

01;02;05;11

©1995 г.

## АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ЛЕГКИХ ИОНОВ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА ПРИ НОРМАЛЬНОМ ПАДЕНИИ И СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ

*В. С. Сузомлинов*

Научно-исследовательский институт физики Санкт-Петербургского государственного университета,  
198904, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 5 октября 1994 г.  
В окончательной редакции 22 декабря 1994 г.)

Развивается предложенная в [1] теория обратного рассеяния легких ионов поверхностью твердого тела при нормальном падении на случай средних энергий для произвольной зависимости величины электронного торможения и сечения рассеяния иона на атоме вещества от скорости иона. Получено выражение для функции распределения потока обратно рассеянных ионов и коэффициентов отражения частиц и энергии в широком диапазоне изменений энергии падающего иона для протонов и ионов  $\text{He}^+$ . Рассчитанные функции распределения и коэффициентов отражения совпадают с известными экспериментальными данными других авторов.

Работа посвящена развитию предложенной в [1] теории обратного рассеяния легких ионов поверхностью твердого тела. Эта проблема в последнее время привлекает внимание [2,3] в связи с попытками создания новых эффективных методов исследования поверхности и приповерхностных слоев [4], а также ввиду значительного вклада обратно рассеянных ионов в распылении конструкционных элементов термоядерных реакторов [5] и по ряду других причин.

Предложенная в работе [1] аналитическая теория позволяет рассчитывать функцию распределения потока обратно рассеянных ионов и, следовательно, вычислять любые характеристики этого потока. Сравнение результатов расчетов по этой теории с известными экспериментальными данными показало, что теория адекватно описывает процесс обратного рассеяния. Вместе с тем, как указывали авторы [1], в теории существует ограничение сверху по энергиям падающих ионов  $E_0$

$$E_0(\text{эВ}) \lesssim 140(Z_1^{1.5} Z_2^{1.5})^{0.5}, \quad (1)$$

где  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер иона и атома твердого тела соответственно, выраженные в единицах элементарного заряда.

Это объяснение было вызвано следующими причинами. Авторы полагали, что электронное торможение пропорционально скорости иона. Как известно, это выполняется для протонов при энергиях до 10 кэВ [6]. Для  $\text{He}^+$  зависимость электронного торможения от энергии иона носит более сложный характер, все более отличаясь с увеличением энергии от зависимости, пропорциональной скорости.

При расчете величины сечения рассеяния иона на атоме мишени авторы пользовались потенциалом типа Борна-Майера

$$V(r) = E_A \exp(-ar), \quad (2)$$

но при этом полагали, что предэкспоненциальный множитель зависит от энергии иона

$$V(r) = E'_A(E_0) \exp(-ar) = \frac{E_A}{1.7ar_m} \exp(-ar), \quad (3)$$

где  $r_m$  — расстояние максимального сближения, рассчитанное для энергии столкновения иона с атомом, равной  $E_0$ ;  $a = 3.53 (\text{\AA}^{-1})$  [7];  $E_A(\text{эВ}) = 87.7(Z_1^{1.5} Z_2^{1.5})^{0.5}$ .

Указанное приближение имеет тот недостаток, что при слишком большой энергии  $E_0$  средняя энергия обратных рассеянных ионов  $\bar{E}$  становится значительно меньше  $E_0$ , что приводит к завышению расчетных коэффициентов отражения частиц  $R_N$  и энергии  $R_E$  (здесь  $R_E = \bar{E}R_N$ ,  $\bar{E}$  — средняя энергия отражения ионов, выраженная в единицах энергии падающих ионов).

Наконец, расчеты, проведенные нами для случая рассеяния ионов  $\text{He}^+$  различными поверхностями по формулам, предложенным в работе [1], дают неудовлетворительное согласие с экспериментальными данными уже при энергиях несколько кэВ. Как будет показано ниже, это вызвано тем, что взаимодействие ионов  $\text{He}^+$  с различными атомами более успешно описывается потенциалом Бора  $V_B$  [8]

$$V_B(r) = \frac{r_0 E_B}{r} \exp(-a_B r), \quad (4)$$

где  $a_B$ ,  $r_0$ ,  $E_B$  — постоянные, чем потенциалом Борна-Майера с поправкой на зависимость предэкспоненциального множителя от энергии иона.

Данная работа посвящена развитию теории обратного рассеяния, предложенной в работе [1]. Предположим, что величина электронного торможения произвольным образом зависит от скорости иона

$$S_e = A_\varphi(v), \quad (5)$$

где  $A$  — постоянная для данного элемента величина,  $\varphi(v)$  — некоторая функция скорости, и получим выражение для функции распределения потока обратных рассеянных ионов. Для решения поставленной задачи поступим аналогично тому, как это сделано в работе [1]. Найдем сначала функцию распределения потока обратных рассеянных ионов  $f_{ie}$  в предположении отсутствия ядерного торможения, а затем учтем его в виде поправки, пропорциональной величине  $\xi \ll 1$  — отношению массы иона и атома твердого тела.

Согласно определению функция  $f_{ie}$  удовлетворяет следующему кинетическому уравнению:

$$\eta \frac{\partial f_{ie}}{\partial z} - b \frac{\partial}{\partial v} \left[ f_{ie} \frac{\varphi(v)}{v} \right] + \sigma(v) f_{ie} = \frac{\sigma(v)}{2} \int_{-1}^{+1} f_{ie} d\eta, \quad (6)$$

где  $v$  — скорость иона;  $\eta$  — косинус угла между направлением скорости иона и внешней нормали к плоской поверхности твердого тела;  $Z = Z' \Sigma_i$ ,  $Z'$  — координата, отсчитываемая от поверхности в глубину твердого тела,  $\Sigma_i$  — обратная длина свободного пробега иона, вычисленная для  $S_0$  — сечения рассеяния иона на атоме;  $\sigma(v) = S(v)/S_0$  — безразмерная функция порядка единицы, вычисленная в работе [1],  $S(v)$  — полное сечение рассеяния иона на атоме вещества,  $S_0 = 4\pi a^2$ ;  $b = A/2S_0(2m_i)^{0.5}$ .

Вводя функцию  $F_{ie} = f_{ie}\varphi(v)/v$ , нетрудно убедиться, что уравнение, которому она удовлетворяет, совпадает с уравнением для функции  $f_{ie}$  при условии замены  $\sigma(v)$  на величину  $\sigma(v)v/\varphi(v)$ . Следовательно, используя результаты работы [1], можно утверждать, что при  $\eta < 0$  выполняется

$$f_{ie} = \frac{v}{\varphi(v)} F_{ie} = \frac{1}{4\pi} \frac{v\sigma(v)}{v_0^2 b \varphi(v)} T[\omega_0 - \omega(v)] \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{1 + |\eta|} \exp[\omega(v) - \omega_0] + 0.3155 \left( 1 + \frac{3}{2} |\eta| \right) \exp[0.186(\omega(v) - \omega_0)] \right\}, \quad (7)$$

где

$$\omega(v) = \frac{1}{b} \int_0^v \frac{x\sigma(x)}{\varphi(x)} dx, \quad \omega_0 = \omega(v_0), \quad T(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Здесь  $v_0$  — скорость падения иона на поверхность твердого тела. Поправку на ядерное торможение для  $\varphi(v) \neq v$  можно найти аналогично тому, как это было сделано в работе [1]. Так, мы получили

$$f_i = f_{ie} - \frac{1}{2} \xi \frac{v_0 \sigma(v_0)}{b \varphi(v_0)} \left\{ v f_{ie}(v) - \int_0^v f_{ie} dx \right\}, \quad (8)$$

где второй член в правой части и есть искомая поправка.

При выводе этой формулы использовано то, что, согласно данным по электронному торможению для легких ионов [6,9], функция  $\varphi(v)/v$  меняется медленнее по сравнению с функцией  $f_{ie}(v)$ .

Таким образом, получено выражение для функции распределения потока обратно рассеянных ионов в предположении произвольной зависимости величины электронного торможения и сечения рассеяния иона на атоме вещества от скорости иона.

Однако для того чтобы воспользоваться этим результатом, необходимо получить выражение для сечения рассеяния  $S(v) = S_0 \sigma(v)$ , справедливое в области энергий, лежащих вне интервала, ограниченного

неравенством (1). Напомним, что это неравенство (в области которого справедливы формулы для  $S(v)$ , полученные в работе [1]) обусловлено тем, что при  $E_0 > 170 (Z_1^{1.5} Z_2^{1.5})^{0.5}$  перестает быть справедливой предложенная аппроксимация для

$$E'_A = E_A (1.7 a r_m(E_0))^{-1}. \quad (9)$$

Учитывая, что для потенциала типа Борна-Майера выполняется  $\sigma(v) = \ln^2 v'_A/v$ , где  $v'_A = (2E'_A/m_i)^{0.5}$ , потребуем, чтобы при  $E \gg E_A$  выполнялось соотношение

$$\sigma(v) \sim \frac{1}{v^{2K}}, \quad (10)$$

где  $K$  — некоторое число порядка единицы.

Такой вид зависимости сечения от скорости иона согласуется с асимптотическим поведением сечения, приведенным в работе [8]. Соотношению (10) можно удовлетворить, если потребовать, чтобы

$$E'_A = E_0 \left[ 1 + 1.6 \left( \frac{E_A}{E_0} \right)^K \right]. \quad (11)$$

Численный коэффициент 1.6 выбран так, чтобы при  $E_0(\text{эВ}) = 140 (Z_1^{1.5} Z_2^{1.5})^{0.5}$  величина  $E'_A$ , определенная формулой (11), совпала с рассчитанной по формуле, предложенной в работе [1].

Итак, мы определили  $\sigma(v)$  во всем диапазоне изменения скорости иона  $\sigma(v) = \ln^2 v'_A(v_0)/v$ , где  $v'_A$  определяется в соответствии с формулой (9), если  $v \leq \sqrt{1.6} v_A \leq v_0$  [1]. Если  $v_0 \geq v > \sqrt{1.6} v_A$ , то  $v'_A(v)$  рассчитывается в соответствии с формулой (11), а при  $v \geq v_0$  — по той же формуле с заменой энергии  $E_0$  на  $E$ .

Напомним, что вышеприведенные формулы относятся к случаю рассеяния иона водорода и его изотопов. При попытке описать экспериментальные данные по рассеянию ионов  $\text{He}^+$  в широком диапазоне энергий  $E_0$  мы натолкнулись на определенные трудности. Их удастся преодолеть, если поступить следующим образом. По-прежнему будем описывать взаимодействие иона и атома твердого тела с помощью потенциала типа (3), но вместо величин  $E_A$  и  $a$ , определенных Абрахамсоном для потенциала Борна-Майера, будем использовать величины  $E_B(\text{эВ}) = 63 Z_1 Z_2$  и  $a_B(\text{Å}^{-1}) = (0.529)^{-1} (Z_1^{1.5} + Z_2^{1.5})^{1/2}$ , определенные Бором [8], т.е. будем потенциал Бора аппроксимировать формулой (3) с параметрами  $E'_B$  и  $a_B$ . Причем для величины  $E'_B$  справедливы формулы (9) и (11) с заменой  $E_A$  на  $E_B$ . Соответственно параметры  $S_0$  и  $b$  определяются через величину  $A_B$ .

Таким образом, мы получили все функции и численные параметры, необходимые для вычисления функции  $f_i$  в широком диапазоне изменений энергии падающего иона, как для протонов, так и для ионов  $\text{He}^+$ . Интегральные характеристики обратного рассеяния — коэффициенты отражения частиц и энергии определяются через функцию  $f_i$  с помощью очевидных формул.

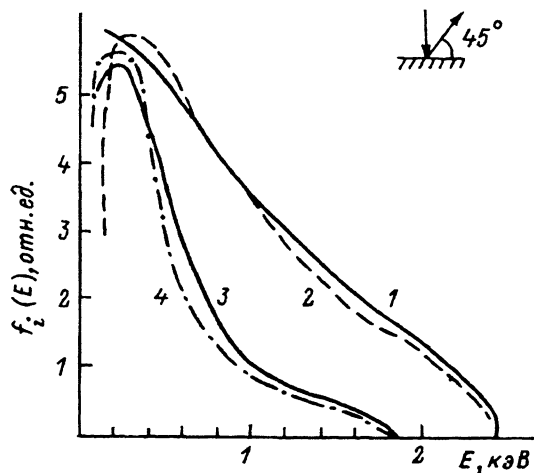


Рис. 1. Функции распределения потока обратно рассеянных протонов для Ti (1, 2) и C (3, 4).

Энергия ионов  $E_0 = 2.5$  кэВ при нормальном падении и угле рассеяния  $135^\circ$ ; 1, 3 — результаты эксперимента авторов работы [16]; 2, 4 — наш расчет.

Перейдем к обсуждению результатов сравнения наших расчетов с известными экспериментальными данными. Мы вычислили величины  $R_N$  и  $R_E$  при нормальном падении ионов для известных нам из литературы случаев. Обнаружено хорошее соответствие наших расчетов с экспериментальными данными как для рассеяния протонов, так и для рассеяния ионов  $\text{He}^+$ . Некоторые результаты приведены на рис. 1-4. На рис. 1 представлены функции распределения потока обратно рассеянных ионов для падения протонов на поверхность титана и углерода ( $\text{H}^+ \rightarrow \text{Ti}$  и  $\text{H}^+ \rightarrow \text{C}$ ). Видно, что рассчитанные нами функции распределения хорошо описывают результаты экспериментов. Исключение составляет область очень малых энергий для  $\text{H}^+ \rightarrow \text{Ti}$  и в меньшей степени для  $\text{H}^+ \rightarrow \text{C}$ . Рассчитанные нами функции резко спадают в

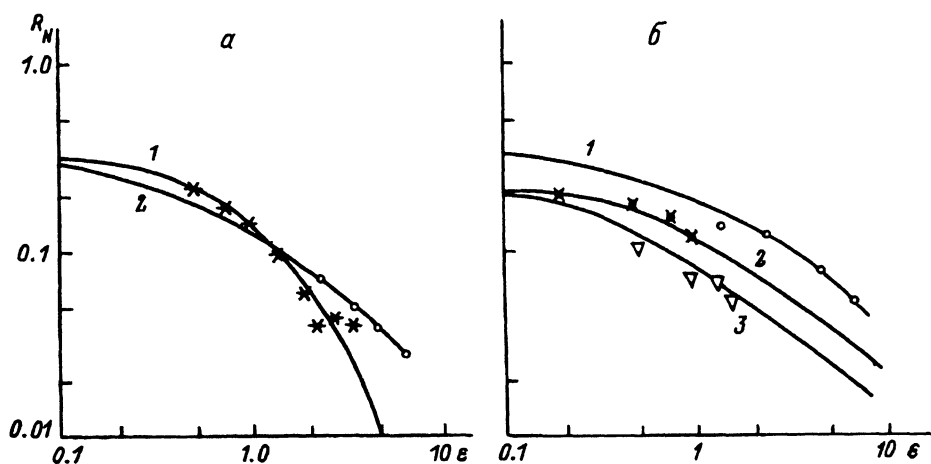


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения  $R_N$  для протонов (а) и ионов  $\text{He}^+$  (б) от приведенной энергии.

а — наш расчет для Ti (1) и Nb (2); \*, o — экспериментальные данные для Ti [14] и Nb [17] соответственно; б — наш расчет для Cu (1), W (2), Mo (3); o, x, v — экспериментальные данные из работы [18] для этих элементов.

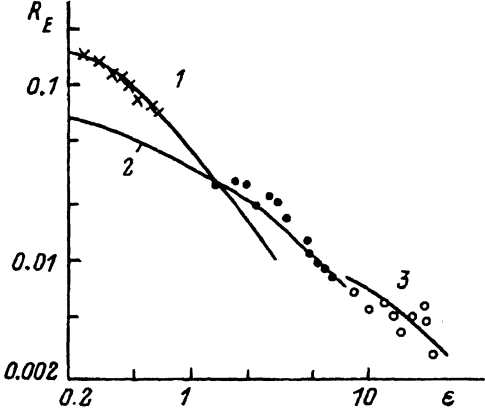


Рис. 3. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  для ионов  $\text{He}^+$ . Сплошные кривые — наш расчет для Au (1), Ta (2), Si (3); x, •, o — результаты эксперимента авторов работ [19] для Au и [20] для Ta и Si.

области энергий рассеянных ионов  $E \leq 400$  эВ, в то время как экспериментально определенные ведут себя более плавно. На наш взгляд, физическая причина того, что низкоэнергетичные ионы не могут покинуть твердое тело, заключается в том, что из-за возрастания сечения рассеяния иона на атоме при уменьшении энергии иона медленные частицы, как указывалось ранее в [1], оказываются как бы запертыми в веществе. Следует также иметь в виду, что по данным авторов работы [10] ошибка эксперимента при регистрации низкоэнергетичных ионов может достигать десятков процентов.

Перейдем к обсуждению энергетических зависимостей интегральных характеристик рассеяния — коэффициентов отражения  $R_N$  и  $R_E$ . Некоторые наши расчеты и экспериментальные данные других авторов приведены на рис. 2, 3. Видна интересная особенность этих зависимостей. Если энергию измерять в единицах безразмерной энергии Линдхарда  $\epsilon$  ( $\epsilon = 32.55 E_0 (\text{кэВ}) Z_1^{-1} Z_2^{-1} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-3/2}$ ) [11], то кривые  $R_N$  и  $R_E$  для различных мишеней и одинаковых ионов могут пересе-

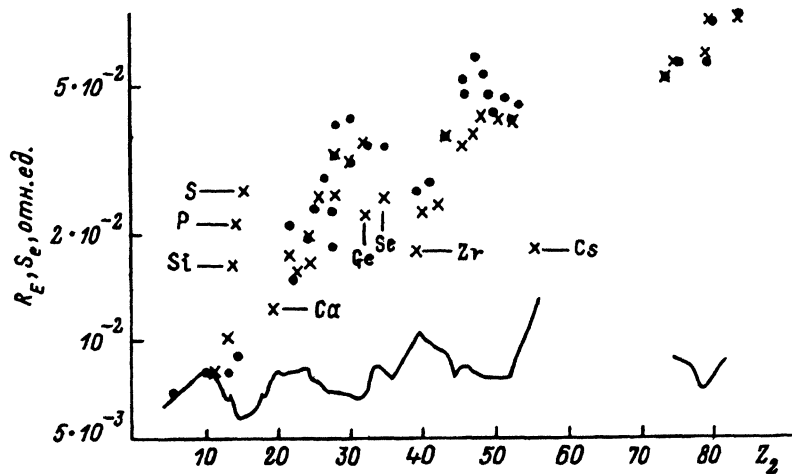


Рис. 4. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  от заряда ядра атома мишени  $Z_2$ .

x — наш расчет, • — экспериментальные данные из работы [12], сплошная кривая — относительная зависимость величины электронного торможения  $S_e$  от  $Z_2$  [9].

каться. Это свидетельствует о том, что зависимость  $R_N(\varepsilon)$  и  $R_E(\varepsilon)$  не являются универсальными не только из-за  $Z_2$ -осцилляций величины электронного торможения, как это считалось ранее (см., например, [12]).

Обратимся к рис. 4. Здесь приведена зависимость величины  $R_E(Z_2)$  от заряда ядра мишени при энергии ионов  $\text{He}^+ E_0 = 12.5$  кэВ. Отмечая в целом хорошее соответствие расчетов с экспериментальными данными, следует обратить внимание на имеющиеся различия. Так,  $R_E$  для Al и Si, рассчитанные нами, значительно превосходят соответствующие величины, полученные экспериментально авторами [12]. Некоторое отличие имеется также для групп элементов с зарядовыми номерами около 50. Что касается Al, то, возможно, поверхность образца, подвергнувшегося ионной бомбардировке авторами работы [12], была покрыта окисной пленкой, что, как известно, снижает величины  $R_N$  и  $R_E$  (см., например, [13]). Расхождения для Si, вероятно, можно объяснить тем, что авторы цитируемой работы использовали кристаллический кремний, что также приводит к снижению коэффициентов отражения [14]. На этом же рисунке приведена относительная зависимость величины электронного торможения  $S_e(Z_2)$  для рассматриваемого случая (необходимые для расчета данные взяты из [9]). Видно, что осциллирующая зависимость  $S_e(Z_2)$  находится в противофазе с осциллирующей зависимостью  $R_E(Z_2)$ . Этим и объясняются, как отмечено в [15], низкие значения коэффициентов отражения для таких элементов, как Zr, Nb, Mo, и высокие для таких, как Al, Si, P, S.

Таким образом, в данной работе развита предложенная авторами [1] теория обратного рассеяния легких ионов при нормальном падении на случай средних энергий. Получены простые аналитические формулы, позволяющие рассчитывать любые дифференциальные и интегральные характеристики обратного рассеяния. Рассчитанные функции распределения и значения коэффициентов отражения частиц и энергии совпадают с известными экспериментальными данными других авторов для рассеяния как протонов, так и для  $\text{He}^+$ .

### Список литературы

- [1] *Сухомлинов В.С., Фафурина Э.Н.* // ЖТФ. В печати.
- [2] *Harrison D.E.* // Rad. Eff. 1993. Vol. 70. P. 1–64.
- [3] *Behrigh R., Eckstein W.* // Physic of Plasma–Wall Interactions in Controlled Fusion / Ed. D.E.Post, R.Behrigh, New York; London: Plenum Press, 1986. P. 413–438.
- [4] *Петров Н.Н., Аброян И.А.* Диагностика поверхностей с помощью ионных пучков. Л., 1977. 160 с.
- [5] *Biersack J.P.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1987. Vol. 27. P. 21–36.
- [6] *Andersen H.H., Ziegler J.F.* Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements / Ed. J.F.Ziegler. New York: Pergamon Press, 1977.
- [7] *Abrachamson A.A.* // Phys. Rev. 1969. Vol. 178. P. 76–79.
- [8] *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978.
- [9] *Ziegler J.F.* Helium Stopping Powers and Ranges in All Elements. New York: Pergamon Press, 1977.
- [10] *Aratari R., Eckstein W.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1989. Vol. 42. N 1. P. 11–19.
- [11] *Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E.* // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1963. Bd 33. N 14. P. 1–42.
- [12] *Manns R., Hildebrandt D.* // Phys. St. Sol. (a). 1976. Vol. 38. P. K 155–157.

- [13] *Bhattacharya R.S., Verbeek H., Eckstein W.* // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 79. P. 420-422.
- [14] *Oen O.S., Robinson M.T.* // Nucl. Instr. Meth. 1976. Vol. 132. P. 647-653.
- [15] *Mashkova E.S.* // Rad. Eff. 1981. Vol. 54. P. 1-28.
- [16] *Schneider P.J., Verbeek H.* // J. Nucl. Mater. 1981. Vol. 97. P. 319-322.
- [17] *Sidenius G., Lenskjaer T.* // Nucl. Instr. Meth. 1976. Vol. 132. P. 673-679.
- [18] *Eckstein W., Verbeek H.* // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 76-77. P. 365-369.
- [19] *Schou J., Sorensen H., Littmark U.* // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 76-77. P. 359-364.
- [20] *Andersen H.H., Lenskjaer T., Sidenius G. et. al.* // J. Appl. Phys. 1976. Vol. 47 P. 13-16.
-