

01;03

РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ БЫСТРЫХ ЧАСТИЦ В АМОРФНОЙ СРЕДЕ II. МОДИФИЦИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ «ТВЕРДЫХ ШАРОВ»

© *Е.Г.Шейкин*

АО Научно-исследовательского предприятия гиперзвуковых систем,
196066 Санкт-Петербург, Россия
(Поступило в Редакцию 31 мая 1995 г.)

Исследован диапазон энергий $\epsilon < 1$. В рамках модифицированной модели “твердых шаров”, учитывающей зависимость сечения упругого рассеяния быстрой частицы от энергии, обобщено полученное ранее аналитическое решение кинетического уравнения. Предложен метод расчета моментальных характеристик пространственного распределения имплантированных ионов. Из сопоставления экспериментальных и теоретических значений пробегов ионов Рb и Вi в В и С восстановлены зависимости сечения упругого рассеяния от энергии.

В работе [1] получено решение кинетического уравнения для быстрых частиц в аморфной среде в приближении упругого характера взаимодействия сталкивающихся частиц. В предположении изотропности рассеяния в системе центра масс (модель “твердых шаров”) были получены аналитические выражения для функции распределения. В данной работе исследуется возможность применения модели “твердых шаров” для описания движения быстрых частиц в твердом теле. Обобщаются результаты, полученные в [1] на случай зависящего от энергии быстрой частицы сечения упругого рассеяния. Предлагается метод расчета моментных характеристик пространственного распределения имплантированных ионов.

Для функции распределения быстрых частиц, распространяющихся в полупространстве $x > 0$, заполненном однородным аморфным веществом с концентрацией атомов n , в [1] получено выражение

$$f(z, \nu, \mu) = \sum_{k=0}^{\infty} V_k(\nu) X_k(z, \mu), \quad (1)$$

где $z = n\sigma x$ — безразмерная пространственная координата, σ — сечение упругого рассеяния, $\nu = v/v_0$ — безразмерная скорость (v_0 — на-

чальная скорость быстрой частицы, μ — косинус угла между направлением движения быстрой частицы и осью Z .

$$V_k(\nu) = \frac{1}{(k-1)!} \left(\frac{2}{1-\alpha^2} \right)^k \sum_{i=0}^k (-1)^i c_k^i \ln^{k-1}(\alpha^i/\nu) \theta(\nu/\alpha^i), \quad k > 0,$$

$$V_0(\nu) = \delta(\nu - 1), \quad (2)$$

где

$$\alpha = \left| \frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2} \right|,$$

m_1 — масса быстрой частицы, m_2 — масса атомов мишени,

$$c_k^i = \frac{k!}{i!(k-i)!}$$

— биномиальные коэффициенты,

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x \leq 1, \\ 0, & x > 1, x < 0. \end{cases}$$

Функция $X_k(z, \mu)$ в приближении, учитывающем отклонение траектории движения частицы от прямолинейной, имеет вид

$$X_k(z, \mu) = \tilde{X}_k(z) \delta(\mu - \mu_s^k),$$

$$\tilde{X}_k(z) = \sum_{i=0}^k (-1)^i \frac{\mu_s^{(i^2-i)/2}}{R_{k-i}(\mu_s) R_i(\mu_s)} e^{-z/\mu_s^i}, \quad (3)$$

где $R_0(x) = 1$, $R_k(x) = \prod_{i=1}^k (1-x^i)$, μ_s — средний косинус угла рассеяния быстрой частицы; определяется выражением

$$\mu_s = \begin{cases} 1 - \frac{1}{3} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2, & m_1 \geq m_2, \\ \frac{2}{3} \frac{m_1}{m_2}, & m_1 < m_2. \end{cases}$$

Функция распределения нормирована на единичный поток падающих на поверхность частиц

$$I(z) = \int_{-1}^1 d\mu \int_0^1 d\nu \nu \mu f(z, \nu, \mu), \quad I(0) = 1.$$

Результаты (1)–(3) получены с использованием модели “твердых шаров” для описания процесса упругого рассеяния. Исследуем возможность модификации модели “твердых шаров” для описания распространения быстрых частиц в аморфном твердом теле. С этой целью

сопоставим энергетические зависимости тормозной способности вещества и страгглинга энергетических потерь для различных потенциалов взаимодействия сталкивающихся частиц.

Тормозная способность S_n и квадратичная флуктуация в потерях энергии Ω^2 определяются, согласно [2], следующими соотношениями:

$$S_n(E) = \int_0^{T_m} T d\sigma, \quad \Omega^2(E) = \int_0^{T_m} T^2 d\sigma, \quad (4)$$

где E — энергия быстрой частицы, T — энергия передаваемая при столкновении атому мишени, T_m — максимальная величина передаваемой энергии ($T_m = (1 - \alpha^2)E$).

Перейдем к безразмерным переменным, традиционно используемым при исследовании движения быстрых частиц в веществе, согласно [2]

$$E = \varepsilon \frac{Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)}{m_2 a},$$

$$s_n(\varepsilon) = \frac{m_1 + m_2}{m_1} \frac{1}{4\pi a Z_1 Z_2 e^2} S_n(E),$$

$$\omega(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m_1 + m_2}{4Z_1 Z_2 e^2 m_1} \right)^2 \Omega^2(E), \quad (5)$$

где Z_1 и Z_2 — заряд ядра соответственно быстрой частицы и атома мишени, $a = 0.8853a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$, a_0 — радиус первой орбиты электрона в атоме водорода.

Используя выражения T и $d\sigma$ из [3], получим выражения $S_n(E)$ и $\Omega^2(E)$ для модели “твердых шаров”. В безразмерных переменных (5) тормозная способность $s_n(\varepsilon)$ и страгглинг энергетических потерь $\omega(\varepsilon)$ имеют следующий вид:

$$s_n(\varepsilon) = \frac{\sigma}{2\pi a^2} \varepsilon, \quad \omega(\varepsilon) = \frac{\sigma}{3\pi a^2} \varepsilon^2. \quad (6)$$

При $\sigma = \text{const}$ выражение $s_n(\varepsilon)$ из (6) существенно отличается от теоретических и экспериментальных значений. Так, согласно [2], для $\varepsilon < 0.01$ экспериментальные значения хорошо описываются формулой $s_n(\varepsilon) = 1.7\varepsilon^{1/2}$, при $\varepsilon > 10$ $s_n(\varepsilon) = \ln \varepsilon / 2\varepsilon$.

Модифицируем модель “твердых шаров”, предполагая, что сечение упругого рассеяния зависит от энергии быстрой частицы. Определенная из соотношений (6) величина сечения $\sigma(\varepsilon) = 2\pi a^2 s_n(\varepsilon) / \varepsilon$ позволит правильно описывать в рамках модели “твердых шаров” средние потери энергии при движении быстрой частицы в аморфной среде. В этом случае для квадратичной флуктуации потерь энергии из (6) получаем выражение

$$\omega(\varepsilon) = \frac{2}{3} \varepsilon s_n(\varepsilon). \quad (7)$$

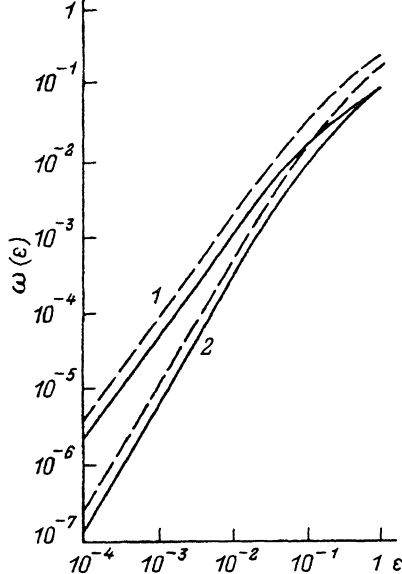


Рис. 1. Страгглинг энергетических потерь.

Сплошные кривые — расчет из [2], штриховые — расчет по формуле (7) для модифицированной модели “твердых шаров”; 1 — потенциал Томаса-Ферми-Фирсова, 2 — потенциал Бора.

Сопоставим значения $\omega(\varepsilon)$, рассчитываемые по (7), для модифицированной предложенным выше способом модели “твердых шаров” с результатами расчетов для различных потенциалов взаимодействия сталкивающихся частиц. Результаты расчетов, представленные на рис. 1, показывают, что разброс значений $\omega(\varepsilon)$, связанный с использованием различных потенциалов взаимодействия, существенно превышает те отклонения, которые вносит использование модифицированной модели “твердых шаров”. Таким образом, применение модифицированной модели “твердых шаров”, в которой рассеяние описывается в рамках модели “твердых шаров”, а сечение рассеяния зависит от энергии быстрой частицы, позволяет вполне удовлетворительно описывать средние потери энергии и страгглинг энергетических потерь при прохождении быстрых частиц через вещество.

В дальнейшем будем использовать простую форму зависимости сечения упругого рассеяния от скорости быстрой частицы

$$\sigma(v) = \sigma(v_0) \left(\frac{v_0}{v} \right)^\kappa. \quad (8)$$

Такое приближение, отражая особенности распространения частиц в веществе (при $\kappa = 1$, $s_n(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$), позволяет получить основные результаты в аналитической форме.

Обобщим полученное решение (1)–(3) для функции распределения быстрых частиц в аморфной среде с учетом зависимости сечения упругого рассеяния от скорости. Величина среднего бесстолкновительного пробега частицы, имеющей скорость v при зависящем от скорости

сечения ипругого рассеяния $\sigma(v)$, также зависит от скорости и определяется соотношением

$$\lambda(v) = \int_0^{\infty} xn\sigma(v)e^{-n\sigma(v)x} dx.$$

Среднее значение смещения в степени m для быстрой частицы, испытавшей k столкновений, при известной функции распределения по скоростям быстрых частиц, испытавших k столкновений $\nu V_k(\nu)$, определяется выражением

$$\bar{\lambda}_k^m = \int_0^1 \nu V_k(\nu) \int_0^{\infty} x^m n\sigma(\nu) e^{-n\sigma(\nu)x} dx.$$

Подставив в это соотношение $\sigma(\nu)$ из (8) и $V_k(\nu)$ из (2), получим

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_k^m &= m! \lambda_0^m \psi_m^k, \quad \lambda_0 = 1/n\sigma(v_0), \\ \psi_m &= \frac{2(1 - \alpha^{2+m\kappa})}{(1 - \alpha^2)(2 + m\kappa)}. \end{aligned} \quad (9)$$

В частности, среднее значение пробега частицы после k -го столкновения $\bar{\lambda}_k = \lambda_0 \psi_1^k$, а среднеквадратичное смещение частицы после k -го столкновения $\bar{\lambda}_k^2 = 2\lambda_0^2 \psi_2^k$. Полученный результат позволяет легко обобщить решение кинетического уравнения [1] (формулы (1)–(3)) с учетом зависимости $\sigma(v)$. Полагаем $z = xn\sigma(v_0)$. Согласно (9), средняя длина пробега быстрой частицы зависит от числа испытанных столкновений $\bar{\lambda}_k = \lambda_0 \psi_1^k$. Согласно [1], среднее значение косинуса угла между направлением движения быстрой частицы после k -го столкновения и осью z определяется выражением $\bar{\mu}_k = \mu_s^k$. Таким образом, среднее проективное смещение быстрой частицы между k - и $k+1$ -столкновениями определяется соотношением

$$\Delta z_k = (\bar{\lambda}_k / \lambda_0) \mu_s^k = (\psi_1 \mu_s)^k.$$

При замене величины μ_s в формуле (3) на произведение $\psi_1 \mu_s$ учитывается зависимость $\sigma(v)$ в рамках приближений [1], правильно описывая среднее смещение частицы между столкновениями. В результате этой замены функция распределения быстрых частиц в веществе принимает вид

$$\begin{aligned} f(z, \nu, \mu) &= \sum_{k=0}^{\infty} V_k(\nu) \bar{X}_k(z) \delta(\mu - \mu_s^k), \\ \bar{X}_k(z) &= \sum_{i=0}^k (-1)^i \frac{(\psi_1 \mu_s)^{(i^2-i)/2}}{R_{k-i}(\psi_1 \mu_s) R_i(\psi_1 \mu_s)} e^{-z/(\psi_1 \mu_s)^i}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$z = xn\sigma(v_0), \quad \psi_1 = \frac{2(1 - \alpha^{2+\kappa})}{(1 - \alpha^2)(2 + \kappa)},$$

$V_k(\nu)$ — рассчитывается по (2).

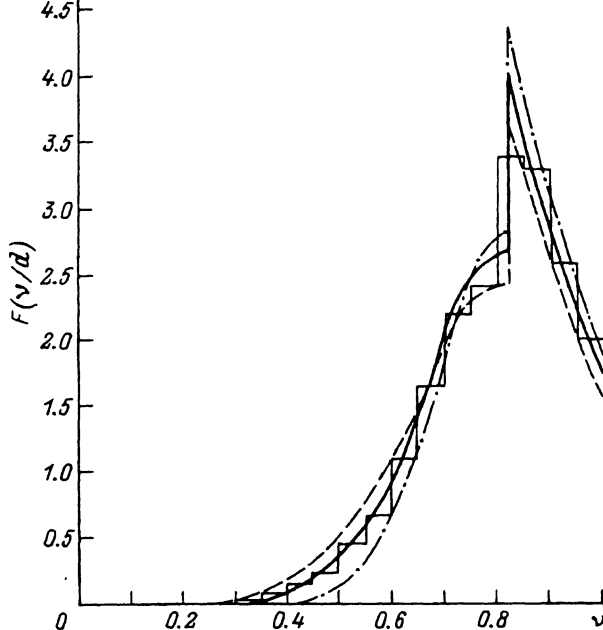


Рис. 2. Функция распределения по скоростям $F(\nu/d)$.

$d = 2$, $m_1/m_2 = 10$; $\kappa = 0$ (штриховая кривая), 1 (сплошная кривая), 2 (штрихпунктир); гистограмма — расчет методом Монте-Карло при $\kappa = 1$.

При $\kappa = 0$ ($\sigma = \text{const}$) $\psi_1 = 1$ и решение (10) переходит в решение (1)–(3).

Функция распределения по скоростям частиц испытавших столкновения при прохождении слоя вещества толщиной d — $F(\nu/d)$, определенная в [1], имеет вид

$$F(\nu/d) = \sum_{k=1}^{\infty} (\psi_1 \mu_s)^k \tilde{X}_k(d) \nu V_k(\nu) / (1 - e^{-d}).$$

На рис. 2 представлены функции распределения по скоростям быстрых частиц, прошедших слой d , при различных значениях κ , определяющих зависимость сечения упругого рассеяния от скорости ($\sigma(\nu) = \sigma_0 \nu^{-\kappa}$). С увеличением κ от 0 до 2 происходит обогащение функции распределения в области низких скоростей и обеднение в области высоких. Такая трансформация функции распределения обусловлена тем, что торможение частиц в веществе (при $\kappa > 0$) сопровождается увеличением сечения упругого рассеяния, а следовательно, и увеличением эффективной толщины слоя. Результаты расчета $F(\nu/d)$ методом Монте-Карло [1] хорошо согласуются с аналитическими результатами.

На основе полученных результатов и результатов работы [1] можно сделать вывод, что предположение о независимом изменении угловых и энергетических характеристик быстрой частицы в процессе упругого рассеяния на атомах мишени при $m_1/m_2 \geq 2$ не приводит к заметным искажениям основных характеристик быстрых частиц, распространяющихся в аморфной среде.

Выражение (10) применимо для описания прохождения быстрых частиц через "тонкую мишень" ($d \lesssim 10$). Для того чтобы получить функцию распределения быстрых частиц в веществе при $d \gg 1$, необходимо учитывать имплантацию (уход частиц из потока в результате "остановки"). При расчете пространственной части функции распределения (согласно [1]) необходимо использовать индикатрису рассеяния, описывающую трансформацию анизотропного углового распределения в изотропное. В ряде практически важных приложений знание функции распределения представляется излишним. В частности, согласно [3], экспериментально измеренные профили имплантированных ионов хорошо описываются гауссовым распределением

$$f(R_p) = \left(2\pi\Delta\bar{R}_p^2\right)^{-1/2} \exp\left[-\frac{(R_p - \bar{R}_p)^2}{2\Delta\bar{R}_p^2}\right].$$

Таким образом, для описания пространственного профиля имплантированных ионов $f(R_p)$ достаточно ограничиться расчетом среднего значения проецированного пробега \bar{R}_p и среднеквадратичного отклонения проецированных пробегов $\Delta\bar{R}_p^2$.

Применим полученные результаты для расчета \bar{R}_p и $\Delta\bar{R}_p^2$ в диапазоне энергий $\varepsilon < 1$, когда основным механизмом торможения ионов является процесс упругого рассеяния на атомах мишени. Процесс имплантации рассмотрим в следующем модельном приближении. Ион внедряется в вещество с начальной энергией $E = E_0$ и движется, теряя энергию и меняя направление своего движения в упругих соударениях с атомами мишени. Движение иона продолжается до тех пор, пока его энергия не станет меньше некоторой пороговой величины $E_{\text{пор}}$. Пространственное распределение концентрации ионов в веществе, остановившихся при выполнении условия $E \leq E_{\text{пор}}$, и будем принимать за распределение имплантированных ионов. Процесс упругого рассеяния будем рассматривать в приближении модифицированной модели "твердых шаров". Значения κ и σ_0 (формула (8)) будем выбирать из сопоставления теоретических результатов с экспериментальными.

Введем следующие понятия: x_k — расстояние от границы поверхности до точки, в которой быстрая частица испытывает k^e -столкновение; q_k — вероятность того, что после k -го столкновения частица остановится. В этих терминах моменты распределения $f(R_p)$ могут быть записаны в виде

$$\bar{R}_p = \sum_{k=1}^{\infty} q_k \bar{x}_k,$$

$$\overline{R_p^2} = \sum_{k=1}^{\infty} q_k \overline{x_k^2} \quad (\Delta\bar{R}_p^2 = \overline{R_p^2} - \bar{R}_p^2). \quad (11)$$

Расчет q_k будет проведен с использованием функции распределения по скоростям $\nu V_k(\nu)$. Для расчета входящих в (11) величин \bar{x}_k и $\overline{x_k^2}$, кроме выражения (9) для длины пробега быстрой частицы $\bar{\lambda}_k$, потребуются и соотношения, описывающие изменение угловых характеристик

быстрой частицы в результате рассеяния. Приведем эти соотношения из [1]

$$\mu_k = \mu_{k-1} \cos \theta + \sqrt{1 - \mu_{k-1}^2} \sin \theta \cos \psi, \quad (12)$$

$$\cos \theta = \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \cos \chi \right) / \sqrt{1 + 2 \frac{m_2}{m_1} \cos \chi + \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2}, \quad (13)$$

где μ_k — косинус угла между траекторией быстрой частицы после k -го столкновения и осью X , θ — угол рассеяния быстрой частицы в лабораторной системе, ψ — азимутальный угол рассеяния, χ — угол рассеяния быстрой частицы в системе центра масс.

Координата k -го столкновения быстрой частицы в веществе x_k определяется очевидным соотношением $x_k = \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_j \mu_j$. Усредним это соотношение, используя обоснованное при $m_1/m_2 \geq 2$ предположение о независимом изменении угловых и энергетических характеристик быстрой частицы в процессе упругого рассеяния. В результате получим

$$\bar{x}_k = \sum_{j=0}^{k-1} \bar{\lambda}_j \bar{\mu}_j. \quad (14)$$

Для нахождения $\overline{x_k^2}$ представим x_k в виде

$$x_k = \bar{x}_k + \sum_{j=0}^{k-1} (\lambda_j \mu_j - \bar{\lambda}_j \bar{\mu}_j).$$

После возведения в квадрат и усреднения данного соотношения получим

$$\overline{x_k^2} = \bar{x}_k^2 + \sum_{j=0}^{k-1} \left(\overline{\lambda_j^2 \mu_j^2} - \bar{\lambda}_j^2 \bar{\mu}_j^2 \right). \quad (15)$$

Рекуррентные соотношения для $\bar{\mu}_j$ и $\overline{\mu_j^2}$ получим, проведя усреднение выражения для μ_j и μ_j^2 с использованием соотношений (12), (13),

$$\bar{\mu}_j = \bar{\mu}_{j-1} \mu_s,$$

$$\overline{\mu_j^2} = \frac{1 - \overline{\cos^2 \theta}}{2} + \overline{\mu_{j-1}^2} \left(\frac{\overline{\cos^2 \theta} - 1}{2} \right). \quad (16)$$

Значение $\overline{\cos^2 \theta}$, входящее в (16), определяется соотношением

$$\overline{\cos^2 \theta} = \int_0^\pi \cos^2 \theta(\chi) \frac{1}{2} \sin \chi d\chi$$

и с учетом (13) имеет вид

$$\overline{\cos^2 \theta} = 1 - \frac{1}{4} \left(1 + \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \right) + \frac{1}{8} \left(\frac{m_1}{m_2} \right) \left(1 - \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2 \right)^2 \ln(1/\alpha). \quad (17)$$

Рекуррентные соотношения (16) позволяют выразить $\bar{\mu}_j$ и $\overline{\mu_j^2}$ в явном виде

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_j &= \mu_0 \mu_s^j, \\ \overline{\mu_j^2} &= \frac{1}{3} + \left(\mu_0^2 - \frac{1}{3} \right) \left(\frac{3\overline{\cos^2 \theta} - 1}{2} \right)^j. \end{aligned} \quad (18)$$

Используя формулы (15)–(18), с учетом (9) для \bar{x}_k и $\overline{x_k^2}$ получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} \bar{x}_k &= \lambda_0 \mu_0 \sum_{j=0}^{k-1} (\psi_1 \mu_s)^j, \\ \overline{x_k^2} &= \bar{x}_k^2 + \lambda_0^2 \sum_{j=0}^{k-1} \left[2\psi_2^j \overline{\mu_j^2} - \mu_0^2 (\psi_1 \mu_s)^{2j} \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

Используя формулы (11), (15), (18), (19), получаем выражение для моментов функции распределения $f(R_p)$ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \bar{R}_p &= \sum_{k=1}^{\infty} q_k \bar{x}_k = \lambda_0 \sum_{k=1}^{\infty} q_k s_k, \\ \overline{R_p^2} &= \sum_{k=1}^{\infty} q_k \overline{x_k^2} = \lambda_0^2 \sum_{k=1}^{\infty} q_k (s_k^2 + p_k), \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} s_k &= \mu_0 \frac{1 - (\psi_1 \mu_s)^k}{1 - \psi_1 \mu_s}, \\ p_k &= \frac{2}{3} \frac{1 - \psi_2^k}{1 - \psi_2} + 2 \left(\mu_0^2 - \frac{1}{3} \right) \frac{1 - (\psi_2 \tau)^k}{1 - \psi_2 \tau} - \mu_0^2 \frac{1 - (\psi_2 \mu_s^2)^k}{1 - \psi_2 \mu_s^2}, \\ \tau &= \frac{3\overline{\cos^2 \theta} - 1}{2}. \end{aligned}$$

Для расчета величин \bar{R}_p и $\overline{R_p^2}$ необходимо определить вероятность остановки быстрой частицы после k -го столкновения q_k . Быструю частицу будем считать остановившейся при выполнении условия $\nu < \omega$, где $\omega = \sqrt{E_{\text{пор}}/E_0}$. Так как $\xi_k = \int_0^w \nu V_k(\nu) d\nu$ — определяет полную вероятность того, что после k -столкновений скорость частицы $\nu < \omega$, то

разность $\xi_k - \xi_{k-1}$, очевидно, определяет вероятность того, что условие $\nu < w$ выполняется для быстрой частицы именно после k -го столкновения. Проинтегрировав $\nu V_k(\nu)$ (2), получим

$$\xi_k = \left(\frac{1}{1-\alpha^2}\right)^k \left[\sum_{i=0}^{i^*} (-1)^i c_k^i \omega^2 \sum_{j=0}^{k-1} \frac{2^j}{j!} \ln^j \left(\frac{\alpha^i}{w}\right) + \sum_{i=i^*+1}^k (-1)^i c_k^i \alpha^{2i} \right],$$

$$q_k = \xi_k - \xi_{k-1}, \quad k > i^*, \quad (21)$$

где i^* — целая часть числа $(\ln w / \ln \alpha)$.

С учетом того, что, согласно [4], $(1-\alpha^2)^k = \sum_{i=0}^k (-1)^i c_k^i \alpha^{2i}$, выражение (21) для ξ_k существенно упрощается

$$\xi_k = 1 - \left(\frac{1}{1-\alpha^2}\right)^k \sum_{i=0}^{i^*} (-1)^i c_k^i \left[\alpha^{2i} - w^2 \sum_{j=0}^{k-1} \frac{2^j}{j!} \ln^j(\alpha^i/w) \right]. \quad (22)$$

При $k \geq 10$ для расчета ξ_k используем приближенное выражение $V_k(\nu)$ из [1]. Результат приведем без вывода

$$\xi_k = \frac{1}{2} [1 - \text{sign}(T_k) \text{erf}(|T_k|)], \quad (23)$$

где

$$T_k = [\ln(1/w) + kt] / \sqrt{2kb},$$

$$t = -\frac{1}{2} \left(1 + \frac{2\alpha^2}{1-\alpha^2} \ln \alpha \right),$$

$$b = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{4\alpha^2}{(1-\alpha^2)^2} \ln^2 \alpha \right].$$

Таким образом, расчет величин \bar{R}_p и \bar{R}_p^2 , характеризующих распределение $f(R_p)$, осуществляется по формулам (20)–(23). Зависимость величин \bar{R}_p и \bar{R}_p^2 от начальной энергии быстрой частицы E_0 входит в формулу (20) через зависимость начальной длины пробега λ_0 от энергии и коэффициентов q_k от $\omega = \sqrt{E_{\text{пор}}/E_0}$.

На рис. 3 представлены зависимости q_k от числа испытанных быстрой частицей столкновений k при различных значениях $E_0/E_{\text{пор}}$. Для наглядности через точки проведены гладкие кривые. Из рис. 3 видно, что с увеличением отношения $E_0/E_{\text{пор}}$ увеличивается число столкновений быстрой частицы с атомами мишени, необходимое для ее остановки. С ростом $E_0/E_{\text{пор}}$ максимальное значение вероятности q_k падает, а распределение вероятностей становится более широким.

На рис. 4 представлены зависимости от отношения масс m_1/m_2 величин среднего проецированного пробега быстрой частицы \bar{R}_p , среднеквадратичного отклонения $\Delta \bar{R}_p = \sqrt{\bar{R}_p^2 - \bar{R}_p^2}$ и отношения $\Delta \bar{R}_p / \bar{R}_p$,

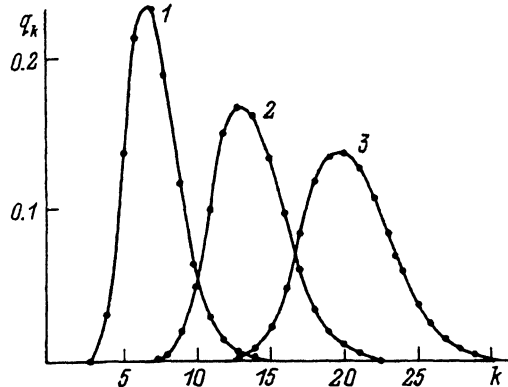


Рис. 3. Зависимость вероятности остановки быстрой частицы q_k от числа испытанных столкновений k . $m_1/m_2 = 5$, $E_0/E_{\text{пор}} = 10$ (1), 100 (2), 1000 (3).

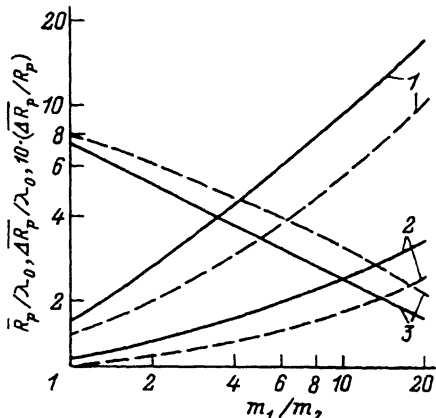


Рис. 4. Зависимости пробегов частицы в веществе от отношения m_1/m_2 . $E_0/E_{\text{пор}} = 100$; $\kappa = 1$ (сплошные кривые), 2 (штриховые); 1 — \bar{R}_p/λ_0 , 2 — $\Delta\bar{R}_p/\lambda_0$, 3 — $10\Delta\bar{R}_p/\bar{R}_p$.

рассчитанные по формулам (20)–(23). С увеличением отношения масс m_1/m_2 средний проективный пробег быстрой частицы \bar{R}_p и величина $\Delta\bar{R}_p$ растут. Это обусловлено тем, что при увеличении m_1/m_2 доля энергии, теряемая быстрой частицей в одном столкновении, падает и для остановки частицы требуется большое число столкновений. Отношение $\Delta\bar{R}_p/\bar{R}_p$ падает с ростом m_1/m_2 . С увеличением κ значения \bar{R}_p и $\Delta\bar{R}_p$ падают. Это объясняется зависимостью сечения упругого рассеяния от скорости быстрой частицы. Согласно (8), при одном значении скорости $v < v_0$ большему значению κ отвечает большая величина сечения рассеяния. Тем самым при одинаковом числе соударений быстрой частицы с атомами мишени на большее расстояние сместится частица, у которой зависимость $\sigma(v)$ характеризуется меньшим значением κ .

Для сопоставления полученных теоретических результатов с экспериментом, необходимо определить величину $E_{\text{пор}}$ — пороговой энергии, при которой происходит остановка быстрой частицы в аморфной среде. Естественным предполагается определить $E_{\text{пор}}$ из условия, когда максимальная величина передаваемой энергии при столкновении быстрой частицы с атомом мишени равна энергии смещения $E_{\text{см}}$ — энергии, которую необходимо передать атому мишени, чтобы сместить его с занимаемого места. Отсюда получаем

$$E_{\text{пор}} = E_{\text{см}}/(1 - \alpha^2). \quad (24)$$

Согласно рекомендациям из [3,5], возьмем $E_{\text{см}} = 25$ эВ. Зависимость сечения упругого рассеяния быстрой частицы от энергии представим в виде, удобном для сопоставления с экспериментальными результатами

$$\sigma(E) = \sigma(\tilde{E})(\tilde{E}/E)^{\kappa/2}. \quad (25)$$

где \tilde{E} — некоторое характерное значение энергии.

Таблица 1. Параметры экспериментальных и теоретических пробегов ионов

Ион	Мишень	Энергия, кэВ	Эксперимент		Теория	
			$\bar{R}_p, \text{Å}$	$\overline{\Delta R}_p, \text{Å}$	$\bar{R}_p, \text{Å}$	$\overline{\Delta R}_p, \text{Å}$
Pb	В	20	165	45	165	31
		50	285	65	291	54
		100	450	110	446	81
Pb	С	10	138	32	149	31
		20	205	44	200	40
		50	315	60	327	59
		100	495	91	467	84
Bi	В	20	180	30	180	32
		50	285	70	295	50
		100	440	100	422	72
Bi	С	15	140	27	139	26
		40	245	37	245	46
		80	390	60	363	65

В табл. 1 приводится сравнение экспериментальных значений пробегов ионов Pb и Bi в мишенях из В и С, полученных в [6], с результатами расчетов по формулам (20)–(24). Значения $\sigma(\bar{E})$ и κ , описывающие зависимость сечения упругого рассеяния от энергии (25), определялись методом наименьших квадратов при сопоставлении экспериментальных и теоретических зависимостей пробегов ионов от энергии. Полученные значения представлены в табл. 2. При выбранном значении $\bar{E} = 10 \text{кэВ}$ величины $\sigma(\bar{E})$ для рассмотренных комбинаций ион–мишень практически совпадают. Значения κ близки к единице.

Экспериментальные и теоретические результаты, представленные в табл. 1, хорошо согласуются. Максимальное отклонение для \bar{R}_p не превышает 10%, а для $\overline{\Delta R}_p$ — 30%.

В заключение перечислим основные результаты работы. В рамках модифицированной модели “твердых шаров”, учитывающей зависимость сечения упругого рассеяния быстрой частицы от энергии, общено полученное в работе [1] аналитическое решение кинетического

Таблица 2. Параметры сечения упругого рассеяния (25) при $\bar{E} = 10 \text{кэВ}$, восстановленные из экспериментальных значений пробегов ионов в веществе

Ион	Мишень	κ	$\sigma(\bar{E}), \text{Å}^2$
Pb	В	1.2	1.1
Pb	С	1.0	1.1
Bi	В	1.0	1.1
Bi	С	1.1	1.2

уравнения. Предложен метод расчета моментных характеристик пространственного распределения имплантированных ионов. Из сопоставления экспериментальных и теоретических значений пробегов ионов Рb и Bi в В и С восстановлены зависимости сечения упругого рассеяния от энергии.

Список литературы

- [1] Шейкин Е.Г. Решение кинетического уравнения для быстрых частиц в аморфной среде. Ч. I. ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 10. С. 1–12.
 - [2] Куматов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск, 1979. 320 с.
 - [3] Готт Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
 - [4] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1978. 832 с.
 - [5] Джафаров Т.Д. Радиационно-стимулированная диффузия в полупроводниках. М.: Энергоатомиздат, 1991. 288 с.
 - [6] Grande P.L., Zawislak F.C., Fink D., Behor M. // Nucl. Instr. and Meth. 1991. Vol. B61. N 3. P. 282–290.
-