

01

Расчет среднего пробега заряженных частиц после прохождения через мишень конечной толщины

© А.И. Толмачев,¹ Л. Форлано²Российский новый университет,
105005 Москва, Россия² Университет Калабрии,
87036 Козенца, Италия

e-mail: tolmachev.alex@rambler.ru, forlano@vegachess.com

Поступило в Редакцию 5 октября 2023 г.

В окончательной редакции 2 декабря 2024 г.

Принято к публикации 12 декабря 2024 г.

Неупругие потери энергии ионов в мишени пропорциональны среднему пробегу ионов, который может существенно отличаться от толщины мишени из-за многократных упругих столкновений между ионами и атомами мишени. Отношение среднего пробега ионов L к толщине мишени D зависит от энергии ионов, массы ионов и массы атомов мишени. Отношение L/D вычислено методом компьютерного моделирования. Построена элементарная аналитическая теория явления.

Ключевые слова: пробег ионов, неупругие потери энергии, мишень конечной толщины, компьютерное моделирование.

DOI: 10.61011/JTF.2025.04.59999.258-24

Введение

Традиционный способ определения тормозной способности вещества состоит в расчете потери энергии бомбардирующей частицы на единицу длины пробега в мишени [1,2]. В работе [3] было показано, что в случае ионов водорода, проходящих через золотую пленку, средняя длина траектории иона может в 2.5 раза превышать толщину пленки. Значительное отклонение длины траектории от толщины пленки авторы объяснили эффектом многократных упругих столкновений ионов с атомами мишени. Значения отношения L/D не могут быть получены непосредственно из компьютерных программ [4–7]. В настоящей работе авторы исследуют зависимость отношения L/D от энергии и массы ионов с помощью программы PAOLA [8], а также путем теоретических расчетов.

1. Компьютерное моделирование

Мы рассматриваем мишень, расположенную между плоскостями $x = 0$ и $x = D$. Ионы энергии E_0 и массы M_1 падают перпендикулярно на поверхность $x = 0$, входят в мишень и испытывают упругие столкновения с неподвижными атомами мишени массы M_2 . В результате столкновений одни ионы возвращаются к поверхности $x = 0$, выходят из мишени и рассматриваются как отраженные. Другие ионы выходят через поверхность $x = D$ и рассматриваются как прошедшие через мишень. Нашей целью является рассчитать средний пробег прошедших ионов L , вычислить отношение $L/D \geq 1$

и проанализировать зависимость отношения L/D от энергии ионов E_0 и отношения масс $A = M_1/M_2$.

Для решения задачи мы применили программу PAOLA, использующую атомный потенциал Менсинг [9–12], для которого энергия взаимодействия двух зарядов на расстоянии r равна

$$U(r) = U_0 \left(\frac{r_0}{r} - 1 \right) \text{ при } r \leq r_0, \quad (1)$$

$U(r) = 0$ при $r \geq r_0$, r_0 — радиус действия потенциала.

В работах [7,10] величины U_0 и r_0 рассматривались как подгоночные параметры. Значения параметров определялись из условия совпадения потенциала (1) со значениями истинного потенциала и его производной в точке наибольшего сближения при лобовом столкновении частиц.

Выбор того или иного вида атомного потенциала является важнейшим шагом при создании любой компьютерной программы. Так называемый ZBL-потенциал представляет собой суперпозицию четырех экранированных кулоновских потенциалов

$$U_{\text{ZBL}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{k=1}^4 c_k \exp\left(-d_k \frac{r}{a}\right), \quad (2)$$

(Z_1 и Z_2 — порядковые номера ионов и атомов мишени, e — заряд электрона, a — длина экранирования) и содержит восемь параметров c_k и d_k [7]. Недавно предложенный DFT-потенциал отличается от (2) наличием притягивающего множителя [13,14], который важен для столкновений ионов малых энергий. Потенциал (1) содержит только два подгоночных параметра и не обладает точностью ZBL-потенциала. Но зато для

потенциала (1) все характеристики упругого рассеяния могут быть выражены в виде аналитических формул как в классическом приближении [10,12], так и в квантово-механическом [9,11]. Например, дифференциальное сечение рассеяния, выраженное через угол рассеяния в системе центра масс ω , имеет вид

$$d\sigma = \frac{2(1 + \epsilon) \sin \omega d\omega}{[2 + \epsilon(1 - \cos \omega)]^2}, \quad (3)$$

где

$$\epsilon = 4\varepsilon(1 + \varepsilon), \quad \varepsilon = E/U_0 \quad (4)$$

— приведенная энергия.

Перед каждым упругим столкновением код генерирует три случайных числа R_1, R_2, R_3 , расположенных между нулем и единицей. Эти числа определяют средний пробег иона между двумя последовательными столкновениями, а также полярный и азимутальный углы рассеяния в данном упругом столкновении. Согласно газовой модели парных столкновений, расстояние, пройденное ионом между двумя столкновениями, равно

$$\lambda = \lambda_0 \ln(1/R_1), \quad (5)$$

где λ_0 — длина свободного пробега. Угол рассеяния в системе центра масс определяется уравнением

$$\cos \omega = \frac{(2 + \epsilon)R_2 - 1}{1 + \epsilon R_2}. \quad (6)$$

Угол рассеяния в лабораторной системе координат Ω имеет вид

$$\cos \Omega = \frac{A + \cos \omega}{(1 + 2A \cos \omega + A^2)^{1/2}}. \quad (7)$$

Если обозначить через μ косинус угла между скоростью иона и внутренней нормалью к поверхности мишени, то после упругого столкновения значение μ_n преобразуется в значение μ_{n+1} в соответствии с уравнением

$$\mu_{n+1} = \mu_n \cos \Omega - (1 - \mu_n^2)^{1/2} \sin \Omega \cos(2\pi R_3). \quad (8)$$

При выходе иона из мишени пробег корректируется с учетом соответствующего геометрического фактора.

2. Теоретическое исследование

Функция распределения ионов в мишени $f(x, \mu, t)$ зависит от глубины проникновения иона в мишень x , угла θ между скоростью иона и нормалью к поверхности мишени, $\mu = \cos \theta$, и пробега иона t . В случае $A = 0$ (масса иона значительно меньше массы атома мишени) и взаимодействия по закону твердых сфер уравнение переноса имеет вид

$$\mu \frac{\partial f(x, \mu, t)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, \mu, t)}{\partial t} + f(x, \mu, t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(x, \mu, t) d\mu. \quad (9)$$

Преобразование Лапласа

$$F(x, \mu) = \int_0^\infty f(x, \mu, t) e^{-st} dt \quad (10)$$

дает

$$\mu \frac{\partial F(x, \mu)}{\partial x} + (1 + s)F(x, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 F(x, \mu) d\mu. \quad (11)$$

Уравнение (11) представляет собой задачу Чандрасекара [15], и коэффициент отражения ионов в случае полубесконечной мишени может быть представлен в аналитической форме

$$R_N(s) = 1 - H(w_0)(1 - w_0)^{1/2}, \quad w_0 = 1/(1 + s), \quad (12)$$

где H — функция Чандрасекара. При малых s получаем

$$R_N(s) = 1 - \text{const} \sqrt{s}, \quad s \ll 1, \quad (13)$$

и средний пробег отраженных ионов оказывается бесконечным,

$$L = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{R_N(0) - R_N(s)}{s R_N(s)} = \infty. \quad (14)$$

Это связано с тем, что в полубесконечной мишени отраженный ион может пересекать плоскость $x = D$ несколько раз. В мишени конечной толщины ион пересекает плоскость $x = D$ только однажды, в момент выхода из мишени, и средний пробег становится конечным.

Для решения уравнения (11) в случае мишени конечной толщины мы выберем четыре дискретных значения угловой переменной, $\mu = 1, 1/3, -1/3, -1$, и обозначим соответствующие значения функции распределения F_1, F_2, F_3, F_4 . Тогда уравнение (11) записывается в виде системы четырех обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} F_1' + (1 + s)F_1 = Q, \\ F_2'/3 + (1 + s)F_2 = Q, \\ -F_3'/3 + (1 + s)F_3 = Q, \\ -F_4' + (1 + s)F_4 = Q, \end{cases} \quad (15)$$

$$Q = \frac{F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4}{6}, \quad (16)$$

где Q представляет собой формулу трапеций для приближенного вычисления интеграла в правой части уравнения (11).

Граничные условия для системы уравнений (15):

$$F_1(0) = 1, \quad F_2(0) = 0, \quad (17)$$

$$F_3(D) = 0, \quad F_4(D) = 0, \quad (18)$$

соответствуют нормальному падению ионов на поверхность $x = 0$, и отсутствию ионов, входящих в мишень через поверхность $x = D$.

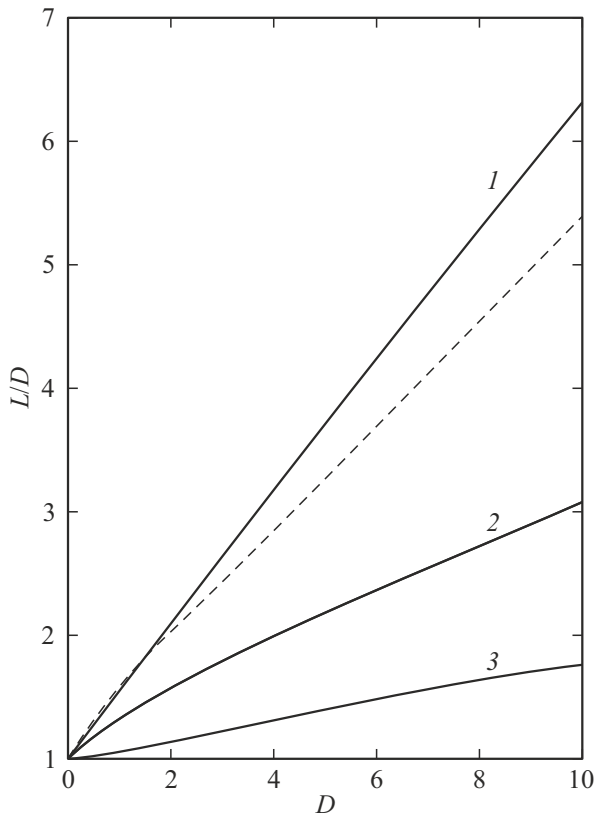


Рис. 1. Зависимости отношения L/D от толщины мишени D для потенциала твердых сфер и различных отношений масс: $A = 0$ (кривая 1), 1 (2), 2 (3). Штриховая линия — формула (23).

Решение системы уравнений (15) имеет вид

$$F_k(x) = \sum_{m=1}^4 C_m Y_{km} \exp(-\lambda_m x), \quad k = 1, 2, 3, 4, \quad (19)$$

где Y_{km} — собственные векторы, λ_m — собственные значения, получаемые из биквадратного уравнения

$$3\lambda^4 - (1+s)(11+30s)\lambda^2 + 27s(1+s)^3 = 0. \quad (20)$$

Коэффициенты C_m определяются из граничных условий (17), (18). Коэффициент прохождения ионов равен

$$T_N(D, s) = \int_0^1 \mu F(D, \mu) d\mu = F_1(D) + \frac{2}{3} F_2(D), \quad (21)$$

и средний пробег прошедших ионов вычисляется как предел

$$L = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{T_N(0) - T_N(s)}{s T_N(s)}. \quad (22)$$

Решение задачи (15)–(18) для четырех дискретных потоков было получено полностью в аналитическом виде, но оно имеет довольно громоздкий вид. Приближенно окончательный результат с точностью 1% можно

записать в виде формулы

$$\frac{L}{D} = 1 + \frac{5D(D+1)}{12D+5}. \quad (23)$$

3. Результаты

Рис. 1 изображает зависимость отношения среднего пробега ионов к толщине мишени от отношения масс и толщины мишени при малых энергиях ионов (взаимодействие по закону твердых сфер). Отношение L/D увеличивается с толщиной мишени и при уменьшении массы ионов. В случае тяжелых ионов ($A \gg 1$) упругое рассеяние происходит только на малые углы, и кривые L/D стремятся к единице. Пунктиром изображена функция (23), относящаяся к случаю $A = 0$. Можно показать, что при дальнейшем увеличении числа дискретных потоков расхождение между теоретическим результатом и результатом компьютерного моделирования уменьшается и не превышает погрешности метода Монте-Карло.

Рис. 2 демонстрирует зависимость отношения L/D от энергии ионов при фиксированной толщине мишени. Отношение достигает наибольших значений при малых энергиях. При больших энергиях рассеяние становится близким к резерфордскому, все ионы движутся почти

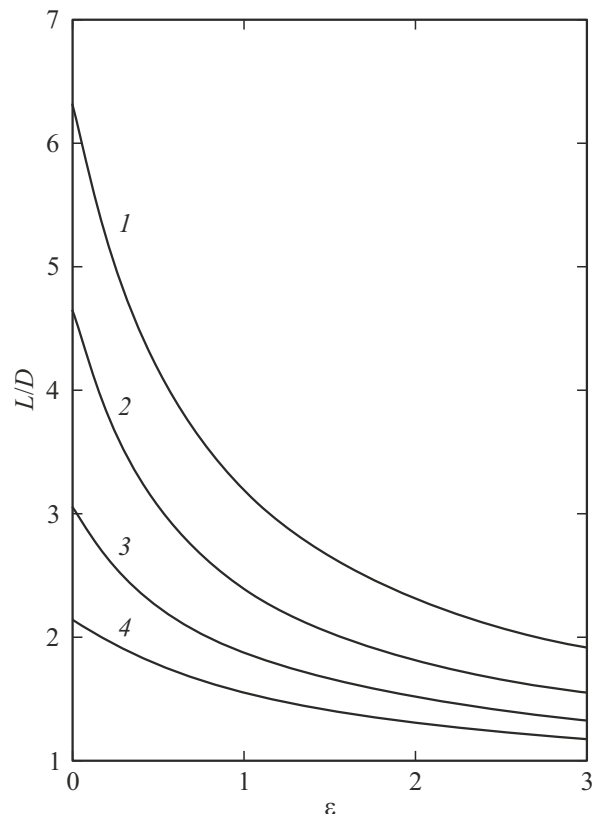


Рис. 2. Зависимости отношения L/D от приведенной энергии ϵ для нормированной толщины мишени $D = 10$ при различных отношениях масс: $A = 0$ (кривая 1), 0,5 (2), 1 (3), 1,5 (4).

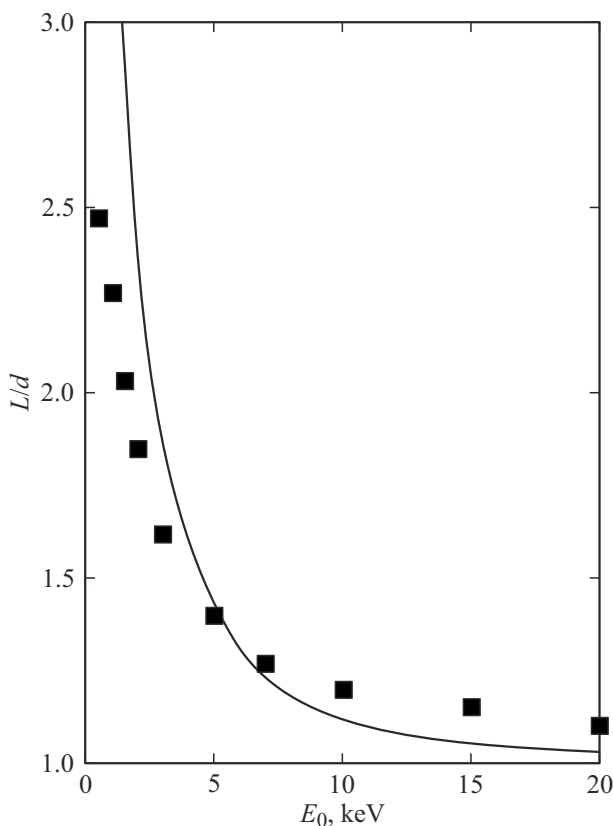


Рис. 3. Зависимость отношения L/d от энергии ионов E_0 для комбинации H–Au при толщине золотой пленки $d = 200$ Å. Сплошная линия — программа PAOLA, маркеры — результаты расчетов [3].

по прямой, и их пробеги равны толщине мишени. При этом все кривые стремятся к прямой $L/D = 1$.

На рис. 3 приведены результаты расчета зависимости отношения L/d от энергии ионов водорода, бомбардирующих золотую пленку толщиной $d = 200$ Å. Средний пробег между двумя последовательными столкновениями и радиус отсечки мы выбрали равными друг другу: $\lambda_0 = r_0 = 4$ Å. При таком выборе нормированная толщина мишени и атомная единица энергии оказываются равными $D = d/\lambda_0 = 50$ и $U_0 = 284$ eV, что дает возможность пользоваться в компьютерном расчете формулами (4) и (6). Согласие наших расчетов с расчетами [3] можно считать удовлетворительным. Заметное различие результатов при малых энергиях может быть связано либо с присутствием в DFT-потенциале отрицательной притягивающей области, либо с различными значениями энергии сублимации.

Заключение

Методом компьютерного моделирования показано, что средний пробег ионов, прошедших через мишень конечной толщины, может в несколько раз превышать толщину мишени. Эффект оказывается особенно за-

метным для малых энергий ионов и в случае, когда масса иона значительно меньше массы атома мишени. Результаты существенно зависят от значения среднего пробега иона λ_0 между двумя последовательными столкновениями. Это отличается от рассеяния ионов в полубесконечной мишени, при котором иногда полученные результаты вообще не зависят от λ_0 . Построена теория явления, основанная на приближении решения интегро-дифференциального уравнения переноса методом дискретных потоков. Отклонения величины L/D от единицы необходимо учитывать при экспериментальном измерении тормозной способности вещества.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] P. Sigmund. *Particle Penetration and Radiation Effects* (Springer, Berlin, 2014), 603 p.
- [2] Ю.А. Белова, Н.В. Новиков, Я.А. Теплова. *Экспериментальные и теоретические исследования процессов взаимодействия ионов с веществом* (Университетская книга, М., 2019), 234 с.
- [3] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко. Письма в ЖЭТФ, **115** (9), 603 (2022). [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko. JETP Lett., **115** (9), 560 (2022).]
- [4] SRIM. *The Stopping and Range of Ions in Matter*. <http://srim.org>
- [5] J.F. Ziegler. Nucl. Instr. Methods Phys. Res., Sect. B, **136–138**, 141 (1998).
- [6] V.I. Shulga. Appl. Surf. Sci., **439**, 456 (2018).
- [7] W. Eckstein. *Computer Simulation of Ion–Solid Interactions* (Springer, Berlin, 1991), 296 p. [В. Экштайн. *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела* (Мир, М., 1995), 319 с.]
- [8] А.И. Толмачев, Л. Форлано. Поверхность, **11**, 106 (2017). [A.I. Tolmachev, L. Forlano. J. Surf. Invest., **11** (6), 1313 (2017).]
- [9] L. Mensing. Zeitschrift fur Physik, **45** (9–10), 603 (1927).
- [10] G. Leibfried, O.M. Oen. J. Appl. Phys., **33** (7), 2257 (1962).
- [11] В.В. Румянцев, Ю.А. Морозов, Б.Н. Либенсон. ЖЭТФ, **63** (4), 1221 (1972). [V.V. Rumyantsev, Yu.A. Morozov, B.N. Libenson. Soviet Phys. JETP, **36** (4), 643 (1973).]
- [12] А.И. Толмачев. Поверхность, **8**, 27 (1992).
- [13] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко. Письма в ЖТФ, **46**, 23 (2020). [A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko. Tech. Phys. Lett., **46**, 909 (2020).]
- [14] П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев. ЖТФ, **91** (12), 1901 (2021). [P.Yu. Babenko, A.N. Zinoviev. Tech. Phys., **67** (12), 1 (2022).]
- [15] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer* (Clarendon Press, Oxford, 1950), 393 p. [С. Чандрасекар. *Перенос лучистой энергии* (ИИЛ, М., 1953), 432 с.]