13

Многократное рассеяние протонов при прохождении через тонкие пленки золота

 П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев

ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 28 марта 2025 г.
В окончательной редакции 29 апреля 2025 г.
Принято к публикации 14 мая 2025 г.

Предложена методика расчета многократного рассеяния атомных частиц при прохождении через тонкие пленки. Приведен расчет углового распределения протонов при прохождении через тонкую пленку золота различной толщины. Полученные данные согласуются с традиционным расчетом методом Монте-Карло при использовании одного и того же потенциала. Хорошего согласия с экспериментом удается достичь применением потенциала атом−твердое тело с коррекцией константы экранирования для вычисления дифференциального сечения рассеяния, чего не удается добиться применением традиционных парных потенциалов.

Ключевые слова: многократное рассеяние, тонкие пленки, угловое распределение, столкновение атомов с твердым телом.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.15.60808.20329

При прохождении частиц через тонкие пленки происходит многократное рассеяние частиц, их ионизация и потеря энергии. Эксперименты по измерению углового и энергетического распределения ионов и атомов, прошедших пленку, используются для измерения важных характеристик — электронных тормозных потерь в веществе, получения сведений о потенциале взаимодействия частиц с твердым телом [1], изучения страгглинга, определения шероховатости пленки [2]. Прохождение частиц через тонкие пленки может использоваться для ионизации потоков атомных частиц, покидающих плазму, что позволяет анализировать параметры ионной компоненты плазмы [3,4].

Обзор работ по теории многократного рассеяния можно найти в монографиях [5,6]. Из этих работ выделим работы Фирсова [7,8], где проблема была рассмотрена в двух приближениях: в диффузионном, которое справедливо при рассеянии, близком к кулоновскому, когда основной вклад в средний квадрат угла рассеяния на единицу пути вносит рассеяние на малые углы, и в приближении, когда потенциал взаимодействия падающих ионов с атомами среды можно аппроксимировать как обратно пропорциональный квадрату расстояния. В работе Мейера [9] были выполнены численные расчеты для потенциала Томаса−Ферми−Фирсова. Как правило, существующие работы либо используют борновское приближение, либо выполнены для конкретного вида потенциала. Из работ последних лет можно отметить [10–14]. Задача настоящей работы состояла в разработке методики расчета многократного рассеяния для любого типа потенциала.

Рассмотрим случай двукратного рассеяния (рис. 1). Пусть первое рассеяние происходит под углом θ_1 и лежит в плоскости ZX. Второе рассеяние происходит под углом θ_2, угол φ характеризует угол между плоскостями первого и второго рассеяния. Повернем систему координат на угол θ_1 относительно оси Y. В системе координат $Z'X'Y$ проекции вектора скорости на эти оси будут

$$v_{X'} = v\sin\theta_2\cos\varphi, \quad v_Y = v\sin\theta_2\sin\varphi, \quad v_{Z'} = v\cos\theta_2.$$

Применим матрицу поворота относительно оси Y на угол θ_1 и получим значение проекции вектора скорости после второго соударения в начальной системе координат XYZ:

$$v_X = v(\cos\theta_1\sin\theta_2\cos\varphi + \sin\theta_1\cos\theta_2),$$

$$v_Y = v\sin\theta_2\sin\varphi,$$

$$v_Z = v(-\sin\theta_1\sin\theta_2\cos\varphi + \cos\theta_1\cos\theta_2).$$

Таким образом, после двукратного рассеяния угол вылета частицы относительно оси Z равен

$$\theta_3 = \arccos(-\sin\theta_1\sin\theta_2\cos\varphi + \cos\theta_1\cos\theta_2). \quad (1)$$

Очевидно, что в случае $\varphi = 0$ имеем $\theta_3 = \theta_1 + \theta_2$, а в случае $\varphi = \pi$ — $\theta_3 = \theta_1 - \theta_2$.

Пусть частица с начальной энергией E_0 рассеивается на угол θ_1. Вероятность рассеяния в диапазоне углов $\theta - \Delta\theta/2$ и $\theta + \Delta\theta/2$ описывается выражением

$$P(E,\theta) = \frac{d\sigma}{d\theta}(E,\theta)N_t d\Delta\theta, \quad (2)$$

где $d\sigma/d\theta$ — дифференциальное сечение рассеяния, N_t — плотность мишени, d — толщина рассматриваемого слоя. При рассеянии на угол θ_1 энергия налетающей

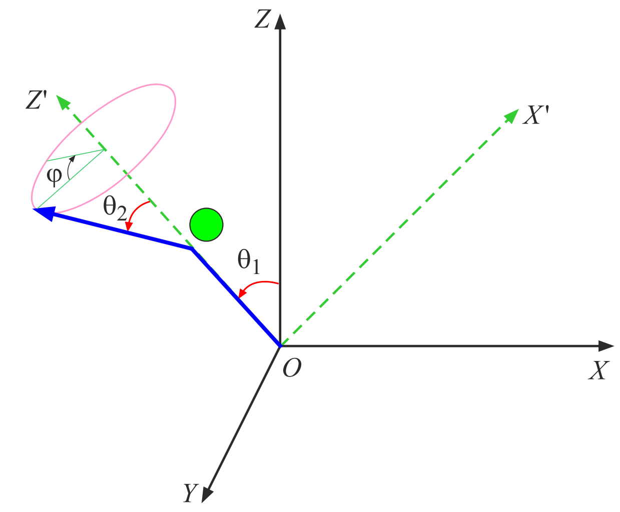

Рис. 1. Геометрия двукратного рассеяния.

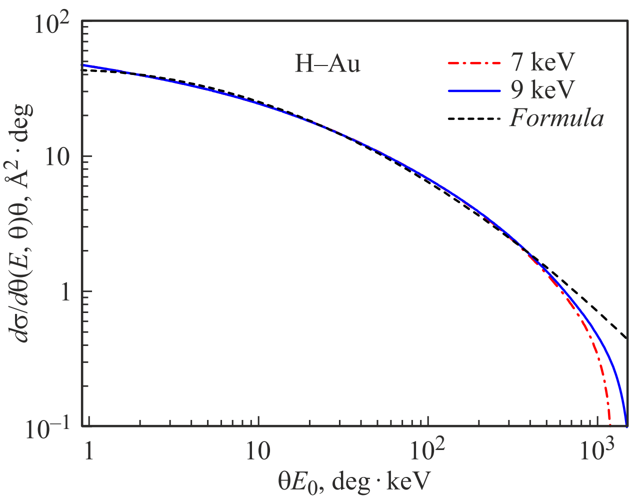

Рис. 2. Зависимость дифференциального сечения рассеяния в универсальных координатах в сопоставлении с аппроксимационной формулой (7).

частицы E_1 описывается выражением

$$\frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{M_1}{M_1+M_2}\right]^2 \times \left(\cos\theta_1 \pm \left\{\left(\frac{M_2}{M_1}\right)^2 - \sin^2\theta_1\right\}^{\frac{1}{2}}\right)^2 = K(\theta_1), \quad (3)$$

где M_1 и M_2 — масса соответственно налетающего иона и атома поверхности.

После второго соударения частица будет иметь энергию $E_2 = E_1 K(\theta_2)$. Вероятность второго рассеяния описывается функцией $P(E_1, \theta_2)$.

Результирующее распределение частиц по углам θ_3 и энергиям E_2 получается интегрированием по всем возможным углам θ_1, θ_2 и φ.

Запишем решение в неявной форме

$$F(E_2, \theta_3) = \int_0^{\pi} d\theta_1 \int_0^{\pi} d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi P(E_0, \theta_1) P(E_1, \theta_2), \quad (4)$$

при этом угол θ_3 рассчитывается по формуле (1), $E_1 = E_0 K(\theta_1)$, $E_2 = E_1 K(\theta_2)$.

Решение этих уравнений удобно искать методом дискретизации значений θ_3 и E_2, суммируя все случаи, когда эти параметры реализуются. Данное решение может быть обобщено на случай многократного рассеяния. Решение для кратности столкновений m получается из решения для случая $m-1$. При этом учитывается, что частица, рассеянная на угол θ_{m-1}, может иметь различные энергии E_{m-1},

$$F_m(E_m, \theta_m) = \int_0^{E_0} dE_{m-1} \int_0^{\pi} d\theta_{m-1} \int_0^{\pi} d\theta_2 \times \int_0^{2\pi} d\varphi F(E_{m-1}, \theta_{m-1}) P(E_{m-1}, \theta_2), \quad (5)$$

при этом

$$\theta_m = \arccos(-\sin\theta_{m-1}\sin\theta_2\cos\varphi + \cos\theta_{m-1}\cos\theta_2),$$

$$E_m = E_{m-1} K(\theta_2). \quad (6)$$

В работе [2] угловое распределение частиц, прошедших через тонкую пленку золота, моделировалось нашей программой методом Монте-Карло. Было показано, что согласия с экспериментом не удается достичь при использовании традиционных парных потенциалов. В работе [15] были предложены формулы, учитывающие экранировку взаимодействия сталкивающихся частиц при прохождении частиц в металле. Эти формулы позволили достичь согласия с экспериментом и использовались в настоящем расчете.

В качестве примера рассмотрим многократное рассеяние при прохождении атомов водорода с энергией 9 keV через тонкую пленку золота толщиной 143 Å. В этом случае имеются экспериментальные данные [16].

В данном случае нас будет интересовать диапазон энергий 7–9 keV и рассеяние на углы менее 45°. В этом случае для описания сечения удобно использовать универсальные координаты: $\tau = E\theta$ и $\rho = (d\sigma/d\Omega)\sin\theta\cdot\theta$, где E и θ — энергия соударения и угол рассеяния. На рис. 2 представлены рассчитанные дифференциальные сечения рассеяния для энергии 7 и 9 keV в универсальных координатах. Как видно из рис. 2, полученные результаты для углов менее 45° хорошо аппроксимируются зависимостью

$$\frac{d\sigma}{d\theta}(E, \theta)\left[\frac{\text{Å}^2}{\text{sr}}\right] = \frac{43.04}{\theta}(\theta E)^{-0.05099-0.18106\lg(\theta E)}. \quad (7)$$

При использовании этой формулы имеется проблема, связанная с расходимостью сечения при малых углах. В случае твердой мишени эта проблема решается в связи с тем, что максимальное значение параметра удара ограничено значением $d/2$, где d — среднее расстояние между атомами мишени. В наших вычислениях шаг интегрирования был 0.1°, таким же был выбран и шаг дискретизации угла θ_3. Шаг дискретизации энергетического спектра $0.01E_0$. Уменьшение шагов дискретизации не влияло на получаемые результаты.

При расчете энергетического спектра вводилась поправка на торможение на электронах

$$E_2 = E_1K(\theta_2) - \Delta E_e = E_1K(\theta_2) - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e \frac{d}{\cos\theta_2}. \quad (8)$$

Значение электронной тормозной способности $(dE/dx)_e$ бралось из работы [17] и аппроксимировалось формулой

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \left[\frac{\text{eV}}{\text{Å}}\right] = 1.6E[\text{keV}]^{0.722}. \quad (9)$$

Наличие $\cos\theta_2$ в формуле (8) учитывает удлинение траектории при прохождении слоя толщиной d.

Результаты расчета приведены на рис. 3. Расчетные кривые нормировались на экспериментальные данные при угле 2°, при этом учитывалось угловое разрешение детектора 0.58°. На рис. 3 показано изменение углового распределения при последовательном прохождении m слоев мишени толщиной d.

Как видно на рис. 3, для толщины пленки 143 Å($\sim$ 50 слоев) имеется хорошее согласие нашего расчета углового распределения как с данными эксперимента [16], так и с данными компьютерного моделирования нашей программой методом Монте-Карло [2].

Подчеркнем согласие результатов расчета с помощью предложенной методики с расчетом нашей программой методом Монте-Карло при использовании одного и того же потенциала. Трудоемкость итерационного численного интегрирования сравнима с применением метода Монте-Карло для расчета прохождения частиц через тонкие пленки. Преимущество методики состоит в более простом изменении параметров моделирования (потенциал взаимодействия, тормозные потери энергии) и автоматическом отслеживании их влияния на прохождение пленок разной толщины.

Применение предложенного в работе [15] потенциала для системы атом–твердое тело позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом.

На рис. 3 добавлено сравнение полученных результатов с данными кода SRIM и данными, рассчитанными с помощью аналитической формулы из работы [18]. В обоих случаях использовался потенциал ZBL. Как известно, потенциал ZBL не слишком хорош для описания столкновений легких частиц с мишенью, так как был получен усреднением данных о потенциалах для большого числа соударений атомов средних масс.

На наш взгляд, различие результатов, полученных с помощью аналитической формулы, с расчетом про-

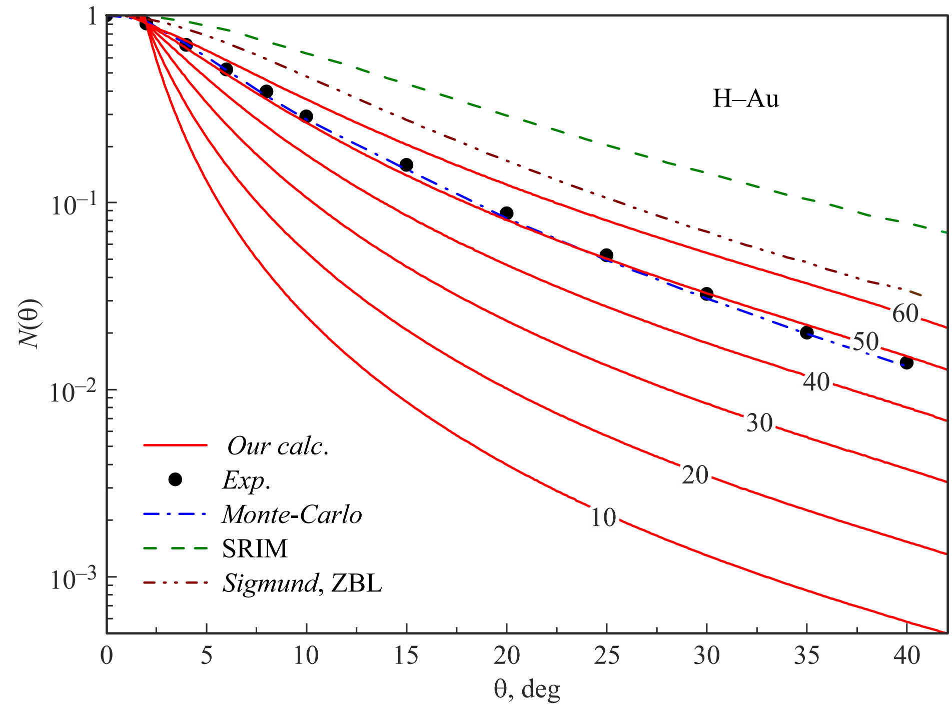

Рис. 3. Изменение углового распределения при прохождении m слоев толщиной d. Число слоев m указано около кривых. Для сопоставления представлены данные эксперимента (точки) [16], данные расчета методом Монте-Карло из работы [2] и расчета с помощью программы SRIM. Также приведен расчет с помощью аналитической формулы Зигмунда из работы [18], где используется потенциал ZBL.

граммой SRIM связано с приближенным характером этой формулы. Поскольку данные этих расчетов не позволяют описать эксперимент, потребовалась коррекция потенциала взаимодействия с целью учета изменения экранировки при столкновениях частиц в металле [15].

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, D.S. Tensin, A.P. Shergin, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **548**, 165259 (2024). DOI: 10.1016/j.nimb.2024.165259
[2] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, Д.С. Тенсин, ЖТФ, **92** (11), 1643 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.11.53436.151-22 [P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev, D.S. Tensin, Tech. Phys., **67** (11), 1416 (2022). DOI: 10.21883/TP.2022.11.55170.151-22].
[3] V.I. Afanasyev, F.V. Chernyshev, S.S. Kozlovsky, A.D. Melnik, M.I. Mironov, A.N. Mokeev, A.S. Navolotsky, V.G. Nesenevich, M.P. Petrov, S.Ya. Petrov, Rev. Sci. Instrum., **94**, 093502 (2023). DOI: /10.1063/5.0158999
[4] В.И. Афанасьев, С.С. Козловский, А.Д. Мельник, М.И. Миронов, А.С. Наволоцкий, В.Г. Несеневич, М.П. Петров, С.Я. Петров, Ф.В. Чернышев, Физика плазмы, **48** (8), 685 (2022). DOI: 10.31857/S0367292122100043 [V.I. Afanasyev, S.S. Kozlovskii, A.D. Melnik, M.I. Mironov, A.S. Navolotskii, V.G. Nesenevich, M.P. Petrov, S.Ya. Petrov, F.V. Chernyshev, Plasma Phys. Rep., **48**, 829 (2022). DOI: 10.1134/S1063780X22700295].
[5] Ю.В. Готт, *Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях* (Атомиздат, М., 1978).
[6] В.А. Курнаев, Е.С. Машкова, В.А. Молчанов, *Отражение легких ионов от поверхности твердого тела* (Энергоатомиздат, М., 1985).
[7] O.B. Firsov, E.S. Mashkova, V.A. Molchanov, Rad. Eff., **18**, 257 (1973). DOI: 10.1080/00337577308232132
[8] O.B. Firsov, E.S. Mashkova, V.A. Molchanov, V.A. Snisar, Nucl. Instrum. Meth., **132**, 695 (1976). DOI: 10.1016/0029-554x(76)90813-2
[9] L. Meyer, Phys. Status Solidi B, **44**, 253 (1971). DOI: 10.1002/pssb.2220440127
[10] E.G. Androulakaki, M. Kokkoris, M. Mayer, E. Mitsi, N. Patronis, E. Vagena, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **496**, 71 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.03.025
[11] Yu.A. Chesnokov, V.A. Maisheev, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **486**, 11 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2020.09.018
[12] V.I. Shulga, A. Schinner, P. Sigmund, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **467**, 91 (2020). DOI: 10.1016/j.nimb.2020.01.029
[13] В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова, В.И. Шульга, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 1, 86 (2023). DOI: 10.31857/S102809602301003X [V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova, V.I. Shulga, J. Surf. Investig., **17**, 78 (2023). DOI: 10.1134/S1027451023010032].
[14] Н.Н. Михеев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 3, 77 (2020). DOI: 10.31857/S1028096020030127 [N.N. Mikheev, J. Surf. Investig., **14**, 281 (2020). DOI: 10.1134/S1027451020020299].
[15] П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.Н. Зиновьев, Письма в ЖЭТФ, **117** (10), 723 (2023). DOI: 10.31857/S1234567823100026 [P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, A.N. Zinoviev, JETP Lett., **117**, 725 (2023). DOI: 10.1134/S0021364023601227].
[16] M. Fama, G.H. Lantschner, J.C. Eckardt, C.D. Denton, N.R. Arista, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **164-165**, 241 (2000). DOI: 10.1016/s0168-583x(99)01086-1
[17] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, V.S. Mikhailov, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, **547**, 165220 (2024). DOI: 10.1016/j.nimb.2023.165220
[18] P. Sigmund, K.B. Winterbon, Nucl. Instrum. Meth., **119**, 541 (1974). DOI: 10.1016/0029-554X(74)90805-2