

ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАССЕЯНИЙ ВЫБИТЫХ АТОМОВ В КАСКАДЕ СТОЛКНОВЕНИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ РЕЛЬЕФА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ АМОРФНОЙ МИШЕНИ Si ИОНАМИ Ar С ЭНЕРГИЕЙ 1 кэВ

А.А. Губарев

Донецкий национальный университет

Украина

Поступила в редакцию 29.01.2013

Методом статистического моделирования в приближении парных столкновений исследовано распределение рассеяний в каскадах столкновений выбитых атомов мишени при облучении аморфного Si ионами Ar с энергией 1 кэВ. Обнаружена сильная зависимость от глубины среднего косинуса угла между направлением движения выбитого атома после очередного рассеяния и направлением падения первичного иона. Выполненный в предположении больших углов падения, численный анализ влияния обнаруженной зависимости на формирование рельефа позволил идентифицировать основную особенность в распределении рассеяний, ответственную за отсутствие возникновения рельефа при динамическом моделировании без учета переноса атомов под поверхностью мишени.

Ключевые слова: Статистическое моделирование, приближение парных столкновений, рельеф поверхности, ионное распыление.

ВПЛИВ РОЗПОДІЛУ РОЗСІЮВАНЬ ВИБИТИХ АТОМІВ У КАСКАДІ ЗІТКНЕНЬ НА ФОРМУВАННЯ РЕЛЬЄФУ ПРИ ОПРОМІНЕННІ АМОРФНОЇ МІШЕНІ Si ІОНАМИ Ar З ЕНЕРГІЄЮ 1 кэВ

А.А. Губарев

Методом статистичного моделювання в наближенні парних зіткнень досліджено розподіл розсіювань у каскадах зіткнень вибитих атомів мішені при опроміненні аморфного Si іонами Ar з енергією 1 кеВ. Виявлено сильну залежність від глибини середнього косинуса кута між напрямком руху вибитого атома після чергового розсіювання і напрямком падіння первинного іона. Виконаний у припущенні великих кутів падіння, чисельний аналіз впливу виявленої залежності на формування рельєфу дозволив ідентифікувати основну особливість у розподілу розсіювань, відповідальну за відсутність виникнення рельєфу при динамічному моделюванні без обліку переносу атомів під поверхнею мішені.

Ключові слова: Статистичне моделювання, наближення парних зіткнень, рельєф поверхні, іонне розпилення.

INFLUENCE OF DISTRIBUTION OF SCATTERING IN COLLISION CASCADES OF RECOIL ATOMS ON PATTERN FORMATION OF AMORPHOUS Si SURFACE UNDER IRRADIATION OF Ar ION WITH ENERGY 1 keV

A.A. Gubarev

The distribution of scatterings in collision cascades of recoil atoms under 1 keV Ar ion bombardment has been investigated by simulation in binary collision approximation. The strong dependency of mean cosine of angle between recoil atom direction and primary ion one has been found. The numerical calculation in the approximation of large incidence angle has revealed the main feature in distribution of scatterings which is responsible for absence of pattern formation at the dynamic simulation without the account of transfer of atoms under the surface of target.

Keywords: Simulation, binary collision approximation, surface pattern, ion beam sputtering.

ВВЕДЕНИЕ

Облучение изначальной плоской поверхности твердого тела пучком ионов может приводить к формированию волнообразного рельефа (см. обзорные работы [1, 2]). При малых углах падения (θ), отсчитываемых от нормали

к первоначальной плоской поверхности образца, волновой вектор рельефа параллелен проекции направляющего вектора пучка на поверхность мишени (\parallel -рельеф). При превышении некоторого угла θ_c волновой вектор перпендикулярен проекции направляющего

вектора пучка (\perp -волны). В экспериментах, в зависимости от мишени, типа первичного иона и его энергии, θ_c лежит в диапазоне $55^\circ - 80^\circ$ [3, 4, 5]. В работе [6] была предложена модель, объясняющая изменение направления волнового вектора рельефа с изменением θ . В этой модели волнообразный рельеф формировался в результате конкуренции поверхностной диффузии, приводящей к сглаживанию рельефа, и зависящей от локальной кривизны поверхности скорости травления, приводящей к увеличению неровности. Обычно в работах посвященных исследованию формирования рельефа, и в частности [6], выбирают правую систему координат, в которой ось X направлена вдоль проекции направляющего вектора пучка на первоначальную плоскую поверхность мишени, ось Z направлена перпендикулярно первоначальной поверхности мишени в вакуум; через $h(x, y)$ обозначают высоту поверхности. Для получения выражения для локальной скорости травления поверхности в [6] предположено, что количество распыленных частиц пропорционально произведению средней упруго выделенной в каскаде столкновений энергии на поверхности мишени, $E(x, y)$, и плотности пучка первичных ионов на поверхности образца в данной точке, $J = J_0 \Phi(x, y)$, (то есть с учетом локального угла наклона поверхности)

$$v_{\text{ВН}} = \Lambda J_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} E(x, y) \Phi(x, y) dx dy, \quad (1)$$

где J_0 – плотность ионного пучка при нормальном падении на плоскую мишень, Λ – постоянная пропорциональности (учитывающая, в частности, поверхностную энергию связи). Распределение средней упруго выделенной энергии предполагалось нормальным и задавалось средней глубиной вдоль направления падения первичного иона (a) и страглингами: вдоль направления падения первичного иона (α) и в перпендикулярном направлении (β). При падении первичных ионов по нормали к исходной плоской поверхности распределение имело вид

$$E(x, y, z) = \frac{E_0}{(2\pi)^{3/2} \alpha \beta^2} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{(z-h+a)^2}{2\alpha^2} - \frac{x^2 + y^2}{2\beta^2}\right), \quad (2)$$

где E_0 – полная средняя упруго выделенная в каскаде столкновений энергия; первичный ион пересекает поверхность в точке $(0, 0, h)$. Предположив, также, что в локальной системе координат, в которой ось z' направлена вдоль локальной нормали в вакуум, а ось x' лежит в плоскости параллельной локальной нормали и направляющему вектору пучка, поверхность можно аппроксимировать функцией

$$h = -\frac{1}{2} \left(\frac{x'^2}{R_x} + \frac{y'^2}{R_y} \right), \quad (3)$$

$R_x \gg a$, $R_y \gg a$ и неровность поверхности мала, в [6] разложением (1) по малым параметрам a/R_x и a/R_y получено линейное уравнение, описывающее эволюцию поверхности на начальных этапах формирования рельефа

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} = & -v_0(\theta) + v'_0(\theta) \frac{\partial h}{\partial x} + v_x(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial^2 x} + \\ & + v_y(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial^2 y} - B \nabla^2 \nabla^2 h, \end{aligned} \quad (4)$$

где коэффициенты $v_0(\theta)$, $v_x(\theta)$, $v_y(\theta)$ выражаются через параметры распределения (2); дополнительно включенный в правую часть уравнения член $-B \nabla^2 \nabla^2 h$ описывает поверхностную диффузию. На поверхности формируется волнообразный рельеф, если по крайней мере один из коэффициентов v_x или v_y имеет отрицательное значение, причем формируется \parallel -рельеф, если $v_x < v_y$, и \perp -рельеф, если $v_x > v_y$. Коэффициент v_y имеет отрицательную величину во всем диапазоне углов падения, тогда как v_x отрицателен при малых θ и положителен при больших θ . Для некоторых значений параметров распределения выделенной энергии при малых θ выполняется $v_x < v_y$. С увеличением θ коэффициент v_x начинает возрастать, сравнивается в некоторой точке $\theta_c^{\text{ВН}}$ с v_y и далее оказывается больше. При $\theta = \theta_c^{\text{ВН}}$ происходит изменение ориентации волнового рельефа.

Результаты моделирования в приближении парных столкновений (ППС) облучения мишени Си ионами Ag с энергией 5 кэВ указывали на отклонение распределения выделен-

ной энергии от (2) [7]. Однако выполненный в [7] учет отклонения распределения выделенной энергии от предполагаемого в [6], показывает, что качественно картина не меняется: при малых углах падения ионов должны формироваться \parallel -волны, а при больших углах – \perp -волны. В [5] продолжено изучение распределения упруго выделенной энергии при помощи моделирования в ППС (в пакете SRIM). Однако, как и в [7], детально не исследовались латеральные распределения средней упруго выделенной энергии (в частности, зависимость латерального страгглинга β от расстояния до поверхности). В [8] при помощи моделирования методом молекулярной динамики получено, что поверхности постоянной величины упруго выделенной энергии имеют форму эллипсоидов, усеченных поверхностью, а зависимость от угла падения сводится к повороту эллипсоидов. То есть выполненный в [8] качественный анализ подтверждает предположения [6] относительно распределения упруго выделенной в каскадах столкновений энергии.

Учет при динамическом моделировании переноса атомов под поверхностью мишени приводил к формированию \parallel -рельефа при облучении Si ионами Ar 1 кэВ [9]. Однако, если перенос атомов не учитывался, то есть в расчет принимались те же физические процессы, что и в модели [6], то формирование \parallel -волн в диапазоне углов падения $20^\circ - 45^\circ$ получено не было [9, 10]. Вместо \parallel -волн на поверхности формируется неупорядоченный холмообразный рельеф малой амплитуды, появление которого ожидается в том случае, когда $v_x \approx v_y$. В данной работе, на примере облучения поверхности аморфного Si ионами Ar 1 кэВ, выясняется какая особенность в распределении рассеяний выбитых атомов в каскаде столкновений может быть ответственной за отсутствие формирования \parallel -волн при динамическом моделировании.

При динамическом моделировании в ППС формирования рельефа используется изотропный (сферический) потенциальный барьер [9, 10, 11, 12]. В этом приближении достигший поверхности выбитый атом считается расплывшимся, если его энергия больше поверхностной энергии связи E_s , а на-

правляющий вектор скорости направлен в вакуум. Для расчета формирования рельефа поверхности недостаточно распределения рассеяний атомов, полученного при моделировании облучения мишени, ограниченной некоторой фиксированной поверхностью. Учитывая результаты [8], в разделе 1 исследуются распределения в неограниченном пространстве. В разделе 2 полученные аппроксимации используются для анализа формирования \parallel -рельефа в диапазоне углов $20^\circ - 45^\circ$.

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАССЕЙНИЙ АТОМОВ В КАСКАДЕ СТОЛКНОВЕНИЙ

1.1. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для исследования распределения рассеяний атомов в каскадах столкновений использовалось статическое (без модификации мишени) моделирование в ППС при помощи программы SRGr [10]. В основе программы лежит модель случайной мишени [13]; в качестве потенциала межатомного взаимодействия используется экранированный кулоновский потенциал Циглера-Бирзака-Литмарка [14]. Детали расчета каскадов столкновений приведены в [10]. Здесь кратко опишем модификации связанные с выполняемыми исследованиями в данной работе.

Ось \tilde{Z} направлена вдоль первоначальной скорости первичного иона. Точка первого столкновения первичного иона с атомом мишени распределена равномерно в кубической ячейке с ребрами: $[0, L]$ – вдоль оси \tilde{Z} , и $[-L/2, L/2]$ – вдоль осей \tilde{X} и \tilde{Y} , где L – длина ребра кубической ячейки, имеющей объем приходящийся на один атом мишени. Для краткости и ассоциации с облучением мишени, ограниченной поверхностью, будем \tilde{z} называть глубиной. Расстояние от оси до точки рассеяния атома обозначим через ρ ; косинус угла между осью и направлением движения атома после рассеяния – через χ . При получении статистических оценок моментов и гистограмм распределений учитывались выбитые атомы, имеющие после очередного рассеяния энергию большую E_s . В дальнейшем при описании это не будет оговариваться. Для получения гистограмм распределения числа рассеянных атомов использовалась группировка с постоянным шагом $\Delta z = 0.2$ нм вдоль

оси (границы “слоев” $Z_i = i\Delta z$), $\Delta\rho = 0.25$ нм по ρ (границы “цилиндров” $\rho_j = j\Delta\rho$) и $\Delta\tilde{n} = 0.05$ по χ (границы промежутков $\tilde{n}_k = -1 + k\Delta\tilde{n}$, $k = 0.39$). Для оценки параметров плотности распределения числа рассеянных атомов от глубины вычислялись выборочные моменты $\hat{\alpha}^{(p)}[\tilde{z}] = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \tilde{z}_i^p$, $p = 1, \dots, 4$,

где $\tilde{z}_i - \tilde{z}$ – координата точки рассеяния атома, M – общее количество рассеяний атомов. Для оценки параметров латерального распределения среднего числа рассеяний атомов для каждого слоя рассчитывались оценки латеральных

$$\hat{\alpha}_i^{(1)} = \frac{1}{M_i} \sum_{l=1}^{M_i} \rho_l, \quad \hat{\alpha}_i^{(2)} = \frac{1}{M_i} \sum_{l=1}^{M_i} \rho_l^2, \\ \hat{\alpha}_i^{(3)} = \frac{1}{M_i} \sum_{l=1}^{M_i} \rho_l^3, \quad (5)$$

где M_i – общее количество рассеяний атомов в i -ом слое, то есть промежутке $Z_i \leq z < Z_{i+1}$. А для оценки распределения c – оценки моментов

$$\hat{\alpha}[\chi]_{i,j}^{(1)} = \frac{1}{L_{ij}} \sum_{l=1}^{L_{ij}} c_l, \quad \hat{\alpha}[\chi]_{i,j}^{(2)} = \frac{1}{L_{ij}} \sum_{l=1}^{L_{ij}} c_l^2, \quad (6)$$

где c_l – косинус угла между направлением атома после рассеяния и осью \tilde{Z} , L_{ij} – общее количество рассеяний атомов в промежутке $Z_i \leq z < Z_{i+1}$, $\rho_i \leq \rho < \rho_{i+1}$.

Плотность мишени полагалась равной 2.321 г/см³, объемная энергия связи – равной нулю, поверхностная энергия связи – 6.0 эВ. Значение поверхностной энергии связи больше обычно задаваемого при моделировании распыления при использовании плоского потенциального барьера значения 4.7 эВ [13]. Слегка завышенное значение было выбрано для применяемого в [9] и данной работе сферического потенциального барьера с целью получать в диапазоне углов $20^\circ - 60^\circ$ значения коэффициента распыления, близкие к результатам работы программы TRIM [14], использующей плоский потенциальный барьер. Для вычисления оценок распределений было выполнено более 530 миллионов генераций каскадов столкновений.

1.2. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Полученное в результате моделирования распределение числа рассеянных атомов как функция плохо аппроксимируется нормальным распределением, но удовлетворительно бета-распределением первого типа

$$f_B(\tilde{z}) = \frac{a_1^{m_1} a_2^{m_2}}{(a_1 + a_2)^{m_1 + m_2 + 1} B(m_1 + 1, m_2 + 1)} \times \\ \times \left(1 + \frac{\tilde{z} - a}{a_1}\right)^{m_1} \left(1 - \frac{\tilde{z} - a}{a_2}\right)^{m_2}, \quad (7)$$

где $B(m_1, m_2)$ – β -функция Эйлера. (Причем при оценке параметров методом моментов в классе распределений Пирсона [15] искомому распределению соответствует β -распределение первого типа, а не распределение Пирсон IV, часто используемое для аппроксимации пробегов ионов в веществе, см., например, [16]). Однако аппроксимирующее β -распределение слишком быстро спадает при $\tilde{z} < 0$. Кроме этого при $\tilde{z} = 0$ полученная в результате моделирования эмпирическая плотность испытывает слабый разрыв. Для более точной аппроксимацией оказалась аппроксимация экспоненциальным распределением

$$f_E(\tilde{z}) = \alpha_e \exp(\alpha_e \tilde{z}), \quad \tilde{z} < 0. \quad (8)$$

На рис. 1 приведена аппроксимация результатов моделирования плотностью

$$f_p(\tilde{z}) = \begin{cases} C_B f_B(\tilde{z}), & \tilde{z} \geq 0, \\ C_E f_E(\tilde{z}), & \tilde{z} < 0. \end{cases} \quad (9)$$

Параметры плотности (9) подбирались методом наименьших квадратов с учетом усло-

вия нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} f_p(\tilde{z}) d\tilde{z} = 1$. Полученная

аппроксимация груба только при больших положительных значениях \tilde{z} (см. вставку (б) на рис. 1), которые не дают заметный вклад в распыление поверхности в диапазоне углов падения, рассматриваемых в данной работе.

При фиксированном \tilde{z} латеральное распределение числа рассеянных ионов хорошо аппроксимируется распределением

$$f_l(\rho | \tilde{z}) = \frac{\lambda(\tilde{z})}{2^{\mu/2} \Gamma\left(\frac{\mu}{2}\right)} \rho^{\mu-1} \times \beta^\mu(\tilde{z})$$

$$\times \exp\left(-\left(\frac{\rho}{\sqrt{2}\beta(\tilde{z})}\right)^{\lambda(\tilde{z})}\right), \quad (10)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера. Такое выражение для плотности взято для того, чтобы при некотором выборе значений параметров (а именно $\lambda = 2$ и $\mu = 2$) получить плотность двумерного нормального распределения в полярной системе координат. При оценке всех трех параметров этого распределения (μ , β и λ) по выборочным моментам (5) получаются трудно аппроксимируемые зависимости параметров от \tilde{z} , которые к тому же трудны при разложении, выполняемом в разделе 2. Однако удовлетворительную аппроксимацию можно получить, если считать, что μ имеет значение 2, если $\tilde{z} > 0$, и значение около 4.5, если $\tilde{z} < 0$, а остальные два параметра оценивать по первым двум выборочным моментам (5).

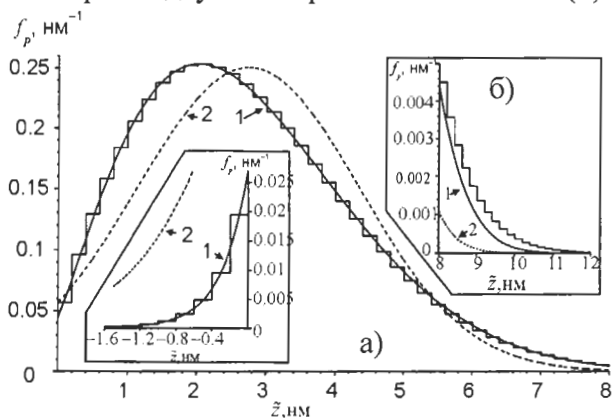


Рис. 1. Плотность числа рассеянных атомов от \tilde{z} : гистограмма – результат моделирования, сплошная линия 1 – результат аппроксимации плотностью f_p , линия 2 – результат аппроксимации плотностью нормального распределения. На вставке (а) приведено распределение при $\tilde{z} < 0$, на вставке (б) – при больших положительных значениях

На рис. 2 приведены статистические оценки параметров β , λ и их аппроксимации зависимостями

$$\beta(\tilde{z}) = \begin{cases} \beta_\infty - k_\beta \exp(-\alpha_\beta \tilde{z}), & \tilde{z} \geq 0, \\ \beta_0 + \beta_1 \tilde{z}, & \tilde{z} < 0; \end{cases}$$

$$\lambda(\tilde{z}) = \begin{cases} \lambda_\infty^+ - k_\lambda^+ \exp(-\alpha_\lambda^+ \tilde{z}), & \tilde{z} \geq 0, \\ \lambda_\infty^- - k_\lambda^- \exp(-\alpha_\lambda^- \tilde{z}), & \tilde{z} < 0; \end{cases} \quad (11)$$

где входящие в правые части параметры β_∞ , $k\beta_\infty$, λ_∞^+ являются постоянными, которые оценивались по результатам моделирования. При

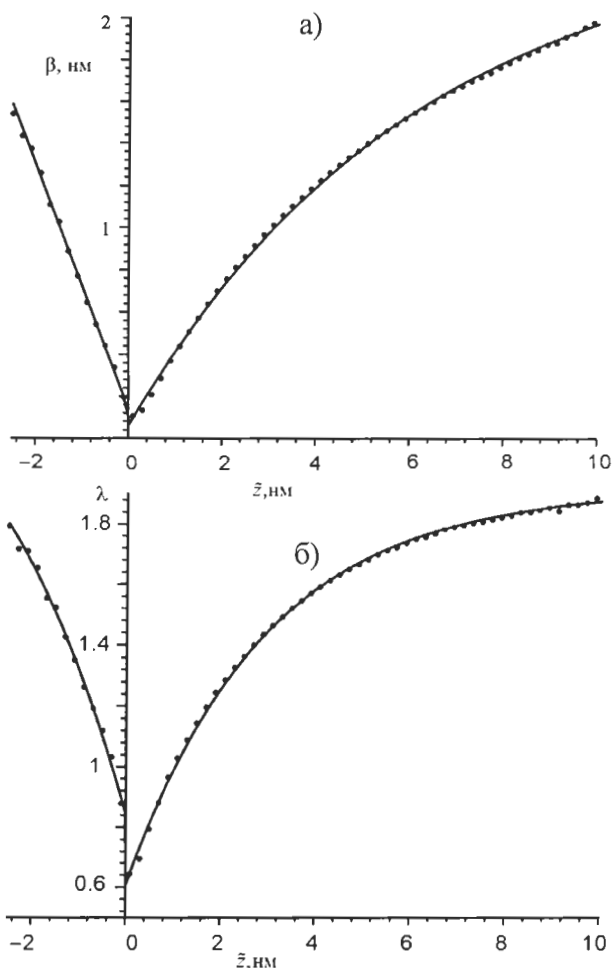


Рис. 2. Зависимость параметров β и λ от \tilde{z} , если $\mu = 4$ для $\tilde{z} < 0$, и $= 2$ для $\tilde{z} \geq 0$. Точками отображены результаты моделирования; сплошная линия – аппроксимация.

больших положительных \tilde{z} значение оценки параметра λ приближается к значению, которое соответствует нормальному распределению.

Плотность (10) с параметрами, имеющими вид (11), хорошо аппроксимирует результаты моделирования при всех значениях \tilde{z} за исключением близких к 0, см. рис. 3а и 3е, где приведены гистограммы и аппроксимации для значений \tilde{z} отстоящих от $\tilde{z} = 0$ на величину меньшую $L/2$ (≈ 0.135 нм). Однако при наклонном падении эта область дает малый вклад в распыление. С увеличением $|\tilde{z}|$ согласие быстро улучшается и сохраняется до самых больших значений $|\tilde{z}|$, см. рис. 3в) и рис. 3г), γ_2). При малых по абсолютной величине значениях $\tilde{z} < 0$ аппроксимации неудовлетворительны при значениях $\mu < 4$, а при $\tilde{z} \ll 0$ – неудовлетворительны при $\mu > 5$. При $4 \leq \mu \leq 5$ получаются аппроксимации достаточно хорошо согласующиеся с результатами моделирования, см. рис. 3г) – е) и рис. 3г₂) – е₂).

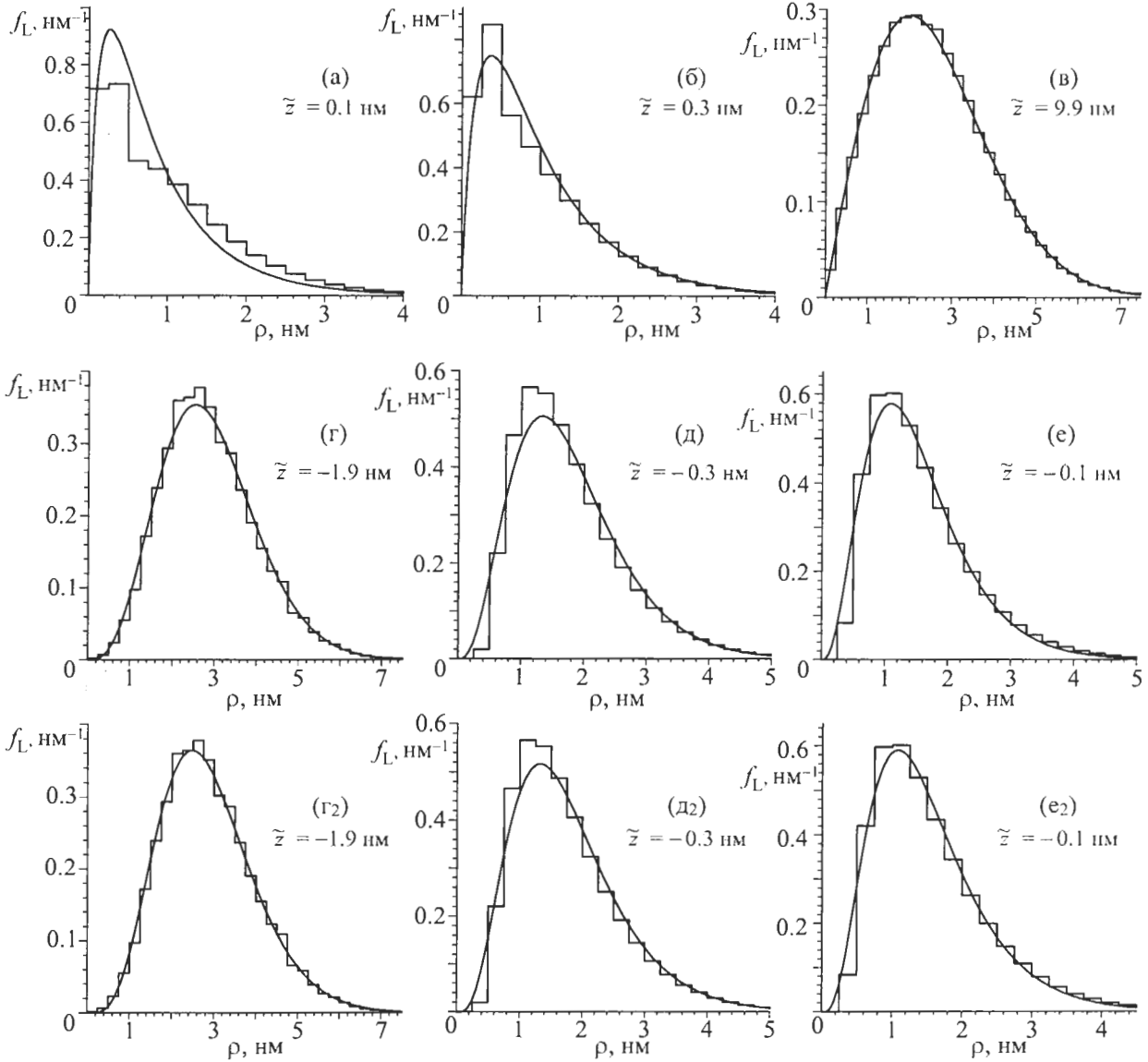


Рис. 3. Плотность распределения числа рассеянных ионов как функция ρ для различных значений \tilde{z} (значения приведены на рисунках). Гистограммы – результаты моделирования, линии – аппроксимации. На рис. (г), (д), (е) приведены результаты аппроксимации с $\mu = 4$; на рис. (г₂), (д₂), (е₂) – с $\mu = 5$.

За исключением малых значений \tilde{z} и ρ плотность распределения χ в некоторой точке мишени хорошо аппроксимируется

$$f_{\chi}(c) = \alpha(\rho)c^2 + \beta(\rho)c + \gamma(\rho), \quad -1 \leq c \leq 1, \quad \alpha/3 + \gamma = 1/2 \quad (12)$$

см. рис. 4, где приведены аппроксимации с коэффициентами α , β , γ найденными методом моментов по выборочным моментам (6). Общей закономерностью является увеличение среднего косинуса угла

$$\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho) = \int_{-1}^1 c f_{\chi}(c; \tilde{z}, \rho) dc$$

с увеличением \tilde{z} . Это объясняется тем, что при первом столкновении первичного иона с атомом мишени последний, рассеивается в направлении близком перпендикулярному к

направлению движения первичного иона. На рис. 4а) виден хорошо выраженный пик распределения χ при $\rho = 0.12$ нм вблизи косинуса 90° , соответствующий дальним столкновениям первичного иона и атома мишени. Дополнительно было выполнено моделирование, при котором в оценке распределения χ не учитывались первично выбитые атомы (ПВА). В этом случае пик распределения χ при нм слабо выражен. Так как массы Ar и Si близки, то, испытав при малых \tilde{z} близкое столкновение с атомом мишени, первичный ион не достигает больших глубин. Большие глубины достигают первичные ионы, испытавшие на малых глубинах только очень слабые дальние столкновения, в результате которых направление движения практически не

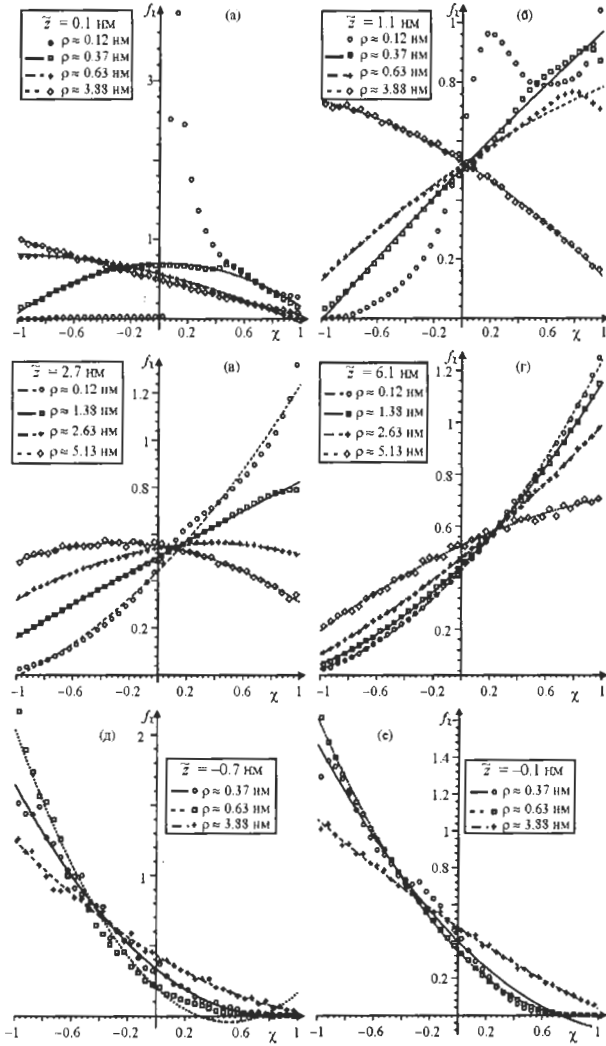


Рис. 4. Плотность распределения χ при некоторых значениях \tilde{z} и ρ . Символами указаны результаты моделирования, линиями – аппроксимации, параметры которых найдены методом моментов.

меняется. В результате потери энергии такими первичными ионами сечение столкновений становится таким, что на больших глубинах они выбивают атомы мишени в столкновениях близким к лобовым.

При $\tilde{z} < 0$ зависимость $\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho)$ может быть удовлетворительно описана смесью распределений, где одно распределение призвано описать пик, вызванный ПВА, а второе – медленное убывание при больших ρ

$$\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho) = \bar{\chi}_0(\tilde{z}) - \bar{\chi}_1(\tilde{z}) \left[\frac{1}{6} \frac{C_1(\tilde{z})}{\sigma_1(\tilde{z})} \left(\frac{\rho}{\sigma_1(\tilde{z})} \right)^3 e^{-\rho/\sigma_1(\tilde{z})} + \frac{1 - C_1(\tilde{z})}{\sigma_2(\tilde{z})} \frac{\rho}{\sigma_2(\tilde{z})} e^{-\rho/\sigma_2(\tilde{z})} \right]. \quad (13)$$

На рис. 5а) выборочно для некоторых глубин приведены результаты моделирования и их аппроксимация при помощи (13).

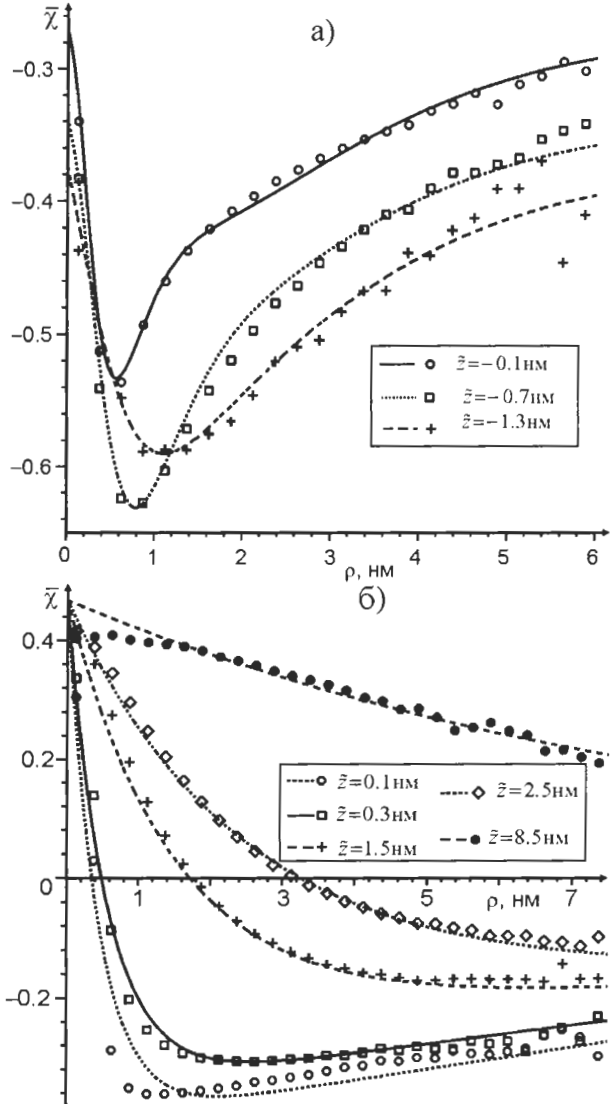


Рис. 5. Зависимость $\bar{\chi}$ от ρ и \tilde{z} : а) – при $\tilde{z} < 0$, б) – при $\tilde{z} > 0$. Символами показаны результаты моделирования, линиями – аппроксимация.

За исключением самых малых глубин (до глубин порядка L), при $\tilde{z} > 0$ зависимость $\bar{\chi}$ удовлетворительно аппроксимируется выражением

$$\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho) = (a_{c0} - b_c(\tilde{z})) \exp\left(-\frac{\rho}{\lambda_c(\tilde{z})}\right) + b_c(\tilde{z}) + a_{c2} \exp(-\alpha_c \tilde{z} \rho), \quad (14)$$

где $\lambda_n(\tilde{z}) = \lambda_{n0} + \lambda_{n1} \tilde{z}^k$, $b_c(\tilde{z}) = a_{c10} + a_{c11} \tilde{z}^5$. На рис. 5б) приведены результаты аппроксимации с коэффициентами $\lambda_n(\tilde{z}) = 0.41 + 6.5 \tilde{z}^{1.22}$ нм, $b_c = -0.55 + 0.27 \tilde{z}^{0.32}$, полученные при использовании $a_{c2} = 0.02$ нм⁻¹,

$\alpha_n = 0.8 \text{ нм}^{-1}$. На рис. 5б) видно, что отклонение аппроксимации от результатов моделирования наблюдаются при малых глубинах (глубинах до L ; линия, соответствующая $\tilde{z} = 0.1 \text{ нм}$), а также на больших глубинах (начиная с 2.5 нм) и малых ρ . Оценки показывают, что отклонение на больших глубинах и малых ρ не даёт заметный вклад в распыление, при углах падения в диапазоне $20^\circ - 50^\circ$, если амплитуда рельефа мала.

Выбранная в данной работе аппроксимация среднего косинуса не является универсальной и физически обоснованной. Это связано с тем, что с одной стороны, при достаточно низких энергиях первичных ионов задача не может быть исследована аналитически, а с другой стороны, аппроксимация должна быть достаточно точной и удобной для разложения по малым параметрам a/R_x и a/R_y .

На рис. 6 приведена зависимость $\langle \bar{\chi}(\tilde{z}) \rangle$ (сплошная линия), полученная усреднением результатов моделирования (символы о) и найденная по полученным аппроксимациям

$$\langle \bar{\chi}(z) \rangle_\rho = \int_0^{+\infty} \bar{\chi}(\tilde{z}, \rho) f_L(\rho | \tilde{z}) d\rho. \quad (15)$$

При отрицательных \tilde{z} усреднение по полученным аппроксимациям (15) хорошо соответствует результатам моделирования. При $\tilde{z} > 5 \text{ нм}$ (15) лежит незначительно выше результатов моделирования, что является дополнительным оправданием пренебрежения отклонениями аппроксимации $\langle \bar{\chi}(\tilde{z}) \rangle$ от результатов моделирования при больших \tilde{z} и малых ρ , которые отмечались выше. При $0 < \tilde{z} < 2$ усреднение (15) проходит заметно ниже результатов моделирования. Это связано, как с недостаточной точностью аппроксимации $\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho)$, так и с недостаточной точностью аппроксимации $f_L(\rho | \tilde{z})$. Для анализа формирования рельефа (в следующем разделе) приемлема такая аппроксимация с погрешностью, приводящей к усилению распыления из впадин. Поскольку, если и при такой аппроксимации формирование рельефа при наклонном падении не будет, то при более

точной аппроксимации формирования рельефа не будет тем более.

В целом, характерной особенностью является возрастание $\langle \bar{\chi}(\tilde{z}) \rangle_\rho$. Грубо эту зависимость можно описать функцией

$$\tilde{a}_c(\tilde{z}) = c_0 + (c_\infty - c_0)[1 - \exp(-\tilde{z}/\tilde{\lambda}_c)]. \quad (16)$$

На рис. 6 пунктиром построена такая грубая аппроксимация, которая в следующем разделе будет использована в простейшей модели, допускающей решение в аналитическом виде.

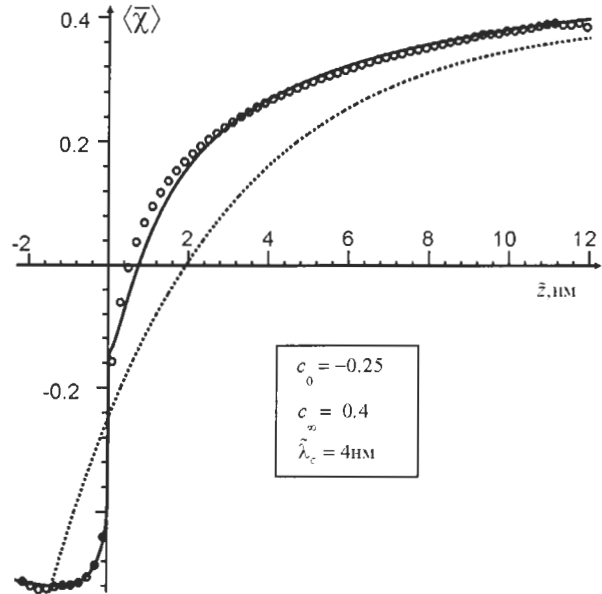


Рис. 6. Зависимость среднего направляющего косинуса направления движения рассеянного атома к оси падения первичного иона от глубины. Символами показаны результаты моделирования; сплошная линия – результат усреднения по полученным аппроксимациям, формула (15); линия из точек – аппроксимация (16).

Обозначим через φ угол между вектором $\vec{r} = (\tilde{x}, \tilde{y})$, где \tilde{x} и \tilde{y} – координаты точки рассеяния и вектором $\omega = (\omega_x, \omega_y)$, где ω_x и ω_y – косинусы направления движения атома после рассеяния к оси \tilde{X} и \tilde{Y} , соответственно. В силу симметрии относительно оси \tilde{Z} , для полного описания направления движения атома после очередного рассеяния достаточно знать плотность совместного распределения χ и φ .

На рис. 7 выборочно приведены полученные в результате моделирования оценки плотности совместного распределения χ и φ . Для удобства анализа, вместо трехмерной гистограммы, приведены двумерные рисунки, на которых зависимость от угла φ отображается

различными символами. За исключением очень малых отрицательных \tilde{z} ($\tilde{z} < -0.4$ нм), при малых ρ рассеяние на большие углы φ больше, чем на малые [см. рис. 7а₁) на котором видно, что оценка плотности растет с увеличением φ]. С увеличением ρ ситуация меняется на обратную: с увеличением φ плотность убывает. Это связано с тем, что рассеяния вызывают в основном атомы, выбитые на больших глубинах. Поскольку вблизи оси падения плотность числа рассеяний мала, для выбивания атомов при малых ρ налетающие атомы должны иметь направление движения в сторону оси падения. Следовательно, выбиваемые ими атомы будут иметь большие углы φ . Для выбивания атомов на больших расстояниях от оси падения эти атомы, наоборот, имеют преимущественно малые φ приводя к выбиванию атомов с малыми φ . С увеличением абсолютного значения \tilde{z} значение $\rho_{\tilde{z}}$,

при котором происходит изменение характера зависимости плотности от φ , возрастает. Так при $\tilde{z} \approx -0.6$ нм, $\rho_{\tilde{z}} \approx 0.9$ нм, а при $\tilde{z} = -1.4$ нм, $\rho_{\tilde{z}} \approx 1.3$ нм (не приведено на рис. 7). При всех < 0 общей характерной особенностью является слабая зависимость плотности от φ при малых ρ , и возрастание зависимости с ростом ρ .

При малых положительных \tilde{z} наблюдается сильная зависимость оценки плотности от φ [см. рис. 7б₁)]. При этом рассеяние на большие углы при малых ρ мало и возрастает с ростом ρ . С увеличением \tilde{z} зависимость от φ уменьшается, причем сильнее при малых ρ [см. рис. 7в₁)]. Такое поведение ожидаемо, поскольку достигающие дальних границ каскада выбитые атомы чаще имеют низкую энергию и вектор ω , имеющий направление близкое к направлению вектора χ , приводя к выбиванию атомов в направлении вектора χ .

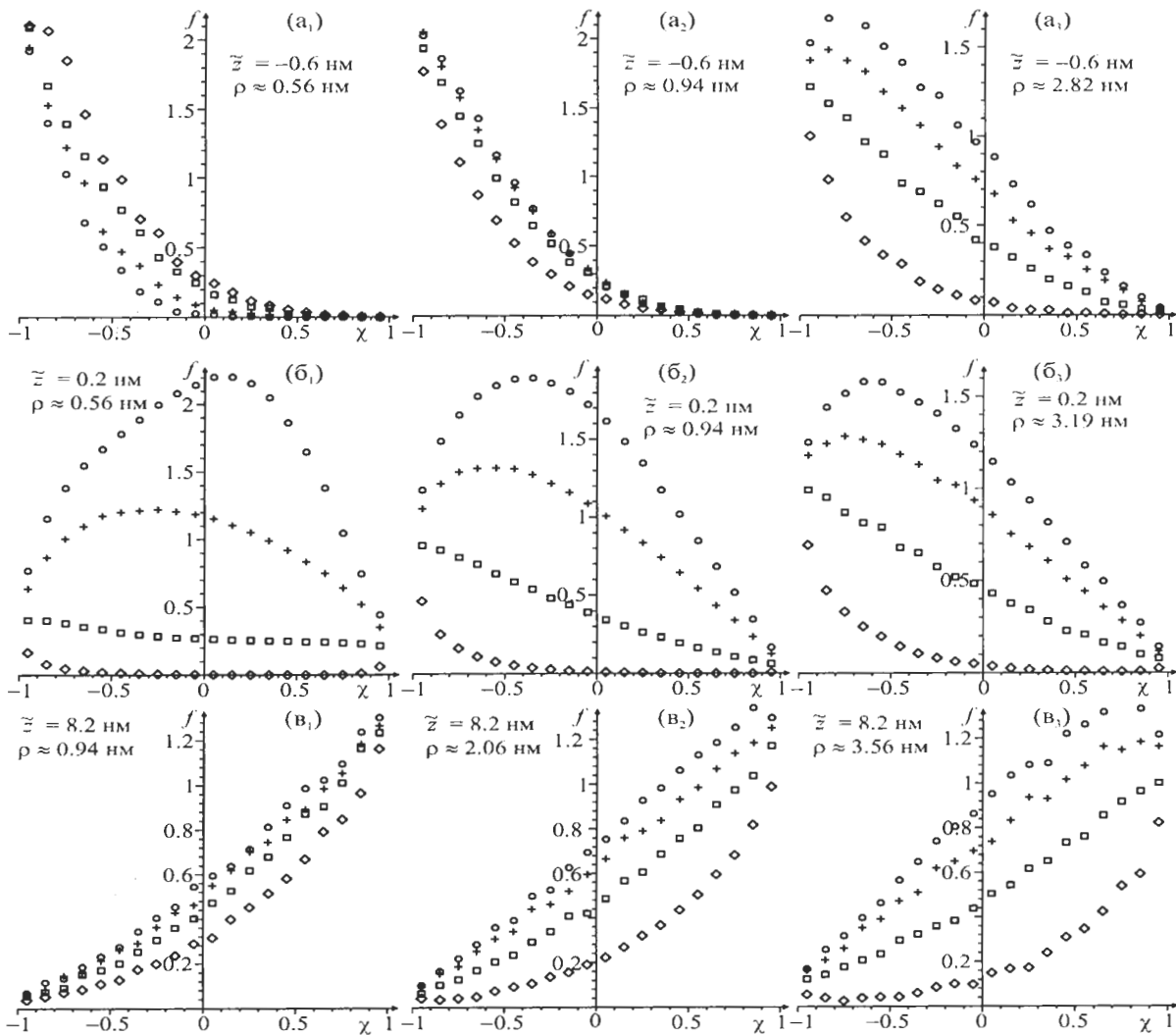


Рис. 7. Оценки плотности f совместного распределения χ и φ для некоторых \tilde{z} и ρ . Различными символами указаны значения φ : $\circ - 10^\circ$, $+$ $- 50^\circ$, $\square - 110^\circ$, $\diamond - 170^\circ$.

2. ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ РАССЕЙНЫХ В КАСКАДЕ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ РЕЛЬЕФА

Будем считать, что локально поверхность имеет вид (3). Получим выражение для скорости распыления в некоторой произвольной точке O , которую без ограничения общности можно считать началом координат. Это выражение для скорости обычно ищется в указанной во введении системе координат $X'Y'Z'$; угол между скоростью первичного иона и нормалью к поверхности в точке в начале координат обозначается через φ [6]. Однако в приближении малых углов наклона поверхности, переход от $X'Y'Z'$ к XYZ приводит только к появлению в уравнении (4) слагаемого с первой производной высоты по координате и замене в выражениях $v_x(\varphi)$ и $v_y(\varphi)$ переменной φ на угол θ . Поскольку в данной работе исследуется поведение коэффициентов v_x, v_y , и не исследуется коэффициенты при первой производной по координате в (4), то, для краткости, координаты локальной системы координат $X'Y'Z'$ обозначаются так же, как и координаты глобальной системы координат XYZ .

Если первичный ион пересекает поверхность в точке с координатами $M_0 = (x, y, h(x, y))$, то расстояние от оси падения первичного иона до начала координат задается выражением

$$\rho = \sqrt{\left(\cos \varphi x - \frac{1}{2} \sin \varphi \left(x^2/R_x + y^2/R_y \right) \right)^2 + y^2}, \quad (17)$$

а смещение от M_0 до точки пересечения плоскости перпендикулярной направлению падения пучка и проходящей через начало координат – выражением

$$\tilde{z} = - \left[\sin \varphi x + \frac{1}{2} \cos \varphi \left(x^2/R_x + y^2/R_y \right) \right]. \quad (18)$$

Предположим, что выбитый атом выходит в вакуум, не испытав рассеяний на атомах мишени, из приповерхностного слоя толщиной Λ , если его единичный направляющий вектор \vec{e} и орт оси Z – вектор \vec{k} – составляют острый угол, то есть $\vec{e}\vec{k} > 0$. Λ имеет порядок половины среднего расстояния между атомами мишени. Задача существенно упрощается,

если предположить независимость χ и φ , и равномерное распределение φ на $[0, \pi]$. В этом случае для задания координат \vec{e} можно ввести угол $\hat{\varphi}$ между его проекцией на плоскость $\tilde{X}\tilde{Y}$ и осью \tilde{X} . Угол $\hat{\varphi}$ будет равномерно распределен на $[0, 2\pi]$. В результате, в системе координат $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ вектор \vec{k} имеет координаты $(-\sin \varphi, 0, -\cos \varphi)$, вектор $\vec{e} = (\sin \vartheta \cos \hat{\varphi}, \sin \vartheta \sin \hat{\varphi}, \cos \vartheta)$, где ϑ – угол между направлением движения атома и осью $O\tilde{Z}$. Так как $0 \leq \vartheta \leq \pi$ и $0 \leq \varphi < \pi/2$, то условие распыления можно записать в виде

$$\chi < \frac{-\operatorname{tg} \varphi \cos \hat{\varphi}}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi \cos^2 \hat{\varphi}}}.$$

Используя независимость χ и $\hat{\varphi}$, и предполагая, что угол равномерно распределен на $[0, 2\pi]$, простое выражение для вероятности распыления атома (p_s) может быть получено, если предположить, что χ имеет плотность (12)

$$p_s = P \left\{ \chi < \frac{-\operatorname{tg} \varphi \cos \hat{\varphi}}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi \cos^2 \hat{\varphi}}} \right\} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\hat{\varphi} \int_{-1}^{\frac{-\operatorname{tg} \varphi \cos \hat{\varphi}}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi \cos^2 \hat{\varphi}}}} (\alpha c^2 + \beta c + \gamma) dc = \frac{2 - 3\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho) \cos \varphi}{4}. \quad (19)$$

В этом приближении скорость распыления поверхности

$$v(\varphi, R) \approx J_0 \Omega \Sigma \Lambda \iint N_{\text{rec}}(\tilde{z}, \rho) p_s(\tilde{z}, \rho) \Phi dx dy, \quad (20)$$

где Σ – среднее число рассеяний в каскаде столкновений, вызванном падением одного первичного иона; N_{rec} – пространственное распределение числа рассеянных атомов, имеющих энергию большую E_x ; Ω – объем, приходящийся на один атом мишени. Разложение до первого порядка по малым параметрам a/R_x и a/R_y фактора, учитывающего влияние наклона поверхности на локальную плотность пучка ионов на поверхности мишени, имеет вид $\Phi = \cos \varphi - \sin \varphi \cdot x/R_x$. Интегрирование выполняется по всей плоскости xy .

Как было получено в разделе 1, распределения существенно зависят от знака \tilde{z} . Сле-

довательно, для разложения скорости распы-
 еâáí èúî î àèùî î àðàì àððàì a/R_x и a/R_y инте-
 грал (20) необходимо разбить на интегралы
 по областям, в которых сохраняется знак. Так
 как при исследовании формирования рельефа
 традиционно используются безразмерные
 переменные $\xi = x/a$, $\psi = y/a$, то перейдем к
 ним. В зависимости от знаков R_x и R_y урав-
 нение линии $\tilde{z} = 0$ будет эллипсом (если R_x и
 R_y одного знака) или гиперболой (если R_x и R_y
 разных знаков):

$$\frac{(\xi + \operatorname{tg} \varphi R_x/a)^2}{(\operatorname{tg} \varphi R_x/a)^2} + \frac{\psi^2}{(\operatorname{tg} \varphi \sqrt{R_x R_y}/a)^2} = 1,$$

$$R_x > 0, R_y > 0 \text{ или } R_x < 0, R_y < 0;$$

$$\frac{(\xi + \operatorname{tg} \varphi R_x/a)^2}{(\operatorname{tg} \varphi R_x/a)^2} - \frac{\psi^2}{(\operatorname{tg} \varphi \sqrt{-R_x R_y}/a)^2} = 1,$$

$$R_x < 0, R_y < 0 \text{ или } R_x > 0, R_y > 0.$$

При падении первичного иона по нормали
 на холм ($R_x > 0, R_y > 0$) в окрестности начала
 координат $\tilde{z} > 0$, а при падении во впадину
 ($R_x < 0, R_y < 0$) – $\tilde{z} < 0$. Этому соответствует
 стягивание эллипсов в точку в начале коор-
 динат при $\varphi \rightarrow 0$. Если радиусы кривизны
 имеют разные знаки, то при $\varphi \rightarrow 0$ окрест-
 ности начала координат \tilde{z} будет иметь один
 знак, если R_x или R_y положить равным беско-
 нечности, то есть в случае формирования
 волнообразного рельефа. Так как в данной
 работе исследуется формирование рельефа
 при наклонном падении, то такие случаи не
 будут рассматриваться. Насколько большим
 должен быть угол падения зависит от вели-
 чин R_x и R_y . Результаты нестационарного мо-
 делирования формирования рельефа и экс-
 периментов указывают, что на начальном эта-
 пе формирования рельефа абсолютные вели-
 чины этих параметров превосходят a более
 чем в десять раз.

На рис. 8 сплошными линиями отображе-
 ны границы областей постоянного знака \tilde{z} ,
 для значений $|R_x| = |R_y| = 10a$ и угле падения
 10° . Вклад в распыление в начале координат
 дают первичные ионы, пересекающие по-
 верхность на расстоянии от начала координат
 не более нескольких a . Следовательно, при
 падении первичных ионов под углами не
 слишком близкими к нулевому, в случае па-
 раметров R_x и R_y разных знаков можно пре-

небречь дальней левой границей при $R_x > 0$,
 $R_y > 0$ (рис. 8в)), и правой границей при $R_x < 0$,
 $R_y < 0$ (рис. 8г)). Таким образом, во всех четы-
 рех случаях граница области изменения знака
 лежит в одной из полуплоскостей. Разложе-
 ние подынтегрального выражения в (20) по
 параметрам a/R_x и a/R_y до первого порядка ма-

лости имеет вид $f = f_0 + f_x \frac{a}{R_x} + f_y \frac{a}{R_y}$, где

f_0, f_x, f_y – величины, не зависящие от кривиз-
 ны поверхности. Обозначим через D полу-
 плоскость $\xi < 0$, либо $\xi > 0$, в которой лежит
 линия $\tilde{z} = 0$. Для получения разложения ско-
 рости распыления до первого порядка малос-
 ти по этим параметрам $\iint_D f_0 dx dy$ достаточ-

но разложить до первого порядка малости по

a/R_x и a/R_y . Для полноты ниже будет приведе-
 но и сведение двойного интеграла к повтор-
 ному в полуплоскости, где \tilde{z} не изменяет
 знак. Рассмотрим подробнее разложение в
 полуплоскости, в которой \tilde{z} меняет знак.
 Обозначим через D_+ и D_- области, в которых
 $\tilde{z} > 0$ и $\tilde{z} < 0$, соответственно. Будем пользо-
 ваться тем, что в силу симметрии интеграл
 по всей области равен удвоенному интегралу
 по части области, где $\psi > 0$. Через ψ_+ обо-
 значим часть эллипса или гиперболы, удо-
 влетворяющую условию $\psi > 0$. При разло-
 жении будем предполагать, что $\operatorname{tg} \varphi \cdot R_x/a \gg 1$,

то есть $u \equiv \xi / \left(\operatorname{tg} \varphi \frac{R_x}{a} \right) \ll 1$.

Случай $R_x > 0, R_y > 0$. Интеграл по левой
 полуплоскости. Для получения разложения до
 первого порядка малости по параметрам a/R_x
 и a/R_y , достаточно удержать в разложении ψ_+
 члены с наименьшей степенью u , то есть

$$\psi_+ = \sqrt{-\xi/\varepsilon}, \text{ где } \varepsilon = \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \varphi \frac{a}{R_y}.$$

Таким обра-
 зом, интегрирование по области ограничен-
 ной эллипсом заменим интегрированием по
 области ограниченной параболой и прямой
 $\xi = \xi_1$. Если для описания среднего числа рас-
 сеянных атомов используется нормальное
 или показательное распределение, то можно
 считать, что $\xi_1 = -\infty$. Однако, в случае испо-

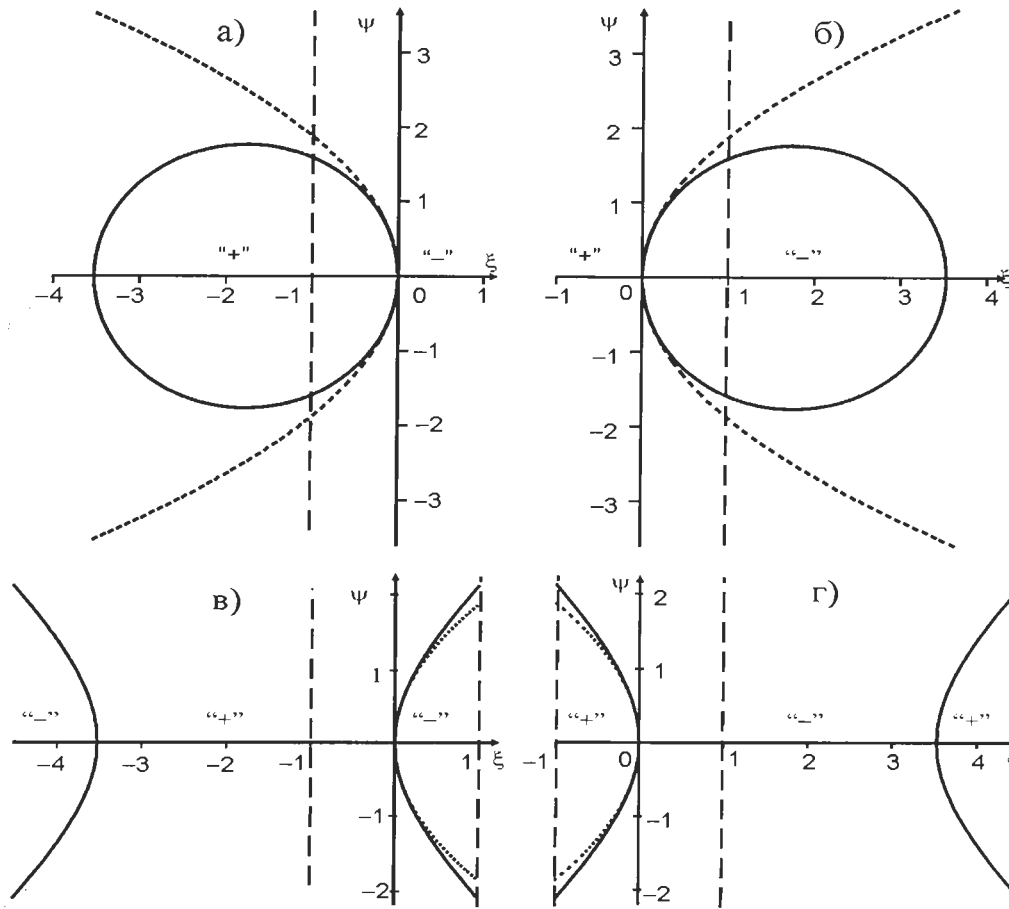


Рис. 8. Области постоянного знака $\tilde{z}(\xi, \psi)$ для различных знаков радиусов кривизны: (а) $R_x > 0, R_y > 0$; (б) $R_x < 0, R_y < 0$; (в) $R_x > 0, R_y < 0$; (г) $R_x < 0, R_y > 0$. Сплошной линией отображена $\tilde{z}(\xi, \psi) = 0$, точками – асимптотические по a/R_x и a/R_y границы интегрирования, пунктирными прямыми построены $\xi = -1$ и $\xi = +1$. Символами “+” и “-” указан знак $\tilde{z}(\xi, \psi) = 0$ внутри области.

льзования бета-распределения, имеющего ограниченный носитель, $\xi_1 = -(a_2 + a)/(a \sin \varphi)$.

$$\iint_{D_+} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\xi d\psi \approx 2 \int_{\xi_1}^0 d\xi \int_0^{\sqrt{-\xi/\varepsilon}} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\psi.$$

Разлагая интеграл по малому параметру ε , и удерживая члены до первого порядка, получим

$$\iint_{D_+} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\xi d\psi \approx 2 \int_{\xi_1}^0 d\xi \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\psi - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \varphi \frac{a}{R_y} \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt.$$

Здесь и далее через ξ обозначен коэффициент f_0 для областей D_+ и D_- соответственно. Таким же образом

$$\iint_{D_-} f_0^{(-)}(\xi, \psi) d\xi d\psi \approx 2 \int_{\xi_1}^0 d\xi \int_{\sqrt{-\xi/\varepsilon}}^{+\infty} f_0^{(-)}(\xi, \psi) d\xi d\psi =$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \varphi \frac{a}{R_y} \int_0^{+\infty} f_0^{(-)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt. \quad (21)$$

Следовательно, интеграл по левой полуплоскости

$$\iint_D f_0(\xi, \psi) d\xi d\psi \approx 2d \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\psi + \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \varphi \frac{a}{R_y} \times \left(\int_0^{+\infty} f_0^{(-)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt - \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt \right).$$

Интеграл по правой полуплоскости

$$\iint_D f_0 d\xi d\psi \approx 2 \int_0^{\xi_2} d\xi \int_0^{+\infty} f_0^{(-)}(\xi, \psi) d\psi,$$

где, как и в случае левой полуплоскости, для нормального или показательного распределения можно считать, что $\xi_2 = +\infty$, а для бета-распределения $\xi_2 = (a_1 - a)/(a \sin \varphi)$.

Случай $R_x < 0, R_y < 0$. Аналогично предыдущему случаю, в правой полуплоскости

$$\iint_D f_0 d\xi d\psi \approx 2 \int_0^{\xi_2} d\xi \int_0^{+\infty} f_0^{(-)}(\xi, \psi) d\psi + \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \varphi \frac{a}{R_y} \times$$

$$\times \left(\int_0^{+\infty} f_0^{(-)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt - \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(0, \sqrt{t}) \sqrt{t} dt \right), \quad (22)$$

и в левой полуплоскости

$$\iint f_0 d\xi d\psi \approx 2 \int_{\xi_1}^0 d\xi \int_0^{+\infty} f_0^{(+)}(\xi, \psi) d\xi d\psi.$$

Случаи радиусов кривизны разных знаков.

В линейном приближении по малым параметрам a/R_x и a/R_y случай $R_x > 0, R_y < 0$ сводится к случаю $R_x < 0, R_y < 0$, а случай $R_x > 0, R_y < 0$ – к случаю $R_x > 0, R_y > 0$.

2.1. ПРОСТЕЙШАЯ МОДЕЛЬ, ДОПУСКАЮЩАЯ РЕШЕНИЕ В ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ФУНКЦИЯХ

Предположим:

1°. Распределение числа рассеянных атомов является нормальным, имеющим при падении по нормали вид подобный (2)

$$N_{\text{rec}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \alpha \beta^2} \exp\left(-\frac{(z-h+a)^2}{2\alpha^2} - \frac{x^2+y^2}{2\beta^2}\right),$$

где a, α, β – средняя глубина и страгглинги числа рассеянных атомов.

2°. $\bar{\chi}$ не зависит от ρ , а зависимость от описывается (16).

При таких предположениях нет необходимости разбивать область интегрирования на области одинакового знака \tilde{z} . Однако, поскольку нормальное распределение при $\tilde{z} \ll 0$ спадает медленней, чем получено в результате моделирования, а с другой стороны, аппроксимация $\bar{\chi}$ выражением (16) при $\tilde{z} < 0$ возрастает быстрее, чем наблюдается при моделировании, то такой упрощенный подход не позволит достаточно точно предсказать величины v_x и v_y . Поэтому для выяснения влияния учета зависимости p_s от \tilde{z} будут сравниваться величины, нормированные на соответствующие значения при нормальном падении.

В указанных предположениях скорость распыления можно записать в виде

$$v(\varphi, R) \approx \tilde{C} \iint \exp\left\{-\frac{\left[a + \sin \varphi x + \frac{1}{2} \cos \varphi \left(\frac{x^2}{R_x} + \frac{y^2}{R_y}\right)\right]^2}{2\alpha^2}\right\} d\xi d\psi$$

$$\frac{\left[\cos \varphi x - \frac{1}{2} \sin \varphi \left(\frac{x^2}{R_x} + \frac{y^2}{R_y}\right)\right]^2 + y^2}{2\beta^2} \left\{1 - \frac{3}{2} \{c_0 + (c_\infty - c_0) \times\right.$$

$$\times \left[1 - \exp\left\{-\frac{\sin \varphi x + \frac{1}{2} \cos \varphi \left(\frac{x^2}{R_x} + \frac{y^2}{R_y}\right)}{\bar{\lambda}_c}\right\}\right]\right\} \times$$

$$\times \cos \varphi \left\{ \left[\cos \varphi - \sin \varphi \frac{x}{R_x} \right] dx dy \right\},$$

где $\tilde{C} = \frac{1}{2} \frac{J_0 \Omega \Sigma \Lambda}{(2\pi)^{3/2} \alpha \beta^2}$, а интегрирование вы-

полняется по всей плоскости XY . Делая замену переменных $\xi = x/a$ и $\psi = y/a$, группируя аргумент экспоненты по степеням ξ и ψ , и, удерживая только линейные слагаемые по a/R_x и a/R_y , скорость распыления можно записать в виде

$$v = \left(1 - \frac{3}{2} c_\infty \cos \varphi\right) v_{\text{BH}} + \frac{3}{2} (c_\infty - c_0) \cos \varphi \hat{v}_{\text{BH}}, \quad (23)$$

где v_{BH} есть скорость распыления без учета зависимости p_s от \tilde{z} , а \hat{v}_{BH} – поправка, учитывающая эту зависимость. Выражения для v_{BH} и \hat{v}_{BH} имеют вид

$$\tilde{C} \alpha^2 \exp\left(-\frac{a^2}{2\alpha^2}\right) \iint \exp\left[-A\xi - \frac{1}{2} \left(B_1 + B_2 \frac{a}{R_x}\right) \xi^2 +\right.$$

$$\left. + C\xi^3 \frac{a}{R_x} - E\psi^2 - \frac{1}{2} B_2 \psi^2 \frac{a}{R_y} + C\xi\psi^2 \frac{a}{R_y}\right] \times$$

$$\times \left[\cos \varphi - \xi \frac{a}{R_x} \sin \varphi \right] d\xi d\psi$$

и отличаются только выражением для коэффициентов A и B_2 . В силу совпадения формы выражения для распределения N_{rec} с выражением для распределения упруго выделенной энергии (2) выражения для коэффициентов v_{BH} совпадают с выражениями, полученными в [6]. Коэффициенты A и B_2 для \hat{v}_{BH} помечены ниже, как \hat{A} и \hat{B}_2 .

$$A = \frac{a^2}{\alpha^2} \sin \varphi, \quad \hat{A} = \left(\frac{a^2}{\alpha^2} - \frac{a}{\tilde{\lambda}_c} \right) \sin \varphi,$$

$$B_1 = \left(\frac{a}{\alpha} \right)^2 \sin^2 \varphi + \left(\frac{a}{\beta} \right)^2 \cos^2 \varphi, \quad B_2 = \frac{a^2}{\alpha^2} \cos \varphi,$$

$$\hat{B}_2 = \left(\frac{a^2}{\alpha^2} - \frac{a}{\tilde{\lambda}_c} \right) \cos \varphi, \quad E = \frac{1}{2} \left(\frac{a}{\beta} \right)^2,$$

$$C = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{a}{\beta} \right)^2 - \left(\frac{a}{\alpha} \right)^2 \right] \sin \varphi \cos \varphi.$$

Считая, что $\hat{A} > 0$, удерживая в подынтегральном выражении линейные по $a/R_x, a/R_y$ слагаемые, и вычисляя интегралы, получим

$$v_{\text{BH}} = J_0 \Omega Y_0^{\text{BH}}(\varphi) \left(\cos \varphi + \Gamma_x \frac{a}{R_x} + \Gamma_y \frac{a}{R_y} \right),$$

$$\hat{v}_{\text{BH}} = J_0 \Omega \hat{Y}_0^{\text{BH}}(\varphi) \left(\cos \varphi + \hat{\Gamma}_x \frac{a}{R_x} + \hat{\Gamma}_y \frac{a}{R_y} \right), \quad (24)$$

где $\Gamma_y = -\frac{\beta^2}{a^2} \left(\frac{1}{2} B_2 + \frac{AC}{B_1} \right) \cos \varphi$,

$$\Gamma_x = \frac{A}{B_1} \sin \varphi - \frac{B_2}{2B_1} \left(1 + \frac{A^2}{B_1} \right) \cos \varphi - \frac{AC}{B_1^2} \left(3 + \frac{A^2}{B_1} \right) \cos \varphi$$

и $Y_0^{\text{BH}}(\varphi) = \frac{1}{2} \frac{\Lambda \Sigma a}{\sqrt{2\pi\alpha\beta}} B_1^{-1/2} \exp \left(-\frac{a^2}{2\alpha^2} + \frac{A^2}{2B_1} \right)$

совпадают с полученными в [6]; $\hat{\Gamma}_x, \hat{\Gamma}_y$ и \hat{Y}_0^{BH} получаются заменой A на \hat{A} , и A_2 на \hat{B}_2 в Γ_x, Γ_y и Y_0^{BH} , соответственно.

Обозначим коэффициенты v_x и v_y для случая, когда зависимость p_s от \tilde{z} не учитывается ($p_s = 1/2$) через v_x^{BH} и v_y^{BH} ($v_x^{\text{BH}} = J_0 \Omega Y_0^{\text{BH}} a \Gamma_x$, $v_y^{\text{BH}} = J_0 \Omega Y_0^{\text{BH}} a \Gamma_y$). И введем обозначения $\hat{v}_x^{\text{BH}} = J_0 \Omega \hat{Y}_0^{\text{BH}} a \hat{\Gamma}_x$, $\hat{v}_y^{\text{BH}} = J_0 \Omega \hat{Y}_0^{\text{BH}} a \hat{\Gamma}_y$. Так как с точностью до коэффициентов выражения (24) совпадают с выражением для скорости, приведенной в [6], и выражение для скорости (23) является линейной функцией v_{BH} и \hat{v}_{BH} , то уравнение эволюции поверхности будет иметь вид (4), а коэффициенты будут задаваться выражениями

$$v_x = \left(1 - \frac{3}{2} c_\infty \cos \varphi \right) v_x^{\text{BH}} + \frac{3}{2} (c_\infty - c_0) \cos \varphi \hat{v}_x^{\text{BH}},$$

$$v_y = \left(1 - \frac{3}{2} c_\infty \cos \varphi \right) v_y^{\text{BH}} + \frac{3}{2} (c_\infty - c_0) \cos \varphi \hat{v}_y^{\text{BH}}.$$

Для того чтобы показать детали поведения в исследуемом диапазоне углов ($20^\circ - 60^\circ$) на рис. 9 приведены зависимости нормированных коэффициентов в диапазоне углов падения $0^\circ - 75^\circ$, и не показана часть графика, лежащая выше оси абсцисс. Учет зависимости p_s от \tilde{z} приводит к тому, что критический угол изменения ориентации рельефа становится значительно меньше ($\theta_c \approx 35^\circ$ тогда как $\theta_c^{\text{BH}} \approx 48^\circ$), а на участке от 0° до θ_c графики $v_x/v_x(0)$ и $v_y/v_y(0)$ расположены значительно ближе друг к другу по сравнению с графиками $v_x^{\text{BH}}/v_x^{\text{BH}}(0)$ и $v_y^{\text{BH}}/v_y^{\text{BH}}(0)$.

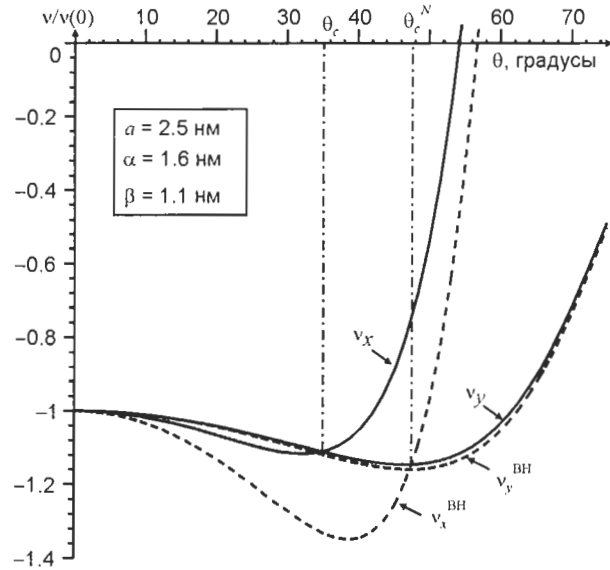


Рис. 9. Зависимость нормированных коэффициентов $v/v(0)$ (сплошные линии) и $v^{\text{BH}}/v^{\text{BH}}(0)$ (пунктирные линии) от угла падения первичного иона.

2.2. МОДЕЛЬ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ДЕТАЛИ ПОЛУЧЕННЫХ В РАЗДЕЛЕ 1 РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

В этом разделе, как и в предыдущем, φ и χ будут считаться независимыми; также будет предполагаться, что угол φ равномерно распределен на $[0, \pi]$; однако, будут учтены детали распределений среднего числа рассеянных атомов и $\bar{\chi}$ в предположении, что $\varphi \gg 0$. $N_{\text{rec}}(\tilde{z}, \rho) = f_p(\tilde{z}) f_l(\rho | \tilde{z}) / \rho$, где $f_p(\tilde{z})$ задавалась (9), $f_l(\rho | \tilde{z})$ – (10). Для $\bar{\chi}(\tilde{z}, \rho)$ используется аппроксимация (13) для области, в ко-

торой $\tilde{z} > 0$, и аппроксимация (14) для области, в которой $\tilde{z} < 0$. Подставив, используя (17) и (18), указанные распределения в (19), (20) и удерживая при помощи (21), (22) в разложении скорости по малым параметрам a/R_x и a/R_y слагаемые до первого порядка включительно, были получены выражения для скоростей распыления вида (24), но с коэффициентами, которые задаются двойными интегралами. В силу громоздкости явное выражение для этих коэффициентов не приводится. Следовательно, в приближении больших углов падения, как и в предыдущем п. 2.1, уравнение эволюции поверхности будет иметь вид (4).

Обозначим через v_{N_x} и v_{N_y} коэффициенты, полученные в результате разложения скорости по малым параметрам a/R_x и a/R_y без учета зависимости вероятности распыления атома от $\bar{\chi}$ (то есть, при $p_s = 1/2$), а через v_x и v_y коэффициенты, учитывающие эту зависимость. На рис. 10 приведены зависимости этих коэффициентов v_x^{BH} и v_y^{BH} коэффициентов и из п. 2.1 от угла падения в диапазоне $2.5^\circ - 75^\circ$. Для расчета коэффициентов, при $\tilde{z} < 0$ применялись аппроксимации параметров плотности f_l , полученные при использовании значения параметра μ равного 4. На промежутке $3^\circ - 15^\circ$ коэффициент v_{N_x} возрастает, вместо ожидаемого убывания. v_{N_x} и v_{N_y} испытывают при малых θ резкое убывание. Это связано как с тем, что разложение справедливо для больших углов, так и с относительно большой погрешностью аппроксимации распределений вблизи поверхности.

Замена нормального распределения для среднего числа рассеянных атомов, используемого при расчете v^{BH} , на более точное распределение, не приводит к существенному изменению поведения коэффициентов уравнения (v_{N_x} и v_{N_y}). В диапазоне углов падения от 20° до $\theta_c^N \approx 46^\circ$ выполняется $v_{N_x} < v_{N_y}$ и на поверхности должны формироваться ||-волны. Тогда как, учет зависимости вероятности распыления от $\bar{\chi}$ приводит к тому, что при углах падения свыше 20° ||-волны формироваться не могут: свыше 20° выполняется $v_x > v_y$. Если взять $N_{rec}(\tilde{z}, \rho) = f_B(\tilde{z}) f_l(\rho | \tilde{z}) / \rho$, с параметрами f_B , найденными методом моментов, то зависимости коэффициентов от θ заметно не

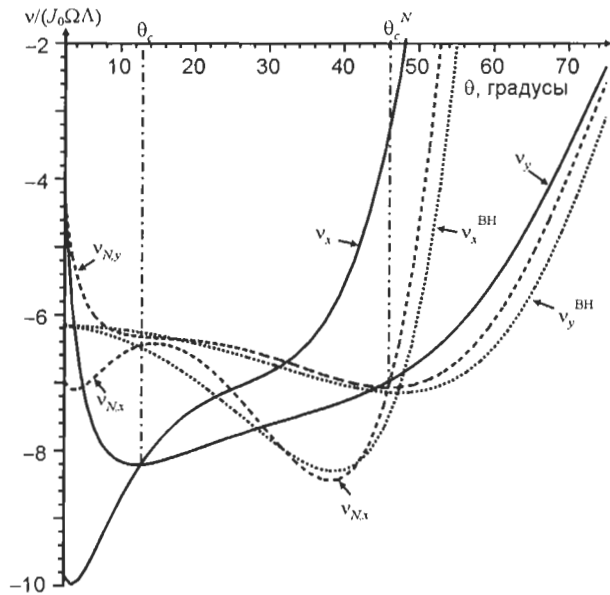


Рис. 10. Зависимость коэффициентов v (сплошная линия) и v_N (пунктирная линия) и v^{BH} (линия из точек) от угла падения первичного иона.

изменится, и качественный результат останется в силе: свыше 20° ||-волны формироваться не могут. Также не приводит к заметным изменениям в зависимости коэффициентов от θ применение f_l с аппроксимацией параметров для $\tilde{z} < 0$, найденных при использовании значения параметра μ равного 4.5 или 5.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предпринята попытка получения уравнения эволюции поверхности на основе распределений, которые можно оценить при моделировании. Результаты моделирования развития каскада в неограниченной мишени показывают сильную зависимость от глубины среднего косинуса угла между направлением движения после очередного рассеяния выбитого атома и осью падения первичного иона ($\bar{\chi}$). Существенное упрощение задачи получается, если предположить, что χ и полярный угол $\hat{\phi}$ направляющего вектора скорости рассеянного атома независимы, и $\hat{\phi}$ распределен равномерно на $[0, 2\pi]$. В этом случае вероятность распыления атома p_s может быть достаточно точно выражена через $\bar{\chi}$ и, в предположении больших углов падения первичного иона, уравнение эволюции поверхности имеет вид уравнения Бредли-Харпера (4). Значения коэффициентов v_x и v_y этого уравнения таковы, что при углах

падения свыше 20° на поверхности не могут формироваться \parallel -волны; вместо этого на поверхности должны формироваться \perp -волны. Таким образом, учет зависимости вероятности распыления атома от $\bar{\chi}(\bar{z}, \rho)$ приводит к качественному изменению предсказания направленности волн на поверхности мишени при облучении. В диапазоне углов падения $20^\circ - 40^\circ$ различие между найденными значениями коэффициентов v_x и v_y мало. Следовательно, выполненные при получении коэффициентов упрощения могут приводить к существенному изменению результата. Результаты нестационарного моделирования формирования рельефа без учета переноса атомов под поверхность твердого тела [10, 9] можно интерпретировать как приближенное равенство коэффициентов v_x и v_y в диапазоне углов падения $20^\circ - 45^\circ$. Таким образом, рассмотренное приближение преувеличивает влияние зависимости ρ_x от $\bar{\chi}$. Причина такого преувеличения – предположение о независимости χ и ϕ . Изложенные в разделе 1.2 результаты моделирования показывают, что за исключением случая малых удалений от оси \bar{z} при $\bar{z} < 0$, плотность совместного распределения убывает с ростом ϕ . Это означает, что с увеличением угла падения углубления будут распыляться в большей степени, чем предсказывает рассмотренная в п. 2.2 модель, и разница в абсолютных величинах v_x и v_y будет меньше в диапазоне углов падения от 20° до 45° .

Несмотря на то, что рассмотренные в п. 2 простые модели преувеличивают влияние распределения направлений движения выбитых атомов, они позволяют сделать вывод: отсутствие формирования \parallel -волн при моделировании без учета переноса атомов в каскадах столкновений в работах [9, 10] связано не с особенностями распределения среднего числа рассеянных атомов, а с особенностью распределения направлений движения выбитых атомов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Makeev M. A., Cuerno R., Barabási A.-L. Morphology of ion-sputtered surfaces//Nucl. Instr. And Meth. B. – 2002. – Vol. 197. – P. 185-227.
2. Cuerno R., Castro M., Munoz-García J., Gago R., Vázquez L. Nanoscale pattern formation

at surfaces under ion-beam sputtering: a perspective from continuum models//Nucl. Instr. and Meth. B. – 2011. – Vol. 269. – P. 894-900.

3. Pahlovy S.A., Mahmud S.F., Yanagimoto K., Miyamoto I. Ripple formation on atomically flat cleaved Si surface with roughness of 0.038 nm rms by low-energy Ar^{1+} ion bombardment//J. Vac. Sci. Technol. A. – 2011. – Vol. 29, No. 2. – P. 021015-021019.
4. Basu T., Mohanty J.R., Som T. Unusual pattern formation on Si(100) due to low energy ion bombardment// Applied Surface Science. – 2012. – Vol. 258. – P. 9944-9948.
5. Mishra P., Ghose D. The rotation of ripple pattern and the shape of the collision cascade in ion sputtered thin metal films//J. Appl. Phys. – 2008. – Vol. 104. – P. 094305-094309.
6. Bradley R.M., Harper J.M.E. Theory of ripple topography induced by ion bombardment//J. Vac. Sci. Technol. A. – 1988. – Vol. 6. – P. 2390-2395.
7. Feix M., Hartmann A.K., Kree R., Munoz-García J., Cuerno R. Influence of collision cascade statistics on pattern formation of ion-sputtered surfaces//Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 71. – P. 125407-125420.
8. Hossain M.Z., Freund J.B., Johnson H.T. Ion impact energy distribution and sputtering of Si and Ge//J. Appl. Phys. – 2012. – Vol. 111. – P. 103513-103518.
9. Губарев А.А., Яковлев Д.А. Моделирование формирования рельефа поверхности кремния при облучении ионами аргона с энергией 1 кэВ //Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. – 2012. – № 8. – С. 8-16.
10. Губарев А.А., Яковлев Д.А. Имитационное моделирование образования рельефа на первоначально плоской поверхности твердого тела. Часть I. Расчет без учета модификации мишени в объеме//Вестник Донецкого национального университета. Сер. А: Естеств. науки. – 2009. – Вып. 2. – С. 198-205.
11. Hautala M., Koponen I. Simulation of submicron-scale erosion and ripple formation on ion bombarded solid surfaces//Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 117. – P. 95-100.
12. Koponen I., Hautala M., Sievänen O.-P. Simulation of self-affine roughening and ripple formation on ion bombardment amorphous carbon surface//Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 129. – P. 349-355.
13. Eckstein W. Computer simulation of ion-solid interactions. – New York: Springer-Verlag, 1991. – 296 p.

14. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. – New York: Pergamon Press, 1985. – 321 p.
15. Кендалл М., Стьюарт А. Теория распределений. – М.: Наука, 1966. – 588 с.
16. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей/Под. Ред. А.Ф. Буренков, Ф.Ф. Комаров, М.А. Кумахов, М.М. Темкин. – Минск: Изд-во БГУ, 1980. – 352 с.
8. Hossain M.Z., Freund J.B., Johnson H.T. Ion impact energy distribution and sputtering of Si and Ge//J. Appl. Phys. – 2012. – Vol. 111. – P. 103513-103518.
9. Gubarev A.A., Yakovlev D.A. Modelirovanie formirovaniya rel'efa poverhnosti kremniya pri obluchenii ionami argona s energiej 1 keV// Poverhnost'. Rentgen., sinhrotr. i nejtron. issled. – 2012. – № 8. – S. 8-16.
10. Gubarev A.A., Yakovlev D.A. Imitacionnoe modelirovanie obrazovaniya rel'efa na pervonachalno ploskoj poverhnosti tverdogo tela. Chast' I. Raschet bez ucheta modifikacii misheni v ob'eme //Vestnik Doneckogo nacional'nogo universiteta. Ser. A: Estestv. nauki. – 2009. – Vyp. 2. – S. 198-205.

LITERATURA

1. Makeev M. A., Cuerno R., Barabási A.-L. Morphology of ion-sputtered surfaces//Nucl. Instr. And Meth. B. – 2002. – Vol. 197. – P. 185-227.
2. Cuerno R., Castro M., Munoz-García J., Gago R., Vázquez L. Nanoscale pattern formation at surfaces under ion-beam sputtering: a perspective from continuum models//Nucl. Instr. and Meth. B. – 2011. – Vol. 269. – P. 894-900.
3. Pahlovy S.A., Mahmud S.F., Yanagimoto K., Miyamoto I. Ripple formation on atomically flat cleaved Si surface with roughness of 0.038 nm rms by low-energy Ar¹⁺ ion bombardment//J. Vac. Sci. Technol. A. – 2011. – Vol. 29, No. 2. – P. 021015-021019.
4. Basu T., Mohanty J.R., Som T. Unusual pattern formation on Si(100) due to low energy ion bombardment// Applied Surface Science. – 2012. – Vol. 258. – P. 9944-9948.
5. Mishra P., Ghose D. The rotation of ripple pattern and the shape of the collision cascade in ion sputtered thin metal films//J. Appl. Phys. – 2008. – Vol. 104. – P. 094305-094309.
6. Bradley R.M., Harper J.M.E. Theory of ripple topography induced by ion bombardment//J. Vac. Sci. Technol. A. – 1988. – Vol. 6. – P. 2390-2395.
7. Feix M., Hartmann A.K., Kree R., Munoz-García J., Cuerno R. Influence of collision cascade statistics on pattern formation of ion-sputtered surfaces//Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 71. – P. 125407-125420.
11. Hautala M., Koponen I. Simulation of submicron-scale erosion and ripple formation on ion bombarded solid surfaces//Nucl. Instr. and Meth. B. – 1996. – Vol. 117. – P. 95-100.
12. Koponen I., Hautala M., Sievänen O.-P. Simulation of self-affine roughening and ripple formation on ion bombardment amorphous carbon surface//Nucl. Instr. and Meth. B. – 1997. – Vol. 129. – P. 349-355.
13. Eckstein W. Computer simulation of ion-solid interactions. – New York: Springer-Verlag, 1991. – 296 p.
14. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. – New York: Pergamon Press, 1985. – 321 p.
15. Kendall M., St'yuart A. Teoriya raspredelenij. – М.: Nauka, 1966. – 588 с.
16. Tablicy parametrov prostranstvennogo raspredeleniya ionno-implantirovannyh primesej/Под. Ред. А.Ф. Буренков, Ф.Ф. Комаров, М.А. Кумахов, М.М. Темкин. – Минск: Изд-во БГУ, 1980. – 352 с.