

01;05;10;11;12

Пробеги тяжелых ионов низких энергий в бериллии, боре, углероде и кремнии

© Е.Г. Шейкин

Акционерное общество открытого типа "Научно-исследовательское предприятие гиперзвуковых систем", 196066 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 21 января 1997 г. В окончательной редакции 17 июня 1997 г.)

На основе разработанной теории прохождения тяжелых ионов низких энергий в веществе получены простые аналитические выражения для расчета средних значений проективных пробегов ионов и среднеквадратичных отклонений проективных пробегов. Проведено сравнение теоретических и экспериментальных пробегов тяжелых ионов с атомными номерами $29 \leq Z_1 \leq 83$ в мишенях из Be, B, C и Si. Наблюдается хорошее согласие теории с экспериментом.

В работе [1] развита теория распространения тяжелых ионов низких энергий в аморфной среде в случае, когда основным процессом, определяющим перенос ионов является процесс их упругого рассеяния на атомах мишени. Процесс упругого рассеяния описывается в приближении модифицированной модели твердых шаров [2]. Сечение упругого рассеяния определяется через тормозную способность s_n для потенциала взаимодействия в модели Томаса-Ферми. Предполагается, что остановка иона в веществе происходит, когда его энергия становится меньше некоторой пороговой величины E_{th} . В этих приближениях в работе [1] получены аналитические выражения для расчета среднего значения проективного пробега ионов \bar{R}_p и среднеквадратичного отклонения проективных пробегов ΔR_p . В данной работе проводится сопоставление теоретических результатов полученных в [1] с экспериментом [3-6] и предлагаются простые выражения для расчетов \bar{R}_p и ΔR_p . Приведем формулы для расчета \bar{R}_p и ΔR_p из [1]

$$\bar{R}_p = \sum_{k=1}^{\infty} q_k \bar{x}_k, \quad \overline{R_p^2} = \sum_{k=1}^{\infty} q_k \bar{x}_k^2, \\ \Delta R_p = \sqrt{(\overline{R_p^2} - \bar{R}_p^2)}, \quad (1)$$

где x_k — расстояние от поверхности твердого тела до точки, в которой ион испытывает k -е столкновение; q_k — вероятность того, что ион остановится после k -го столкновения;

$$q_k = \xi_k - \xi_{k-1}, \\ \xi_k = 1 - Q^k \sum_{i=0}^N (-1)^i c_k^i \left[\alpha^i - \frac{E_{th}}{E} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{1}{j!} \ln^j(\alpha^i E / E_{th}) \right], \quad k > N, \\ \xi_k = 0, \quad k \leq N, \quad (2)$$

где E — начальная энергия иона, N — целая часть числа $\ln(E/E_{th})/\ln(\alpha)$, $\alpha = ((m_1 - m_2)/(m_1 + m_2))^2$, m_1 — масса иона, m_2 — масса атома мишени,

$$c_k^i = \frac{k!}{i!(k-i)!}, \quad Q = 1/(1 - \alpha).$$

Средние значения \bar{x}_k и \bar{x}_k^2 , входящие в (1), определяются соотношениями

$$\bar{x}_k = \sum_{j=0}^{k-1} \lambda_j \mu_j, \quad \bar{x}_k^2 = \bar{x}_k^2 + \sum_{j=0}^{k-1} (\overline{\lambda_j^2 \mu_j^2} - \bar{\lambda}_j^2 \bar{\mu}_j^2). \quad (3)$$

Здесь λ_j — длина пробега иона между j - и $j+1$ -столкновениями, μ_j — косинус угла между направлением движения иона после j -го столкновения и нормалью к поверхности мишени. Средние значения $\bar{\mu}_j$ и $\bar{\mu}_j^2$ определяются соотношениями

$$\bar{\mu}_j = \mu_0 (\overline{\cos \Theta})^j, \quad \bar{\mu}_j^2 = \frac{1}{3} + \left(\mu_0^2 - \frac{1}{3} \right) \left(\frac{3 \overline{\cos^2 \Theta} - 1}{2} \right)^j,$$

где θ — угол рассеяния иона в лабораторной системе при столкновении с атомом мишени, μ_0 — начальное значение μ , в дальнейшем будем полагать $\mu_0 = 1$.

В модифицированной модели твердых шаров средние значения $\overline{\cos \Theta}$ и $\overline{\cos^2 \Theta}$ определяются следующими соотношениями:

$$\overline{\cos \Theta} = \begin{cases} 1 - \frac{1}{3}(m_2/m_1)^2, & m_1 > m_2, \\ \frac{2}{3}(m_1/m_2), & m_1 \leq m_2, \end{cases} \\ \overline{\cos^2 \Theta} = 1 - \frac{1}{4}(1 + (m_2/m_1)^2) + \frac{1}{16}(m_1/m_2) \left(1 - (m_2/m_1)^2 \right)^2 \ln(1/\alpha). \quad (4)$$

При $m_1 > m_2$ для расчета $\overline{\cos^2 \Theta}$ удобно использовать разложение данного выражения в ряд Тейлора. В частности, при $m_1/m_2 \geq 2$ для расчета $\overline{\cos^2 \Theta}$ с относительной погрешностью, не превышающей 0.1%, получаем следующее выражение:

$$\overline{\cos^2 \Theta} \approx 1 - \frac{2}{3}(m_2/m_1)^2 + \frac{2}{15}(m_2/m_1)^4.$$

Выражения для средних значений $\bar{\lambda}_j$ и $\bar{\lambda}_j^2$, входящих в (3), получены в [1] с использованием аппроксимационного выражения для s_n из [7]

$$s_n = \frac{g\sqrt{\varepsilon}}{b + \varepsilon} \quad \text{при } g = 0.45, \quad b = 0.3. \quad (5)$$

Приведенная энергия ε определяется соотношением

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

где Z_1 и Z_2 — соответственно заряд ядра иона и атома мишени, a — параметр экранирования, e — заряд электрона.

Используется приближение Линдхарда, в котором $a = 0.8853 a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$, a_0 — боровский радиус. В этом случае, согласно [1],

$$\bar{\lambda}_j = \lambda_0 \left[b + \gamma^j(1/2) + \varepsilon \gamma^j(3/2) \right],$$

$$\bar{\lambda}_j^2 = 2\lambda_0^2 \left[b^2 \gamma^j(1) + 2b\varepsilon \gamma^j(2) + \varepsilon^2 \gamma^j(3) \right], \quad (6)$$

где $\gamma(w) = (1 - \alpha^{1+w}) / ((1 - \alpha)(1 + w))$, $\lambda_0 = \sqrt{\varepsilon} / (2gn\pi a^2)$, n — концентрация атомов мишени.

Совокупность формул (1)–(6) позволяет рассчитать при заданной величине E_{th} зависимость пробегов ионов в веществе от их энергии E . Величину E_{th} определим аналогично [1] соотношением $E_{th} = E_d / (1 - \alpha)$, полученным из условия равенства максимальной энергии, передаваемой атому мишени при столкновении, и энергии смещения E_d . Энергия смещения E_d для различных материалов мишени, согласно [8], изменяется в пределах от 10 до 35 eV.

Исследуем, насколько существен учет E_{th} при расчете пробегов тяжелых ионов с энергиями $\varepsilon \leq 0.1$. Рассмотрим предельный случай $E_{th} = 0$. Для предельных значений пробегов ионов при $E_{th} = 0$ введем специальные обозначения: L_p — предельное значение среднего проективного пробега, ΔL_p — предельное значение среднеквадратичного отклонения проективных пробегов. Согласно (2), при $E_{th} = 0$ величина $q_k = 0$ для любого конечного значения числа k . Следовательно, согласно (1)–(3), для L_p и ΔL_p получаем следующие выражения:

$$L_p = \sum_{j=0}^{\infty} \bar{\lambda}_j \mu_j, \quad (\Delta L_p)^2 = \sum_{j=0}^{\infty} (\bar{\lambda}_j^2 \mu_j^2 - \bar{\lambda}_j^2 \bar{\mu}_j^2). \quad (7)$$

После несложных преобразований из формул (3)–(7) получаем

$$\begin{aligned} L_p &= \lambda_0 \left[\frac{b}{1 - \gamma(1/2)\overline{\cos \Theta}} + \frac{\varepsilon}{1 - \gamma(3/2)\overline{\cos \Theta}} \right], \\ (\Delta L_p)^2 &= \lambda_0^2 \left\{ \frac{2}{3} \left[\frac{b^2}{1 - \gamma(1)} + \frac{2b\varepsilon}{1 - \gamma(2)} + \frac{\varepsilon^2}{1 - \gamma(3)} \right] \right. \\ &+ \frac{4}{3} \left[\frac{b^2}{1 - \tau\gamma(1)} + \frac{2b\varepsilon}{1 - \tau\gamma(2)} + \frac{\varepsilon^2}{1 - \tau\gamma(3)} \right] \\ &- \left[\frac{b^2}{1 - (\gamma(1/2)\overline{\cos \Theta})^2} + \frac{2b\varepsilon}{1 - \gamma(1/2)\gamma(3/2)(\overline{\cos \Theta})^2} \right. \\ &\left. \left. + \frac{\varepsilon^2}{1 - (\gamma(3/2)\overline{\cos \Theta})^2} \right] \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

где $\tau = (3\overline{\cos^2 \Theta}) / 2$.

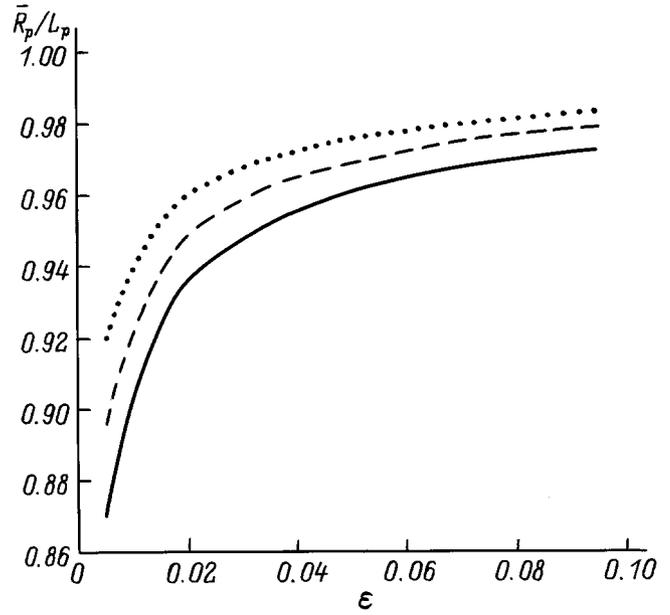


Рис. 1. Зависимость отношения \bar{R}_p/L_p от энергии ионов, при $E_d = 25$ eV: сплошная кривая — Pb-C, штриховая — Cs-Si, пунктир — Pb-Si.

На рис. 1 представлены зависимости \bar{R}_p/L_p от энергии ионов для различных пар ион–мишень. При расчете \bar{R}_p для всех мишеней полагали $E_d = 25$ eV. Видно, что при больших значениях ε отношение \bar{R}_p/L_p близко к единице и падает с уменьшением энергии иона. При фиксированном значении ε отношение \bar{R}_p/L_p падает как с уменьшением Z_1 , так и с уменьшением Z_2 . При $\varepsilon < 0.05$ отличие \bar{R}_p от L_p становится существенным. В этом диапазоне энергий необходим корректный учет пороговой энергии ε_{th} при расчете проективных пробегов ионов в веществе. Сравнительные расчеты зависимостей $\bar{R}_p(\varepsilon)$ и $L_p(\varepsilon)$, а также $\Delta R_p(\varepsilon)$ и $\Delta L_p(\varepsilon)$ были проведены для большого набора комбинаций ион–мишень, удовлетворяющих условию $m_1/m_2 \geq 2$. На основе этих расчетов получены следующие аппроксимированные выражения для расчета проективных пробегов ионов в веществе:

$$\begin{aligned} \bar{R}_p(\varepsilon) &\approx L_p(\varepsilon) - \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^{0.8} L_p(\varepsilon_{th}), \\ \Delta R_p(\varepsilon) &\approx \Delta L_p(\varepsilon). \quad (9) \end{aligned}$$

Относительная погрешность при расчете по формулам (9) в диапазоне энергий $0.005 \leq \varepsilon \leq 0.1$ для \bar{R}_p не превышает 0.3%, а для ΔR_p — 1%. Таким образом, использование формул (8)–(10) позволяет просто и с высокой точностью рассчитывать значения проективных пробегов ионов в веществе.

При малых значениях параметра m_2/m_1 выражения для расчета предельных значений пробегов ионов L_p и ΔL_p , входящих в (9), могут быть существенно упрощены. Используя разложение в ряд Тейлора функций L_p и ΔL_p , определяемых формулами (8), и ограничиваясь

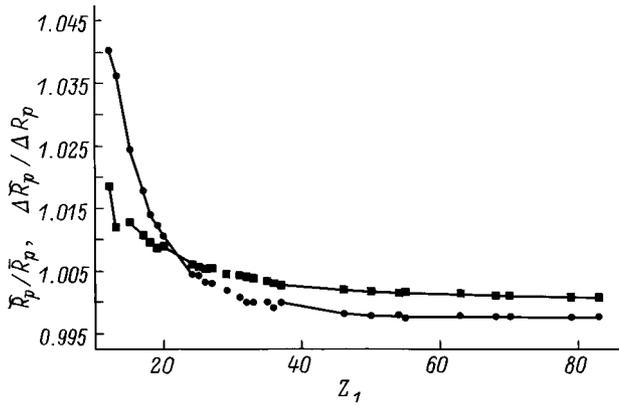


Рис. 2. Зависимость отношения приближенных значений пробегов ионов к точным от атомного номера иона Z_1 : $\varepsilon = 0.01$; ■ — \tilde{R}_p/\bar{R}_p ; ● — $\Delta\tilde{R}_p/\Delta R_p$.

первыми членами разложения, получаем приближенные выражения для предельных пробегов ионов

$$\begin{aligned} \tilde{L}_p &= \lambda_0 \left(1 + \frac{m_1}{m_2} \right) \left(b + \varepsilon \left(\frac{1}{3} + 0.52 \frac{m_2}{m_1} \right) \right), \\ (\Delta\tilde{L}_p)^2 &= 0.5 \frac{m_1}{m_2} \left(1 + \frac{m_2}{m_1} \right)^2 \\ &\times \left[b^2 \left(1 - \frac{1}{6} \frac{m_2}{m_1} \right) + b\varepsilon \left(1 + \frac{5}{4} \frac{m_2}{m_1} \right) \right. \\ &\left. + \varepsilon^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \frac{m_2}{m_1} \right) \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Для констатации приближенного характера полученных соотношений используется волнистая линия сверху над обозначением соответствующих величин. При $m_1/m_2 \geq 2$, $\varepsilon \leq 0.1$ относительные отклонения приближенных значений \tilde{L}_p от точных L_p не превышает 2%, а $\Delta\tilde{L}_p$ от ΔL_p — 3.5%. Эти отклонения меньше обычных погрешностей экспериментального определения пробегов ионов в веществе. Поэтому представляется целесообразным на основе формул (9), (10) ввести следующие приближенные выражения для расчета пробегов ионов:

$$\begin{aligned} \tilde{R}_p(\varepsilon) &= \tilde{L}_p(\varepsilon) - \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^{0.8} \tilde{L}_p(\varepsilon_{th}), \\ \Delta\tilde{R}_p(\varepsilon) &= \Delta\tilde{L}_p(\varepsilon). \end{aligned} \quad (11)$$

На рис. 2 проводится сопоставление точных значений пробегов ионов в углероде, рассчитываемых по формулам (1)–(6), и приближенных, рассчитываемых по (10), (11). Сравнение проводится в широком диапазоне изменения Z_1 от 12 (магний) до 83 (висмут). Из рис. 2 видно, что погрешность приближенного расчета пробегов ионов по формуле (11) невелика и быстро падает с ростом Z_1 . При значениях $Z_1 > 20$, отвечающих значениям $m_2/m_1 < 0.3$, отклонения приближенных

пробегов \tilde{R}_p и $\Delta\tilde{R}_p$ от точных соответственно \bar{R}_p и ΔR_p не превышает 1%. Это позволяет получить из (10), (11) надежную оценку для отношения $\Delta R_p/\bar{R}_p$. Предполагая параметры m_2/m_1 и ε малыми (с ограничивающим условием $\varepsilon_{th} \ll \varepsilon \leq 0.1$), разложим в ряд Тейлора отношение функций $\Delta\tilde{R}_p$ и \bar{R}_p . Ограничившись членами первого порядка малости, получим

$$\Delta R_p/\bar{R}_p \approx \frac{(1 + (\varepsilon/b - m_2/m_1)/6)}{1 - \sqrt{\varepsilon_{th}/\varepsilon}} \sqrt{\frac{m_2}{2m_1}}. \quad (12)$$

При $m_2/m_1 < 0.3$ выражение (12) с высокой точностью определяет отношение $\Delta R_p/\bar{R}_p$. В частности, при $\varepsilon = 0.1$ для пары Ca–C результат точного расчета по формулам (1)–(6) дает значение $\Delta R_p/\bar{R}_p = 0.427$, а приближенного по формуле (12) — $\Delta R_p/\bar{R}_p = 0.424$. Для пары Pb–C результаты точного и приближенного расчетов совпадают в третьем знаке $\Delta R_p/\bar{R}_p = 0.184$.

Проведем сопоставление результатов эксперимента [3–6] с результатами расчетов. Чтобы не вносить дополнительный элемент неопределенности, для сравнения используем результаты точных расчетов по формулам (1)–(6). На рис. 3 приведены зависимости пробегов ионов от энергии для четырех различных комбинаций ион–мишень. Как видно из рисунка, экспериментальные результаты хорошо согласуются с теоретическими. Выборочное сопоставление экспериментальных результатов с теоретическими для 19 комбинаций ион–мишень при различных энергиях ионов проводится в табл. 1. Анализ приведенных результатов показывает, что для мишеней из Be, B и C наблюдается в целом хорошее согласие экспериментальных и теоретических значений \bar{R}_p и ΔR_p . Для мишеней из Si теоретические значения \bar{R}_p и ΔR_p , как правило, выше экспериментальных.

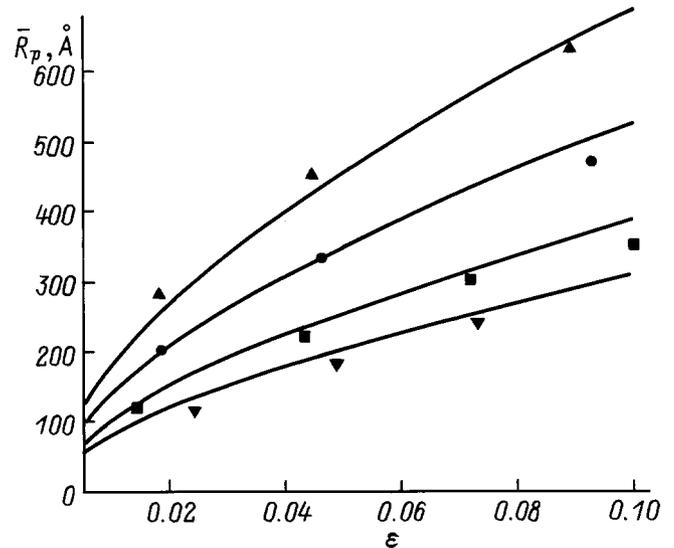


Рис. 3. Зависимость пробегов ионов \bar{R}_p — от энергии: сплошные линии — расчет по формулам (1)–(6), ▲ — Pb–Be, ● — Au–B, ■ — Eu–C, ▼ — Pd–Si.

Проведем статистическую обработку результатов сравнения теоретических значений пробегов ионов в рассматриваемых мишенях с представленными в работах [3–6] экспериментальными значениями пробегов для ионов с атомными номерами от $Z_1 = 29$ до 83 и энергиями $\varepsilon \leq 0.1$. Рассмотрим безразмерные величины δ_1, δ_2 , введенные следующим образом: $\delta_1(\varepsilon_i)$ — отно-

Таблица 1. Параметры экспериментальных и теоретических пробегов ионов

| Ион | Мишень | E, keV | ε | Эксперимент | | Теория | |
|-----|--------|--------|---------------|-----------------------|------------------------|-----------------------|------------------------|
| | | | | $\bar{R}_p, \text{Å}$ | $\Delta R_p, \text{Å}$ | $\bar{R}_p, \text{Å}$ | $\Delta R_p, \text{Å}$ |
| Bi | Be | 20 | 0.0174 | 280 | — | 251 | 41 |
| | | 50 | 0.0436 | 450 | — | 424 | 67 |
| | | 100 | 0.0872 | 650 | — | 640 | 102 |
| | B | 20 | 0.0165 | 180 | 30 | 202 | 35 |
| | | 50 | 0.0411 | 285 | 60 | 339 | 59 |
| | | 100 | 0.0823 | 440 | 90 | 511 | 89 |
| | Si | 20 | 0.0133 | 160 | 50 | 230 | 62 |
| | | 50 | 0.0333 | 270 | 75 | 379 | 101 |
| | | 100 | 0.0666 | 425 | 115 | 562 | 152 |
| Pb | Be | 20 | 0.0179 | 280 | — | 251 | 41 |
| | | 50 | 0.0446 | 450 | — | 423 | 67 |
| | | 100 | 0.0893 | 630 | — | 640 | 102 |
| | B | 20 | 0.0169 | 175 | 30 | 202 | 36 |
| | | 50 | 0.0421 | 310 | 70 | 339 | 59 |
| | | 100 | 0.0843 | 450 | 100 | 510 | 89 |
| | C | 20 | 0.0154 | 205 | 44 | 203 | 38 |
| | | 50 | 0.0384 | 315 | 60 | 340 | 62 |
| | | 100 | 0.0769 | 495 | 91 | 510 | 93 |
| Au | B | 20 | 0.0186 | 200 | 50 | 198 | 36 |
| | | 50 | 0.0464 | 330 | 70 | 334 | 59 |
| | | 100 | 0.0928 | 470 | 90 | 504 | 91 |
| | C | 20 | 0.0169 | 197 | 25 | 200 | 38 |
| | | 50 | 0.0423 | 315 | 47 | 335 | 62 |
| | | 100 | 0.0846 | 460 | 80 | 504 | 95 |
| | Si | 20 | 0.0149 | 250 | 54 | 226 | 62 |
| | | 50 | 0.0373 | 375 | 84 | 373 | 103 |
| | | 100 | 0.0746 | 484 | 130 | 557 | 156 |
| Yb | B | 20 | 0.0245 | 180 | 40 | 190 | 37 |
| | | 50 | 0.0612 | 310 | 60 | 323 | 62 |
| | C | 20 | 0.0223 | 176 | 35 | 192 | 39 |
| | | 50 | 0.0558 | 295 | 59 | 324 | 65 |
| | Si | 20 | 0.0194 | 200 | 43 | 219 | 64 |
| Eu | Be | 50 | 0.0486 | 310 | 84 | 365 | 108 |
| | | 100 | 0.0972 | 468 | 126 | 552 | 167 |
| | | 20 | 0.0337 | 220 | — | 227 | 43 |
| | C | 50 | 0.0842 | 365 | — | 392 | 74 |
| | | 50 | 0.0720 | 302 | 64 | 315 | 68 |
| | Si | 20 | 0.0247 | 194 | 29 | 212 | 67 |
| Cs | Be | 50 | 0.0618 | 318 | 68 | 357 | 113 |
| | | 20 | 0.0455 | 200 | — | 220 | 44 |
| | | 20 | 0.0427 | 165 | 45 | 177 | 39 |
| | C | 20 | 0.0387 | 170 | 43 | 179 | 41 |
| | | 50 | 0.0968 | 290 | 69 | 310 | 72 |
| | Si | 20 | 0.0327 | 137 | 50 | 207 | 70 |
| Si | 50 | 0.0819 | 270 | 84 | 354 | 121 | |

Таблица 2. Результаты статистической обработки данных сравнения экспериментальных и теоретических значений пробегов ионов в веществе

| Мишень | $\bar{\delta}_1$ | σ_1 | $\bar{\delta}_2$ | σ_2 |
|--------|------------------|------------|------------------|------------|
| Be | 1.02 | 0.075 | — | — |
| B | 0.92 | 0.053 | 1.07 | 0.16 |
| C | 0.93 | 0.066 | 0.93 | 0.18 |
| Si | 0.88 | 0.12 | 0.72 | 0.12 |

шение экспериментальных значений \bar{R}_p к теоретическим, $\delta_2(\varepsilon_i)$ — отношение экспериментальных значений ΔR_p к теоретическим, где ε_i — соответствующие значения энергии ионов.

В табл. 2 приведены результаты статистической обработки полученных данных $\delta_1(\varepsilon_i)$ и $\delta_2(\varepsilon_i)$ для различных мишеней. Математические ожидания $\bar{\delta}_1$ и $\bar{\delta}_2$ являются усредненными по ε_i и Z_1 значениями соответствующих наборов величин $\delta_1(\varepsilon_i)$ и $\delta_2(\varepsilon_i)$. Величины σ_1 и σ_2 — среднеквадратичные отклонения для соответствующих значений δ_1 и δ_2 . Из табл. 2 следует, что в среднем экспериментальные и теоретические результаты находятся в хорошем соответствии. Незначительные отличия величин $\bar{\delta}_1$ и $\bar{\delta}_2$ от единицы для B и C и чуть большие для Si могут быть вызваны как погрешностями экспериментального измерения пробегов, так и приближенностью разработанного теоретического подхода. Систематический характер отклонения теоретических и экспериментальных значений пробегов ионов в Si, возможно, обусловлен влиянием процесса неупругого торможения, не учитываемого в данной работе. Приведенные в табл. 2 значения $\bar{\delta}_1$ и $\bar{\delta}_2$ могут быть использованы для корректировки теоретических значений пробегов ионов в мишенях из Be, B, C и Si.

Список литературы

- [1] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 10. С. 16–20.
- [2] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1996. Т. 66. Вып. 10. С. 63.
- [3] Behar M., Fichtner P.F., Oliveri C.A. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1985. Vol. B6. N 3. P. 453–458.
- [4] Fichtner P.F., Behar M., Oliveri C.A. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1987. Vol. B28. N 4. P. 481–487.
- [5] Grande M., Behar M., Biersack J.P., Zawislak F.C. // Nucl. Instr. and Meth. 1990. Vol. B45. N 1–4. P. 689–692.
- [6] Grande M., Zawislak F.C., Fink D., Behar M. // Nucl. Instr. and Meth. 1990. Vol. B61. N 3. P. 282–290.
- [7] Юдин В.В. // ДАН СССР. 1972. Т. 207. № 2. С. 325–332.
- [8] Эжитайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 320 с.