

01;02;11;12

©1995 г.

## ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОБРАТНО РАССЕЯННЫХ ЛЕГКИХ ИОНОВ В АМОРФНОМ ТВЕРДОМ ТЕЛЕ ПРИ НОРМАЛЬНОМ ПАДЕНИИ. СЛУЧАЙ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

*В.С.Сухомлинов, Э.Н.Фафурина*

Санкт-Петербургский государственный университет,  
199164, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 12 апреля 1993 г.  
В окончательной редакции 21 апреля 1994 г.)

Работа посвящена разработке аналитической теории, позволяющей рассчитать функцию распределения потока обратно рассеянных легких ионов малых энергий (до нескольких кэВ) в аморфном твердом теле при нормальном падении. Создана модель процесса обратного рассеяния. Решено стационарное кинетическое уравнение Больцмана и получено простое аналитическое выражение для функции распределения. Получено хорошее соответствие как для функций распределения, рассчитанных нами и измеренных другими авторами, так и для вычисленных с помощью этой функции коэффициентов отражения частиц и энергии. Результаты данной работы могут быть использованы для разработки новых методов диагностики поверхности, методов расчета коэффициентов распыления при низких энергиях.

### Введение и постановка задачи

Процессы отражения и рассеяния ионов различными поверхностями в последнее время привлекают все большее внимание исследователей [1-5]. Особый интерес проявляется к обратному рассеянию низкоэнергетических легких ионов, так как поток ионов несет информацию о свойствах поверхности, а в случае легких ионов коэффициент отражения достаточно велик для надежной регистрации сигнала. Легкие ионы низких энергий при взаимодействии с поверхностью лишь незначительно изменяют ее свойства. Таким образом, развитие теории обратного рассеяния может служить основой для создания новых эффективных методов анализа поверхности и приповерхностных слоев твердого тела.

Кроме того, как известно [6], обратно рассеянные ионы при энергиях в несколько сот электрон-вольт и менее вносят основной вклад в распыление конструктивных элементов термоядерных реакторов.

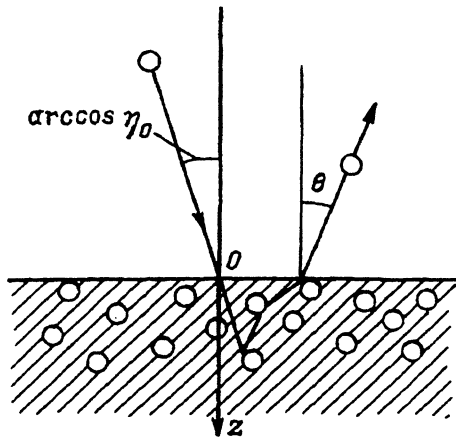


Рис. 1. Схема обратного рассеяния иона на поверхности твердого тела ( $\arccos \eta_0$  — угол падения,  $\theta$  — угол вылета обратно рассеянного иона).

Данная работа посвящена разработке аналитической теории, позволяющей рассчитывать функцию распределения потока обратно рассеянных ионов в аморфном твердом теле и любые характеристики этого потока, например коэффициенты отражения частиц  $R_N$  и энергии  $R_E$ .

Для решения поставленной задачи примем следующую модель. Пусть на поверхность аморфного тела, расположенную в плоскости  $XU$  (рис. 1), падает по нормали монокинетический пучок ионов со скоростью  $v_0$ . Атомы твердого тела расположены хаотически и покоятся. Как известно, для рассматриваемых условий в процессе движения ионов существенно как электронное, так и ядерное торможение [7]; электронное торможение ( $\Theta T$ ) —  $E_e/dx$  ( $dE_e$  — потери энергии иона при прохождении расстояния  $dx$ , вызванные  $\Theta T$ ) при низких энергиях пропорционально скорости [8]

$$\frac{dE_e}{dx} = S_e(v)N_e = A\sqrt{E},$$

где  $A$  — постоянный коэффициент,  $N_e$  — концентрация электронов в твердом теле.

Далее предположим, что отношения масс иона и атома  $\xi \ll 1$ . Тогда, учитывая, что рассеяние иона на атоме в рассматриваемом диапазоне энергий с достаточной степенью точности изотропно в системе центра масс сталкивающихся частиц [9,10], с точностью до величин  $\xi^2$  можно считать индикатрису рассеяния легких ионов на атомах вещества сферически симметричной [10]. С учетом этого функция распределения потока ионов в твердом теле  $f_{ieN}$  удовлетворяет следующему кинетическому уравнению Больцмана [10]:

$$\begin{aligned} \eta |\text{grad } f_{ieN}| + \frac{A}{\sqrt{2m_i}} \frac{\partial}{\partial v} f_{ieN} + \Sigma(v) f_{ieN} = \\ = \frac{(M+1)^2}{2M} \Sigma(v) \int_{-1}^1 d\eta' \int_v^{M+1} dv' \frac{v}{v'^2} f_{ieN}(\eta', z, v') \end{aligned} \quad (1)$$

и граничным условиям

$$f_{ieN}(z, \eta, v) = \frac{1}{2\pi} \frac{v}{v_0^3} \delta(\eta - \eta_0) \delta(v - v_0); \quad 2\pi \int_0^1 \eta d\eta \int_0^\infty v^2 f_{ieN} dv = 1; \quad (1a)$$

Здесь  $v$  — скорость иона,  $\eta$  — косинус угла между направлением скорости иона и осью  $z$ ,  $\Sigma(v)$  — обратная длина свободного пробега иона до упругого столкновения с атомом,  $M = (\xi)^{-1}$ ,  $m_i$  — масса иона.

### Решение кинетического уравнения для функции распределения обратно рассеянных ионов

Решение уравнения (1) с граничными условиями (1a) начнем с решения частной задачи — со случая отсутствия ЭТ при  $\xi = 0$  и когда  $\Sigma(v) = \Sigma_i$  не зависит от скорости. Это нам понадобится в дальнейшем для проверки правильности полученных более общих результатов.

При указанных предположениях задача нахождения функции  $f_{ieN}$  формулируется следующим образом:

$$\eta \frac{\partial f_{ieN}}{\partial z'} + f_{ieN} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\eta' f_{ieN}(\eta'); \quad (2)$$

$$f_{ieN}(z', \eta) = \frac{1}{2\pi} \delta(\eta - 1). \quad (2a)$$

Здесь  $z' = \Sigma_i z$  — безразмерная координата.

Прежде всего отметим, что метод последовательных приближений нахождения функций  $f_{in}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ), удовлетворяющих системе уравнений

$$\eta \frac{\partial f_{ieN}}{\partial z} + f_{i0} = 0; \quad \eta \frac{\partial f_{ieN}}{\partial z} + f_{in} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\eta' f_{i, n-1}(\eta'); \quad (3)$$

$$f_{i0}(z', \eta) = \frac{1}{2\pi} \delta(\eta - 1); \quad f_{in}; \quad n = 1, 2, \dots$$

дает нам  $F_{in} = \sum_{k=0}^n f_{ik}$ , которые представляют собой функции распределения потока ионов, испытавших не более  $n$  столкновений. При этом очевидно, что  $\lim_{n \rightarrow \infty} F_{in} = f_{ieN}$ . Каждое уравнение системы (3) представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка и легко разрешимо. Однако интегрирование в правой части по переменной  $\eta$  выполнить не удастся при  $n \geq 2$ , поэтому формулы при увеличении номера  $n$  становятся все более громоздкими.

Предложим следующий метод расчета  $f_{in}$ ,  $n \geq 2$ , позволяющий получить простое аналитическое выражение для  $\sum_{k=2}^{\infty} f_{ik}$ . Заметим, что любое столкновение иона с атомом из-за малости величины  $\xi$  приводит к изотропизации его движения. Наличие границы и неизотропность

падающего потока нарушают это изотропное распределение. Тем не менее можно показать, что неизотропность функций распределения частиц, испытавших два и более столкновений с атомами, вполне описывается в рамках известного метода  $P_{1n}$ -приближений с граничными условиями в форме Маршака [11]. Поэтому поступим следующим образом. Найдем  $f_{i0}$  и  $f_{i1}$  путем решения соответствующих уравнений системы (3), а функцию  $F_{i2} = f_{ien} - (f_{i0} + f_{i1})$  представим в виде

$$F_{i2}(\eta, z') = \frac{1}{4\pi} \left\{ \varphi_{i0}(z') + 3\eta\varphi_{i1}(z') \right\}. \quad (4)$$

Из решения системы (3) легко получить

$$f_{i0} = \frac{1}{2\pi} \delta(\eta - \eta_0) \exp\left(-\frac{z'}{\eta}\right); \quad f_{i0} = 0; \quad \eta > 0; \quad \eta < 0 \quad (5)$$

$$f_{i1} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{1 - \eta} \left\{ \exp(-z') - \exp\left(-\frac{z'}{\eta}\right) \right\}; \quad f_{i1} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{1 + |\eta|} \exp(-z'); \quad \eta > 0; \quad \eta < 0$$

$$F_{i2}(\eta, z') = \frac{1}{4\pi} (1 + \ln 2) \left( 1 + \frac{3}{2} |\eta| \right) + o(z'); \quad \eta < 0; z' \ll 1$$

$$f_{ieN}(\eta, z') = \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{1}{1 + |\eta|} + (1 + \ln 2) \left( 1 + \frac{3}{2} |\eta| \right) \right] + o(z'). \quad (6)$$

Эти выражения будем в дальнейшем использовать для проверки правильности более общих формул для функции  $f_{ieN}$ .

В рассматриваемых условиях основной тип торможения ионов — ЭТ [7]. Тогда можно, используя уравнение (1), показать, что между функциями  $f_{ieN}$  и  $f_{ie}$  выполняется следующее соотношение:

$$f_{ieN} \approx f_{ie} - \frac{3}{2} \frac{\xi\sigma(v_0)}{b} \int_0^v v' \frac{\partial}{\partial v'} f_{ie} dv' = f_{ie} - \frac{3}{2} \frac{\xi\sigma(v_0)}{b} \left\{ v f_{ie} - \int_0^v f_{ie} dv' \right\}, \quad (7)$$

где  $b = A/\sqrt{2m_i}S_0$ .

Из формулы (7) видно, что  $f_{ieN} \rightarrow f_{ie}$ , если  $\xi \rightarrow 0$  и  $b \rightarrow \infty$ . Это соответствует реальной ситуации.

Таким образом, мы свели нашу задачу к более простой задаче нахождения  $f_{ie}$ . Согласно определению, она удовлетворяет уравнению

$$\eta \frac{\partial f_{ie}}{\partial z'} - b \frac{\partial f_{ie}}{\partial v} + \sigma(v) f_{ie} = \frac{\sigma(v)}{2} \int_{-1}^1 f_{ie} d\eta',$$

$$f_{ie} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{v^3} \delta(v - v_0) \delta(\eta - 1), \quad z=0; \eta < 0 \quad (8)$$

где параметр  $b$  определен выше,  $\sigma(v) = \Sigma(v)/\Sigma_i$  — безразмерная функция скорости  $v$ .

Применяя для решения уравнения (8) метод, аналогичный предыдущему, получим в случае нормального падения функцию распределения потока нерассеянных ионов

$$f_{ie0}(v, \eta, z') = \tilde{f}_{ie0}(\omega, \eta, y) = \frac{\sigma(v(\omega))}{2\pi b v_0^3} \delta(\eta - \eta_0) \delta\left(\omega - \omega_0 + \frac{y}{\eta}\right) \exp\left(-\frac{y}{\eta}\right);$$

$$\eta > 0;$$

а для функции распределения потока ионов, испытавших одно столкновение

$$f_{ie1}(v, \eta, z') = \tilde{f}_{ie1}(\omega, \eta, y) = \frac{\sigma(v(\omega))}{4\pi b v_0^3} \frac{1}{1 - \eta} \exp(\omega - \omega_0) \times$$

$$\times T\left(\omega - \omega_0 - \frac{y}{\eta}\right) T(\omega_0 - \omega - y),$$

$$f_{ie1}(v, \eta, z') = \tilde{f}_{ie1}(\omega, \eta, y) = \frac{\sigma(v(\omega))}{4\pi b v_0^3} \frac{1}{1 + |\eta|} \exp(\omega - \omega_0) T(\omega_0 - \omega - y),$$

$$T(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x < 0, \\ 1, & \text{если } x > 0, \end{cases} \quad (9)$$

где  $\omega = \frac{1}{b} \int_0^v \sigma(v') dv'$ ;  $\omega_0 = \omega(v_0)$ .

Функцию  $f_{ie2}$ , такую что  $f_{ie} = f_{ie0} + f_{ie1} + f_{ie2}$ , находим методом, аналогичным тому, который мы применяли для нахождения  $F_{i2}$ , и получим

$$\tilde{f}_{ie2} = \frac{1}{4\pi} \left\{ \tilde{F}_{ie0} + 3\eta \tilde{F}_{ie1} \right\} = 0.186 \frac{\sigma(v(\omega))}{4\pi b v_0^3} (1 + \ln 2) \left(1 + \frac{3}{2} |\eta|\right) \times$$

$$\times T(\omega_0 - \omega) \exp[0.186(\omega - \omega_0)] + o(z').$$

Нетрудно видеть, что

$$\lim_{b \rightarrow 0} \tilde{f}_{ie2} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{v_0^3} (1 + \ln 2) \left(1 + \frac{3}{2} |\eta|\right) \delta(v - v_0).$$

Это совпадает с выражением для  $\tilde{F}_{i2}$  (формула (7) при  $\eta_0 = 1$ ). Таким образом, имеем

$$f_{ie}(v, \eta, z) = \frac{\sigma(v)}{4\pi b v_0^3} T(\omega - \omega(v)) \left\{ \frac{1}{1 + |\eta|} \exp[\omega(v) - \omega_0] + 0.186(1 + \ln 2) \times \right.$$

$$\left. \times \left(1 + \frac{3}{2} |\eta|\right) \exp[0.186(\omega(v) - \omega_0)] \right\} + o(z'). \quad (10)$$

## Нахождение сечения

Как видно из формулы (10), для расчета функции распределения обратно рассеянных ионов необходимо знать сечение  $S_0\sigma(v)$ , где  $\sigma(v)$  определено выше, а  $S_0$  — множитель, имеющий размерность сечения.

Как известно [12], выбор этой величины — одна из основных проблем при решении кинетического уравнения Больцмана. Ограничим сечение путем выбора максимального прицельного параметра, при котором интересующая нас величина в результате столкновения меняется незначительно. Поскольку мы рассматриваем обратное рассеяние, то в качестве сечения рассеяния назад возьмем сечение рассеяния на угол, больший  $\pi/2$ . Из-за изотропности этого процесса в нашем случае полное сечение рассеяния  $S_0\sigma(v)$  будет в два раза больше.

Для нахождения искомого сечения можно использовать модифицированный потенциал Борна-Майера, в котором предэкспоненциальный множитель зависит от энергии  $E_0$

$$V(r) = E'_A(E_0) \exp(-ar). \quad (11)$$

Приведем результат, который получается при использовании известной формулы для угла рассеяния в центральном поле [12] с потенциалом, определенным формулой (11), при условии, что он совпадает с известным потенциалом Борна-Майера в диапазоне расстояний от  $0.8/a$  до  $0.2/a$  (область применимости согласно [12]), а вне этого диапазона — с потенциалом Фирсова [13]

$$E'_A \approx 1.7E_A \left\{ \ln \left( \frac{1.5E_A}{E_0} \right) \operatorname{tg} \left[ \frac{\pi}{2} + 0.3888 \frac{1 + 2.358 \left( \frac{E_0}{1.5E_A} \right)^2}{1 + 0.3056 \left( \frac{E_0}{1.5E_A} \right)^2} \right] \right\}^{-1}$$

$$\text{при } E_0 \leq 2.5E_A,$$

$$E'_A = 0.454 \left( \frac{E_0}{1.7E_A} - 0.4 \right)^{0.7} \quad \text{при } E_0 \geq 2.5E_A, \quad S_0 = \frac{8\pi}{a^2},$$

$$\sigma(v) = \ln^2 \left( \frac{v'_A}{v} \right) \left( 1 + 2 \ln \frac{v'_A}{v} \right) \left\{ 1 + \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \ln \frac{v'_A}{v} \left( \sqrt{1 + 2 \ln \frac{v'_A}{v}} \right)^{-1} \right\}^{-1}, \quad (12)$$

где  $v' = \sqrt{2E'_A} (\sqrt{m_i})^{-1}$ ,  $b = Aa^2 (8\pi\sqrt{2m_i})^{-1}$ .

Полученные выше формулы для  $S_0$ ,  $\sigma(v)$  справедливы при условии

$$R \equiv \sqrt{\frac{S_0\sigma(v)}{\pi}} \ll d = n^{-\frac{1}{3}}, \quad (13)$$

где  $n$  — концентрация атомов мишени,  $d$  — среднее расстояние между их центрами.

При нарушении этого условия уравнение Больцмана в обычном виде неприменимо из-за того, что проявляется корреляция в столкновениях иона с отдельными атомами, вызванная тем, что атомы мишени

частично заслоняют друг друга [14]. Как показывают оценки, в наших условиях неравенство (13) начинает нарушаться уже при энергиях ионов порядка нескольких сотен эВ, следовательно, необходим учет указанного обстоятельства в рамках решаемой проблемы.

Как показано в работе [14], при несоблюдении условия (13) уравнение Больцмана можно применять в обычном виде, следует лишь вместо сечения  $S_0\sigma(v)$  пользоваться формулами, приведенными в этой работе, которые с достаточной степенью точности аппроксимируются практически во всем интересующем нас диапазоне скоростей  $v$  следующим выражением:

$$\tilde{\sigma}(v) = \sigma(v) \left\{ 1 + 2.266n^{\frac{2}{3}}\sigma(v) \right\}, \quad (14)$$

где величина  $n$  выражена в  $\text{Å}^{-3}$ , а  $\sigma(v)$  определено формулой (12).

Таким образом, все параметры и функции этих параметров, определяющие функцию распределения обратно рассеянных ионов  $f_{ieN}$ , согласно формулам (7) и (10), аналитически определены через известные величины  $m_i$ ,  $m_a$ ,  $v$ ,  $v_0$ ,  $a$ ,  $A$  и  $\eta$ .

### Обсуждение полученных результатов, сравнение их с известными экспериментальными данными и расчетами других авторов

Функция распределения  $f_{ieN}$ , определенная формулой (7), представлена в виде двух слагаемых, пропорциональных экспоненциальным множителям  $\exp(\omega(v) - \omega(v_0))$  и  $\exp(\omega(v) - \omega(v_0))(b/b_1)$ , где  $b_1 = 5.373b$ . Это отражает тот факт, что  $f_{ieN}$  состоит из функции распределения потока однократно и многократно рассеянных ионов соответственно. Причем функции распределения многократно рассеянных ионов соответствует параметр электронного торможения  $b_1 > b$ , что вызвано тем, что многократно рассеянные ионы проходят в веществе путь, больший, чем однократно рассеянные. В соответствии с этим средняя энергия однократно рассеянных ионов превосходит таковую для потока многократно рассеянных. Однако вклад в суммарный коэффициент отражения  $R_N$  однократно рассеянных ионов, как правило, в несколько раз меньше, чем вклад многократно рассеянных.

Из формулы (14) видно, что сечение  $S_0\sigma(v)$  неограниченно возрастает, когда  $R \rightarrow d$ , т. е. при уменьшении скорости  $v$ . Это приводит к резкому возрастанию по абсолютной величине показателя экспоненты в формуле (10), и поэтому  $f_{ieN}(v) \rightarrow 0$ . Функция распределения потока обратно рассеянных ионов оказывается обрезанной со стороны малых энергий рассеянных ионов. Этот результат физически легко объяснить. При неограниченном возрастании сечения рассеяния длина свободного пробега стремится к нулю и ионы, находящиеся на любом расстоянии от поверхности, оказываются как бы запертыми и не в состоянии достичь этой поверхности.

В нашей теории нет ни одного подповерхностного параметра и все необходимые для численных расчетов величины взяты из справочных изданий: плотности веществ  $n$  — из [15], величины ЭТ — из [8]. При рассеянии  $\text{He}^+$  для расчета величины ЭТ мы поступали следующим образом. Как известно [16], при  $E_0 \leq 10$  кэВ  $S_{e|\text{He}^+} \sim v^{0.5 \pm \gamma}$ , где  $\gamma \leq 0.2$ , поэтому в исследуемом в данной работе диапазоне энергий  $E_0$  (ниже нескольких

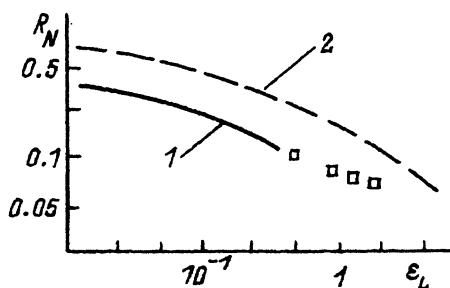


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения  $R_N$  от приведенной энергии  $\epsilon_L$  [1] для  $\text{He}^+ \rightarrow \text{Mo}$ .

1 — наш расчет, 2 — расчет по программе MARLOW [17],  $\square$  — экспериментальные данные из работы [18].

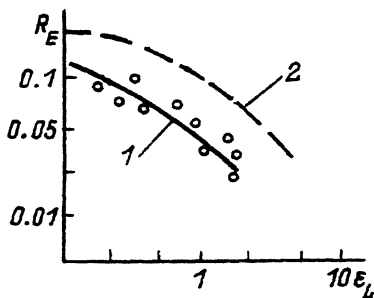


Рис. 3. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  от приведенной энергии  $\epsilon_L$  для  $\text{H}^+ \rightarrow \text{Nb}$ .

1 — наш расчет, 2 — расчет по программе MARLOW [19],  $\circ$  — экспериментальные данные из работы [20].

кэВ)  $S_{e|\text{He}^+}$  можно представить в виде  $S_{e|\text{He}^+} \sim A(v)v^{0.5}$ , где  $A(v)$  — медленно меняющаяся функция скорости. Ее значения брали из работы [16], таким образом, для ионов He величина  $b$  становится также слабо меняющейся функцией скорости, что и учитывалось при расчетах.

Перейдем к сопоставлению известных экспериментальных данных и расчетов других авторов при нормальном падении ионов на поверхность с нашими результатами. Сначала рассмотрим интегральные величины  $R_N$  и  $R_E$ . Мы провели расчеты коэффициентов отражения ионов  $\text{H}^+$ ,  $\text{D}^+$ ,  $\text{He}^+$  для всех известных нам экспериментальных данных.

В качестве примера рассмотрим рассеяние ионов  $\text{He}^+$  поверхностью Mo (рис. 2) и ионов  $\text{H}^+$  поверхностью Nb (рис. 3). Из этих рисунков следует, что расчеты по компьютерным программам для этих элементов не согласуются с экспериментальными данными и нашими расчетами. Причина указанного расхождения для этих металлов может быть следующая. Известно, что зависимость электронной тормозной способности (ЭТС) от заряда ядра атома мишени имеет осциллирующий характер [8], при этом значения ЭТС для Mo и Nb попадают на пик. Расчеты, в которых ЭТС для Mo, W, Nb рассчитывается по Линдхарду [21], у которого предполагается монотонный характер функции и, следовательно, значения сечений занижены, будут для величин  $R_N$  и  $R_E$  давать завышенные результаты. Это, на наш взгляд, является и причиной расхождения экспериментальных результатов с расчетами по формулам, полученным на основе транспортных теорий различными авторами, не учитывающими этого (рис. 4). Как видно из рис. 2–4, так и из расчетов, проведенных нами для всех известных нам экспериментов, согласие с ними наших расчетов хорошее.

Исключение составляют случаи  $\text{H}^+ \rightarrow \text{C}$  и  $\text{D}^+ \rightarrow \text{C}$ . [23]. Известно, что водород и дейтерий эффективно захватываются графитом и при значительных дозах облучения ионами в приповерхностном слое может накапливаться заметное количество внедренных изотопов H. При энергиях ионов  $E_0$  выше 300 эВ сечение рассеяния падающих ионов на внедренных атомах мало и расчеты  $R_N$  совпадают с экспериментом. При уменьшении  $E_0$  необходимо учитывать эффективное ядерное торможение обратно рассеянных ионов  $\text{H}^+$  или  $\text{D}^+$  на атомах H и D, скопившихся у поверхности графита.



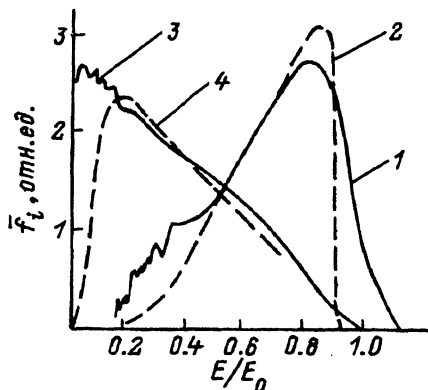
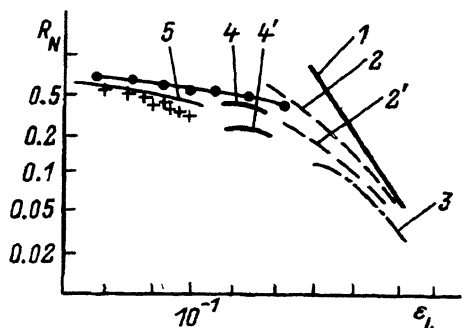


Рис. 4. То же, что на рис. 2, — универсальная зависимость согласно существующим транспортным теориям.

1 — из работы [22], 2 и 2' — соответственно с и без учета ослабления пучка из работы [23], 3 — из работы [24], 4 и 4' — соответственно с учетом и без учета коррекции поверхности из работы [25], • — расчет по программе TRIM [26], 5 — наш расчет для  $D^+ \rightarrow W$ ; крестики — экспериментальные данные из работы [27] для  $D^+ \rightarrow W$ .

Рис. 5. Функция распределения по энергиям потока ионов обратно рассеянных поверхностью под углом  $45^\circ$ , приведенная к единичному интервалу энергии, использованному при компьютерных расчетах для  $H^+ \rightarrow Ni$ .

1, 3 — экспериментальные данные для  $E_0 = 50$  эВ и 2 кэВ соответственно из работы [29]; 2, 4 — наш расчет для этих энергий.

Перейдем к обсуждению дифференциальных характеристик потока обратно рассеянных ионов и рассмотрим функцию распределения по энергиям  $\bar{f}_i(E)$ . Она известным образом связана с функцией  $f_{ieN}$ , определенной формулой (7). Нами рассчитаны функции  $\bar{f}_i(E)$  для различных пар ион-вещество и энергий  $E_0$ :  $H^+ \rightarrow Au$ ,  $E_0 = 500$  эВ [28];  $H^+ \rightarrow C$ ,  $E_0 = 50$  эВ [29];  $D^+ \rightarrow C$ ,  $E_0 = 80$  эВ [29] и т.д. В качестве примера рассмотрим функцию распределения ионов  $H^+$ , обратно рассеянных поверхностью Ni (рис. 5). Наблюдается четко выраженная тенденция в изменении вида  $\bar{f}_i(E)$  в зависимости от энергии падения  $E_0$  и параметра  $b$ . При небольших значениях  $E_0 \leq 100$  эВ и  $b = 10$  эВ $^{1/2}$  функция  $\bar{f}_i(E)$  имеет четко выраженный максимум в районе  $E = E_{max} = E_0(1 - 2\xi)$ . При увеличении  $E_0$  и  $b$  этот максимум сглаживается и наблюдается рост  $\bar{f}_i(E)$  при малых энергиях  $E$ . Это связано с тем, что при увеличении  $E_0$  падает сечение обратного рассеяния и увеличивается пробег иона до того, как он покинет твердое тело, т.е. увеличиваются потери на ЭТ и функция распределения становится более низкоэнергетичной.

Сравнивая наши и компьютерные расчеты, следует отметить, что между ними имеются некоторые систематические расхождения: «наша»  $\bar{f}_i(E)$  при малых значениях  $E$  всегда ниже и имеет более низкий максимум. Это, по-видимому, связано в поведении сечения рассеяния ионов на атомах вещества в зависимости от скорости иона. Расхождение с расчетами по программам TRIM и MARLOW отмечено для  $H^+ \rightarrow Nb$  [9] (и будет, вероятно, при рассеянии на Mo), которое как указано выше, объясняется заниженным у авторов программ значением величины ЭТ.

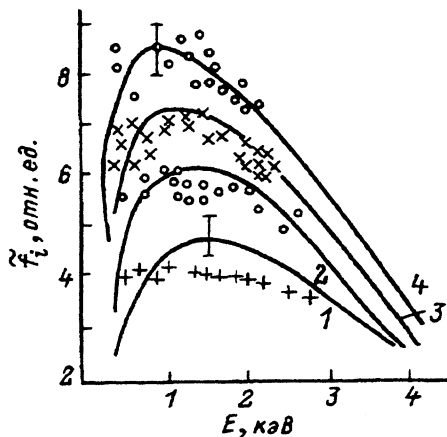


Рис. 6. Функция распределения по энергиям потока обратно рассеянных ионов  $H^+$  поверхностью Au при различных углах вылета,  $E_0 = 5$  кэВ.

o — экспериментальные данные из работы [30] для углов вылета, равных 25 (1), 35 (2), 45 (3), 55° (4); кривые — наш расчет для тех же углов.

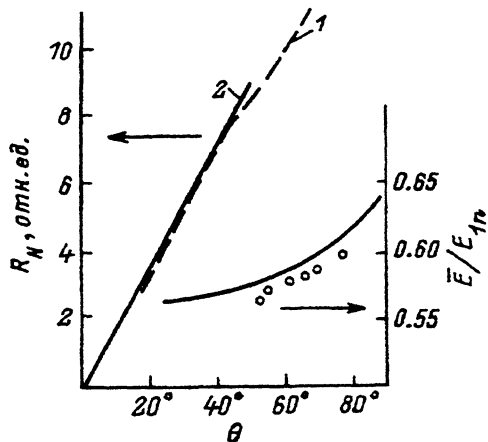


Рис. 7. Зависимость числа обратно рассеянных ионов  $R_N(\theta)$  от угла вылета для  $H^+ \rightarrow C$ ,  $E_0 = 1$  кэВ (1 — наш расчет, 2 — экспериментальные данные из работы [31]) (слева) и зависимость отношения средней энергии потока обратно рассеянных ионов к энергии однократно рассеянного иона при отсутствии электронного торможения  $\bar{E}/E_{1n}$  от угла вылета  $\theta$  для  $H^+ \rightarrow C$  (кривая — наш расчет, точки — экспериментальные данные из работы [31]) (справа).

Перейдем к угловым характеристикам потока обратно рассеянных ионов. Вычисления проведены для  $H^+ \rightarrow Au$ , так как для этой пары имеется экспериментальный материал [30]; рассмотрен случай сферического потенциального барьера как наиболее простого, но передающего все основные особенности углового распределения. Из рис. 6 видно, что соответствие наших расчетов с результатами эксперимента удовлетворительное и с увеличением угла вылета функция  $f_i(E)$  становится все более высокоэнергетичной. Этого следовало ожидать и из вида формулы (10). Действительно, коэффициент при функции распределения однократно рассеянных ионов при увеличении угла вылета падает медленнее, чем при функции распределения многократно рассеянных ионов, что приводит к обогащению  $f_i(E, \eta)$  быстрыми ионами при увеличении угла  $\theta$ . Многократно рассеянные ионы проходят в веществе в среднем большие расстояния, чем однократно рассеянные при угле вылета, равном нулю, поэтому часть многократно рассеянных ионов тормозится настолько, что не может достигнуть поверхности твердого тела.

На рис. 7 справа проведено сравнение экспериментальных данных из [31] с нашими расчетами  $\bar{E}/E_{1n}$  — отношение средней энергии потока обратно рассеянных ионов к энергии иона, которую он имел бы, если бы испытал одно столкновение при отсутствии ЭТ. Видно, что для данного случая ( $H^+ \rightarrow C$ ) наши расчеты удовлетворительно согласуются с экспериментом. Из левой части рис. 7 следует, что наблюдается хорошее согласие эксперимента с расчетом числа обратно рассеянных ионов в зависимости от угла вылета и эта зависимость отличается от косинусной.

Итак, создана и практически реализована модель обратного рассеяния легких ионов низких энергий (до нескольких кэВ) при падении их на гладкую поверхность аморфного твердого тела, состоящего из атомов одного сорта. Модель не содержит подгоночных параметров и позволяет аналитически вычислять функцию распределения потока обратно рассеянных ионов по энергиям и углам вылета, а следовательно, и интегральные характеристики обратного рассеяния — коэффициенты отражения частиц  $R_N$  и энергии  $R_E$ . Модель согласуется с экспериментальными данными других авторов, в том числе и для таких элементов, как W, Mo, Nb, отражение от которых до сих пор не удавалось описать в рамках численных методов программ TRIM и MARLOW.

### Список литературы

- [1] *Behrish R., Eckstein W.* // *Physic of Plasma-Wall Interactions in Controlled Fusion* / Ed. D.E.Post, R.Behrish. New York; London: Plenum Press, 1986. P. 413.
- [2] *Hou M.* // *Vacuum*. 1989. Vol. 39. P. 309–314.
- [3] *Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоиздат, 1985.
- [4] *Luo Zhengming, Bai Rongshend, Wang Shiming* // *Nucl. Instr. Meth. B*. 1990. Vol. 48. P. 435–438.
- [5] *Yueyuen Xia, Xiangang Xu, Chunyu Tan et al.* // *J. Appl. Phys*. 1991. Vol. 69. P. 439–446.
- [6] *Biersack J.P.* // *Nucl. Instr. Meth. B*. 1987. Vol. 27. P. 21–36.
- [7] *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985.
- [8] *Andersen H.H., Ziegler J.F.* Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements / Ed. J.F.Ziegler. New York: Pergamon Press, 1977.
- [9] *Плетнев В.В.* Докт. дис. М., 1989. 384 с.
- [10] *Luo Zhengming* *Nucl. Instr. Meth. B*. 1990. Vol. 48. P. 444–447.
- [11] *Владимиров В.С.* Математические задачи односкоростной теории переноса частиц. Тр. Матем. ин-та им. В.А.Стеклова АН СССР. № 59 М., 1961.
- [12] *Голант В.Е., Жилинский А.П., Сазаров С.А.* Основы физики плазмы М.: Атомиздат, 1977.
- [13] *Фирсов О.Б.* // *ЖЭТФ*. 1959. Т. 36. С. 1517–1522.
- [14] *Плетнев В.В.* // *Поверхность. Физ., хим., мех.* 1987. № 3. С. 67–72.
- [15] Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И.А.Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [16] *Ziegler J.F.* *Heliun Stopping Powers and Ranges in All Elements*. New York: Pergamon Press, 1977.
- [17] *Oen O.S., Robinson M.T.* *Nucl. Instr. Meth.* 1976. Vol. 132. P. 647–653.
- [18] *Eckstein W., Verbeek H.* // *J. Nucl. Mater.* 1978. Vol. 76–77. P. 365–369.
- [19] *Robinson J.E., Kwock K.K., Thompson D.A.* // *Nucl. Instr. Meth.* 1976. Vol. 132. P. 667–671.
- [20] *Chen C.K., Bohdanský J., Eckstein W., Robinson M.T.* // *J. Nucl. Mater.* 1984. Vol. 128–129. P. 687–690.
- [21] *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M.* // *Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd.* 1968. Bd. 36. N 10.
- [22] *McCracken G.M., Freeman N.J.* // *J. Phys. B*. 1969. Ser. 2. Vol. 2. P. 661–668.
- [23] *Vucanic J., Sigmund P.* // *Appl. Phys.* 1976. Vol. 11. P. 265–272.
- [24] *Weismann R., Sigmund P.* // *Rad. Eff.* 1973. Vol. 19. P. 7–14.
- [25] *Bottiger J., Winterbon K.B.* // *Rad. Eff.* 1973. Vol. 20. P. 65–67.
- [26] *Eckstein W., Laszlo J.* // *J. Nucl. Mater.* 1991. Vol. 183. P. 19–24.
- [27] *Bandurko N.V., Koborov N.N., Kurnaev V.A. et al.* // *J. Nucl. Mater.* 1990. Vol. 176–177. P. 630–634.
- [28] *Eckstein W., Verbeek H.* // *J. Appl. Phys.* 1980. Vol. 51. P. 1194–1200.
- [29] *Aratari R., Eckstein W.* // *Nucl. Instr. Meth. B*. 1989. Vol. 42. P. 11–19.
- [30] *Verbeek H., Eckstein W., Bhattacharya R.S.* // *J. Appl. Phys.* 1980. Vol. 51. P. 1783–1789.
- [31] *Overbury S.H., Dittner P.E., Datz S., Thoe R.S.* // *J. Nucl. Mater.* 1980. Vol. 93–94. P. 529–535.