

ТЕРМАЛИЗАЦИЯ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ В ГАЗАХ

В. А. Вольняс, А. Б. Козырев*

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ)
197376, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 15 июля 2010 г.

Создана модель процесса термализации атомных частиц при рассеянии в различных газах с применением межатомного потенциала взаимодействия Борна – Майера. Описание процесса термализации атомных частиц проводится методом статистического моделирования. Предложенная модель термализации адаптирована для широкого класса партнеров атомных столкновений, учитывает реальные энергетические и угловые распределения источников атомных частиц и позволяет рассчитывать параметры пространственной зоны их термализации и переход в диффузионный режим движения. Энергетический диапазон применения модели термализации атомных частиц представляет интерес для многих прикладных задач физики плазмы, газового разряда и процессов ионного осаждения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Термализация атомных частиц — это процесс потери ими энергии при столкновениях с частицами рассеивающей среды до состояния термодинамического равновесия с ней. Количественные оценки протяженности зоны термализации атомных частиц позволяют определить границу между их направленным движением и переходом в диффузионный режим распространения в газовой среде. Это в свою очередь позволяет при описании процессов переноса атомных частиц использовать именно тот математический аппарат, который соответствует характеру их движения — направленному или диффузионному.

Существующие модели процесса переноса атомных частиц в газовой среде, если рассматривать вопросы переноса с точки зрения термализации частиц [1–3] и диффузии термализованного потока частиц [4–6], не позволяют корректно описать пространственное распределение плотности, потока и скоростей атомных частиц. Например, процедуры усреднения длины свободного пробега [1] или угла рассеяния атомных частиц [2] не учитывают реального разброса переданной энергии при атомных столкновениях. Приближение непрерывных потерь энергии в процессе переноса атомных частиц в газовой среде [4] справедливо в случае преимущественных потерь атомами энергии, но не импульса. Это соответ-

ствует рассеянию тяжелых атомных частиц на легких атомах газовой среды. Изменение величины сечения упругого рассеяния и углов рассеяния в зависимости от скорости относительного движения атомных частиц [7] затрудняет описание процесса переноса с позиции классической теории рассеяния.

Оценка протяженности и границы одномерной зоны термализации атомных частиц возможна на основе модели нелинейной диффузии [8], которая рассматривает процесс переноса атомов как диффузию со «сверхтепловой» скоростью. Этот механизм нелинейной диффузии, учитывающий выход рассеянных атомов из потока и их инерцию, позволяет рассматривать поток атомов как диффундирующий по законам нелинейной диффузии через хаотическую решетку атомов рабочего газа. В рамках этой модели могут быть определены пространственные положения виртуальных источников термализованных атомных частиц и соотношение прямого и диффузионного потоков в зависимости от параметров газоразрядной плазмы и сорта сталкивающихся атомных частиц.

Во избежание различных допущений при расчете протяженности и границы зоны термализации атомных частиц в ряде работ [9–13] были предприняты попытки использования методов статистического моделирования Монте-Карло. Однако ряд различных предположений об отсутствии выхода частиц из прямого потока [9], начальных энергетических и угловых распределениях частиц потока [10]

*E-mail: mcl@eltech.ru, volpyas@yandex.ru

и различных межатомных потенциалах взаимодействия [11, 13] приводит к моделированию частных задач [12], описывающих процессы переноса атомных частиц в различных приближениях, адаптированных к конкретным условиям экспериментальных исследований.

В настоящей работе предложена модель процесса термализации атомных частиц при их движении в газовой среде, которая достаточно корректно описывает процессы рассеяния при столкновении атомных частиц, учитывает энергетические и угловые распределения источников атомных частиц и позволяет рассчитывать параметры пространственной зоны их термализации. Описание процесса термализации атомных частиц проводится методом статистического моделирования. Полное изложение структуры модели и алгоритмов моделирования выходит за рамки настоящей статьи, поэтому остановимся на рассмотрении тех характерных особенностей, которые обладают определенной новизной.

2. ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ

Основной характеристикой при описании процессов упругого взаимодействия атомных частиц является угол рассеяния θ в системе центра масс, от которого зависят энергетические потери и последующий характер их движения. Он определяется прицельным параметром столкновения b и при сферически симметричном межатомном потенциале взаимодействия $U(r)$ описывается выражением

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr/r^2}{[1 - U(r)/E_c - b^2/r^2]^{1/2}}, \quad (1)$$

где r — межатомное расстояние, E_c — кинетическая энергия относительного движения частиц в системе центра масс при $r \rightarrow \infty$, r_{min} — расстояние наибольшего сближения сталкивающихся частиц, которое является корнем выражения под знаком радикала в знаменателе:

$$1 - U(r)/E_c - b^2/r^2 = 0.$$

Этот интеграл для определения угла рассеяния θ выражается в элементарных функциях только для потенциала жестких сфер и ряда степенных потенциалов и их линейных комбинаций. Использование межатомного потенциала жестких сфер значительно упрощает процедуру расчета [14], прежде всего

при статистическом моделировании процесса упругого рассеяния атомных частиц в газе. Однако существенным недостатком этого потенциала взаимодействия является отсутствие зависимости сечения взаимодействия от энергии относительного движения сталкивающихся частиц. При взаимодействии частиц в газовой среде в области низких энергий, по масштабу величины не превышающих соответствующих потенциалов ионизации, сечение упругого рассеяния имеет порядок газокINETического и слабо зависит от энергии сталкивающихся частиц. В этом случае классическое рассеяние жестких сфер является хорошим приближением. В таком диапазоне энергий взаимодействие сталкивающихся частиц определяется их внешними электронными оболочками и отличается для каждой из пар сталкивающихся частиц. При увеличении энергии относительного движения сталкивающихся частиц значительное рассеяние происходит при существенном перекрытии их электронных оболочек, и потенциал взаимодействия определяется, в основном, внутренними электронами. Возбуждение при этом внешних электронов мало меняет рассеивающий потенциал, эффективная область действия которого соответствует меньшим межатомным расстояниям. В этом диапазоне энергии взаимодействия атомных частиц с газовой средой необходимо применение более корректных межатомных потенциалов взаимодействия сталкивающихся частиц. Однако использование таких межатомных потенциалов взаимодействия $U(r)$ предусматривает процедуру численного интегрирования для определения угла рассеяния θ в каждом акте атомных столкновений непосредственно при численном моделировании статистическим методом, что нереально с точки зрения времени моделирования. При этом для достаточно корректных межатомных потенциалов взаимодействия часто ограничиваются различными приближенными методами как в рамках классического, так и квантовомеханического описания.

Совмещение быстрой вычислительной процедуры при использовании потенциала жестких сфер и корректности физического описания процессов взаимодействия атомных частиц может быть достигнуто применением введенного нами ранее [15] межатомного потенциала квазижестких сфер $U_{qhs}(r)$.

Рассмотрим кратко вид и процедуру применения межатомного потенциала взаимодействия $U_{qhs}(r)$. В качестве достаточно корректных межатомных потенциалов взаимодействия возможно использование целого ряда пробных потенциалов, применимых к

атомам различных элементов и содержащих подгоночные параметры. Наиболее удобным, с точки зрения математического применения, является межатомный потенциал Борна–Майера [16]:

$$U_{B-M}(r) = A_{B-M}(Z_1, Z_2) \times \exp\left(-\frac{r}{b_{B-M}(Z_1, Z_2)}\right), \quad (2)$$

где Z_1, Z_2 — порядковые (атомные) номера сталкивающихся атомных частиц; A_{B-M}, b_{B-M} — постоянные, определяемые для каждой из пар сталкивающихся атомных частиц.

Для использования межатомного потенциала Борна–Майера нами была проведена его модификация по результатам работ [17, 18] для большого класса партнеров столкновения с порядковыми номерами $Z_{1,2} = 2 \dots 80$. При этом постоянные A_{B-M} и b_{B-M} в выражении для межатомного потенциала Борна–Майера (2) были представлены в виде функций $A_{B-M}(Z_1, Z_2)$ и $b_{B-M}(Z_1, Z_2)$ и аппроксимированы степенными функциями как

$$A_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2) = 95.863(Z_1 Z_2)^{0.7383} \text{ эВ},$$

$$b_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2) = 0.122(Z_1^{0.0387} + Z_2^{0.0387}) \text{ \AA}.$$

Максимальная относительная погрешность аппроксимации параметров $A_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2)$ и $b_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2)$, соответствующих столкновению наиболее легких атомных частиц, не превышает величины 8% и для тяжелых атомных частиц уменьшается до 3%.

Этот чисто экспоненциальный межатомный потенциал взаимодействия (2) позволяет аналитически выразить расстояние r_{min} наибольшего сближения при центральном столкновении (прицельный параметр $b = 0$) двух атомных частиц из уравнения

$$U_{B-M}(r_{min}) = E_c,$$

решение которого имеет вид

$$r_{min}(E_c) = -b_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2) \ln \frac{E_c}{A_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2)}, \quad (3)$$

и определяет минимальное расстояние между двумя атомными частицами в точке остановки при инфинитном движении налетающей частицы.

Межатомный потенциал квазижестких сфер может быть определен при этом как

$$U_{qhs}(r) = \begin{cases} \infty & \text{при } r < r_{qhs} = r_{min}(E_c), \\ 0 & \text{при } r > r_{qhs} = r_{min}(E_c). \end{cases}$$

Расстояние максимального сближения атомных частиц r_{min} в моделях жестких ($r_{min} = \text{const}$) и квазижестких ($r_{min}(E_c)$) сфер не зависит от прицельного параметра b , лежащего в интервале $0 < b < r_{min}$ (при $b > r_{min}$ взаимодействие отсутствует). Прицельный параметр b при заданном расстоянии максимального сближения атомных частиц r_{min} определяет положение точки соприкосновения двух сфер и соответственно угол рассеяния налетающей атомной частицы.

Критерий применимости потенциала взаимодействия квазижестких сфер с произвольным межатомным потенциалом $U(r)$ имеет вид [15]

$$\frac{r}{\Delta r} = r \left| \frac{(dU(r)/dr)_{r=r_{min}}}{U(r)} \right| = r \left. \frac{d \ln U(r)}{dr} \right|_{r=r_{min}} > 1.$$

Для экспоненциального межатомного потенциала Борна–Майера (2) критерий применимости потенциала взаимодействия квазижестких сфер принимает вид

$$r \left. \frac{d \ln U_{B-M}(r)}{dr} \right|_{r=r_{min}} = \frac{r_{min}(E_c)}{b_{B-M}^{ap}} > 1,$$

и область применимости соответствующего потенциала взаимодействия квазижестких сфер составляет

$$r_{min}(E_c) > 0.122(Z_1^{0.0387} + Z_2^{0.0387}) \text{ \AA}. \quad (4)$$

Из этого условия видно, что потенциал взаимодействия квазижестких сфер с межатомным потенциалом Борна–Майера применим в области больших межатомных расстояний, которым соответствуют как малые значения энергии столкновения, так и большие значения прицельного параметра в широком диапазоне энергии столкновения атомных частиц.

В рамках полученной модели квазижестких сфер микроскопическое сечение упругого взаимодействия атомных частиц σ_{qhs} зависит от энергии их относительного движения E_c :

$$\sigma_{qhs} = \pi \left[-b_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2) \ln \frac{E_c}{A_{B-M}^{ap}(Z_1, Z_2)} \right]^2,$$

растет с уменьшением энергии E_c и достигает величины газокINETического сечения при тепловых энергиях столкновения. При увеличении энергии столкновения сечение упругого рассеяния уменьшается до величины, ограниченной критерием применимости (4) модели квазижестких сфер. Максимальная энергия столкновения, соответствующая границе критерия применимости модели квазижестких

сфер, при упругом рассеянии большинства партнеров атомных столкновений ограничена величиной 5 кэВ. Этот энергетический диапазон взаимодействия атомных частиц представляет интерес для многих прикладных задач физики плазмы и газового разряда.

Определение микроскопического сечения упругого рассеяния атомных частиц в виде $\sigma_{ghs} \sim r_{min}^2(E_c)$ позволяет для описания атомных столкновений применить математический аппарат модели жестких сфер, который значительно упрощает процедуру расчета параметров рассеяния [14] и делает возможным применение метода статистического моделирования для реального описания процессов упругого рассеяния атомных частиц в газе. При этом модель квазижестких сфер с модифицированным потенциалом взаимодействия Борна–Майера лучше адаптируется к различным сочетаниям партнеров столкновения, так как содержит параметры, характерные для конкретных пар сталкивающихся атомных частиц.

Для проверки степени адекватности модели квазижестких сфер описанию процессов термализации атомных частиц было проведено сравнение результатов расчета углов рассеяния $\theta(b, E_c)$ атомных частиц при столкновении с применением различных межатомных потенциалов. В качестве межатомного потенциала взаимодействия, достаточно корректно описывающего процессы рассеяния атомных частиц при столкновениях, был выбран модифицированный потенциал Фирсова [19] с функцией экранирования Никулина [20]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \psi\left(-\frac{r}{a_f}\right), \quad (5)$$

где

$$a_f = \frac{0.8853a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}}$$

— параметр экранирования Фирсова (a_0 — борковский радиус). Функция экранирования Никулина, полученная путем приближенного решения уравнения Томаса–Ферми при применении вариационного принципа, имеет вид

$$\psi\left(-\frac{r}{a_f}\right) = \left[a \exp\left(-\alpha \frac{r}{a_f}\right) + b \exp\left(\beta \frac{r}{a_f}\right) \right]^2,$$

где $a = 0.7111$, $b = 0.2889$, $\alpha = 0.175$, $\beta = 1.6625$.

Для проведения численного интегрирования в выражении (1) при определении угла рассеяния θ с потенциалом взаимодействия (5) нами была предложена математическая процедура, при которой ин-

тервал интегрирования (r_{min}, ∞) в выражении (1) разбивается на три области.

В первой области $r_{min} < r < r_{min} + \delta$ подынтегральная функция в знаменателе выражения (1)

$$f(r) = 1 - U(r)/E_c - b^2/r^2$$

раскладывается в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} f(r) &= f(r_{min}) + f'(r_{min})(r - r_{min}) + \\ &+ f''(r_{min}) \frac{(r - r_{min})^2}{2} + \dots \approx \\ &\approx (r - r_{min}) \left(f'(r_{min}) + f''(r_{min}) \frac{r - r_{min}}{2} \right). \end{aligned}$$

Относительная погрешность этих преобразований оценивается величиной

$$\Delta = \frac{f'''(r_{min})}{f''(r_{min})} \frac{(r - r_{min})^2}{6}.$$

При $\delta = 0.01$ величина Δ не превышает значения $\Delta \sim 10^{-4}$.

Верхний предел q второй области $r_{min} + \delta \leq r \leq q$ — это то значение r , при котором второй член $-U(r)/E_c$ функции $f(r)$ становится малым и в дальнейшем им можно пренебречь. В качестве критерия малости мы приняли условие $U(r)/E_c < 10^{-6}$.

В третьей области $q < r < \infty$ интеграл в выражении (1) имеет аналитическое решение вида

$$\int_q^\infty \frac{dr/r^2}{[1 - U(r)/E_c - b^2/r^2]^{1/2}} = \frac{1}{b} \arcsin \frac{b}{q}.$$

В результате этой процедуры были рассчитаны значения углов рассеяния $\theta(b, E_c)$ для широкого диапазона значений энергии относительного движения сталкивающихся атомных частиц E_c , каждому из которых соответствовал диапазон значений прицельного параметра b от 0 до b_{max} . Величина максимального прицельного параметра b_{max} для каждого значения энергии столкновения E_c определялась из условия $\theta(b = b_{max}) \approx 0$. По результатам расчета создавался двумерный массив значений углов рассеяния $\theta(b, E_c)$, между элементами которого проводилась сплайн-аппроксимация. Этот двумерный массив $\theta(b, E_c)$, вычисленный для конкретных партнеров столкновения [14], использовался для сравнения с результатами, полученными с помощью межатомного потенциала квазижестких сфер с потенциалом Борна–Майера (2).

Анализ сравнения показал, что оба межатомных потенциала взаимодействия сходятся в области малых энергий и незначительно отличаются при увеличении энергии столкновения ($\Delta\theta/\theta \approx 15\%$ при

$E_c = 5$ кэВ). Это может быть связано с тем, что модифицированный потенциал Фирсова (5) с функцией экранирования Никулина при больших межъядерных расстояниях убывает медленнее, чем истинный потенциал взаимодействия. Более того, модифицированный потенциал взаимодействия Борна–Майера (2), использованный нами в модели квазижестких сфер, лучше применять при больших межъядерных расстояниях, для которых существенны взаимодействия между внешними электронными оболочками сталкивающихся атомных частиц.

3. МОДЕЛЬ ТЕРМАЛИЗАЦИИ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ

При расчете параметров упругого рассеяния в каждом акте атомных столкновений переход от модели жестких сфер к модели квазижестких сфер заключается в замене достаточно недостоверной величины, равной сумме радиусов сталкивающихся атомов, на величину минимального расстояния между двумя сталкивающимися атомными частицами $r_{min}(E_c)$, определяемому межатомным потенциалом их взаимодействия. Выражение для угла рассеяния ϑ в лабораторной системе координат в этом случае имеет следующий вид:

$$\vartheta = \arctg \frac{\frac{2b}{r_{min}(E_c)} \left(\frac{1-b^2}{r_{min}^2(E_c)} \right)^{1/2}}{\frac{2b^2}{r_{min}^2(E_c)} - 1 + \frac{m_1}{m_2}}.$$

Если теперь при статистическом моделировании приравнять отношение прицельного параметра b к величине минимального расстояния $r_{min}(E_c)$, определенному в виде (3), случайному числу $\xi^{1/2}$, то выражение для угла рассеяния ϑ , который и определяет дальнейшую траекторию движущегося атома с массой m_1 после столкновения с атомом газа с массой m_2 , принимает вид

$$\vartheta = \arctg \frac{2[\xi(1-\xi)]^{1/2}}{2\xi - 1 + m_1/m_2}.$$

Определение нами прицельного параметра b в виде $b = r_{min}(E_c)\xi^{1/2}$ учитывает увеличение вероятности больших по абсолютной величине значений b , определяемое тем фактом, что налетающая атомная частица случайным образом попадает в различные точки площади поперечного микроскопического сечения рассеяния $\sigma_{qhs} \sim r_{min}^2(E_c)$.

Траектория движения атома после рассеяния на атоме газа случайным образом является одной из об-

разующих конуса, угол при вершине которого (относительно направления первоначального движения атома) равен ϑ , а высота является продолжением траектории движения атома до столкновения. Положение траектории движения атома на поверхности конуса определяется случайным значением азимутального угла φ , распределенного равномерно в интервале $[0, 2\pi]$. Величина пробега δ движущегося атома между последовательными упругими столкновениями с атомами газа зависит от его кинетической энергии и случайным образом (ξ — случайное число) флуктуирует относительно величины его свободного пробега $\lambda_{qhs} \sim 1/\sigma_{qhs}$:

$$\delta = -\frac{1}{N\pi r_{min}^2(E_c)} \ln \xi,$$

где N — концентрация атомных частиц в рассеивающей среде.

При движении атома с энергией E_c в газе, атомы которого имеют максвелловское распределение по скоростям [12], выражение для пробега движущегося атома принимает вид

$$\delta = -\frac{\left(1 + \frac{1}{2\omega}\right) \operatorname{erf}(\sqrt{\omega}) + \frac{\exp(-\omega)}{\sqrt{\pi\omega}}}{N\pi r_{min}^2(E_c)} \ln \xi,$$

где параметр

$$\omega = \frac{3}{2} \frac{E_c}{E_T} \frac{m_2}{m_1}$$

и E_T — тепловая (средняя) энергия атомов газа.

Однако, как показали результаты статистического моделирования процессов термализации атомных частиц, учет максвелловского распределения атомов газа по скоростям незначительно влияет на конечные результаты пространственного распределения термализованных атомов.

На основании законов сохранения энергии и импульса можно показать, что при столкновении движущегося атома с атомом газа величины его энергии до столкновения E и после него E_k в рамках модели квазижестких сфер связаны соотношением

$$E_k = \frac{E}{(g+1)^2} \left[g^2 + 1 + 2g \left(\frac{2b^2}{r_{min}^2(E)} - 1 \right) \right],$$

где $g = m_1/m_2$.

В процессе релаксации энергии при столкновении с атомами газа энергия движущегося атома E_k уменьшается до тепловой энергии атомов газа E_T . Движущийся атом будет считаться термализованным, если его энергия E_k будет отличаться от E_T

на величину флуктуации энергии ΔE , не превышающую среднеквадратичное отклонение энергии атома от тепловой энергии атомов газа:

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{r_{min}(E)} E_k^2 \frac{db^2}{r_{min}^2(E)} - E_T^2.$$

Величина ΔE с учетом выражения для энергии E_k имеет вид

$$\Delta E = \frac{2g}{g+1} E_T \left[\frac{(g-1)^2}{4\pi g} + \frac{(g+1)^2}{3g} - \frac{1}{3\pi} \right]^{1/2}.$$

В результате рассмотрения большого числа траекторий движения потока атомов («историй» движения), которые заканчиваются их термализацией, анализируются их конечные координаты и импульсы и формируются соответствующие пространственные и угловые распределения термализованных атомов. На основе пространственного распределения термализованных атомов может быть описан процесс их дальнейшего диффузионного движения в пространстве как аналитическим методом решения уравнения диффузии [11], так и методом последующего статистического моделирования [14].

Теперь рассмотрим процедуру описания энергетического и углового распределения источника высокоэнергетичных атомов на примере разыгрывания случайного значения начальной энергии атома E_0 из энергетического спектра

$$\frac{dN}{dE} = C \frac{E}{(E + E_b)^3},$$

описывающего распределение по энергиям атомов при ионно-плазменном распылении (E_b — энергия связи атомов в мишени) [21]. Процедура разыгрывания непрерывной случайной величины, адаптированная к спектру распыленных атомов, имеет вид

$$\xi \int_0^{E_{max}} \frac{dN}{dE} dE = \int_0^{E_0} \frac{dN}{dE} dE.$$

После интегрирования по энергии и разрешения относительно случайного значения начальной энергии E_0 получаем выражение для E_0 распыленного атома:

$$E_0 = \frac{E_b \xi^{1/2}}{\frac{E_{max} + E_b}{E_{max}} - \xi^{1/2}}.$$

Аналогичным образом разыгрываются случайные направления вылета атомов из заданного углового

распределения $dN/d\vartheta$ источника высокоэнергетичных атомов, которые также определяют границу зоны их термализации при рассеянии в газовой среде.

В рамках предложенной модели термализации атомных частиц было проведено сравнение результатов статистического моделирования с результатами экспериментальных исследований. В работе [22] методом катодного распыления при различных давлениях рабочего газа (Ar) на подложки из полиоксида алюминия (Al_2O_3), расположенные на разном расстоянии от распыляемой мишени, наносились пленки меди (Cu). В результате изучения экспериментальных зависимостей толщины осаждаемых пленок меди от расстояния в различных сечениях пространства мишень-подложка было показано, что, например, глубина зоны термализации L распыленных атомов меди при давлении рабочего газа (Ar) $P = 5$ Па составляет $L_{exp} \approx 12 \pm 2$ см. Результаты статистического моделирования, проведенные на основе предложенной модели, для приведенных условий экспериментальных исследований показывают, что рассчитанная величина глубины зоны термализации $L_{exp} \approx 11$ см адекватно описывает процесс термализации атомов меди в аргоне.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим отдельные результаты моделирования, полученные с помощью разработанной нами модели термализации атомных частиц, на примере термализации атомов в инертных газах. В качестве термализующегося атома выберем атом $Sr_{87.6}^{38}$, масса которого практически совпадает с массой атома $Kr_{83.8}^{36}$. Характерный вид рассчитанной пространственной зоны термализации потока распыленных атомов Sr для точечного источника представлен на рис. 1.

Пространственную зону термализации атомных частиц для источников, обладающих осевой симметрией, можно характеризовать глубиной L и шириной H . Вид зоны термализации потока атомов Sr в газовой среде Ne (рис. 1а) характерен для термализации тяжелых атомных частиц в газовой среде более легких атомов. При столкновении тяжелых атомов с более легкими происходит их рассеяние на малые углы и зона термализации потока тяжелых атомов вытянута в направлении их первоначального движения ($L > H$). В этом случае наблюдается потеря преимущественно энергии, но не импульса. При столкновении атомов Sr с более тяжелыми атомами Xe (рис. 1б) происходит их рассеяние на большие углы и зона термализации потока более лег-

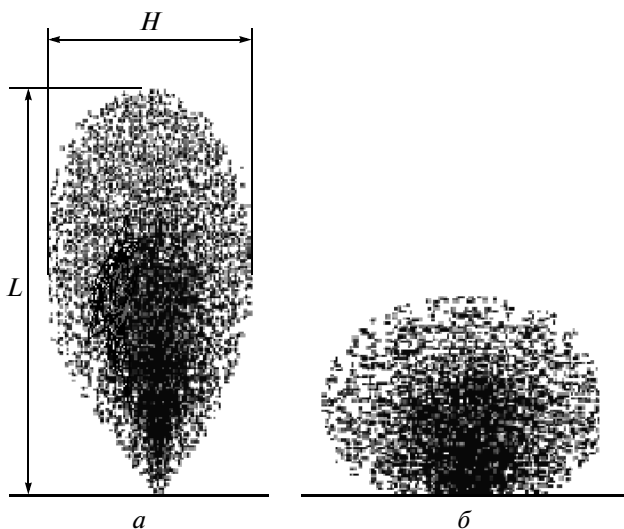


Рис. 1. Пространственные распределения термализованных атомов Sr в среде инертных газов Ne (а) и Xe (б) при давлении 10 Па

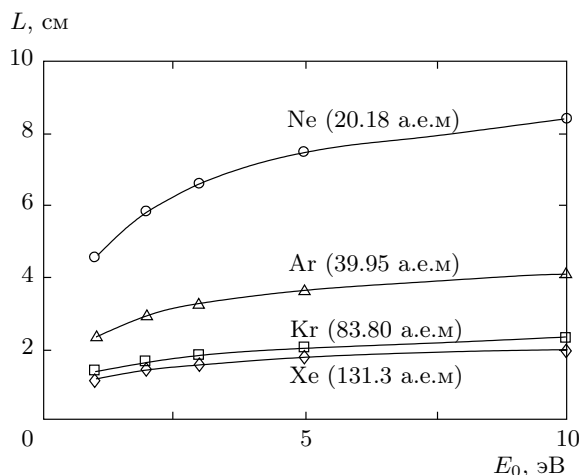


Рис. 2. Зависимости глубины L зоны термализации потока атомов Sr от их начальной энергии E_0

ких атомов Sr увеличивается в направлении бокового рассеяния, т. е. прижата к плоскости их источника ($L < H$). В этом случае наблюдается преимущественная потеря импульса. Зависимость глубины L зоны термализации потока атомов Sr от их начальной энергии E_0 в газовой среде ряда инертных газов (давление 10 Па) представлена на рис. 2.

С увеличением начальной энергии E_0 атомов Sr глубина L зоны их термализации увеличивается. В среде инертного газа Ne, как наиболее легкого из представленных газов, увеличение глубины L зоны

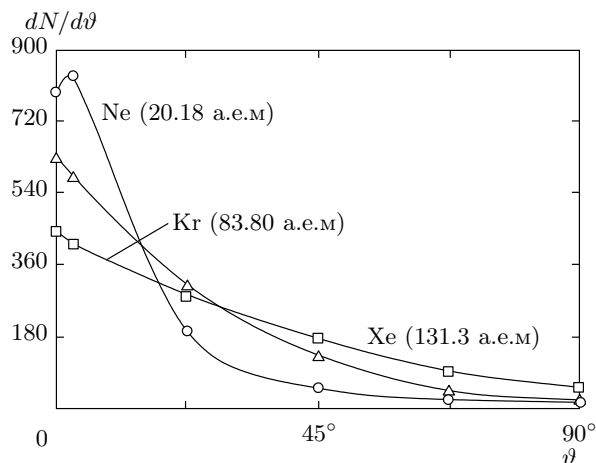


Рис. 3. Угловые распределения термализующихся атомов Sr при столкновении с атомами инертных газов Ne, Kr и Xe при давлении газовой среды 10 Па; $E_0 = 10$ эВ

термализации происходит наиболее интенсивно. Это обусловлено тем, что для термализации атомов Sr в среде более легких атомов Ne необходимо большее число столкновений. Минимальное число столкновений атомов Sr до их термализации соответствует движению в среде инертного газа Kr. Это связано с тем, что при столкновении атомов Sr с атомами Kr, имеющими практически ту же атомную массу, величина средней переданной энергии имеет максимальное значение. При столкновении атомов Sr с более легкими атомами Ne и более тяжелыми атомами Xe величина средней переданной энергии уменьшается, но последующий характер их движения различен и описывается угловым распределением $dN/d\theta$ термализующихся атомов Sr (рис. 3).

Анализ формы и глубины пространственной зоны термализации атомных частиц при их рассеянии в газовой среде показывает, что ее граница достаточно сильно размыта из-за статистического разброса величины пробега δ движущегося атома между последовательными упругими столкновениями с атомами газа. Как было показано выше, величина пробега $\delta \sim -\lambda \ln \xi$ случайным образом (ξ — случайное число из интервала $[0,1]$) флуктуирует относительно средней длины свободного пробега λ . Но число таких «статистически» удаленных атомов в потоке невелико, и если для величины потока термализованных атомов J_T ограничиться его статистическим разбросом $\sqrt{J_T}$, то пространственная зона термализации атомных частиц при их рассеянии в газовой среде принимает конкретные очертания

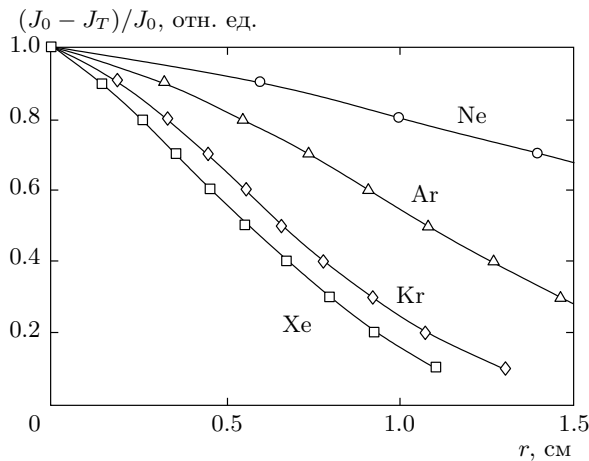


Рис. 4. Изменение относительной величины потока атомов Sr по глубине зоны их термализации для ряда инертных газов при давлении газовой среды 10 Па

ния. При расчете величины границы зоны термализации атомных частиц мы ограничивались отношением $(J_0 - J_T)/J_0 \approx 1\%$, что приводит к термализации 99% первоначального потока атомов J_0 . Изменение величины потока атомов Sr по глубине зоны их термализации для ряда инертных газов при давлении газовой среды 10 Па приведено на рис. 4.

Интенсивность направленного потока атомов J_0 уменьшается из-за их термализации и перехода в диффузионный режим движения. Наиболее интенсивно термализация атомов Sr происходит при переходе к более тяжелым атомам газовой среды за счет рассеяния на большие углы. Однако наиболее интенсивная термализация атомов Sr происходит при рассеянии на соизмеримых по массе атомах Kr в результате передачи максимальной средней энергии при столкновениях.

5. ВЫВОДЫ

Результаты статистического моделирования в рамках предложенной модели показывают, что выход термализованных атомов из направленного потока приводит к формированию пространственной зоны их термализации, которую можно интерпретировать как виртуальный источник дальнейшего диффузионного движения атомов. В результате термализации первоначального потока атомов как сама форма и размеры пространственной зоны термализации, так и соотношение прямого и диффузионного потоков в ней зависят от начальной энергии движущихся атомов, начального углового распределения и параметров сталкивающихся атомных частиц.

Практическая реализация предложенной модели, а также алгоритма статистического моделирования процесса термализации атомных частиц при рассеянии в газах и расчета границы пространственной зоны их термализации может быть использована, например, при ионно-плазменном распылении сложных оксидов в кислородосодержащей среде. В этом случае в среду рабочего газа следует дозировать инертный газ, атомы которого соизмеримы по массе одному из компонентов распыляемой мишени. Это приведет к управляемому изменению формы пространственной зоны их термализации и соответственно к заданному изменению стехиометрии потоков распыляемых компонентов мишени в пространстве дрейфа мишень–подложка. При этом соотношение прямого и диффузионного потоков позволяет оценить энергетические характеристики и пространственные распределения распыленных атомов, плотности и стехиометрию их потоков на поверхности подложки, обусловленные энергетическими характеристиками ионов и атомов рабочего газа, бомбардирующих катод–мишень, и свойствами самой мишени.

Предложенная модель термализации достаточно корректно описывает процессы рассеяния атомов в газовой среде при высокой скорости статистического моделирования. Энергетический диапазон применения модели процесса термализации атомных частиц представляет интерес для многих прикладных задач физики плазмы, газового разряда и процессов ионного осаждения.

Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. J. Cadieu and N. Chencinski, IEEE Trans. Magn. MAG-11, 227 (1975).
2. W. D. Westwood, J. Vac. Sci. Technol. 15(1), 1 (1978).
3. K. Meyer, I. K. Schuller, and C. M. Falco, J. Appl. Phys. 52, 5803 (1981).
4. J. A. Valles-Abarca and A. Gras-Marti, J. Appl. Phys. 55, 1370 (1984).
5. A. Gras-Marti, I. Abril, and J. A. Valles-Abarca, Thin Solid Films 124, 59 (1985).

6. J. H. Keller and R. G. Simmons, IBM J. Res. Dev. **23**, 24 (1979).
7. R. S. Robinson, J. Vac. Sci. Technol. **16**, 185 (1979).
8. В. А. Вольпяс, Е. К. Гольман, М. А. Цукерман, ЖТФ **66**(4), 16 (1996).
9. R. E. Somekh, Vacuum **34**, № 10/11, 987 (1984).
10. T. Motohiro and Y. Taga, Surf. Sci. **134**, 494 (1983).
11. T. Motohiro and Y. Taga, Thin Solid Films **112**, 161 (1984).
12. А. Г. Жиглинский, В. В. Кучинский, Е. Г. Шейкин, ЖТФ **56**(9), 1718 (1986).
13. G. M. Turner, I. S. Falconer, B. W. James et al., J. Appl. Phys. **65**, 3671 (1989).
14. V. A. Volpyas, P. K. Petrov, and R. A. Chakalov, Vacuum **52**, 427 (1999).
15. В. А. Вольпяс, Е. К. Гольман, ЖТФ **70**(3), 13 (2000).
16. M. Born and J. E. Mayer, Z. Phys. **75**, 1 (1932).
17. A. A. Abrahamson, Phys. Rev. **178**, 76 (1969).
18. V. I. Gaydaenko and V. K. Nikulin, Chem. Phys. Lett. **7**, 360 (1970).
19. О. Б. Фирсов, ЖЭТФ **33**, 696 (1957).
20. В. К. Никулин, ЖТФ **41**, 567 (1971).
21. M. W. Thompson, Phil. Mag. **18**, 377 (1968).
22. А. В. Бобыль, С. Ф. Карманенко, *Пучковые и плазменные процессы в планарной технологии*, Изд-во Политехн. унив., Санкт-Петербург (2005), с. 113.