $c$ . Релаксация в атомных плоскостях графита, обусловленная коалесценцией вакансий, приводит к уменьшению размеров кристаллитов в базисной плоскости, см. рис.2.13.

Специфика химической связи и слоистая структура графита приводит к тому, что влияние радиационных нарушений в углеродных материалах на единицу дозы больше, чем в металлах и сплавах. Причем значительные эффекты радиационных нарушений наблюдаются при температурах, близких к комнатной температуре, т.е. в области, где большая часть радиационных дефектов в металлах отжигается. Известно, например, что нейтронная бомбардировка графита при комнатной температуре может привести к рентгеноаморфному состоянию облучаемого материала, рис.2.14. Видно, что линия (002) на рентгенограмме при дозах примерно до  $4 \times 10^{20}$  нейтронов/см<sup>2</sup> постепенно смещается без расширения. При более высоких дозах линия начинает расширяться и становится очень диффузной, т.е. материал становится рентгеноаморфным. При пересчете флюенса нейтронного облучения в дозу облучения в  $dpa$  в ядерном реакторе принимают, что  $1 dpa = 1.12 \cdot 10^{21}$  нейтр./см<sup>2</sup>, в токамаках –  $1 dpa \approx 10^{21}$  нейтр./см<sup>2</sup>.

Влияние радиационных нарушений на структуру углеродных материалов проводили при облучении нейтронами, легкими ионами ( $D^+$  и  $He^+$ ) и

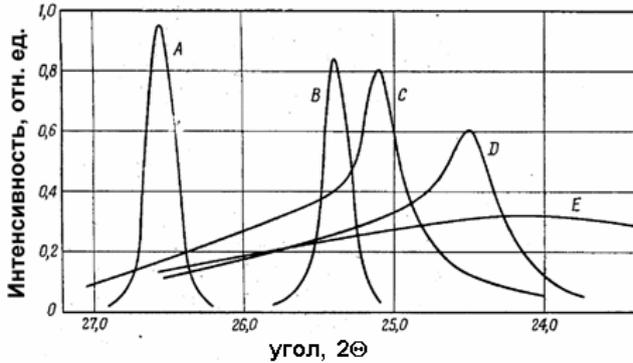


Рис. 2.14. Форма линии (002) на рентгенограммах графита ( $Cu K_{\alpha}$  - излучение) до облучения (A) и после нейтронного облучения в водоохлаждаемом канале реактора дозами:  $4,39 \cdot 10^{20}$  (B),  $5,55 \cdot 10^{20}$  (C),  $7,75 \cdot 10^{20}$  (D),  $9,69 \cdot 10^{20}$  нейтрон/ $cm^2$  (E)

ионами средних масс (C, N, Ar). При повышении температуры, при которой происходит облучение, увеличивается подвижность дефектов, приводящая к сложным процессам динамического отжига. Исследование облучения ионами  $D^+$  и  $He^+$  энергии 25 кэВ показало, что уровень радиационных повреждений, вызывающих аморфизацию,  $dpa_{ам}$ , зависит от температуры облучаемого графита и изменяется от 0,5 до 10  $dpa$  при увеличении температуры от 20 до  $400^{\circ}C$ . Эти данные близки к данным по нейтронному облучению. Ионное облучение можно рассматривать как экспрессный метод моделирования дефектообразования при нейтронном облучении. Анализ кристаллической структуры поверхностного слоя материала методом дифракции быстрых электронов на отражение

продемонстрировал, что доза облучения  $1,3 \text{ dpa}$  при  $T = 77^\circ\text{C}$  приводит к сильному размытию трех, исходно четких, колец на дифрактограммах, т.е. к сильному разупорядочению структуры поверхностного слоя поликристаллических графитов, в то время как при  $T = 400^\circ\text{C}$  такого сильного разупорядочения не наблюдается.

Облучение ионами атомов относительно больших масс (C, N, Ne, Ar) позволяет за небольшие промежутки времени достигать высоких уровней радиационного повреждения, ограниченных сверху движением границы мишени из-за ее распыления. Оценки такого уровня по формуле (2.88) показывают, что при энергии ионов 30 кэВ предельный уровень  $\nu_0$  радиационных повреждений составляет 520, 340 и 180 *dpa* для ионов  $\text{N}^+$ ,  $\text{Ne}^+$  и  $\text{Ar}^+$  соответственно. Такие уровни радиационных повреждений более чем достаточны для аморфизации поликристаллических графитов и, вместе с тем, как показали исследования методом дифракции быстрых электронов на отражение, не вызывают сильного разупорядочения кристаллической решетки при повышенных ( $T = 400^\circ\text{C}$ ) температурах облучаемой мишени.

#### Рекомендуемая литература

1. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Механика. Т.1. М.: Наука, 1988.
2. Голдстейн Г. Классическая механика. 2 изд. М., Наука, 1975, гл.3.
3. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985, v. 1.
4. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир. 1971.

5. Лейман К. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. М.: Атомиздат, 1979, гл.1,5,12.
6. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995, гл. 1 – 4.
7. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат,1995, Приложение 1.
8. Машкова Е.С. Физические основы взаимодействия ионов с материалами. Учебное пособие. М.: Изд-во МГУ. 2005.
9. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 1985.
10. Sigmund P. Stopping of heavy ions. A theoretical Approach. Springer, 2004.

## Глава 3. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ИОННО-ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ

В зависимости от механизма возбуждения электрона различают потенциальную (ПИЭЭ) и кинетическую (КИЭЭ) ионно-электронные эмиссии, которые обычно считаются независимыми и аддитивными ( $\gamma = \gamma_n + \gamma_k$ ).

Потенциальная электронная эмиссия является следствием взаимного расположения энергетических уровней взаимодействующих систем, и возбуждение электрона происходит в результате конверсии внутренней энергии налетающей частицы через оже-процессы. В результате у ПИЭЭ нет порога по скорости налетающей частицы, в отличие от КИЭЭ.

### 3.1. Основные механизмы

Основные механизмы потенциальной ионно-электронной эмиссии были проанализированы Хэгструмом (1954). Ответственные за ПИЭЭ оже-процессы начинают происходить при энергиях, близких к нулевым. При подлете к твердому телу положительного иона вылет электронов из него может происходить в результате процесса оже-нейтрализации. Для металлов в этом процессе один из электронов туннелирует с уровня, расположенного ниже уровня Ферми, на уровень основного состояния иона, нейтрализуя его (рис.3.1а).

Высвобождающаяся при этом энергия передается другому электрону зоны проводимости, который при этом возбуждается и может покинуть поверхность, если выполняется очевидное условие  $I_i > 2\phi$ , где  $I_i$  – энергия ионизации,  $\phi$  – работа выхода металла. Для неметаллов вместо  $\phi$  в граничное условие появления

эмиссии электронов входит энергия наивысшего заполненного электронами уровня – “потолка” валентной зоны.

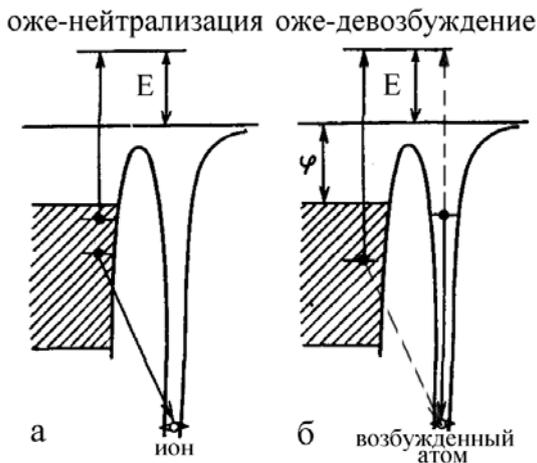


Рис.3.1. Схемы процесса оже-нейтрализации (а) и процессов оже-девозбуждения (б) подлетающего к поверхности положительного иона:  $\varphi$  - работа выхода,  $E$  – энергия вылетевшего электрона

Вылет электронов из твердого тела при нейтрализации положительного иона в возбужденное состояние или при приближении к нему возбужденного атома может происходить в результате двух энергетически эквивалентных процессов при оже-девозбуждении. В одном из них в результате перехода электрона из возбужденного состояния атома в основное может происходить испускание электрона из зоны проводимости (рис.3.1б). В другом процессе девозбуждения электрон может выйти не из зоны проводимости, а с возбужденного уровня атома, а на основной уровень частицы переходит электрон из зоны проводимости (рис.3.1б, пунктир). При этом

условие появления эмиссии  $I_{ex} > \phi$ , где  $I_{ex}$  – энергия возбуждения иона или атома.

### 3.2. Основные закономерности

Потенциальное вырывание из металлов тем больше, чем меньше работа выхода  $\phi$ . При увеличении потенциала ионизации  $I_i$  атомов того элемента, ионы которого подлетают к поверхности твердого тела, коэффициент  $\gamma_n$  возрастает и для однозарядных ионов инертных газов достигает  $\sim 0.1$ , слабо зависит от кинетической энергии подлетающих ионов  $E_0$  (рис.3.2) и хорошо описывается эмпирическим соотношением (см. рис.3.3)

$$\gamma_n = 0.032 (0.78 I_i - 2\phi). \quad (3.1)$$

Наибольшими потенциалами ионизации обладают атомы инертных газов, однако ПИЭЭ может также наблюдаться и при взаимодействии с поверхностями ионов щелочных элементов при

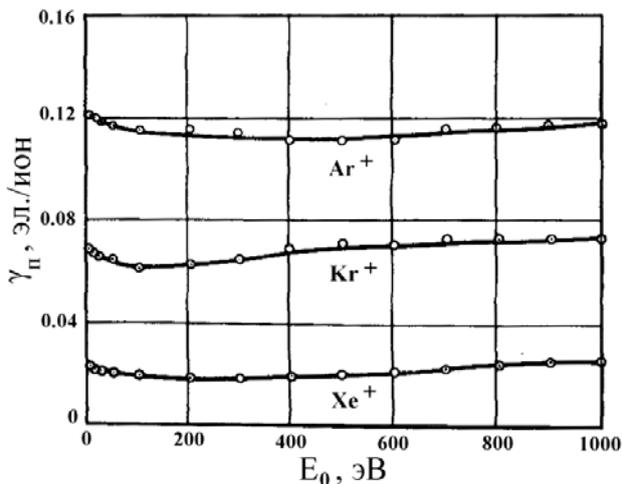


Рис.3.2. Зависимость коэффициента  $\gamma_n$  для молибденовой мишени от энергии  $E_0$  ионов инертных газов



условии, что работа выхода мишени достаточно низка, чтобы произошел процесс оже-девозбуждения. При увеличении температуры  $T$  мишени  $\gamma_n$  может возрастать, особенно заметно при  $I_i \approx 2\phi$  или  $I_{ex} \approx \phi$ .

Нейтрализация многозарядных ионов происходит последовательно со ступенчатым понижением кратности заряда до 0. ПИЭЭ определяется суммой энергий ионизации  $\sum I_i$  бомбардирующих частиц и серией оже-переходов. При этом  $\gamma_n$  может достигать значительных величин и превысить 1.

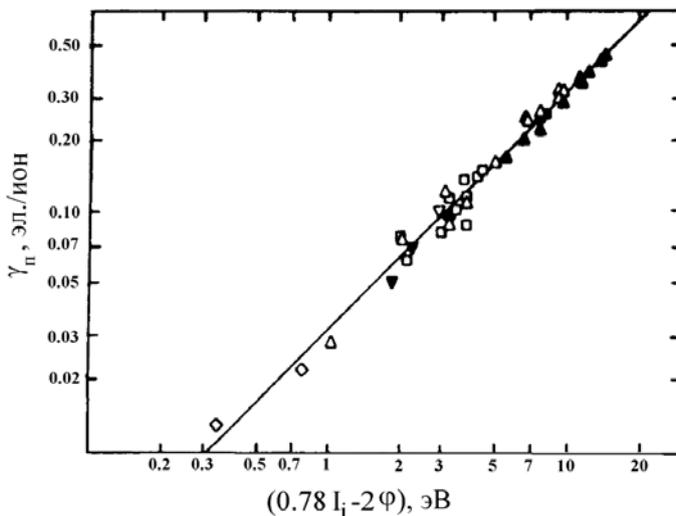


Рис.3.3. Коэффициент  $\gamma_n$  в зависимости от величины  $(0.78 I_i - 2\phi)$  при бомбардировке чистых поверхностей ряда металлов однозарядными ионами инертных газов

Коэффициент  $\gamma_n$  примерно пропорционален выделяющейся при оже-нейтрализации энергии и сильно различается для металлов, полупроводников и диэлектриков, т.е. для твердых тел с различной зонной структурой (рис.3.4).

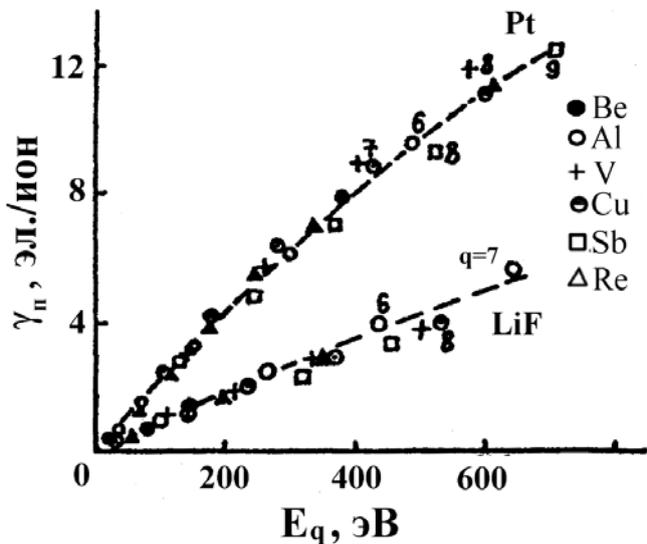


Рис.3.4. Зависимость коэффициента  $\gamma_n$  для металлической (Pt) и диэлектрической (LiF) мишеней от энергии  $E_q$ , выделяющейся при оже-нейтрализации многозарядных ионов

Сильную зависимость ПИЭЭ от заряда иона используют для идентификации многозарядных ионов. Эмиссия под действием многозарядных ионов убывает со скоростью иона быстрее, чем эмиссия под действием однозарядных. Молекулярные ионы вызывают меньшую эмиссию, чем атомарные с близкими потенциалами ионизации. Бомбардировка металлов медленными ( $v_0 \sim 10^5$  см/с) большими ( $M_1 \sim 10^6 - 10^7$  а.е.м) высоко-зарядными ( $q \sim 10^2$ ) кластерами с низкой степенью ионизации приводит к очень большой ПЭЭ:  $\gamma_n \sim 10 - 10^2$  эл./кластер. При этом  $\gamma_n$  нелинейно возрастает с увеличением  $q$  в результате влияния полной электростатической

энергии  $q$ -зарядного кластера при последовательной ступенчатой оже-нейтрализации его около поверхности. Зависимость  $\gamma_n$  от  $q/M_1$  может быть использована для определения отношения заряда кластера к его массе.

Форма энергетических распределений эмиттированных электронов зависит от распределения плотности состояний электронов по энергиям в зоне проводимости металла или в валентной зоне полупроводника, максимальная энергия распределений близка к  $(I_i - \phi)$  (рис.3.5).

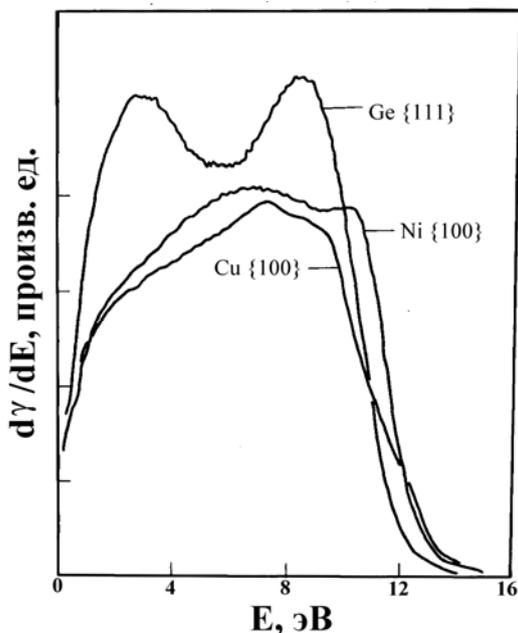


Рис.3.5. Энергетические распределения электронов ПИЭ при облучении Ge, Ni и Cu мишеней ионами  $He^+$  с энергией 5 эВ

Наличие адсорбированных атомов или молекул на поверхности изменяет электронные состояния в приповерхностной области. Эти изменения могут оказывать значительное влияние как на общий выход электронов, так и на энергетическое распределение их по энергиям. В случае монокристаллических мишеней наблюдается влияние кристаллографической ориентации мишени на все характеристики ПИЭЭ.

ПИЭЭ лежит в основе метода ионно-нейтрализационной спектроскопии (ion neutralization spectroscopy) и метода метастабильной спектроскопии девозбуждения (metastable de-excitation spectroscopy). С помощью этих методов на основе анализа энергетических распределений эмитированных электронов извлекается информация об электронной структуре поверхности.

#### Рекомендуемая литература

1. Каминский М. Атомные и ионные столкновения на поверхности металла. Пер. с англ. Под ред. Л.А. Арцимовича. М.: Мир. 1967, гл. 12.
2. Хэгструм Х. – В кн.: Электронная и ионная спектроскопия твердых тел. Под ред. Л. Фирменса, Дж. Веника, В. Декейсера. М.: Мир. 1981.

## Глава 4. КИНЕТИЧЕСКАЯ ИОННО-ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

### 4.1. Зависимости от энергии (скорости) и заряда бомбардирующих ионов

Кинетическая ионно-электронная эмиссия начинает наблюдаться при энергиях  $E_0$  бомбардирующих частиц, больших некоторой пороговой энергии  $E_{th}$ . Для относительно тяжелых ионов соответствующие пороговые скорости  $v_{th} \approx 0.7 \cdot 10^7$  см/с, для легких ионов пороговые скорости выше -  $v_{th} \approx 2 \cdot 3 \cdot 10^7$  см/с.

При  $E_0 < E_{th}$  коэффициент  $\gamma$  либо равен нулю, либо за счет ПВЭЭ примерно постоянен. По мере увеличения энергии вблизи порога кинетического выбивания коэффициент  $\gamma$  растет линейно с энергией бомбардирующей частицы:  $\gamma \sim E_0$ . (рис.4.1).

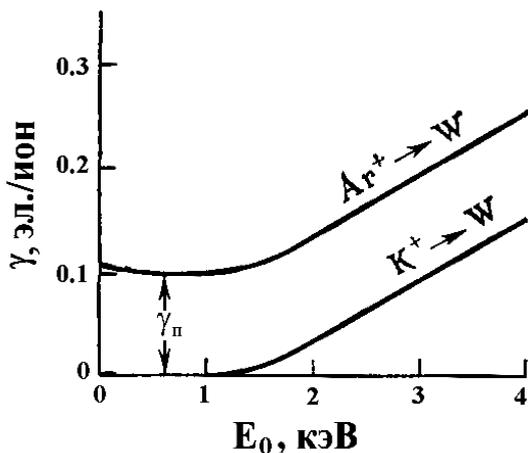


Рис.4.1. Зависимости коэффициента  $\gamma$  от энергии ионов инертных газов ( $Ar^+$ ) и щелочных ионов ( $K^+$ ) для вольфрамовой мишени

Скорость возрастания зависит от комбинации частица-мишень и простирается примерно до  $v_0 = (1.5 - 2) \cdot 10^7$  см/с. Для данной мишени эта область тем шире, чем больше массовое число бомбардирующей частицы. Затем скорость возрастания эмиссии при увеличении  $E_0$  уменьшается и в некотором интервале скоростей примерно до  $v_0 \approx (2.5-3) \cdot 10^8$  см/с линейной можно считать зависимость  $\gamma(v_0)$ . При дальнейшем увеличении энергии (скорости) рост  $\gamma$  продолжает замедляться, достигается максимум, вслед за которым начинается убывание эмиссии (рис.4.2).

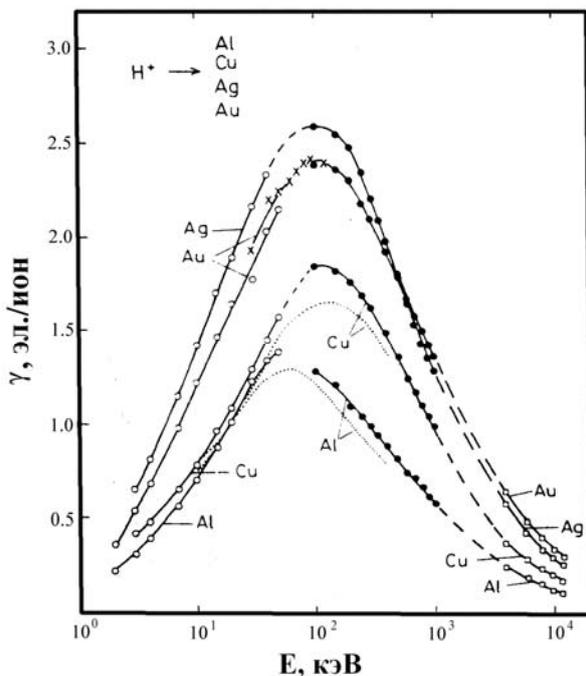


Рис. 4.2. Зависимости коэффициента  $\gamma$  от энергии протонов для ряда металлических мишеней: пунктир – интерполяция между экспериментальными точками, полученными разными авторами

Максимум наблюдается при  $v_0 \approx (10^8 - 10^9)$  см/с, что соответствует, в зависимости от типа бомбардирующей частицы, области энергий в несколько десятков, сотен кэВ или даже нескольких МэВ. При аналогичных условиях облучения  $\gamma$  больше у диэлектриков, что связано с большей, чем у металлов, длиной свободного пробега возбужденных электронов.

При низких энергиях (в области скоростей  $v_0 \approx (1 - 5) \cdot 10^7$  см/с) коэффициент  $\gamma$  для металлов, как поли-, так и монокристаллов, практически не зависит от заряда  $q$  бомбардирующей частицы, а при высоких энергиях (для протонов,  $\alpha$ -частиц и осколков деления) возрастает как  $q^2$ . Промежуточная область практически не исследована, хотя переход, конечно, должен быть. Существенные особенности при низких энергиях проявляет КИЭЭ для щелочно-галоидных кристаллов, для которых она имеет более низкий, чем для металлов, энергетический порог, большую величину эмиссии и убывает с ростом заряда.

#### **4.2. Зависимости от атомного номера бомбардирующей частицы и атома мишени**

В случае постоянной энергии бомбардирующих частиц коэффициент  $\gamma$  в целом является убывающей функцией атомного номера  $Z_1$  бомбардирующей частицы. На это убывание налагается периодичность, примерно соответствующая периодической системе элементов (так называемые “ $Z_1$  – осцилляции”) -  $\gamma$  убывает по мере заполнения электронных оболочек бомбардирующей частицы (рис.4.3).

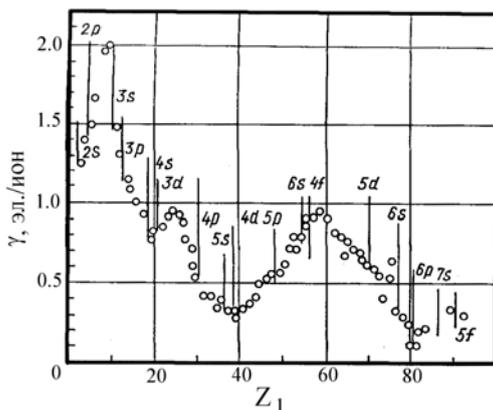


Рис.4.3. Зависимость  $\gamma$  для золотой мишени от атомного номера  $Z_1$  бомбардирующего иона с энергией 20 кэВ

Зависимость  $\gamma$  от атомного номера  $Z_2$  материала мишени также является немонотонной функцией (рис.4.4).

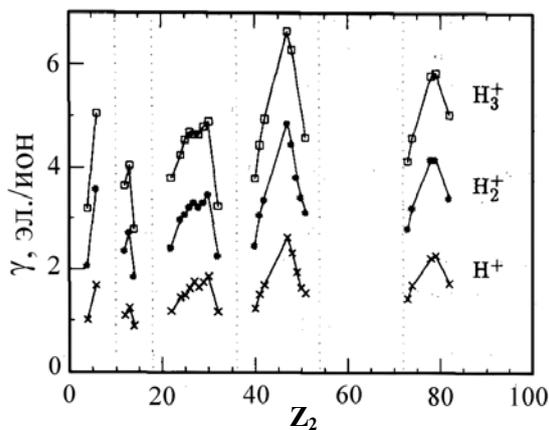


Рис.4.4. Зависимость  $\gamma$  от атомного номера  $Z_2$  при облучении атомарными и молекулярными ионами водорода с энергией 100 кэВ/протон. Вертикальные пунктирные линии указывают начало периодов периодической системы элементов



### 4.3. Зависимость от угла падения ионов на мишень

При увеличении угла  $\theta$  падения частиц на мишень  $\gamma$  для поликристаллических и аморфных мишеней растет, проходит через максимум, положение которого зависит от сорта и энергии бомбардирующей частицы и материала мишени и затем убывает (рис.4.5).

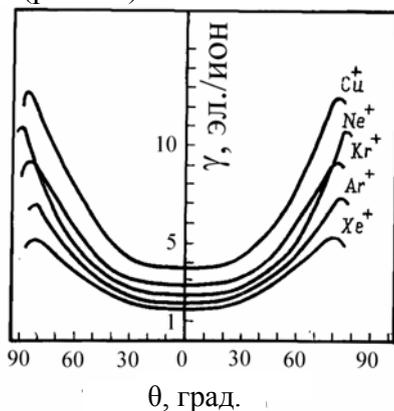


Рис.4.5. Зависимость  $\gamma$  от угла падения  $\theta$  различных ионов с энергией 40 кэВ на медную мишень

В большинстве исследованных случаев при углах падения, меньших некоторого критического угла  $\theta_c$ , угловая зависимость коэффициента ионно-электронной эмиссии аппроксимируется выражением

$$\gamma(\theta) = \gamma(0) (\cos \theta)^{-1}, \quad \theta < \theta_c \quad (4.1)$$

Значения  $\theta_c$  для разных типов ионов и материалов мишени различны. Это обстоятельство приводит практически к независимости от угла падения величины  $\gamma(\theta) \cdot \cos \theta$  в интервале углов  $\theta < \theta_c$ , см. данные, приведенные на рис.4.6.

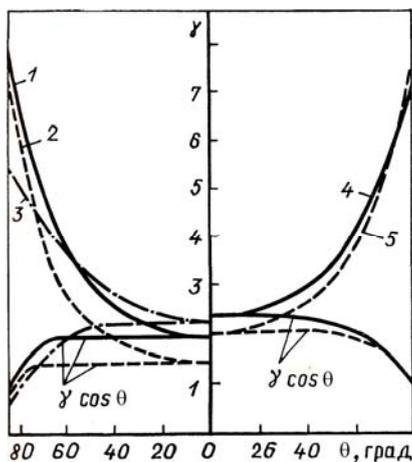


Рис.4.6. Зависимость  $\gamma(\theta)$  и  $\gamma \cdot \cos \theta$  при облучении поликристаллической меди ионами: 1 –  $N^+$  энергии 30 кэВ; 2 –  $He^+$  30 кэВ; 3 –  $Kr^+$  25 кэВ; 4 –  $Ag^+$  30 кэВ; 5 –  $Ne^+$  30 кэВ

Для монокристаллических мишеней на фоне возрастания  $\gamma$  с  $\theta$  наблюдаются резкие его уменьшения, когда направление бомбардировки становится параллельным либо осям, либо плоскостям мишени с низкими кристаллографическими индексами – так называемая анизотропия коэффициента ионно-электронной эмиссии (рис.4.7).

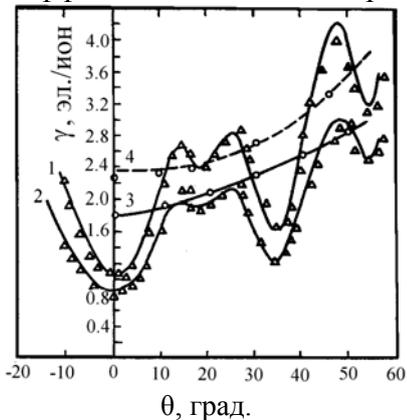


Рис.4.7. Зависимость  $\gamma$  от угла падения  $\theta$  при облучении грани (100)Cu и поликристаллической меди ионами аргона: 1,3 – с энергией 30 кэВ, 2,4 – с энергией 20 кэВ

При уменьшении энергии бомбардирующих частиц и увеличении их массы анизотропия сглаживается.

#### **4.4. Зависимость от температуры мишени**

Коэффициент  $\gamma$  слабо зависит от температуры мишени, если состояние поверхности мишени при изменении температуры практически не изменяется. Для монокристаллов металлов повышение температуры мишени ведет к некоторому сглаживанию кривой  $\gamma(\theta)$ , обусловленному уменьшением прозрачности кристалла по отношению к падающему пучку за счет увеличения амплитуды тепловых колебаний атомов кристаллической решетки. Значительно большее влияние оказывает температура мишени на анизотропию  $\gamma$  полупроводниковых кристаллов, что связано с фазовым переходом поверхности из кристаллической фазы в аморфную под действием ионной бомбардировки. В этом случае  $\gamma$  может резко изменяться в узком температурном интервале: анизотропия угловых зависимостей  $\gamma$  наблюдается только при температуре  $T$  выше температуры отжига  $T_a$  радиационных дефектов, приводящих к аморфизации поверхностного слоя кристаллической мишени. При  $T < T_a$   $\gamma(\theta)$  имеет вид, типичный для твердого тела с неупорядоченным расположением атомов (рис.4.8). При полиморфных и магнитных фазовых переходах коэффициент  $\gamma$  также может изменяться в узком температурном интервале.

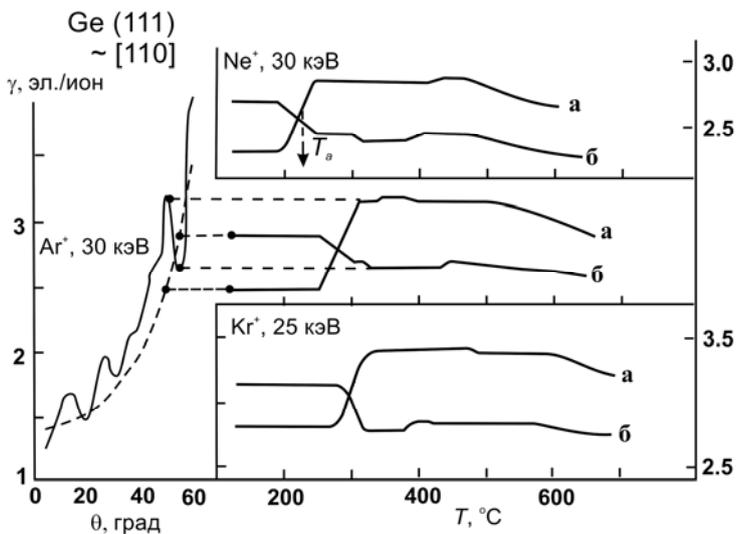


Рис.4.8. Зависимость  $\gamma$  от угла падения  $\theta$  при облучении грани (111) кристалла Ge ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 30 кэВ при температурах выше ( $500^\circ\text{C}$ ) и ниже ( $100^\circ\text{C}$ ) температуры отжига радиационных нарушений и зависимости  $\gamma(T)$  при двух углах падения для ионов неона, аргона и криптона

Отметим, что для полупроводниковых кристаллов характер температурных зависимостей коэффициента  $\gamma$  определяется, в основном, различием в характере движения бомбардирующих ионов в упорядоченных и неупорядоченных материалах. Для углеродных материалов первостепенное значение имеет транспорт вторичных электронов. Отжиг радиационных нарушений в графите приводит к переходу поверхностного слоя, разупорядоченного высокодозным облучением при температурах, близких к комнатной, в относительно упорядоченное состояние, например, поликристаллическое, при  $T > T_a$ . Это приводит в свою очередь к росту длины свободного пробега  $\lambda$  вторичных электронов и,

соответственно, скачку  $\gamma$  при  $T = T_a$  из-за уменьшения сечения ослабления электронного потока в решетке графита при ее упорядочении. Типичные примеры приведены на рис.4.9.

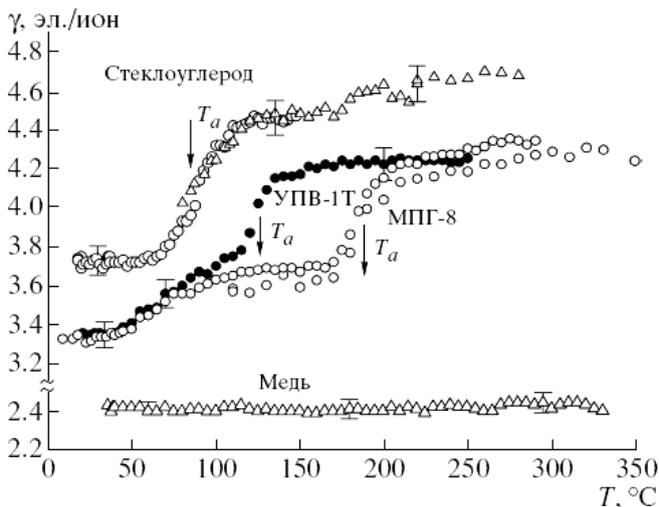


Рис.4.9. Температурные зависимости коэффициента ионно-электронной эмиссии  $\gamma$  при облучении по нормали ионами  $N_2^+$  с энергией 30 кэВ углеродных материалов (поликристаллического графита марки МПГ-8, высокоориентированного пирографита марки УПВ-1Т, стеклоуглерода) и для сравнения - поликристаллической меди

#### 4.5. Молекулярный эффект

При облучении молекулярными ионами и кластерами наблюдается так называемый «молекулярный эффект» – коэффициент  $\gamma_n$ , как правило, отличается от суммы коэффициентов, измеренных при той же скорости для  $n$  атомов, составляющих молекулу или кластер. Снижение

выхода в расчете на один атом при облучении твердого тела замечено и в ряде других электронных процессов: люминесценции, установления зарядового равновесия, электронном распылении и др. В ионно-электронной эмиссии оно вызывается действием механизма «выметания» электронов головными атомами молекул или кластеров, уменьшающим эффективность последующих столкновений. Мерой эффекта принято считать отношение  $R_n(v_0) = \gamma_n/n\gamma_1$ , где  $\gamma_1$  соответствует атомарному иону. Типичные результаты приведены на рис.4.10 и 4.11.

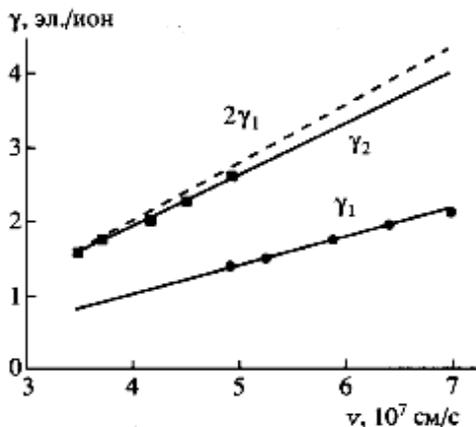


Рис.4.10. Молекулярный эффект при облучении поликристаллической меди атомарными  $N^+$  и молекулярными  $N_2^+$  ионами азота с энергиями 17-35 кэВ

Выходы вторичных электронов под действием как атомарных, так и молекулярных ионов растут линейно со скоростью. Наблюдается неаддитивность эмиссии электронов, выражающаяся в том, что при равной скорости эмиссия для молекулярных ионов меньше, чем удвоенная эмиссия для атомарных ионов. Этот

эффект усиливается с ростом скорости ионов. Соответствующая зависимость  $R_2$  от скорости ионов представлена на рис.4.11.

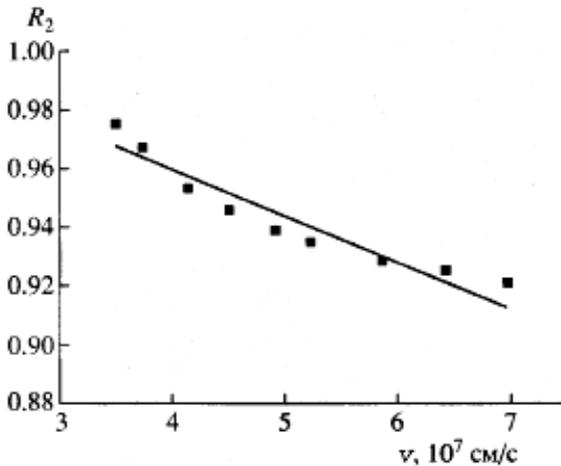


Рис. 4.11. Зависимость меры молекулярного эффекта в интервале скоростей  $(3-7) \cdot 10^7 \text{ см/с}$  ионов при облучении поликристаллической меди атомарными  $\text{N}^+$  и молекулярными  $\text{N}_2^+$  ионами азота

Для монокристаллов молекулярный эффект имеет ориентационный характер. Характерные зависимости коэффициентов  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ , а также  $R_2$  от угла падения  $\theta$  ионов на грань  $(001)\text{Cu}$  под действием атомарных и молекулярных ионов азота с одной и той же скоростью приведены на рис.4.12. Отношение выходов  $R_2$  повторяет характерные для монокристаллов анизотропные угловые зависимости, однако глубина осцилляций гораздо меньше.

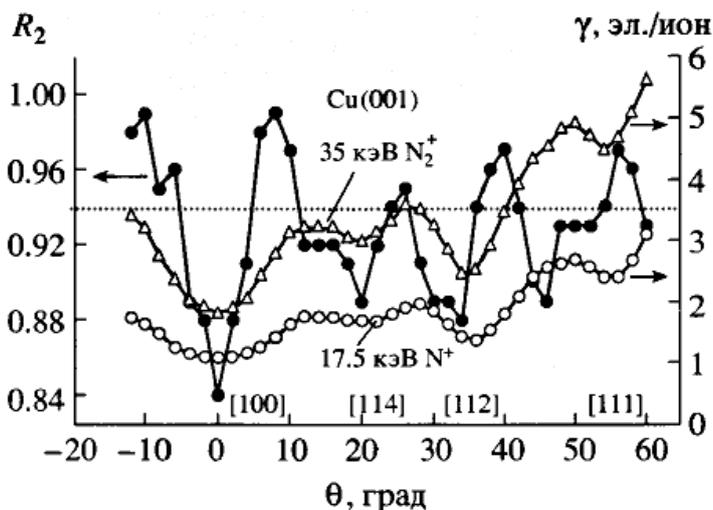


Рис.4.12. Зависимости  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и  $R_2$  от угла падения ионов азота на грань (001)Cu. Плоскость падения (100), скорость ионов  $4.92 \cdot 10^7$  см/с. Пунктиром показано значение  $R_2$  для поликристалла меди для случая нормального падения

Абсолютная величина  $R_2$  везде меньше единицы. Среднее значение  $R_2(\theta)$  (пунктир) соответствует величине для поликристаллической меди при нормальном падении ионов.

#### 4.6. Влияние адсорбированных слоёв

Адсорбированные слои на поверхности мишени могут приводить и к увеличению, и к уменьшению  $\gamma$  по сравнению с атомно чистой поверхностью. Так адсорбция электроотрицательного элемента (кислорода) на поверхности металлов может приводить к уменьшению выхода электронов (рис.4.13), тогда как адсорбция электроположительного цезия – к увеличению  $\gamma$ .



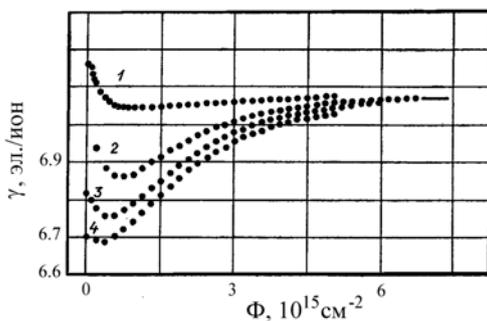


Рис.4.13. Зависимости  $\gamma$  от флюенса  $\Phi$  при облучении, покрытого кислородом вольфрама ионами  $\text{Ne}^+$  с энергией 500 кэВ при разных степенях покрытия: 1 – остаточный газ, 2 –  $3.4 \cdot 10^{-4}$  Па·с, 3 –  $6.8 \cdot 10^{-4}$  Па·с, 4 –  $3.4 \cdot 10^{-3}$  Па·с

Причины могут быть связаны с различной вероятностью возбуждения электронов для адсорбатов и атомов матрицы и с изменением поверхностного барьера.

#### 4.7. Энергетические распределения эмитированных электронов

Энергетическое распределение эмитированных электронов имеет максимум при энергии, равной нескольким электрон-вольтам, положение которого практически не изменяется при изменении энергии первичных частиц. Форма распределения зависит от материала мишени, сорта бомбардирующих ионов, а для тяжелых ионов и от их энергии. Полуширина спектра возрастает с увеличением энергии бомбардирующих частиц (рис.4.14). В высокоэнергетической части спектра (хвост распределения) наблюдается тонкая структура, обусловленная влиянием ряда групп вторичных электронов, таких как оже-электроны, конвойные

электроны, электроны, потерявшие энергию на возбуждение плазмонов и т.д.

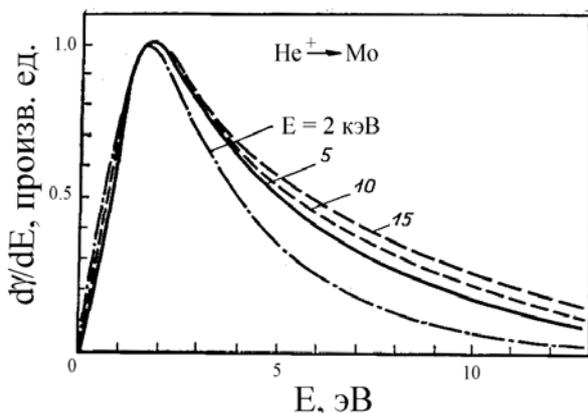


Рис.4.14. Энергетическое распределение эмитированных электронов, полученное при облучении молибденовой мишени ионами гелия

Так, испускание электронов, получающих энергию в результате оже-процесса при заполнении вакансии во внутренней оболочке, образовавшейся в результате соударения бомбардирующей частицы и атома твердого тела, обуславливает появление в спектре перегибов, ступенек и пиков при характерных дискретных энергиях, достигающих десятков, сотен электронвольт и более. Типичный пример приведен на рис.4.15. Для монокристаллов форма энергетического спектра электронов, в том числе и оже-спектра, зависит от ориентации первичного пучка относительно низкоиндексных направлений и плоскостей, вблизи которых он движется. На анализе особенностей энергетических распределений эмиттированных электронов основана ионная оже-спектроскопия поверхности твердого тела (см.гл.6).

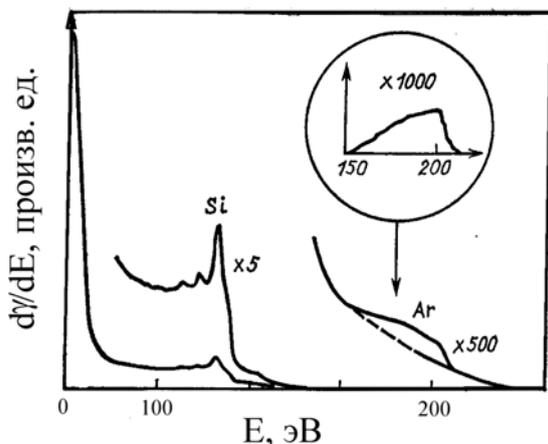


Рис.4.15. Энергетическое распределение электронов при облучении кремниевой мишени ионами  $Ag^+$  с энергией 14 кэВ. При  $E = 86$  и 210 эВ наблюдается тонкая структура, обусловленная оже-электронами материала мишени и бомбардирующих ионов

#### 4.8. Угловые распределения эмитированных электронов

Угловое распределение электронов с непрерывным энергетическим спектром аппроксимируется законом косинуса  $d\gamma/d\Omega \sim \cos \Theta$ , где  $\Theta$  - угол вылета относительно нормали к поверхности мишени. Для электронов, дающих вклад в тонкую структуру энергетического спектра, угловые распределения неизотропны, их форма зависит как от процесса возбуждения электронов, так и от особенностей их выхода. Угловые распределения электронов, возникающих при облучении монокристаллов, являются немонотонными (рис. 4.16). Они дают информацию об особенностях влияния упорядоченной структуры твердого тела на взаимодействие с ней вторичных электронов, в том

числе о дифракции электронов на кристаллической решетке облучаемого твердого тела.

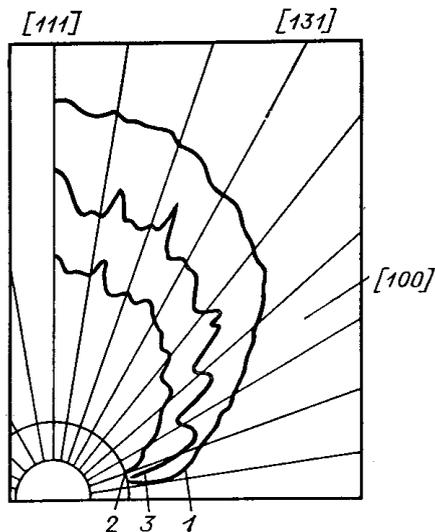


Рис.4.16. Полярные угловые распределения электронов, эмитированных с грани (111) кристалла Nb при облучении ионами  $Ag^+$  с энергией 25 кэВ: 1 – полный поток электронов, 2 – с  $E = 16 \div 20$  эВ, 3 – с  $E = 10 \div 12$  эВ

#### 4.9. Статистические распределения эмитированных электронов

Ионно-электронная эмиссия имеет статистический характер. Если при попадании на мишень одного иона группа  $n$  электронов эмитируется одновременно, то

$$\gamma = \sum n P_n, \quad (4.2)$$

где  $P_n$  – распределение вероятности эмиссии  $n$  электронов. Статистическое распределение эмитированных электронов является достаточно широким (рис.4.17). Во многих случаях форма

достаточно хорошо аппроксимируется  
распределением Пуассона

$$P(n) = \gamma^n [\exp(-\gamma) / n!]. \quad (4.3)$$

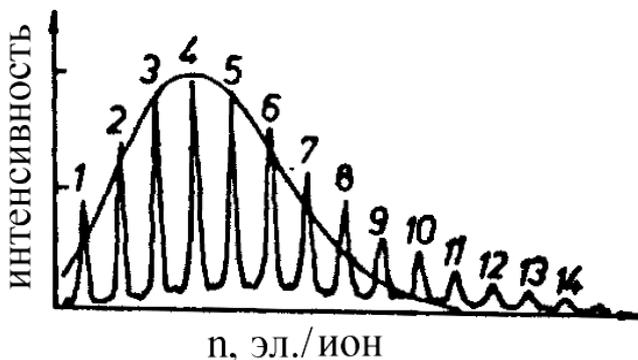


Рис.4.17. Статистическое распределение электронов, эмитированных из медной мишени при облучении ионами  $\text{Xe}^+$  с энергией 84 кэВ. Огибающая линия – распределение Пуассона

Для такого распределения

$$\gamma = (n + 1) [P(n + 1) / P(n)]. \quad (4.4)$$

Для многокомпонентных мишеней статистические распределения вылетевших электронов лучше аппроксимируются двухпараметрическим распределением Пойа

$$P(n) = (\gamma^n / n!) (1 + bn)^{-n-1/b} \prod_{i=1}^n [1 + (i-1)b], \quad (4.5)$$

где  $b$  варьируется от нуля до единицы и является мерой флуктуации  $n$ . При  $b = 0$  распределение Пойа переходит в распределение Пуассона.

Рекомендуемая литература:

1. Брусиловский Б.А. Кинетическая ионно-электронная эмиссия. М.: Энергоатомиздат, 1990.
2. Энциклопедическая серия. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том. Книга 3. / Под ред. академика В.Е.Фортова. М.: “Наука / Интерпериодика”, 2000. 574с. (VI. Взаимодействие НТП с конденсированным веществом, газом и электромагнитным полем)

## ГЛАВА 5. МЕХАНИЗМЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ ИОННО- ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ

### 5.1. Эмиссия электронов из неупорядоченных твердых тел

В теоретическом анализе КИЭЭ основной вопрос заключается в том, какие электроны являются преобладающим источником эмиссии и каков эффективный механизм их возбуждения в той или иной ситуации. В качестве источников электронов принято рассматривать три возможности – свободные электроны (электроны зоны проводимости), связанные электроны (электроны валентной и более глубоких зон облучаемого материала) и электроны бомбардирующей частицы (иона или атома).

#### 5.1.1. История вопроса

Ранние теоретические рассмотрения отвечали на вопрос об источнике электронов по-разному. Первую попытку найти способ теоретического описания КИЭЭ сделал Капица (1923), который рассматривал свободные электроны металла (электроны зоны проводимости) как источник КИЭЭ и полагал, что ион, ударяясь о поверхность мишени, передает часть своей кинетической энергии очень малому объему металла, вызывает кратковременный локальный разогрев, приводящий к термоэлектронной эмиссии. Теория давала правильный порядок величины эмиссии, но не смогла объяснить основные закономерности процесса. Причина трудностей “термических” теорий КИЭЭ, равно как и других эмиссионных процессов при ионной бомбардировке, связана с недостаточно большим повышением

температуры области каскада атомных соударений при его термализации для рассматриваемых в этих теориях случаев ионного облучения материалов.

«Механические» теории рассматривали в качестве источника электронов КИЭЭ в области высоких энергий ионов (0.1 – 1 МэВ) электроны бомбардирующих частиц, испускаемые вследствие “встряхивания” электронных оболочек при внезапном изменении движения ядра при столкновении, аналогично ионизации атома при ударе нейтрона. Однако, эти теории предсказывали выход электронов на два порядка ниже наблюдаемого экспериментально. Применение такой модели оказалось неоправданным, поскольку при столкновении в первую очередь приходят в соприкосновение электронные оболочки сталкивающихся частиц, а затем уже тормозятся ядра.

Что касается связанных электронов, как источника КИЭЭ, то согласно теории атомных столкновений механизм возбуждения этих электронов зависит от соотношения между скоростью поступательного движения иона  $v_0$  и скоростью орбитальных электронов  $v \approx Z_1^{2/3} v_B$ .

При  $v_0 \gg Z_1^{2/3} v_B$  происходит резкое изменение потенциала, действующего на связанные электроны, которое вызывает возбуждение или ионизацию атома. Эта область скоростей соответствует в КИЭЭ области максимума выхода электронов и последующего спада эмиссии, см. выше рис. 4.2 в главе 4. В этой области скоростей (энергии ионов порядка нескольких МэВ) Штернглассом (1957) была развита так называемая «ударно-ионизационная» теория.

Для расчета ионизации, производимой быстрым ионом в твердом теле Штернгласс использовал теорию



Бора-Бете прохождения ионов через вещество. Выход электронов из металла рассматривался как следствие их диффузии к поверхности. Выражение для коэффициента эмиссии имеет вид

$$\gamma = \frac{4AP\pi e^4 q^2}{\bar{V}\alpha\sigma} \left( \frac{Z_2}{E_R E_e} \right)^{1/2} \sim \frac{q^2}{v_0} \quad (5.1)$$

где  $P$  – вероятность выхода электронов из металла,  $A$  – определяется распределением начальных скоростей вторичных электронов,  $e$  – заряд электрона,  $q$  – эффективный заряд падающей частицы,  $Z_2$  – атомный номер материала мишени,  $\bar{V}$  – средняя энергия, идущая на ионизацию атома в твердом теле,  $E_e$  – энергия электрона, летящего с той же скоростью, что и ион,  $E_R$  – энергия Ридберга,  $\sigma$  – площадь поперечного сечения атома металла, определяемая ковалентным радиусом,  $\alpha$  – константа, характеризующая сечение рассеяния вторичных электронов. Формула Штернгласса разумно описывает экспериментальные данные – наличие максимума зависимости  $\gamma(v_0)$  и спад эмиссии, обратно пропорциональный скорости бомбардирующей частицы, пропорциональность коэффициента КИЭЭ квадрату заряда иона, слабую зависимость от параметров мишени.

5.1.2. Механизм передачи электронам кинетической энергии иона в области скоростей, меньших скоростей связанных электронов

При  $v_0 \leq Z_1^{2/3} v_B$ , т.е. в области энергий ионов 1 – 100 кэВ, движение электронов адиабатически (т.е. медленно) следует за движением ядер сталкивающихся

частиц. При этом характер столкновения таков, что деформацию, проникновение и возмущение испытывают практически все электронные оболочки, окружающие ядра. Передача энергии электронам осуществляется не ударом иона как целого, а взаимодействием его электронов при прохождении электронных оболочек друг сквозь друга, причем в процессе передачи энергии участвуют электроны обеих сталкивающихся частиц. В такой ситуации анализ возбуждения связанных электронов, окружающих “квазимолекулу”, образованную бомбардирующим ионом и изолированным атомом, основывается на статистической модели атома Томаса-Ферми. Аналогичный подход к проблеме КИЭЭ твердых тел, основанный на модели Фирсова (см. раздел 2.3 главы 2), позволяющей рассчитывать неупругую потерю энергии в элементарном акте столкновения двух частиц, с учетом того, что электроны внутренних оболочек атомов металла слабо коллективизированы и образуют ионный остаток, близкий по свойствам к изолированному атому, развивался Парилисом и Кишиневским (1961-1993), и в последнее десятилетие Парилисом.

Выше в главе 2 отмечалось, что при взаимодействии налетающего иона с изолированным атомом на некоторое время образуется «квазимолекула». Согласно Парилису и Кишиневскому и в твердом теле неупругая потеря происходит во время тесного сближения налетающего иона и атома мишени. При этом важную роль в эмиссии электронов, как и в столкновениях изолированных атомов, играют оже-процессы. Учитывая, что возбуждение, ионизация и оже-процессы в атомных столкновениях происходят в

основном во внешних оболочках квазимолекулы, можно оценить верхнее значение сечения однократной ионизации атомного остатка в твердом теле на основании соотношения

$$\sigma_1 = \pi p_1^2, \quad (5.2)$$

где  $p_1$  – прицельный параметр столкновения, при котором  $Q(p_1) = \delta_1 - \varphi$ ;  $\varphi$  – работа выхода электронов,  $\delta_1$  – глубина энергетического уровня, на котором находится связанный электрон валентной зоны, см. на рис.5.1 вариант заполнения зон электронами в металле.

Большие прицельные параметры столкновений сопровождаются передачей энергии, меньшей ( $\delta_1 - \varphi$ ) и поэтому недостаточной для возбуждения связанных электронов. Чтобы получить наблюдаемую экспериментально эмиссию электронов была произведена оценка сечения для перехода связанных электронов в зону проводимости, учитывая возможность вырывания из заполненной валентной зоны более одного электрона в каждом акте столкновения при передаче энергии возбуждения  $Q$



Рис. 5.1. Заполнение зон электронами в металле:  $\varphi$  – работа выхода,  $E_F$  – энергия уровня Ферми,  $\delta_1$  – энергия связанного электрона в валентной зоне (глубина дырки, отсчитанная от вакуумного уровня). Для металлов зона проводимости и валентная зона могут частично перекрываться

электронам за счет кинетической энергии бомбардирующего иона. Соответствующая формула

$$\sigma(v_0) = 2\pi \int_0^{p_1} \frac{Q(p)}{I} p \, dp \quad (5.3)$$

где параметр  $p_1$  определяет верхнюю границу сечения однократной ионизации (см. выше формулу (5.2)),  $I$  – средний потенциал ионизации для внешних оболочек атома. Эта величина, известная из теории прохождения частиц через вещество, составляет для металлов 20-30 эВ. Таким образом, эмиссия обусловлена связанными электронами, как изначально возбужденными в зону проводимости, так и через оже-переходы за счет неупругой потери энергии в парном столкновении иона и атома мишени. Для малых прицельных параметров  $p$  соударения и области энергий ионов порядка нескольких кэВ отношение  $Q(p)/I$  значительно превосходит единицу. Ионизирующие столкновения иона с атомами решетки могут происходить на разных глубинах, вплоть до глубины  $R_e$ , на которой ион еще сохраняет способность ионизировать, т.е. вплоть до пороговой скорости  $v_{th}$ . В результате, сечение ионизации  $\sigma(v_0)$ , с использованием формул (2.47) - (2.49) для неупругой потери энергии  $Q$  и формулы (5.3) определяется выражением

$$\sigma(v_0) = \frac{1.39a_0\hbar}{I} f(Z_1Z_2)S(v_0), \quad (5.4)$$

где  $f(Z_1Z_2) = \left( \frac{Z_1 + Z_2}{Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}} \right)^2$  при  $\frac{1}{4} < \frac{Z_1}{Z_2} < 4$

и  $f(Z_1, Z_2) = \frac{1}{16} (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})(Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})^3$  для

легких ионов. С использованием формулы (2.48) выражение для  $S(v_0)$  имеет вид

$$S(v_0) = \frac{1.28v_0}{a_0^2} (\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^2 \int_0^{p_1} p dp \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{[1 - V(r)/E_r] dr}{\sqrt{1 - V(r)/E_r - p^2/r^2}} \times \\ \times \int_{r/2}^{\infty} \frac{\Phi^2 [1.13(Z_1 + Z_2)^{1/3} (\rho/a_B)]}{\rho} d\rho \quad (5.5)$$

Величина  $S(v_0)$  интегрируется численно и в пределах точности теории может быть аппроксимирована выражением

$$S(v_0) = 5.25 v_0 \operatorname{arctg} 0.6 \cdot 10^{-7} (v_0 - v_{th}), \quad (5.6)$$

$v_{th}$  – пороговая скорость, которая различна для разных комбинаций ион-мишень и составляет  $(0.6 - 0.7) \cdot 10^7$  см/с.

По определению пороговая скорость  $v_{th}$  процесса соответствует  $p_1(v_{th}) = 0$ .

Оценки пороговой скорости для кинетической электронной эмиссии при прямом столкновении иона с электроном проводимости приводят к следующему выражению:

$$v_{th} = \frac{v_F}{2} \left\{ \sqrt{1 + \frac{\Phi}{E_F}} - 1 \right\}, \quad (5.7)$$

где  $E_F$  и  $v_F$  – энергия и соответствующая скорость Ферми,  $\Phi$  – работа выхода. Например, для графита  $\Phi = 5$  эВ,  $E_F = 21.3$  эВ, что дает значение пороговой скорости  $v_{th} = 1.5 \times 10^7$  см/с или 117 эВ/а.е.м.

Существуют две области изменения  $S(v_0)$  и соответственно сечения ионизации со скоростью иона, определяющие зависимость от  $v_0$  выхода электронов. Они обусловлены различной зависимостью расстояния наибольшего сближения  $r_{\min}$  от скорости  $v_0$ . При больших скоростях  $r_{\min}$  близко к  $p$ , при малых сильно от него отличается. Зависимость сечения ионизации  $\sigma_e(v_0)$  при скоростях  $v_0 \sim (1-3) \cdot 10^7$  см/с близка к квадратичной, а при более высоких скоростях приближается к линейной и при

$$\frac{1}{4} < \frac{Z_1}{Z_2} < 4 \quad \text{с учетом выражения (5.7) имеет вид}$$

$$\sigma_e(v_0) = 1.16a_0hI^{-1}[(Z_1 + Z_2)(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-1}]^2 \times \text{varctg} [0.6(v_0 - v_{\text{th}})10^{-7}], \quad (5.8)$$

Ионизирующие столкновения иона с атомом мишени могут происходить на разных глубинах вплоть до глубины, на которой ион еще может ионизовать атом мишени. В результате за счет торможения иона в твердом теле сечение  $\sigma_e(v_0)$  уменьшается на некоторую величину. Пусть  $R_e(v_{\text{th}})$  есть средняя длина пути иона, на которой ион замедляется до пороговой скорости  $v_{\text{th}}$  за счет торможения на пути  $l$  и  $R_e \cos \theta$  - глубина, на которой ион еще может ионизовать атом мишени,  $\theta$  - угол падения иона относительно нормали к поверхности. Влияние торможения иона на уменьшение сечения ионизации наиболее существенно при относительно низких скоростях бомбардирующих ионов (т.е. при приближении скорости иона к пороговой). А именно, когда путь иона в веществе, на котором ион еще может

ионизовать атом мишени, не превышает глубину, с которой электроны еще могут выйти из мишени, т.е. когда  $R_e \cos\theta < \lambda$ , где  $\lambda$  - глубина выхода электронов. При относительно высоких скоростях ионов, когда  $R_e \cos\theta > \lambda$ , можно пренебречь влиянием торможения на сечение ионизации  $\sigma_e(v_0)$ .

Учет влияния торможения иона на уменьшение сечения ионизации может быть сделан в предположении, что скорость иона на пути  $l$  уменьшается по закону  $v_0^2 - v_1^2 = kl$ , где  $v_1$  - скорость иона на расстоянии  $l$ , а

$$k = 2.48\pi n_0 a_0 e^2 Z_1 Z_2 / [(M_1 + M_2)(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^2]^{2/3}. \quad (5.9)$$

Тогда, соответственно, зависимость сечения ионизации от скорости иона имеет вид

$$\sigma_e(v) \sim v_0^2 - v_{th}^2 \quad (5.10)$$

и уменьшение сечения ионизации на пути  $l$

$$\sigma_e(v_1) = \sigma_e(v_0)(1 - l/R_e), \quad (5.11)$$

где

$$R_e = (v_0^2 - v_{th}^2)/k. \quad (5.12)$$

### 5.1.3. Коэффициент кинетической ионно-электронной эмиссии

Прежде чем выйти из твердого тела вторичные электроны могут испытать ослабление потока за счет рассеяния на атомах решетки, имплантированных частицах, радиационных дефектах. Обычно полагают, что поток вторичных электронов убывает по закону

$\exp(-l \cos \theta / \lambda)$ , где  $l$  – путь иона в твердом теле,  $l \cos \theta$  – глубина, на которой ион производит ионизацию,  $\lambda$  – длина пробега вторичных электронов. В результате коэффициент кинетической ионно-электронной эмиссии определяется как

$$\gamma(\theta) = \int_0^{R_e(v_{th})} n_0 \sigma_e(v_l) w \exp(-l \cos \theta / \lambda) dl, \quad (5.13)$$

где  $n_0$  – концентрация атомов мишени,  $R_e$  – средняя длина пути, на котором ион еще способен производить ионизацию (т.е. когда ион замедляется до пороговой скорости  $v_{th}$ ),  $w$  – вероятность выхода возбужденного электрона из твердого тела. При не слишком больших углах падения и достаточно высоких скоростях ионов

$$\gamma(\theta) = n_0 \sigma_e(v_0) \lambda w / \cos \theta. \quad (5.14)$$

Анализ угловой зависимости выражений (5.13) и (5.14) показывает, что при наклонном падении, выше определенного критического угла  $\theta_c$ , определяемого неравенством  $R_e \cos \theta_c \leq \lambda$ , коэффициент ионно-электронной эмиссии достигает предельной величины  $\gamma_{lim} = n_0 \sigma_e w R_e$ , которая не зависит от угла  $\theta$  падения ионов на мишень.

При сделанных выше аппроксимациях формулы ((5.10)-(5.12)), хорошо описывающих сечение ионизации при скоростях ионов  $(1-3) \cdot 10^7$  см/с, интеграл (5.13) вычисляется аналитически и выражение для коэффициента ионно-электронной эмиссии принимает вид

$$\gamma = n_0 \sigma_e \lambda w / \cos \theta [1 - \lambda / (R_e \cos \theta) (1 - \exp(-R_e \cos \theta / \lambda))] \quad (5.15)$$



Ниже, в главе 6 показано, что выражение (5.15) может быть использовано при установлении критической дозы аморфизации образцов, подвергаемых высокодозному ионному облучению.

Вероятность эмиссии  $w$  состоит из двух частей – вероятности  $w_i$  прямого выброса электрона в вакуум при атомном столкновении и вероятности  $w_a$  эмиссии в результате оже-рекомбинации, т.е. процесса рекомбинации электрона проводимости с дыркой, образовавшейся при столкновении с падающим ионом и сопровождающегося передачей энергии другому электрону проводимости, см. рис.5.2 и ср. с рис.5.1.



Рис. 5.2. Схема оже-рекомбинации электрона и дырки, образовавшейся при столкновении с падающим ионом

Для металлов величина

$$w = w_i (\delta_1 - \varphi) + w_a (\delta_1) \quad (5.16)$$

рассчитывается по эмпирической формуле

$$w = 0.016 (\delta_1 - 2\varphi) \quad (5.17)$$

и обычно составляет около 0.5.

Теория Парилуса-Кишиневского правильно предсказывает наличие порога КИЭЭ и ход зависимости  $\gamma$  от скорости бомбардирующей частицы в диапазоне скоростей практически вплоть до максимума, а также независимость от заряда иона, зависимость от  $Z_1$  и  $Z_2$ , и объясняет изотопический эффект.

Для щелочно-галогидных кристаллов рассмотрение эмиссии с учетом двух механизмов – обычной ионизации катиона и аниона по Фирсову и квазимолекулярного механизма отрыва слабосвязанного электрона от аниона хорошо описывает наблюдаемую экспериментально зависимость от  $v_0$  и сильную зависимость  $\gamma$  от заряда иона.

## **5.2. Проблемы транспорта вторичных электронов и влияния радиационных нарушений**

Теории ионно-электронной эмиссии, развитые в основном для металлов, рассматривали их обычно как неупорядоченные системы и проблемы влияния радиационных повреждений ни на образование, ни на выход вторичных электронов не обсуждалась. Для полупроводниковых кристаллов влияние радиационных повреждений на эмиссию электронов рассматривали в связи с исчезновением анизотропии выхода электронов при высокодозной ионной бомбардировке за счет изменения для бомбардирующего пучка прозрачности кристалла в результате его аморфизации, см. выше рис. 4.8 и раздел 5.3. Что касается углеродных материалов, то известно, что радиационные повреждения могут очень сильно изменять их физические свойства, см. раздел 2.8.

В НИИЯФ МГУ в начале нынешнего столетия предпринята попытка учесть влияние радиационных нарушений в графитах на кинетическую ионно-электронную эмиссию. С этой целью были проведены измерения температурных зависимостей  $\gamma(T)$  выхода электронов при различных углах падения ионов на мишень. Температура твердого тела, если ее изменение не приводит к каким-либо структурно-фазовым превращениям, практически не влияет на кинетическую ионно-электронную эмиссию. При наличии структурно-фазовых переходов, например, при переходе в аморфизированное состояние поверхностного слоя кристаллов полупроводников (Si, Ge и ряда других) при высокодозной ионной бомбардировке, влияние температуры на закономерности выхода электронов, распыление, рассеяние, каналирование и другие ионно-индуцированные процессы может быть довольно сильным.

Примером такого влияния на характер угловых зависимостей коэффициентов кинетической ионно-электронной эмиссии  $\gamma$  и распыления  $Y$  могут служить данные для кристалла германия, приведенные на рис.5.3.

Для углеродных материалов скачок на температурных зависимостях  $\gamma(T)$  был обнаружен в НИИЯФ МГУ (2001) для поликристаллического графита при облучении молекулярными ионами азота энергии 30 кэВ. Наблюдалась зависимость, типичная для кривых динамического отжига радиационных нарушений, см. рис.5.4, а также рис.4.9.

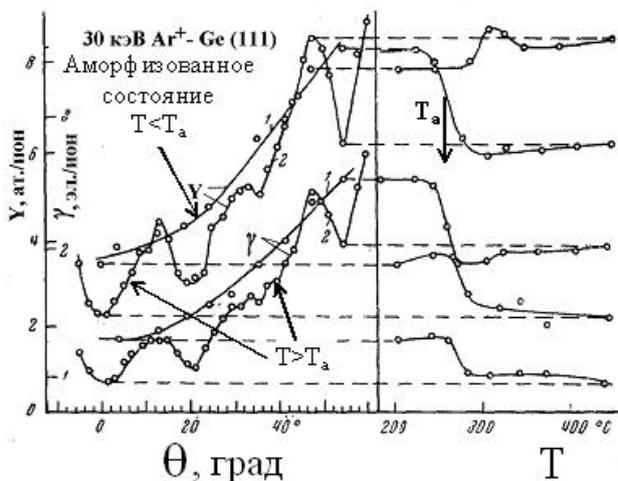


Рис.5.3. Примеры исчезновения анизотропии коэффициентов распыления и ионно-электронной эмиссии в зависимости от температуры облучения

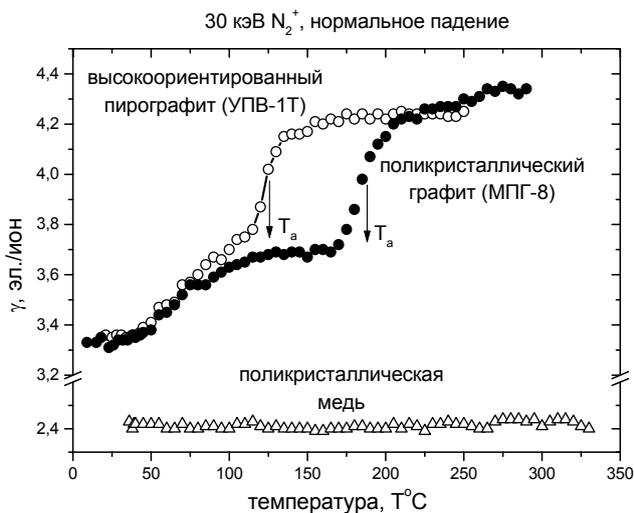


Рис.5.4. Температурные зависимости коэффициента ионно-электронной эмиссии графита марки МПГ-8, высокоориентированного пирографита марки УПВ-1Т и поликристаллической меди

Видно, что в исследованных температурных интервалах для углеграфитовых материалов при некоторой температуре  $T_a$ , зависящей от типа углеродного материала, наблюдается скачок коэффициента ионно-электронной эмиссии. Скачкообразное увеличение  $\gamma$  наблюдается также при облучении ионами  $Ne^+$ ,  $Ar^+$  и атомарными ионами азота. Таким образом, измерения зависимости ионно-электронной эмиссии от температуры позволяют эффективно определять температуры  $T_a$  ионно-индуцированных структурных превращений в поверхностном слое углеродных материалов. Действительно, исследования кристаллической структуры поверхностных слоев углеродных материалов при помощи дифракции быстрых электронов на отражение подтвердили в условиях проводимых экспериментов образование структурных превращений. Электронограммы показали, что в случаях, когда облучение графитов производилось при повышенных температурах, наблюдаются системы дифракционных колец, характерные для поликристаллических структур, а ширина колец определяется размером зерен. При температурах, близких к комнатной, наблюдаются диффузные гало, типичные для аморфизованных поверхностей. В качестве примера на рис.5.5 приведены данные для поликристаллического графита марки РОСО-AXF-5Q.

На электронограмме для исходного образца видны контрастные кольца, характерные для поликристаллических графитов. Облучение при комнатной температуре приводит к появлению диффузного гало, типичного для разупорядоченных поверхностей.

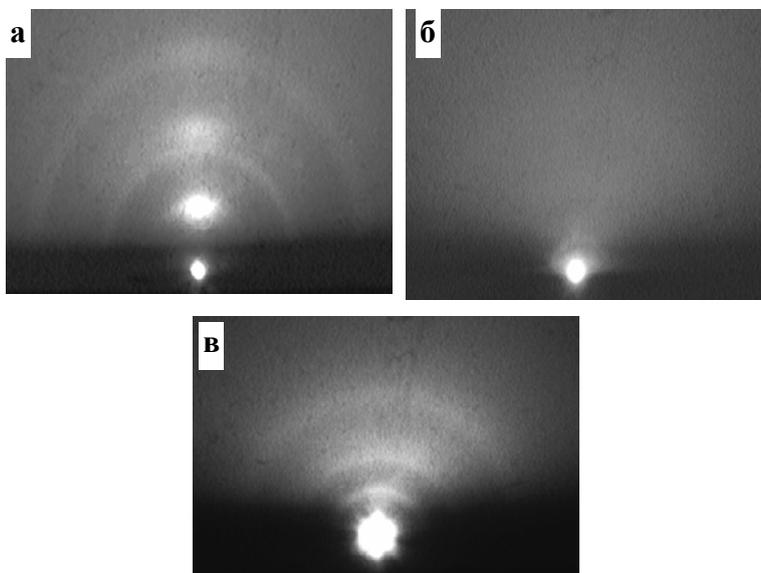


Рис.5.5. Картины дифракции от поверхности графита марки РОСО-AXF-5Q до (а) и после облучения ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 30 кэВ при температурах 25°C (б), и 300°C (в)

Дифракционная картина при повышенных температурах ( $T > T_a$ ) отличается как от случая исходного образца, так и от случаев облучения при  $T < T_a$  – наблюдаются три размытых кольца, соответствующих трем наиболее интенсивным кольцам на электронограмме исходного графита, свидетельствующие о восстановлении трехмерной кристаллической структуры в поверхностном слое графита.

Исследование образцов высокоориентированного пирографита (марки УПВ-1Т), структура которого близка к структуре естественного монокристалла графита (см. выше на рис.2.13а схему кристаллической решетки естественного графита), также показало различие структур поверхностных

слоев при различных температурах облучения и углах падения ионов, но более сложное, чем наблюдалось при аналогичных условиях облучения поликристаллических графитов. А именно, было установлено, что для необлученных образцов картина электронной дифракции содержит точечные рефлексы типа  $(002l)$ , которые соответствуют монокристаллу графита с ориентацией оси  $c$ , близкой к нормали к поверхности образца. Облучение при температурах, близких к комнатной, приводит как при нормальном, так и при наклонном падении ионов к аморфному гало на электронограммах, свидетельствующему о сильном разупорядочении кристаллической структуры. Дифракционная картина для образцов, облученных при повышенных температурах свидетельствует о восстановлении исходной структуры.

Анализ полученных данных позволил установить, что ступенчатый характер выхода электронов при температуре  $T_a$ , обусловлен в основном зависимостью длины свободного пробега вторичных электронов  $\lambda$ , а также длины пробега  $R_e$ , на которой бомбардирующий ион способен производить ионизацию, от структуры мишени, которая изменяется в конкурирующих процессах накопления и отжига радиационных нарушений. Было установлено, что при достаточно больших углах  $\theta$  падения ионов экспериментальные зависимости  $\gamma(\theta)$  отклоняются от обратной практически косинусоидальной зависимости. Это связано, в частности, с тем, что глубина  $(R_e \cos\theta)$ , на которой происходит возбуждение электронов в столкновении бомбардирующей частицы с атомами мишени, становится равной или меньше длины пробега вторичных электронов  $\lambda$ , см. схему процесса на рис.5.6.

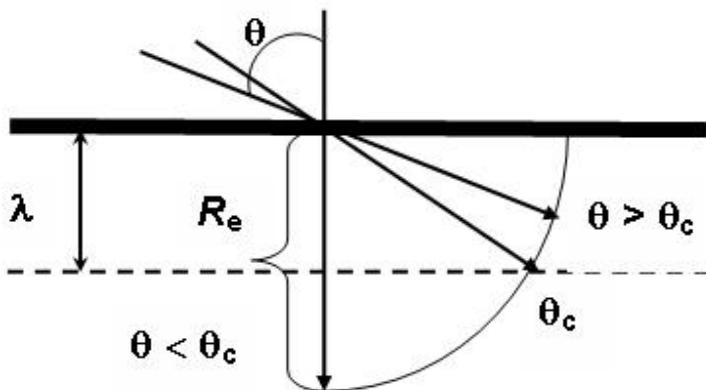


Рис.5.6. Схема процесса возбуждения электронов

Как отмечалось выше в разделе 5.1.3 при  $R_e \cos \theta < \lambda$  значение  $\gamma$  стремится к предельному значению

$$\gamma_{\text{lim}} \approx \rho \sigma(v_0) R_e w. \quad (5.18)$$

Таким образом, в области достаточно больших углов падения коэффициент  $\gamma$  определяется величиной  $R_e$  и не зависит от  $\lambda$ . При сопоставлении с экспериментом, можно ограничиться простейшей аппроксимацией произведения  $\gamma(\theta) \cos \theta$

$$\gamma(\theta) \cos \theta = \begin{cases} \rho \sigma(v_0) \lambda w & \text{при } \theta \leq \theta_c \\ \rho \sigma(v_0) R_e w \cos \theta & \text{при } \theta \geq \theta_c \end{cases}, \quad (5.19)$$

где угол  $\theta_c$  определяется равенством  $R_e \cos \theta_c = \lambda$ .

На рис.5.7 в качестве примера представлены угловые зависимости  $\gamma \cos \theta$ , в которых значения  $\gamma$  взяты из результатов измерений при облучении графита марки РОСО-АХФ-5Q ионами  $\text{Ag}^+$  энергии 30 кэВ при трех температурах: 25, 100 и 300°C. При температурах, как близких к комнатным (RT), так и при  $T > T_a$  значения  $\gamma$



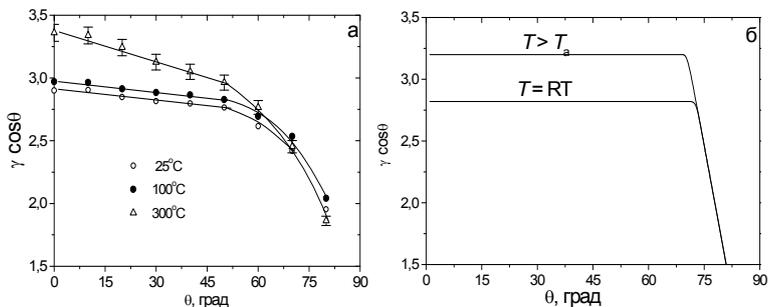


Рис.5.7. Экспериментальные (а) и расчетные (б) угловые зависимости  $\gamma \cos\theta$  при облучении ионами  $\text{Ag}^+$  с энергией 30 кэВ графита марки РОСО-AXF-5Q при различных температурах мишени

соответствуют температурным интервалам, где  $\gamma$  проявляет слабую зависимость от температуры. Построенные таким образом угловые зависимости  $\gamma \cos\theta$  являются характерными для кинетической ионно-электронной эмиссии при энергиях ионов порядка десятков кэВ, ср. с рис.4.6, где приведены аналогичные данные для случаев облучения поликристаллической меди различными ионами. А именно, наблюдается слабая зависимость от угла падения ионов величины  $\gamma \cos\theta$  при углах, близких к нормальному, переходящая при больших углах падения к быстрому уменьшению  $\gamma \cos\theta$ . При этом, как видно из рис.5.7а, при больших углах падения кривые  $\gamma \cos\theta$  при комнатных и повышенных температурах ( $T > T_a$ ) сближаются. Кривая  $\gamma \cos\theta$  для промежуточных температур при небольших углах падения лежит между соответствующими кривыми для комнатных и повышенных температур. Такой ход зависимостей  $\gamma \cos\theta$  от угла падения качественно соответствует аппроксимации зависимости  $\gamma(\theta)$ , взятой в виде (5.19) и

приведенной на рис.5.7б, если предположить, что при температуре  $T_a$  скачком увеличивается длина пробега вторичных электронов  $\lambda$ . Обнаруженное изменение длины пробега вторичных электронов  $\lambda$  при  $T = T_a$  можно объяснить следующим образом. Перед выходом из мишени вторичные электроны испытывают ослабление потока в упругих и неупругих взаимодействиях с электронами и атомами мишени. Длина свободного пробега вторичных электронов

$$\lambda = (n_0 \sigma)^{-1} \quad (5.20)$$

определяется сечением ослабления  $\sigma$ . Известно, что для возбужденных электронов проводимости в металлических кристаллах сечение  $\sigma_{cr}$  существенно меньше соответствующего сечения  $\sigma_{am}$  ослабления потока электронов в аморфном твердом теле. А именно,

$$\sigma_{cr}/\sigma_{am} = \Theta/Ms^2 < 1, \quad (5.21)$$

где  $\Theta = kT$  – температура решетки,  $M$  – масса атома мишени,  $s$  – скорость звука (Займан 1966). Это остается справедливым для поликристаллических металлов с достаточно большим размером зерен кристаллитов. Очевидно, что отмеченное различие в сечениях  $\sigma$  для электронов, возбуждаемых в твердых телах различной структуры должно проявляться в явлениях, где важную роль играет транспорт возбужденных электронов. Так, например, различие в сечениях  $\sigma$  для возбужденных электронов в кристаллических и аморфных твердых телах использовалось при интерпретации образования треков в аморфных металлах при бомбардировке их быстрыми тяжелыми ионами. Для рассматриваемой здесь кинетической ионно-электронной эмиссии

транспорт вторичных электронов имеет первостепенное значение. Как уже отмечалось выше, отжиг радиационных нарушений в графите приводит к переходу поверхностного слоя, разупорядоченного высокодозным облучением при температурах, близких к комнатной, в относительно упорядоченное состояние при  $T > T_a$ . Это приводит в свою очередь к росту  $\lambda$  и, соответственно, скачку  $\gamma$  при  $T = T_a$  из-за уменьшения сечения ослабления электронного потока в решетке графита при ее упорядочении. Следующие эксперименты по исследованию энергетических закономерностей выхода электронов в различных температурных режимах облучения позволили получать данные о критических значениях степени первичных радиационных повреждений, ответственных за аморфизацию поверхностного слоя в зависимости от энергии и типа бомбардирующего иона, см. ниже главу 6.

### 5.3. Эмиссия электронов из упорядоченных твердых тел

Первое объяснение влияния упорядоченного строения твердого тела на КИЭЭ было дано Одинцовым (1963) исходя из модели прозрачности кристалла по отношению к падающему пучку, т.е. из предположения, что анизотропный характер зависимости  $\gamma(\theta)$  обусловлен различной вероятностью столкновений иона с атомами поверхностных слоев мишени. Коэффициент КИЭЭ в теории Одинцова определяется выражением

$$\gamma = \sum_i \beta_i(\theta) \frac{\bar{E}_i(\theta) S_i(\theta)}{A_0 \cos \theta}, \quad (5.22)$$

где  $\theta$  - угол падения ионов на мишень относительно нормали к поверхности,  $\beta_i(\theta)$  – коэффициенты пропорциональности (число электронов, испускаемых на один эВ), определяемые из экспериментальных данных при малых  $\theta$   $S_i(\theta)$  – площадь открытых сфер в  $i$  – том слое,  $\bar{E}_i$  – средняя передача энергии в упругом столкновении,

$A_0$  – площадь поверхности элементарного объема, трансляцией которого можно получить весь кристалл. Недостатком теории Одинцова является пропорциональность  $\gamma$  упруго переданной энергии, использование сечения твердых сфер, как для эмиссии электронов, так и для вычисления “прозрачности” (тогда как сечение рассеяния меньше, чем сечение ионизации), пренебрежение всеми столкновениями иона с атомами мишени, кроме первого, наличие коэффициентов, взятых из эксперимента. Особенностью феноменологической формулы Одинцова является то, что она не связана с конкретным механизмом возбуждения электронов, описывает анизотропию эмиссии в целом, и впервые позволила увидеть атомную “прозрачность” кристалла через электронную эмиссию, см. выше рис. 4.7, где сплошные линии представляют собой расчетные зависимости Одинцова. Соотношение между анизотропией “прозрачности” кристалла по отношению к падающему пучку ионов и теорией КИЭЭ для неупорядоченных сред, описанной выше в разделе 5.1, установил Мартыненко (1966). Коэффициент КИЭЭ полагается равным

$$\gamma = \sum_i w e^{-x/\lambda} P_i, \quad (5.23)$$

где  $P_i$  – вероятность ионизации в  $i$  – том слое.

Вероятность ионизации при облучении ионами верхнего слоя атомов кристалла

$$P_0 = \frac{\sigma_e(v_0)}{S \cos \theta}, \quad (5.24)$$

где  $S$  – поверхность, приходящаяся на один атом.

Определение вероятности ионизации в последующих слоях производится, принимая во внимание перераспределение потока бомбардирующих частиц вследствие упругих столкновений в верхнем слое. Анализ рассеяния параллельного потока частиц на конечных, т.е. сравнимых с межатомными, расстояниях показывает, что на плоскости, находящейся на расстоянии  $d$  позади рассеивающего атома, в случае, когда  $M_1 < M_2$ , имеется область тени с радиусом  $R_T$ , куда рассеянные частицы попасть не могут, см. рис. 5.8. На границе тени интенсивность

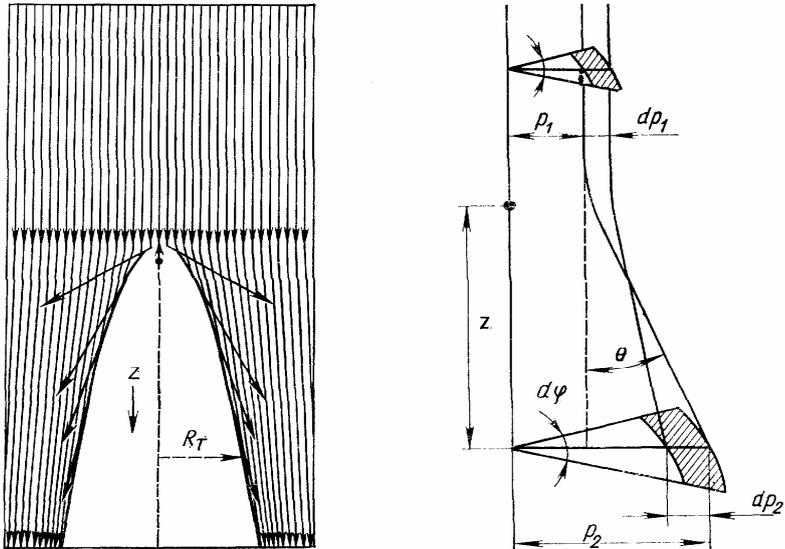


Рис.5.8. Схема образования тени позади рассеивающего атома

рассеянных частиц может заметно превышать интенсивность частиц в невозмущенном потоке. Перераспределение потока частиц на рассеивающем центре и радиус тени определяются законом рассеяния, т.е. зависимостью угла рассеяния от прицельного параметра столкновения, которая в свою очередь определяется потенциалом взаимодействия.

Действительно, если потенциал межатомного взаимодействия является потенциалом отталкивания, то с уменьшением прицельного параметра столкновения налетающего иона относительно рассеивающего атома угол отклонения иона возрастает. Поэтому расстояние от эпицентра до некоторой точки на плоскости уменьшается не до нуля, а лишь до некоторого расстояния – радиуса тени, после чего начинает возрастать. Для обратноквадратичного потенциала, определяемого формулами (2.7) и (2.8)

$$R_T = 1.5d (\pi A/E_0 d^2)^{1/3}. \quad (5.25)$$

С учетом экранирования атомов последующих слоев, попадающих в тень позади верхнего атома кристалла

$$\gamma(\theta) = \sigma_e(v_0) \sum_i e^{-x/\lambda} F(\delta_i, R_T), \quad (5.26)$$

где  $\delta_i$  - проекция расстояния между экранирующим и экранируемым атомами на плоскость, перпендикулярную направлению движения иона. Для атомов второго слоя функция

$$F = \begin{cases} 0 & \text{при } \delta < R_T - 0.9p_1, \\ 0.56 + \frac{\delta - R_T}{1.6p_1} & \text{при } R_T - 0.9p_1 < \delta < R_T + 0.7p_1, \\ 1 & \text{при } \delta > R_T + 0.7p_1, \end{cases} \quad (5.27)$$

где  $p_1$  – прицельный параметр столкновения, приводящего к ионизации. На рис.5.9 приведено сравнение данных эксперимента и теории с учетом влияния тепловых колебаний атомов решетки кристалла.

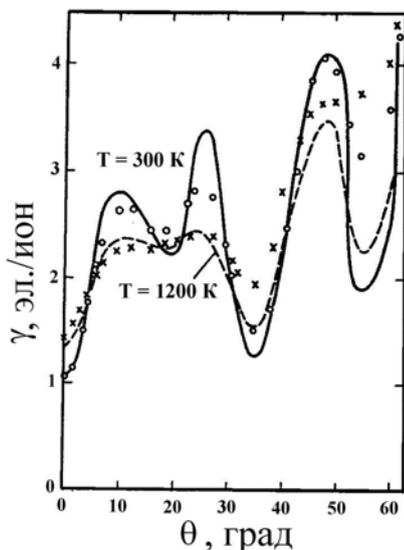


Рис.5.9. Сравнение экспериментальных зависимостей  $\gamma$  от угла  $\theta$  падения ионов  $\text{Ag}^+$  с энергией 30 кэВ на грань (100) Cu, полученных при двух температурах мишени с теорией Мартыненко (сплошные линии)

В качестве примера анализа транспорта вторичных электронов в твердом теле с упорядоченным расположением атомов рассмотрим ситуацию с высокоориентированным пиролизическим графитом (в англоязычной терминологии - highly oriented pyrolytic graphite (HOPG)). Он характеризуется высокой степенью трехмерного упорядочения по

сравнению с другими углеродными материалами. Его кристаллическая структура наиболее близка к структуре природного монокристалла графита (см. рис.2.13а и раздел 5.2), и он обладает наиболее сильной анизотропией физических свойств по сравнению с другими искусственными графитами. При исследовании угловых зависимостей коэффициента  $\gamma$  ионно-электронной эмиссии при облучении грани (001) высокоориентированного пирографита марки УПВ-1Т ионами молекулярного азота  $N_2^+$  энергии 30 кэВ при температурах, меньших температуры  $T_a$  отжига радиационных нарушений ( $T < T_a$ ), и больших  $T_a$  было установлено следующее. Характерный скачок выхода электронов, наблюдающийся для многих углеродных исходно поликристаллических материалов при некоторой температуре отжига  $T_a$  (см. рисунки 4.9 и 5.4) для высокоориентированного пирографита наблюдается только в интервале углов падения ионов  $\theta \leq 30^\circ$ . При увеличении  $\theta \geq 30^\circ$  при  $T > T_a$  выход электронов уменьшается по сравнению со случаем облучения при  $T < T_a$ , см. рис. 5.10. Выше уже упоминалось об анизотропии физических свойств природного кристалла графита и близкого к нему квазикристалла высокоориентированного пирографита. В частности, проводимость в направлении оси  $c$  (т.е. перпендикулярно слоям гексагонов, см. рис.2.13а) примерно в 1000 раз меньше, чем в направлениях, перпендикулярных оси  $c$  (т.е. в направлениях, параллельных гексагонным слоям атомов углерода). Поскольку можно предположить, что транспорт вторичных электронов в твердых телах коррелирует с проводимостью, то при повышенных температурах ( $T > T_a$ ) увеличение угла падения ионов  $\theta$  и



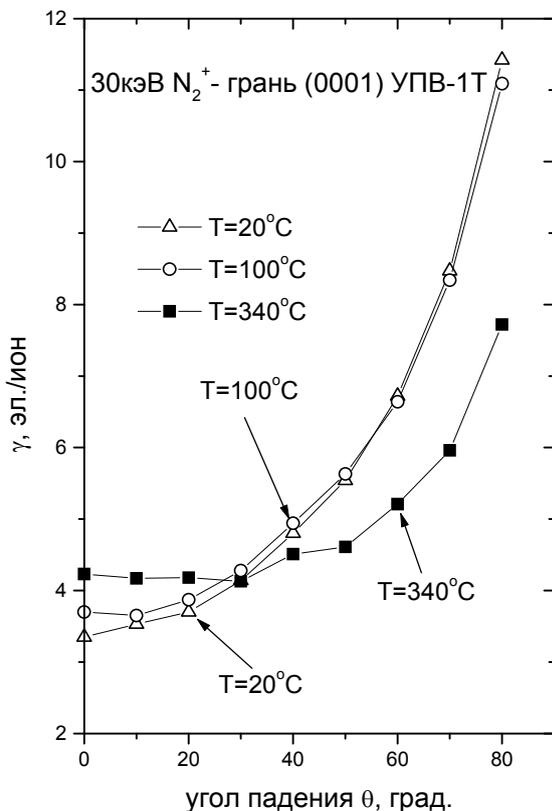


Рис. 5.10. Зависимости  $\gamma$  от угла падения ионов на грань (0001)УПВ-1Т при трех различных температурах облучения

постепенный переход поверхностного слоя облучаемого образца УПВ-1Т (по данным дифракции быстрых электронов на отражение) от поликристаллической структуры (при  $\theta < 30^\circ$ ) к структуре текстурированного монокристаллического графита, из-за уменьшения степени первичных радиационных нарушений, приводит к уменьшению эффективной длины  $\lambda$  пробега вторичных электронов

в направлении выхода из мишени. Можно предположить, что соответствующая длина  $\lambda_{cr}$  пробега вторичных электронов меньше чем  $\lambda_{poly}$  поликристаллического состояния облученного поверхностного слоя УПВ-1Т и разница увеличивается по мере увеличения угла падения ионов. Действительно,  $\lambda_{poly}$  является усредненной по многим хаотически расположенным кристаллитам. Тот факт, что при  $\theta > 30^\circ$   $\lambda_{cr}$  становится меньше  $\lambda_{poly}$  и разница  $\Delta\lambda = \lambda_{poly} - \lambda_{cr}$  растет по мере увеличения  $\theta$ , определяет поведение  $\gamma(\theta)$  при  $T > T_a$ . В качестве примера на рис.5.11

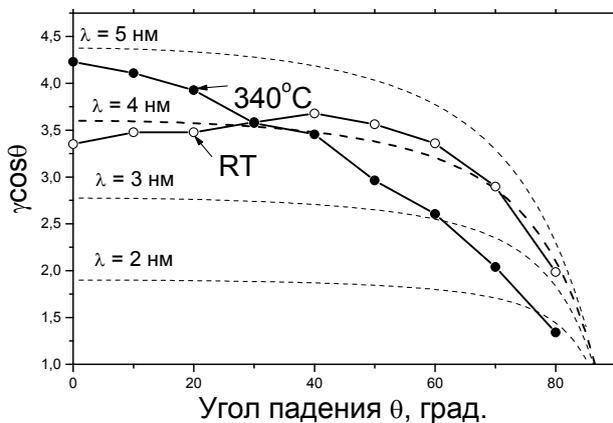


Рис. 5.11. Экспериментальные и расчетные угловые зависимости произведения ( $\gamma \cos \theta$ ) при двух различных температурах: комнатной (RT) и  $T = 340^\circ\text{C}$ ;  $R_e = 40$  нм

приведена угловая зависимость произведения ( $\gamma \cos \theta$ ) для  $T = 340^\circ\text{C}$ . Видно, что по мере увеличения  $\theta$  величина ( $\gamma \cos \theta$ ) монотонно убывает, тогда как согласно теории кинетической ионно-электронной эмиссии, если при прочих равных условиях  $\lambda = \text{const}$ , то и  $\gamma \cos \theta = \rho \sigma_e R_e w = \text{const}$  при  $\theta < \theta_c$ , где  $\theta_c$

определяется соотношением  $R_e \cos \theta_c = \lambda$ , см. формулу (5.19).

Такие ситуации наблюдаются как для изотропных графитов во всем исследованном интервале температур, при которых проводилось облучение (см. например, рис.5.7) так и для высокоориентированного пирографита, облучение которого производилось при  $T < T_a$  (рис.5.11).

Рекомендуемая литература:

1. Брусиловский Б.А. Кинетическая ионно-электронная эмиссия. М.: Энергоатомиздат, 1990.
2. Энциклопедическая серия. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводный том. Книга 3. Под ред. академика В.Е.Фортова. М.: "Наука / Интерпериодика", 2000. 574с. (VI. Взаимодействие НТП с конденсированным веществом, газом и электромагнитным полем).

## **ГЛАВА 6. ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ИОННО-ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ**

Кинетическая ионно-электронная эмиссия имеет многочисленные практические приложения. Она используется для контроля чистоты поверхности, регистрации малых ионных токов и потоков нейтральных частиц, в ионной оже-спектроскопии и электронной микроскопии, для создания электронных пучков большого сечения, при ионно-плазменной обработке материалов, а также для исследования структурно-фазовых превращений в объеме и на поверхности твердых тел. Ионно-электронная эмиссия с поверхности монокристаллов может применяться для изучения поверхностной релаксации, отжига и диффузии радиационных нарушений и закономерностей движения ионов в поверхностном слое. Она также позволяет выполнить точную юстировку низкоиндексных граней кристалла относительно ионного пучка.

### **6.1. Ионная оже – спектроскопия**

Наряду с методом ионно-нейтрализационной спектроскопии, использующим закономерности потенциальной ионно-электронной эмиссии и описанном в разделе 3.2, все более широкое распространение для элементного анализа поверхностного слоя материалов получает метод ионной оже-спектроскопии. В методе анализируют тонкую структуру высокоэнергетической части спектра вторичных электронов, обусловленную оже-процессами при заполнении вакансии во внутренней оболочке при соударении бомбардирующего иона с атомами твердого тела, см. рис.4.14. В

рассматриваемой области энергий ионов столкновения, приводящие к образованию вакансий являются медленными, поэтому реализуется квазимолекулярный механизм их образования. В зависимости от времени существования квазимолекулярной системы ( $10^{-15} - 10^{-16}$  с) и характерного времени оже-переходов ( $10^{-14} - 10^{-11}$  с) могут наблюдаться два типа спектров оже-электронов.

Первый, так называемый атомный, имеет место, когда большая часть оже-электронов образуется после распада квазимолекулы на отдельные атомы. Она имеет вид узких пиков, характерных для данного материала. Форма их не зависит от энергии ионов. Во втором случае, когда оже-переходы происходят прежде, чем сталкивающиеся частицы успевают разойтись, возникают квазимолекулярные спектры. Они представляют собой широкие полосы, форма которых зависит от энергии первичных ионов. В реальных условиях может наблюдаться и наложение указанных спектров.

Ионная оже-спектроскопия обладает избирательно высокой чувствительностью для обнаружения в поверхностном слое каких-либо заранее заданных элементов. Для квазимолекулярного механизма ионизации внутренних оболочек атома мишени необходимо, чтобы у первичной частицы существовали электронные уровни с такими же квантовыми числами  $n_r = n - l - 1$  и  $m$  и несколько меньшей энергией связи. Поэтому для эффективного обнаружения, например, углерода, целесообразно использовать ионы азота, кислорода и калия. Интенсивность потока оже-электронов  $I_{\text{оже}}$  определяется по формуле

$$I_{\text{оже}} = I_0 \omega n \sigma \lambda, \quad (6.1)$$

где  $I_0$  – ток первичных ионов;  $\lambda$  - глубина выхода оже-электронов;  $\sigma$  - сечение ионизации соответствующей оболочки;  $\omega$  - относительная вероятность безизлучательных оже-переходов;  $n$  – средняя концентрация атомов данного сорта в слое толщиной  $\lambda$ . Формула справедлива для условий когда пробег ионов много больше  $\lambda$ .

Сопоставление ионной оже-спектрометрии с электронной показывает, что первая обладает рядом преимуществ. К их числу относятся более высокая чувствительность по заданному элементу, отсутствие фона неупругоотраженных электронов, возможность использовать ионные пучки для воздействия на поверхность. По сравнению с вторичной ионной масс-спектрометрией ионная оже-спектроскопия также обладает некоторыми преимуществами. Спектры оже-электронов легче получить и проще интерпретировать. Кроме того, на масс-спектры вторичных ионов оказывают большое влияние матричные эффекты. Отметим, что метод ионной оже-спектроскопии не лишен недостатков: к их числу относится его не универсальный характер, разрушающее действие ионного пучка на поверхность, необходимость работать с первичными ионами достаточно высоких энергий.

## **6.2. Измерение слабых токов ионов и потоков нейтральных частиц**

Во многих методах и приборах требуются измерение в вакууме потоков нейтральных частиц и ионных токов  $10^{-16}$  А и менее. Наиболее часто для этих целей используют ионно-электронную эмиссию на специальном конверсионном электроде, электронный ток с которого затем усиливается и регистрируется.

Используют либо открытые электронные умножители типа ВЭУ-6, либо метод регистрации с помощью фотоэлектронных умножителей (ФЭУ). В последнем случае вторичные электроны укоряются и попадают на сцинтиллятор, установленный на входном окне ФЭУ. Сцинтиллятор и ФЭУ часто заменяются на полупроводниковый детектор, образующиеся при том заряды регистрируются зарядочувствительным усилителем. Получить количественную информацию с помощью аппаратуры, где регистрируются выходные токи электронных умножителей, очень трудно, поскольку коэффициент ионно-электронной эмиссии, как показано в главах 4 и 5, зависит от многих параметров. В этой связи широкое распространение получил метод измерения слабых потоков частиц, основанный на регистрации отдельных импульсов.

### **6.3. Растровая ионная микроскопия**

В связи с развитием техники фокусированных ионных пучков в аналитических приборах с такими пучками используется режим растровой ионной микроскопии. Растровая ионная микроскопия (РИМ) имеет по сравнению с обычной растровой электронной микроскопией (РЭМ) ряд преимуществ по контрасту изображения и z-контрасту. Это иллюстрирует рис. 6.1 на котором сопоставлены возможности различать элементы с различным атомным номером z (алюминия и золота) в РИМ с использованием пучка галлия энергии 30 кэВ и РЭМ с пучком электронов энергии 10 кэВ. Видно, что РИМ может дать существенно большее изменение контраста границы двух элементов за счет большего, чем в РЭМ изменения коэффициента  $\gamma$  КИЭЭ. Важно, что граница элементов в РИМ может быть более резкой, чем в

РЭМ, где граница раздела размывается из-за большого рассеяния электронов.

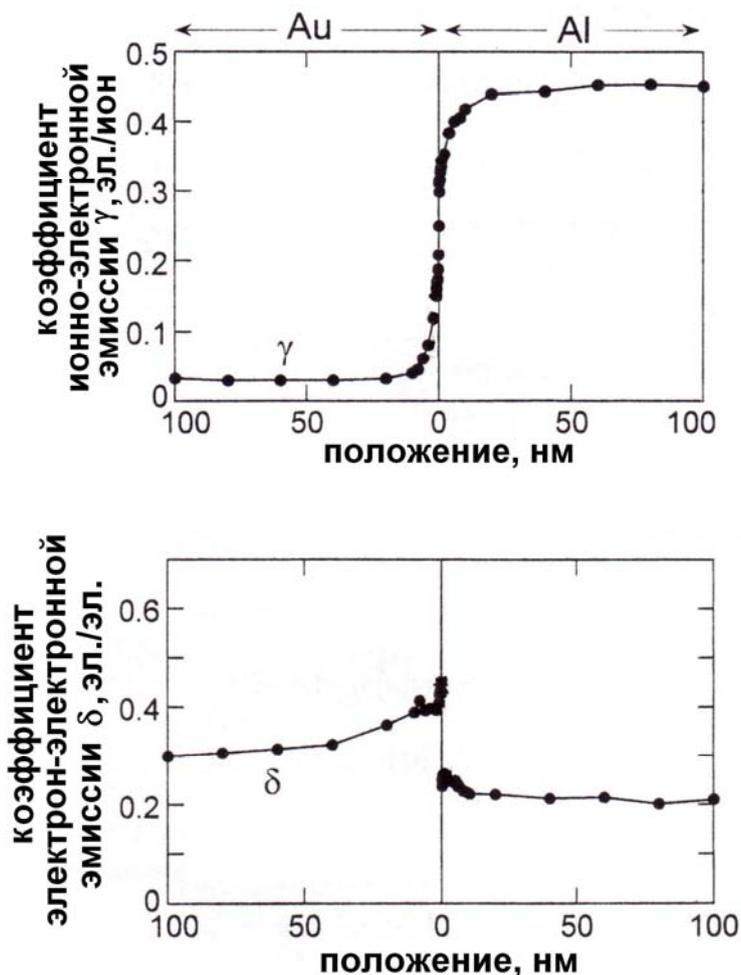


Рис.6.1. Компьютерное моделирование изменений коэффициента КЭЭ  $\gamma$  и вторичной электронной эмиссии  $\delta$  при сканировании границы раздела золота и алюминия соответственно пучком ионов галлия энергии 30 кэВ и электронов энергии 10 кэВ



#### 6.4. Определение флюенса облучения пучком многозарядных ионов

Флюенс ионного облучения  $F$  обычно определяют посредством измерения электрического заряда  $Q$  ионов с зарядом  $q$  (1,2,3, ...) ионов, прошедших в цилиндр Фарадея за время облучения  $t_{\text{обл}}$

$$F = \frac{Q}{eqS} = \frac{I}{eqS} \int_0^{t_{\text{обл}}} I_i dt, \quad (6.2)$$

где  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл,  $S$  – площадь облучаемой поверхности,  $I_i$  – значение тока ионов в процессе облучения.

В беспарационных ионных имплантерах с импульсными вакуумно-дуговыми ионными источниками (ВДИ) типа MEVVA, генерирующими многозарядные ионы, измерения заряда  $Q$  недостаточно для определения флюенса облучения. Необходимы также данные о зарядовом составе пучка ионов  $\varphi_q$  с зарядами  $q$ . Прямые измерения  $\varphi_q$  требуют масс-сепарации ионного пучка и выполняются на специальных стендах. При использовании ВДИ для технологических целей флюенс ионного облучения оценивают косвенно  $F=Q/\langle q \rangle$ , где средний заряд ионного пучка  $\langle q \rangle$  определяют по данным стендовых измерений  $\varphi_q$ , или путем последующих после облучения исследований поверхности методами элементного анализа, такими как рентгеновский микроанализ, электронная оже – спектрометрия и спектрометрия резерфордского обратного рассеяния.

Однако имеется возможность определения флюенса  $F$  посредством измерений ионного тока  $I_i$  и тока вторичных электронов  $I_e$ .

В интервале энергий в десятки кэВ коэффициент  $\gamma$  кинетической ионно-электронной эмиссии пропорционален скорости ионов, которая при одном и том же ускоряющем напряжении пропорциональна  $\sqrt{q}$ . Коэффициент  $\gamma_q$  для компонента ионного пучка с зарядом  $q$  можно представить в виде  $\gamma_q = \sqrt{q} \gamma_1$ , где  $\gamma_1$  – коэффициент КЭЭ для однозарядного компонента  $q = 1$  ионного пучка  $\varphi_q$ . Ток  $I_i$  и суммарный ток  $I_e$  определяются соотношениями:

$$I_i = e \langle q \rangle \varphi; \quad I_e = e \gamma_1 \langle q^{1/2} \rangle \varphi, \quad (6.3)$$

$$\text{где } \langle q \rangle = \frac{1}{\varphi} \sum_q q \varphi_q; \quad \langle q^{1/2} \rangle = \frac{1}{\varphi} \sum_q q^{1/2} \varphi_q;$$

$\varphi = \sum_q \varphi_q$  – суммарный поток ионов. Тогда для эффективного коэффициента КИЭЭ получается выражение:

$$\gamma = I_e/I_i = \gamma_1 \langle q^{1/2} \rangle / \langle q \rangle. \quad (6.4)$$

Оценки с использованием типичных распределений зарядового состава ионного пучка импульсных вакуумно – дуговых ионных источников показывают, что с погрешностью не более 1 – 3 %  $\langle q^{1/2} \rangle = \langle q \rangle^{1/2}$ . Учитывая это обстоятельство, можно заключить, что измерения коэффициента  $\gamma = I_e/I_i$  позволяют с относительно небольшой погрешностью определить средний заряд ионов, поскольку

$$\gamma \approx \gamma_1 / \langle q^{1/2} \rangle. \quad (6.5)$$

Тогда выражение (6.12) для флюенса ионного облучения принимает вид:

$$F = \frac{I}{e \gamma_i^2 S} \int_0^{t_{\text{обл}}} I_i \gamma^2 dt \approx \frac{Q \gamma^2}{\gamma_i^2}. \quad (6.6)$$

Таким образом, измерения ионного тока  $I_i$  и тока вторичных электронов  $I_e$ , испускаемых из поверхности мишени, позволяют определить флюенс ионного облучения непосредственно в процессе ионной имплантации. По сравнению с имеющимися косвенными методами оценки флюенса облучения рассмотренный метод отличается высокой оперативностью, возможностью непрерывного контроля флюенса облучения и простотой технической реализации. Измерение КЭЭ позволяет также исследовать динамические закономерности работы ионного ВДИ, контролировать средний заряд  $\langle q \rangle$  ионов в пучке и оценивать среднюю энергию имплантированных ионов  $\langle E_0 \rangle = \langle q \rangle \cdot U_{\text{уск.}}$ , где  $U_{\text{уск.}}$  – ускоряющее напряжение.

## 6.5. Контроль процессов ионного травления слоистых структур

Ионное травление микроструктур является одним из основных процессов в микроэлектронике. Ионный пучок производит распыление не только открытых окон на поверхности пластины, но и маски. Необходимо ограничивать процесс травления прежде, чем маска будет полностью удалена. Для контроля за процессом ионного травления может использоваться и используется мониторинг ионно-электронной эмиссии, которая изменяется скачкообразно при переходе травления от одного к другому поверхностному слою.

## 6.6. Определение радиационной стойкости углеродных материалов

Как отмечалось в разделе 2.8, в связи с широким применением углеродных материалов в ракетно-космической технике, ядерных и термоядерных реакторах большое внимание уделяют исследованиям их поведения в радиационных полях различной природы (электромагнитные поля, потоки нейтронов и заряженных частиц). Облучение ионами атомов относительно больших масс (C, N, Ne, Ar) позволяет за небольшие промежутки времени достигать высоких уровней радиационного повреждения, более чем достаточных для разупорядочения углеродных материалов. Закономерности кинетической ионно-электронной эмиссии углеродных материалов позволяют разработать методику определения критического уровня радиационных нарушений, вызывающего разупорядочение структуры материала. Методика основана на том, что зависимость аморфной фракции  $f_a$  в материале от уровня радиационных нарушений может быть описана ступенчатой функцией типа *erf* – функции. А именно, для  $f_a$  характерной является ступенчатая зависимость от уровня или дозы радиационных нарушений  $v$ , определяемых числом смещений на атом (СНА или  $dra$ ). Если эту зависимость представить *erf*-функцией

$$f_a = \frac{1}{2} \{1 + \operatorname{erf} [(v - v_a) / k]\}, \quad (6.7)$$

то  $v_a$  имеет смысл критической дозы аморфизации с масштабным коэффициентом  $k$ .

Рис.6.2 демонстрирует экспериментально измеренную энергетическую зависимость отношения  $\gamma_{HT}/\gamma_{RT}$  (где  $HT$  соответствует температурам  $T > T_a$ ) при нормальном падении ионов на

поликристаллическую графитовую мишень и расчетную зависимость (см. формулу (5.15))

$$\frac{\gamma_{HT}}{\gamma_{RT}} = \frac{\lambda_{poly} [1 - \lambda_{poly} / R_e (1 - \exp(-R_e / \lambda_{HT}))]}{\lambda_{RT} [1 - \lambda_{RT} / R_e (1 - \exp(-R_e / \lambda_{RT}))]}, \quad (6.8)$$

которая по зависимости  $\lambda_{RT}(v) = \lambda_{poly} - f_a \cdot (\lambda_{poly} - \lambda_a)$  подобрана с наилучшим соответствием к эксперименту.

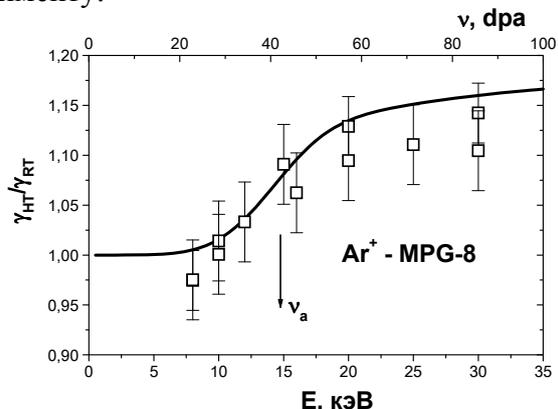


Рис. 6.2. Энергетическая зависимость отношения коэффициентов ионно-электронной эмиссии при повышенной ( $HT = 400^{\circ}C$ ) и комнатной ( $RT$ ) температурах. Сплошные линии – расчет

Сопоставление расчетов энергетических зависимостей  $\gamma(E)$  с использованием зависимости аморфной фракции от уровня первичных радиационных нарушений ( $dpa$ ) в виде  $erf$  – функции с экспериментом позволяют оценить пороговые значения  $dpa$  аморфизации графита при ионном облучении.

Рекомендуемая литература:

1. Брусиловский Б.А. Кинетическая ионно-электронная эмиссия. М.: Энергоатомиздат, 1990.

Учебное пособие

Анатолий Михайлович Борисов,

Евгения Сергеевна Машкова

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ИОННО-  
ЛУЧЕВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ.**

**I. ИОННО-ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ**

Работа поступила в ОНТИ 26 апреля 2011 г.

Формат 60×84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>. Бумага офсетная.

Печать цифровая. Тираж 70 экз. Заказ № Т-109-11.

Отпечатано с материалов, предоставленных автором, в типографии «КДУ».  
Тел./факс (495) 939-44-91; [www.kdu.ru](http://www.kdu.ru); e-mail: [press@kdu.ru](mailto:press@kdu.ru)