

УДК 537.534:539.186.3

СРАВНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ И КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОТРАЖЕНИЯ ИОНОВ ВОДОРОДА ПРИ СКОЛЬЗЯЩЕМ ПАДЕНИИ НА МИШЕНЬ

© 2004 г. В. А. Курнаев, Н. Н. Трифонов, В. А. Урусов

Московский инженерно-физический институт (Государственный университет), Москва, Россия

Поступила в редакцию 10.09.2003 г.

Проведен сравнительный анализ компьютерного моделирования и аналитических теорий отражения легких ионов от поверхности твердых тел. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными показывает, что для правильного описания процесса отражения в области энергий от нескольких единиц до десятков килоэлектрон-вольт необходимо учитывать рассеяние на большие углы при столкновении налетающего иона с атомами твердого тела.

ВВЕДЕНИЕ

Отражение легких ионов с энергиями в единицы и десятки килоэлектрон-вольт от поверхности твердого тела было предметом интенсивного изучения в последней трети минувшего века [1].

Для малоуглового рассеяния основные теоретические результаты были получены О.Б. Фирсовым и теоретиками из МИФИ на основе решения кинетического уравнения при разных предположениях, облегчающих аналитическое решение задачи. В работах [2, 3] были найдены выражения для тройного дифференциального коэффициента отражения, соответствующего энергетическому распределению частиц, рассеянных на заданные углы, для бесконечной среды с учетом торможения частиц. В работе [4] было найдено точное решение для полубесконечной среды с учетом торможения, но в пренебрежении зависимостью рассеивающих свойств среды от энергии.

Найденные решения качественно, а в некоторых случаях и количественно, описывали наблюдаемые в экспериментах формы энергетических спектров, их зависимость от начальной энергии частиц, геометрии рассеяния, атомного номера материала мишени. Однако было обнаружено [1, 5], что зависимость от угла скольжения характерных параметров спектра (полуширины и положения максимума) при отражении ионов водорода с энергией 20 кэВ от поверхности золота имела вид с максимумом при угле зеркального отражения, что было прямо противоположно теории. Попытка “снять” это единственное расхождение теории и эксперимента с помощью недавно разработанного кода, учитывающего шероховатость мишени [6] в предположении, что причиной расхождения является микрорельеф на ее поверхности, оказалась неудачной.

Расчеты как для шероховатой, так и для гладкой мишени соответствовали данным эксперимента, а не всех перечисленных выше теоретических работ. Это послужило толчком для более тщательного анализа причин такого расхождения, чему и посвящена данная работа.

АНАЛИЗ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Анализ теоретических моделей [3, 4, 9], основанных на диффузионном приближении, при скользких углах рассеяния показывает при сравнении с экспериментальными данными качественно другой ход зависимости наиболее вероятных потерь энергии и полуширины энергетических спектров в зависимости от угла рассеяния. В этих моделях движение частиц в среде рассматривается как диффузия в импульсном пространстве, а потери энергии при движении частиц в среде полагаются непрерывными. Угол скольжения пучка предполагался малым ($\alpha < 1$). Кроме того, характерный угол рассеяния в одном столкновении считался много меньшим, чем угол скольжения и угол вылета ($\zeta = \theta - \alpha$), что позволило считать процесс существенно многократным и задачу о нахождении распределения отраженных частиц свести к решению уравнения переноса Больцмана.

В теории, развитой Фирсовым, задача была решена для двух приближений:

1. Для обратно квадратичного потенциала взаимодействия [10]:

$$w = \frac{4\sqrt{3}\langle\Theta^2\rangle\zeta}{\pi[4\pi^2(\langle\Theta^2\rangle R_0 s)^2 + \varphi^2 + (\zeta^2 - \zeta\alpha + \alpha^2)]^2}, \quad (1)$$

где w – дифференциальный коэффициент рассеяния, $\langle\Theta^2\rangle$ – средний квадрат угла рассеяния на еди-

нищу длины пути, $s = R/R_0$ – безразмерный пробег, R_0 – полный пробег частиц в веществе, Φ – азиму-

тальный угол рассеяния.

2. Для случая сильного торможения [3]:

$$w = \frac{1 - 2.25x + 1.25x^2}{x^{5/2}} \exp \left[\frac{3(1 - 1.5x + 0.5x^2)\alpha^2 - 3(1-x)^2\alpha\theta + (1 - 2.25x + 1.25x^2)\theta^2}{\langle \Theta^2 \rangle R_0 x} \right], \quad (2)$$

где $x = 1 - \sqrt{E/E_0}$.

Дальнейшее развитие это направление получило в работе Ремизовича и др. [4], где было получено точное решение:

$$w = \frac{2\sqrt{3}\zeta}{\pi^{3/2} |dE/dR| \langle \Theta^2 \rangle^{3/2} R_0^{5/2} s^{5/2}} \exp \left\{ -\frac{4}{\langle \Theta^2 \rangle R_0 s} \left(\zeta^2 - \zeta\alpha + \alpha^2 + \frac{\Phi^2}{4} \right) \right\} \operatorname{erf} \left(2 \sqrt{\frac{3\zeta\alpha}{\langle \Theta^2 \rangle R_0 s}} \right), \quad (3)$$

где $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^x \exp(-t^2) dt$.

В диапазоне средних энергий (единицы – десятки кэВ) преобладают неупругие потери энергии. В приближении непрерывного замедления $dE/dR = -k\sqrt{E}$. Полный пробег частиц определялся по теории Линхарда, а средний квадрат угла отклонения на единицу пути по теории Фирсова:

$$R_0 = \frac{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{2/3} (E_0 E_B)^{1/2}}{4\pi n a_0 e^2 Z_1^{7/6} Z_2}, \quad (4)$$

$$\langle \Theta^2 \rangle = \frac{2\pi n Z_1^2 Z_2^2 e^4}{E^2} \ln \left(1 + \frac{0.7E}{30.5 Z_1 Z_2 \sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}} \right), \quad (5)$$

где Z_1 и Z_2 – заряды налетающего атома и атома мишени, n – концентрация атомов мишени, a_0 – борковский радиус, E_B – энергия Бора.

В рассмотренных выше моделях вероятность рассеяния на большой угол в однократном столкновении считается пренебрежимо малой. В результате при фиксированном угле рассеяния $\theta = \alpha + \zeta = \text{const}$ наиболее вероятные потери энергии и полуширина спектра получаются минимальными при угле скольжения, равном углу вылета, в то время как эксперимент дает противоположную зависимость.

Интересно отметить, что модель двукратного рассеяния [9]

$$w = \frac{\exp \left[-d \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - 1 \right) \left(\frac{1}{\sin \frac{\chi\theta}{4}} - 1 \right) \right] (1 - \sqrt{\varepsilon})^2}{\sqrt{\varepsilon} (\sqrt{\varepsilon} \sin(\theta - \alpha) + \sin \alpha)^3 (1 - \varepsilon)^{1/2}}, \quad (6)$$

где $d = 0.227 \frac{\pi(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})}{Z_1^{2/3}} \left(\frac{E_B}{E_0} \right)^{1/2}$, $\varepsilon = \frac{E}{E_0}$, χ – коэффициент порядка единицы, учитывающая рассеяние на большие углы в однократном столкнове-

нии, в аналитическом приближении в плоскости падения пучка дает монотонную зависимость от угла скольжения, что тоже расходится с результатами эксперимента.

Таким образом, анализ теоретических моделей позволяет предположить, что энергетический спектр в диапазоне энергий от нескольких единиц до десятков кэВ формируется за счет сочетания нескольких рассеяний на большой угол и многократного рассеяния на малые углы. Причем вклады и того, и другого процессов в формирование энергетических спектров сопоставимы.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Компьютерное моделирование выполнено с помощью TRIM-подобного кода SCATTER [7]. Для ускорения расчетов были табулированы значения максимального прицельного параметра парного соударения, угол рассеяния, упругие и неупругие потери энергии в каждом столкновении как функция энергии и параметра соударения. Кроме того, был использован генератор случайных чисел с периодом более $2 \cdot 10^{18}$. Использовался Kr-C потенциал взаимодействия, неупругие потери рассчитывались по формуле Оена–Робинзона.

Для расчета энергетических распределений частиц, отраженных в пределах малого телесного угла, соответствующего углу регистрации энергоанализатора ионов и нейтральных атомов, использованного в эксперименте [5], в общей сложности был проведен расчет $\sim 10^9$ траекторий.

Для ограничения значения максимального прицельного параметра при табулировании сначала использовалось значение минимального угла рассеяния в парных соударениях $\theta_{\min} = 1^\circ$, как это рекомендовалось в [8]. Однако полученный спектр оказался значительно уже экспериментального. Вариация θ_{\min} показала, что с уменьшением значения этого угла вплоть до $\theta_{\min} = 0.01^\circ$ ширина спектра растет и приближается к экспериментально наблюдаемому. На рис. 1 приведены вычисленные для разных значений θ_{\min} энергетические распределения частиц, зеркально отра-

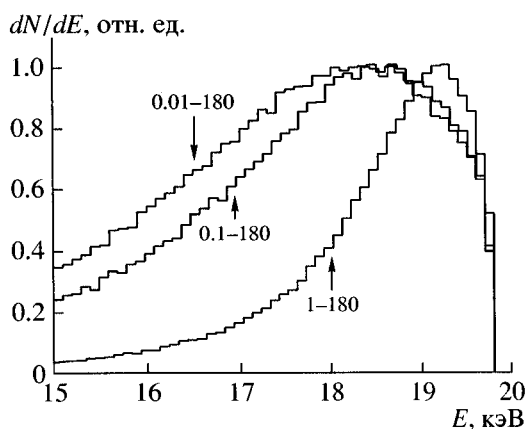


Рис. 1. Результаты моделирования с помощью модифицированного кода SCATTER энергетических спектров рассеянных частиц для случая облучения гладкой мишени из золота протонами с энергией 20 кэВ при угле рассеяния 25° и угле скольжения 12.5°. Пределы изменения угла в парном однократном соударении указаны у соответствующих гистограмм.

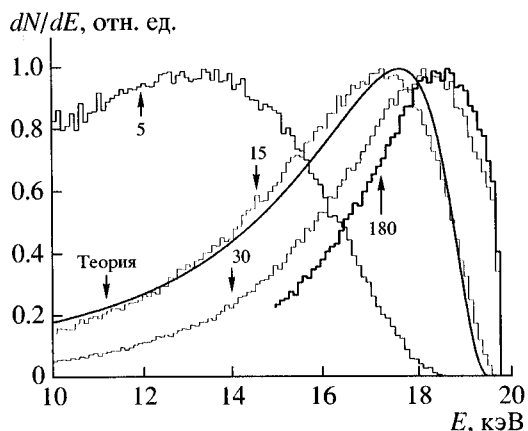


Рис. 2. Энергетические спектры для случая, соответствующего рис. 1, при минимальном угле однократного рассеяния $\theta_{\text{мин}} = 0.1^\circ$ и варьируемом значении максимального угла однократного рассеяния в парных соударениях в пределах от 5° до 180° в сравнении с расчетом по формуле (3) (сплошная линия).

женных на угол 25° при облучении протонами с энергией 20 кэВ мишени из золота. Видно, что попытка ограничить значение $\theta_{\text{мин}}$ сверху приводит к серьезной переоценке наиболее вероятной и средней энергии рассеянных частиц, так как в этом случае частица значительно быстрее покидает мишень, набрав нужный суммарный угол рассеяния. В то же время спектры для $\theta_{\text{мин}}$, равно 0.1° и 0.01°, отличаются незначительно.

На рис. 2 приведены энергетические спектры, найденные путем машинного моделирования, и спектр, рассчитанный по формуле (3) [4]. Изменяемым параметром при расчетах являлось значение максимального угла рассеяния в парных соударениях. Именно малость этого угла по сравнению с углом рассеяния является главным критерием применимости малоуглового приближения при решении кинетического уравнения. Как видно из рисунка, при значении угла максимального рассеяния, равном 15°, наблюдается совпадение результатов аналитического решения с компьютерным моделированием. При больших углах вплоть до максимально возможного, равного 180°, спектр становится уже, чем следует из теории.

Однако при значениях $\theta_{\text{макс}} > 30^\circ$ изменение спектра незначительно, что свидетельствует о малом вкладе в формирование спектра столкновений с большими значениями угла рассеяния. Диффузионное приближение, в котором получена формула (1), должно тем лучше описывать реальную ситуацию, чем меньше максимально возможный угол однократного рассеяния. Существенное отличие спектра от теории при $\theta_{\text{макс}} = 5^\circ$, очевидно, связано с тем, что при выводе (3) предполагалась независимость $\langle \Theta^2 \rangle$ от энергии. Соответственно, выражение (1) может быть использо-

вано в том случае, когда спектры достаточно узки, а максимум близок к начальной энергии. Так как при “подсчете” частиц, рассеянных на угол 25° с отклонением не больше чем на 5° в каждом соударении, длина пути оказывается большой, то значительные потери энергии приводят к тому, что применимость (3) нарушается.

Рис. 3 иллюстрирует, что компьютерное моделирование спектров отраженных частиц без ограничения по углу качественно соответствует результатам эксперимента, в то время как ограничение этого угла и тем самым лучшее удовлетворение условий применимости диффузионного описания

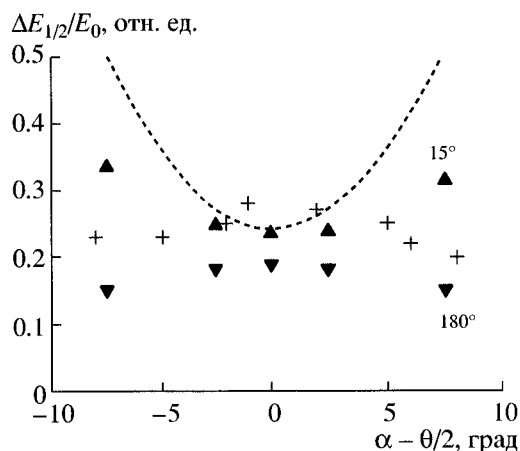


Рис. 3. Зависимость относительной полуширины энергетических спектров отраженных частиц при условиях, соответствующих рис. 1, от угла скольжения: пунктир – расчет по (1), крестики – эксперимент, треугольники – компьютерное моделирование с разными значениями $\theta_{\text{макс}}$.

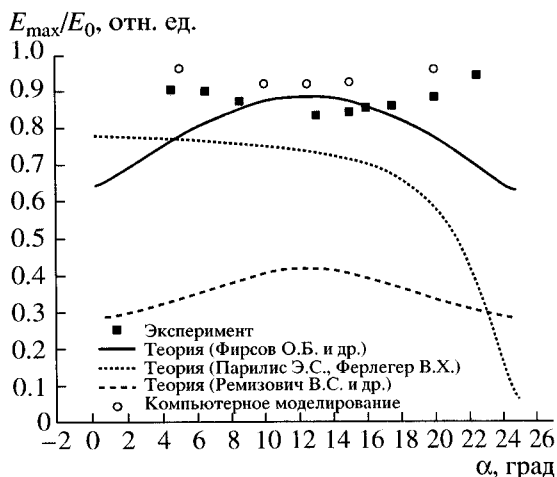


Рис. 4. Наиболее вероятная энергия протонов, отраженных от золота, в зависимости от угла скольжения α ; угол рассеяния $\theta = 25^\circ$, начальная энергия частиц 20 кэВ.

при решении уравнения Больцмана качественно соответствуют результатам теории. Рис. 4 показывает зависимость наиболее вероятной энергии отраженных частиц от угла скольжения. Из рисунков видно, что компьютерный код более точно описывает статистику пробегов в веществе, чем аналитические теории.

Таким образом, компьютерное моделирование позволяет проанализировать вклад различных фак-

торов в формирование спектров отраженных частиц, а точные аналитические решения кинетического уравнения позволяют провести верификацию компьютерного кода.

Авторы благодарны В.С. Ремизовичу за замечания и предложения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курнаев В.А., Машикова Е.С., Молчанов В.А. // Отражение легких ионов от поверхности твердого тела, М.: Энергоатомиздат, 1985. 192 с.
2. Фирсов О.Б. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С. 1452.
3. Firsov O.B., Mashkova E.S., Molchanov V.A. // Radiat. Eff. 1973. V. 18. P. 257.
4. Ремизович В.С., Рязанов М.И., Тилинин И.С. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 448.
5. Коборов Н.Н., Курнаев В.А. // Поверхность. 1983. № 8. С. 45.
6. Kurnaev V.A., Trifonov N.N. // Physica Scripta. 2003. V. 103. P. 85.
7. Koborov N.N. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1997. V. 129. P. 5.
8. Eckstein W. // Computer Simulation of Ion Solid Interactions. Berlin: Springer-Verlag, 1991. P. 50.
9. Парилис Э.С., Ферлегер В.Х. // Поверхность. 1985. № 6. С. 17.
10. Машикова Е.С., Молчанов В.А., Снисарь В.А., Фирсов О.Б. // Физика плазмы. 1976. Т. 2. Вып. 4. С. 578.

Comparison of the Analytical Description and Computer Simulation of Hydrogen Ion Reflection under Glancing Incidence on a Target

V. A. Kurnaev, N. N. Trifonov, V. A. Urusov

The comparative analysis of computer simulation and analytical theories of reflection of light ions from a surface of solid bodies is carried out. Comparison of the obtained results with experimental data shows, that for the exact description of process of reflection in the field of energies from several keV up to tens keV it is necessary to take into account a dispersion on major angle at collision of an ion with atoms of a solid body.