

01;05;10;11

Пробеги тяжелых ионов низких и средних энергий в аморфном веществе

© Е.Г. Шейкин

Научно-исследовательское предприятие гиперзвуковых систем,
196066 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 28 июля 1997 г. В окончательной редакции 25 декабря 1997 г.)

Разработана теория прохождения ионов в аморфном веществе с учетом процессов упругого и неупругого торможения. Неупругое торможение ионов рассматривается в приближении непрерывного замедления. Упругое торможение рассматривается с учетом дискретного характера изменения энергии и направления движения ионов при упругом рассеянии на атомах мишени. Получены интегральные уравнения для полного и проектного пробегов ионов. Получены выражения, определяющие вероятность изменения энергии иона при упругом и неупругом торможении. Проведены расчеты проективных пробегов ионов Cu и Ga в мишенях из Si и C. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментом.

В работах [1–3] развита теория прохождения тяжелых ионов в аморфном веществе. Исследован диапазон низких энергий, для которого основным процессом при движении ионов в веществе является их упругое рассеяние на атомах мишени, неупругие процессы не учитывались. Результаты, полученные в [1–3], удовлетворительно согласуются с экспериментом в диапазоне энергии $\varepsilon \leq 0.1$. Здесь ε — приведенная энергия в линдхардовском приближении, связанная с энергией ионов E следующим соотношением: $\varepsilon = Em_2a / (Z_1Z_2e^2(m_1+m_2))$, где Z_1 , Z_2 и m_1 , m_2 — соответственно заряд и масса ядра иона и атома мишени; e — заряд электрона; $a = 0.8853a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$; a_0 — боровский радиус.

С увеличением энергии ионов возрастает роль неупругих процессов [4], и для адекватного описания распространения ионов в веществе необходим учет процессов неупругого торможения. В данной работе учитываются процессы упругого и неупругого торможения ионов. Подход, развитый в работах [1–3], обобщается на случай низких и средних энергий ионов. Рассматривается следующая модельная постановка задачи. Ион с начальной энергией E_0 падает на аморфное тело ортогонально к его поверхности, расположенной при значении координаты $x = 0$. При движении в веществе ион теряет энергию, испытывая упругие и неупругие столкновения. Потери энергии в неупругих столкновениях рассматриваются в приближении непрерывного замедления. Упругое рассеяние описывается в приближении модифицированной модели твердых шаров [1]. При упругом рассеянии энергия и направление движения иона изменяются дискретно. При движении иона между последовательными актами упругого рассеяния его энергия непрерывно уменьшается в процессе неупругого торможения, направление движения не изменяется. Остановка иона в веществе происходит, когда его энергия становится меньше некоторой пороговой величины E_{th} . По аналогии с [15] вводим следующие понятия: R — полный пробег иона — расстояние, которое проходит ион в веществе до момента остановки, и R_p — проективный пробег

иона — проекция расстояния, пройденного ионом в веществе на выделенное направление движения. Когда энергия иона $\varepsilon > 0.1$, согласно [3], при расчете пробегов можно приближенно полагать $E_{th} = 0$. Для значений $\varepsilon < 0.1$ в работе [3] получены простые формулы пересчета пробегов ионов, рассчитанных в приближении $E_{th} = 0$, на случай отличных от нуля значений пороговой энергии E_{th} . Как будет показано ниже, такой пересчет применим и в приближении, учитывающем неупругое торможение иона. В дальнейшем рассматриваем $E_{th} = 0$ с соответствующей корректировкой результатов при низких энергиях ионов. В этом случае, согласно [3], выражения для расчета полного и проективного пробегов ионов имеют следующий вид:

$$R = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k, \quad R_p = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k \mu_k, \quad (1), (2)$$

где λ_k — средняя длина пробега иона между k -м и $k+1$ -м упругими столкновениями, μ_k — среднее значение косинуса угла между направлением движения иона после k -го столкновения и осью X .

Выражения для расчета λ_k в приближении, учитываемом только процессы упругого рассеяния ионов, получены в [2]. Получим выражения для расчета λ_k в более общем виде с учетом неупругих потерь энергии иона. Так как сечение упругого рассеяния иона в общем случае зависит от его энергии, то и средняя длина свободного пробега иона также зависит от энергии. Зависимость λ_k от числа испытанных ионом упругих столкновений обусловлена соответствующим изменением функции распределения ионов по энергиям. Введем следующие понятия: $\lambda_0(\varepsilon)$ — средняя длина пробега иона с начальной энергией ε до первого упругого столкновения с атомом мишени; $F_k(\varepsilon)$ — функция распределения по энергиям ионов, испытавших k -упругие столкновения. Формирование функции распределения $F_k(\varepsilon)$ определяют дискретные потери энергии ионов при упругом торможении и непрерывные потери энергии

при неупругом торможении. Полагаем, что на поверхность мишени падает моноэнергетический поток ионов с энергией $\varepsilon = \varepsilon_0$, т.е. $F_0(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$. Средняя длина пробега ионов, имевших начальную энергию ε_0 и испытавших при движении в веществе k -столкновений, определяется выражением

$$\lambda_k(\varepsilon_0) = \int_0^{\varepsilon_0} \lambda_0(\varepsilon) F_k(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3)$$

Для того чтобы определить $\lambda_k(\varepsilon_0)$ при известной функции $\lambda_0(\varepsilon)$, необходимо знать функцию распределения $F_k(\varepsilon)$. Трансформация функции распределения с увеличением числа испытанных ионом столкновений описывается следующим рекуррентным соотношением:

$$F_k(\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0} F_{k-1}(\varepsilon') p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon'. \quad (4)$$

где $p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ — плотность вероятности изменения энергии иона при упругих (индекс n) и неупругих (индекс e) потерях энергии,

$$\int_0^{\varepsilon'} p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon = 1.$$

Подставив (4) в (3) и изменив порядок интегрирования, получим

$$\lambda_k(\varepsilon_0) = \int_0^{\varepsilon_0} F_{k-1}(\varepsilon') \int_0^{\varepsilon'} \lambda_0(\varepsilon) p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon d\varepsilon'. \quad (5)$$

Перепишем (5) следующим образом:

$$\lambda_k(\varepsilon_0) = \int_0^{\varepsilon_0} F_{k-1}(\varepsilon') \tilde{\lambda}_1(\varepsilon') d\varepsilon',$$

$$\tilde{\lambda}_1(\varepsilon') = \int_0^{\varepsilon'} \lambda_0(\varepsilon) p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon.$$

Повторяя проделанную операцию, получим в общем виде

$$\lambda_k(\varepsilon_0) = \int_0^{\varepsilon_0} F_{k-i}(\varepsilon') \tilde{\lambda}_i(\varepsilon') d\varepsilon',$$

$$\tilde{\lambda}_i(\varepsilon') = \int_0^{\varepsilon'} \tilde{\lambda}_{i-1}(\varepsilon) p_{\text{en}}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon. \quad (6)$$

При $i = k$ из (6) получаем

$$\lambda_k(\varepsilon_0) = \int_0^{\varepsilon_0} F_0(\varepsilon') \tilde{\lambda}_k(\varepsilon') d\varepsilon' \equiv \tilde{\lambda}_k(\varepsilon_0).$$

Так как индекс k выбран произвольно, то равенство $\tilde{\lambda}_k = \lambda_k$ справедливо для любого значения k . Таким образом, из (6) получаем следующее рекуррентное соотношение для расчета $\lambda_k(\varepsilon)$:

$$\lambda_k(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \lambda_{k-1}(\varepsilon') p_{\text{en}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') d\varepsilon' \quad \text{при } k \geq 1. \quad (7)$$

Примечательно, что выражение (7) позволяет рассчитать среднюю длину пробега иона после k -столкновений без нахождения функции распределения ионов $F_k(\varepsilon)$. Найдем выражение для полного пробега ионов в веществе, используя формулы (1) и (7). Просуммировав выражение (7) по k от 1 до ∞ , получим следующее соотношение:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k(\varepsilon) = \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\varepsilon} \lambda_{k-1}(\varepsilon') p_{\text{en}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') d\varepsilon'.$$

Пронеся в полученном выражении знак суммирования под интеграл и используя определение (1) для $R(\varepsilon)$, получаем для полного пробега ионов в веществе следующее интегральное уравнение:

$$R(\varepsilon) = \lambda_0(\varepsilon) + \int_0^{\varepsilon} R(\varepsilon') p_{\text{en}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (8)$$

Полученное уравнение имеет наглядное физическое содержание. Действительно, полный пробег иона включает в себя расстояние, которое проходит ион до первого упругого столкновения, и усредненный с учетом соответствующей вероятности, полный пробег иона с энергией, изменившейся в результате неупругих и упругих потерь.

Получим аналогичное уравнение для проективного пробега ионов в веществе. В этом случае требуется определить выражение для среднего значения косинуса направляющего угла движения иона после k -го столкновения. Согласно [1], $\mu_k = \mu_s^k$, где μ_s — среднее значение косинуса угла рассеяния иона при столкновении с атомом мишени

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

Домножим выражение (7) на μ_s^k и повторим последовательность действий при выводе уравнения (8). В результате получим следующее интегральное уравнение для проективного пробега ионов:

$$R_p(\varepsilon) = \lambda_0(\varepsilon) + \mu_s \int_0^{\varepsilon} R_p(\varepsilon') p_{\text{en}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (9)$$

Интегральные уравнения (8), (9) для полного и проективного пробега ионов в веществе получены при

достаточно общих предположениях относительно механизма потерь энергии при движении иона в веществе. Это — интегральные уравнения Вольтерра второго рода. Математический аппарат для решения подобных уравнений детально разработан (см., например, [6]). Один из возможных способов решения — метод итераций. Нетрудно показать, что выражения (1), (2) совместно с итерационным соотношением (7) являются решениями интегральных уравнений (8), (9) методом итераций с использованием в качестве нулевого приближения функции $\lambda_0(\varepsilon)$. В данной работе ограничимся исследованием этого решения.

Для расчета пробегов необходимо знать функции $p_{en}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')$ и $\lambda_0(\varepsilon)$. Эти функции определяются через плотность вероятности $p(x)$ того, что ион, прошедший расстояние x , испытывает упругое столкновение. Плотность вероятности $p(x)$ вводится следующим очевидным соотношением:

$$p(x) = n\sigma(x) \exp\left(-\int_0^x n\sigma(x')dx'\right), \quad (10)$$

где n — концентрация атомов мишени, σ — сечение упругого рассеяния иона на атомах мишени.

Зависимость сечения σ от координаты x обусловлена непрерывным уменьшением энергии иона при неупругом торможении между двумя последовательными актами упругого рассеяния, т.е. в действительности $\sigma(x) = \sigma(\varepsilon(x))$. Зависимость сечения упругого рассеяния от энергии определим согласно [1,2] через безразмерную тормозную способность ионов для упругих потерь энергии $s_n(\varepsilon)$ (используются традиционные обозначения) соотношением

$$\sigma(\varepsilon) = 2\pi a^2 s_n(\varepsilon) / \varepsilon. \quad (11a)$$

Изменение энергии иона за счет неупругих потерь в приближении непрерывного торможения определяется через безразмерную тормозную способность для неупругих потерь энергии $s_e(\varepsilon)$, согласно [7], соотношением

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = -As_e(\varepsilon),$$

$$A = \pi a^2 n \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2}. \quad (11b)$$

Формулы (10), (11) позволяют получить выражение для вероятности изменения энергии иона при неупругих потерях энергии в процессе его движения между двумя последовательными актами упругого рассеяния на атомах мишени. Соответствующую плотность вероятности будем обозначать $p_e(\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon)$, где ε_b — энергия, с которой ион "начинает" свое движение, испытав очередное упругое соударение; ε — энергия, с которой ион "заканчивает" свое движение и испытывает следующее упругое соударение. Используя закон преобразования случайных

величин [8], согласно которому $p(\varepsilon)d\varepsilon = p(x)dx$, после несложных преобразований формул (10), (11) получаем

$$p_e(\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon) = Q \frac{s_n(\varepsilon)}{\varepsilon s_e(\varepsilon)} \exp\left[-\int_{\varepsilon}^{\varepsilon_b} Q \frac{s_n(\varepsilon')}{\varepsilon' s_e(\varepsilon')} d\varepsilon'\right], \quad (12)$$

где

$$Q = \frac{(m_1 + m_2)^2}{2m_1 m_2}.$$

Плотность вероятности изменения энергии иона от значения ε до значения ε' в результате упругого рассеяния на атомах мишени определяется, согласно [2], следующим соотношением:

$$p_n(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') = \frac{Q}{2\varepsilon} \begin{cases} 1 & \text{при } \alpha\varepsilon \leq \varepsilon' \leq \varepsilon, \\ 0 & \text{при } \varepsilon' > \varepsilon, \varepsilon' < \alpha\varepsilon, \end{cases} \quad (13)$$

где

$$\alpha = \left(\frac{m_1 - m_2}{m_1 + m_2}\right)^2.$$

Функция $p_{en}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')$, определяющая плотность вероятности изменения энергии иона в процессах неупругого и упругого торможения, выражается через функции p_e и p_n , задаваемые формулами (12), (13), следующим соотношением:

$$p_{en}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon') = \int_{\varepsilon'}^{\varepsilon} p_e(\varepsilon \rightarrow \varepsilon'') p_n(\varepsilon'' \rightarrow \varepsilon') d\varepsilon''. \quad (14)$$

Теперь определим среднюю длину пробега иона с энергий ε_b , учитывая изменение его энергии при неупругом торможении. Для этого воспользуемся соотношениями (11b), (12), описывающими потери энергии иона в неупругих столкновениях. Проинтегрировав (11b), получим выражение для определения расстояния $x(\varepsilon_b, \varepsilon)$, при прохождении которого энергия иона уменьшается за счет неупругого торможения от значения ε_b до значения ε ,

$$x(\varepsilon_b, \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_b} \frac{d\varepsilon'}{s_e(\varepsilon')}.$$

Выражение для $\lambda_0(\varepsilon_b)$ получим, усреднив $x(\varepsilon_b, \varepsilon)$ с определенной в (12) плотностью вероятности,

$$\lambda_0(\varepsilon_b) = \int_0^{\varepsilon_b} x(\varepsilon_b, \varepsilon) p_e(\varepsilon_b \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon.$$

После несложных преобразований получим

$$\lambda_0(\varepsilon_b) = \frac{1}{A} \int_0^{\varepsilon_b} \frac{1}{s_e(\varepsilon)} \exp\left(-\int_{\varepsilon}^{\varepsilon_b} Q \frac{s_n(\varepsilon')}{\varepsilon' s_e(\varepsilon')} d\varepsilon'\right) d\varepsilon. \quad (15)$$

При заданных зависимостях $s_e(\varepsilon)$ и $s_n(\varepsilon)$ совокупность формул (1), (2), (7), (14), (15) позволяет рассчитать

полный и проективный пробеги ионов в аморфном веществе. В расчетах будем использовать следующие зависимости: $s_e(\varepsilon) = k\sqrt{\varepsilon}$, $s_n(\varepsilon) = g\sqrt{\varepsilon}/(b + \varepsilon)$. Согласно [7], данное выражение $s_n(\varepsilon)$ при значениях $g = 0.45$, $b = 0.3$ является хорошим приближением для расчета тормозной способности ионов, полученной с использованием потенциала взаимодействия в модели Томаса–Ферми–Фирсова, в диапазоне энергий $0.001 \leq \varepsilon \leq 10$.

Исследуем влияние неупругого торможения на величину проективного пробега ионов в веществе. На рис. 1 представлены зависимости проективного пробега ионов Cu в Si для различных значений коэффициента k . Из рис. 1 следует, что проективный пробег уменьшается с ростом неупругих потерь энергии (с увеличением k). При значении $\varepsilon = 10$ учет неупругих потерь энергии приводит к существенному уменьшению проективного пробега ионов. В частности, при значении $k = 0.1$ проективный пробег уменьшается приблизительно в два раза по сравнению с проективным пробегом при $k = 0$. При значениях $\varepsilon < 0.1$ влияние неупругих потерь энергии на величину проективного пробега незначительно. Это позволяет использовать методику, разработанную в [3], для расчета пробегов ионов в приближении упругого торможения при корректировке величины проективного пробега ионов низких энергий с учетом отличного от нуля значения пороговой энергии E_{th} .

На рис. 2 приводится сопоставление результатов численных расчетов проективных пробегов ионов с экспериментальными результатами из работ [9,10]. Два пара-

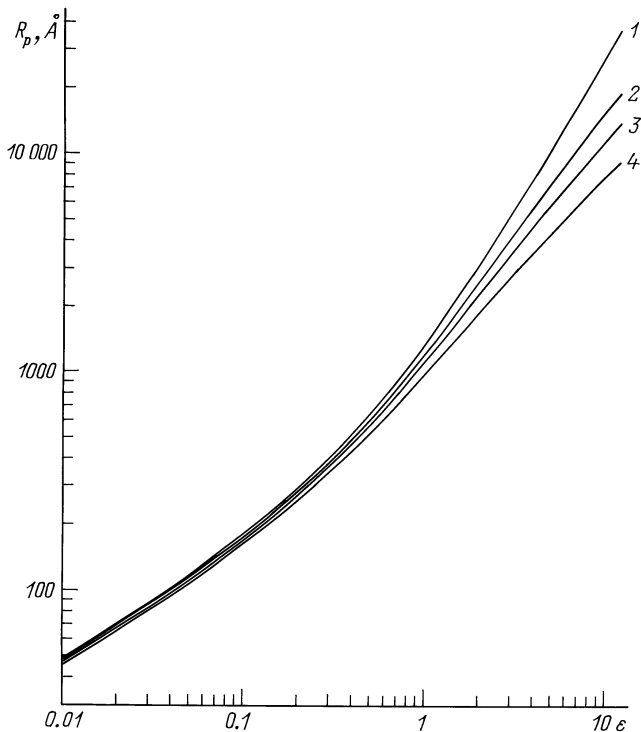


Рис. 1. Зависимость проективного пробега ионов Cu в мишени из Si от энергии: $g = 0.45$, $b = 0.3$, k : 1 — 0, 2 — 0.05, 3 — 0.1, 4 — 0.2.

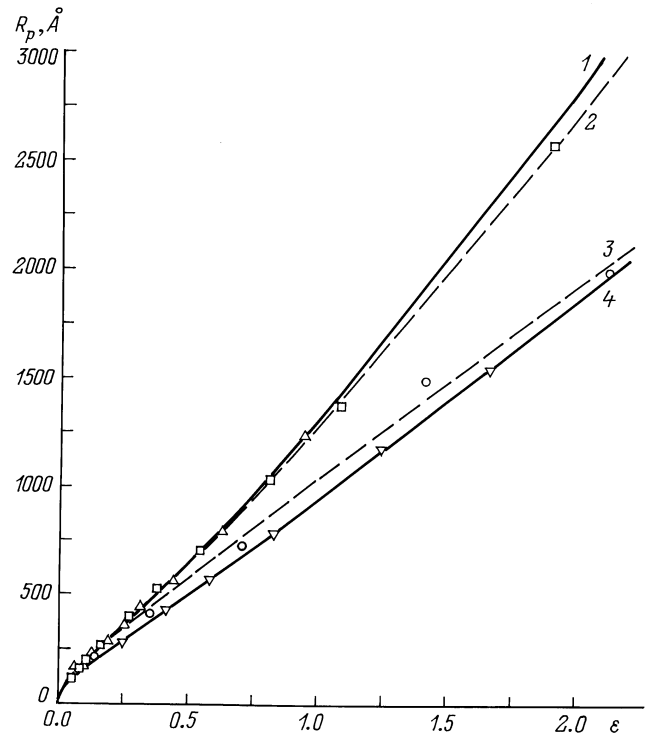


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и теоретических значений проективных пробегов ионов: кривые — расчет по формулам (2), (7), (14), (15) для следующих комбинаций ион–мишень: 1 — Cu–Si при $k = 0.04$, $g = 0.43$; 2 — Ca–Si, $k = 0.06$, $g = 0.46$; 3 — Ga–C, $k = 0.17$, $g = 0.30$; 4 — Cu–C, $k = 0.09$, $g = 0.34$; значки — эксперимент из [10]: \triangle — Cu–Si, \square — Ga–Si и из [9]: ∇ — Cu–C, \circ — Ga–C.

метра, характеризующих тормозные способности ионов в веществе g и k , выбирались методом наименьших квадратов из сравнения экспериментальных и теоретических значений пробегов ионов. Параметр b для всех пар ион–мишень предполагали постоянным $b = 0.3$. На рис. 2 следует, что теория хорошо согласуется с экспериментом.

В заключение перечислим основные результаты работы. Развита теория прохождения ионов в веществе, учитывающая упругие и неупругие потери энергии. Получены интегральные уравнения для полного и проективного пробега ионов. Получены выражения, определяющие вероятность изменения энергии иона в упругих и неупругих столкновениях. Проведенные расчеты показывают хорошее согласие теоретических результатов с экспериментальными.

Список литературы

- [1] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1996. Т. 66. Вып. 10. С. 63–75.
- [2] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 10. С. 16–20.
- [3] Шейкин Е.Г. // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 9. С. 33–36.
- [4] Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. 200 с.

- [5] Экишайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 320 с.
- [6] Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Методы решения интегральных уравнений с программами для ЭВМ. Справочное пособие. Киев: Наукова думка, 1978. 292 с.
- [7] Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск, 1979. 320 с.
- [8] Худсон Д. Статистика для физиков. М.: Мир, 1967. 244 с.
- [9] Grande M., Zawislak F.C., Fink D., Behar M. // Nucl. Instr. and Meth. 1991. Vol. B61. N 3. P. 282–290.
- [10] Fichtner P.F., Behar M., Oliveri C.A. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1987. Vol. B28. N 4. P. 481–487.