

01;02;05;11

©1995 г.

## ОБРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЛЕГКИХ ИОНОВ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА В СЛУЧАЕ НАКЛОННОГО ПАДЕНИЯ

*В.С.Сухомлинов*

Научно-исследовательский институт физики  
Санкт-Петербургского государственного университета,  
198904, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 12 октября 1994 г.  
В окончательной редакции 27 декабря 1994 г.)

Развивается предложенная в [1,2] теория обратного рассеяния легких ионов поверхностью аморфного твердого тела при нормальном падении для случая наклонного падения. Получено выражение для функции распределения потока обратно рассеянных ионов. Рассчитанные по полученным формулам коэффициенты отражения частиц и энергии хорошо совпадают с известными экспериментальными данными и удовлетворительно с результатами компьютерных расчетов.

К изучению явления обратного рассеяния легких ионов проявляется растущий интерес [3,4]. Экспериментально оно изучено достаточно полно. Что касается теоретического рассмотрения, то, несмотря на ряд работ, посвященных данной проблеме, многие стороны рассматриваемого явления остаются теоретически неописанными.

В настоящее время наиболее успешным теоретическим подходом следует, видимо, признать численное моделирование процесса обратного рассеяния [5-9]. Однако такие методы имеют ряд недостатков, а именно в ряде случаев (для таких элементов, как Nb, Mo, W) не удается описать как дифференциальные характеристики обратного рассеяния, так и интегральные — коэффициенты отражения частиц  $R_N$  и энергии  $R_E$ . Кроме того, как указывают авторы [10], расчеты требуют очень большого машинного времени. Существующие же аналитические теории либо согласуются с экспериментальными данными только в отдельных случаях [11,12], либо имеют узкий диапазон применения [13,14].

В работах [1,2] была развита аналитическая теория процесса обратного рассеяния легких ионов в случае нормального падения на плоскую поверхность твердого тела, состоящую из атомов одного сорта. Настоящая работа посвящена развитию данной теории для наклонного падения.

Напомним основные физические предположения, в рамках которых мы будем решать поставленную задачу. Пусть на плоскую поверхность твердого тела падает под углом  $\theta_0 = \arccos \eta_0$  к нормали легкий ион, отношение массы которого к массе атома поверхности  $\xi \ll 1$ . После проникновения в твердое тело ион начинает испытывать два типа торможения: электронное и ядерное. Зависимость величины электронного торможения от скорости иона произвольная (данные при конкретных расчетах для протонов берутся из работы [15], для ионов  $\text{He}^+$  — из работы [16]). Ядерное торможение описывается интегралом столкновений с произвольной зависимостью сечения рассеяния иона атомом вещества от энергии иона (конкретное выражение получено в работах [1,2]). Можно показать, что в указанных предположениях функцию распределения потока обратно рассеянных ионов можно представить в виде, полученном в работах [1,2],

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

где функция  $f_{ei}(v, \eta)$  удовлетворяет кинетическому уравнению Больцмана

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

и представляет собой  $f_i$  при  $\xi = 0$ . Здесь и далее сохранены обозначения, принятые в этих работах. Граничное условие для функции  $f_{ie}$  выглядит следующим образом:

$$f_{ie}(v, \eta, z) \Big|_{\substack{z=0; \\ \eta > 0}} = \frac{1}{2\pi v_0^2} \delta(\eta - \eta_0) \delta(v - v_0). \quad (3)$$

Таким образом, как в случае нормального падения, задача сведена к нахождению функции распределения потока обратно рассеянных ионов при отсутствии ядерного торможения.

Уравнение (2) с граничными условиями (3) будем решать методом, аналогичным примененному в работах [1,2]. Как указано в [2], уравнение (2) с граничным условием (3) при замене переменной  $f_{ie} = v F_{ie} / \varphi(v)$  сводится к уравнению

$$\eta \frac{\partial F_{ie}}{\partial z} - b \frac{\partial F_{ie}}{\partial v} + \frac{v \sigma(v)}{\varphi(v)} F_{ie} = \frac{v \sigma(v)}{2 \varphi(v)} \int_{-1}^1 F_{ie} d\eta \quad (4)$$

с граничными условиями

$$F_{ie}(v, \eta, z) \Big|_{\substack{z=0; \\ \eta > 0}} = \frac{\varphi(v)}{2\pi v v_0^2} \delta(\eta - \eta_0) \delta(v - v_0). \quad (5)$$

Решение этой задачи ищем в виде  $F_{ie} = F_{ie0} + F_{ie1} + F_{ie2}$ , где  $F_{ie0}$  — функция распределения потока нерассеянных ионов;  $F_{ie1}$  — функция распределения потока ионов, испытавших одно столкновение;  $F_{ie2}$  — функция распределения потока ионов, испытавших два и более столкновений.

Как легко показать, функции  $F_{ie0}$  и  $F_{ie2}$  удовлетворяют следующим уравнениям и граничным условиям:

$$\eta \frac{\partial F_{ie0}}{\partial z} - b \frac{\partial F_{ie0}}{\partial v} + v \frac{\sigma(v)}{\varphi(v)} F_{ie0} = 0;$$

$$F_{ie0}(v, \eta, z) = \frac{1}{2\pi v_0^2} \frac{\varphi(v)}{v} \delta(\eta - \eta_0) \delta(v - v_0); \quad (6)$$

$$\eta \frac{\partial F_{ie1}}{\partial z} - b \frac{\partial F_{ie1}}{\partial v} + v \frac{\sigma(v)}{\varphi(v)} F_{ie1} = \frac{v\sigma(v)}{2\varphi(v)} \int_{-1}^1 F_{ie0} d\eta;$$

$$F_{ie1}(v, \eta, z) = 0. \quad (7)$$

Функция  $F_{ie2}$  удовлетворяет уравнению

$$\eta \frac{\partial F_{ie2}}{\partial z} - b \frac{\partial F_{ie2}}{\partial v} + v \frac{\sigma(v)}{\varphi(v)} F_{ie2} = \frac{v\sigma(v)}{2\varphi(v)} \int_{-1}^1 (F_{ie1} + F_{ie2}) d\eta. \quad (8)$$

Переходя в уравнениях (6), (7) от переменной  $v$  к переменной  $\omega = (b)^{-1} \int_0^v (\varphi(x))^{-1} x \sigma(x) dx$ , легко получить для  $F_{ie1}$  выражение [1]

$$\begin{aligned} F_{ie1}(v, \eta, z) &= \Phi_{ie1}(\omega, \eta, z) = \frac{v(\omega)\sigma(v(\omega))}{4\pi b v_0^2 \varphi(v(\omega))} \frac{1}{\eta_0 - \eta} \times \\ &\times \exp(\omega - \omega_0) T\left(\omega_0 - \omega - \frac{z}{\eta}\right) T\left(\omega - \omega_0 + \frac{z}{\eta}\right); \\ F_{ie1}(v, \eta, z) &= \Phi_{ie1}(\omega, \eta, z) = \frac{v(\omega)\sigma(v(\omega))}{4\pi b v_0^2 \varphi(v(\omega))} \frac{1}{\eta_0 + |\eta|} \times \\ &\times \exp(\omega - \omega_0) T\left(\omega_0 - \omega - \frac{z}{\eta_0}\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Полагая, что

$$\Phi_{ie2}(\omega, \eta, z) = F_{ie2}(v(\omega), \eta, z) = \frac{1}{4\pi} \left\{ P_{ie0}(\omega, z) + 3\eta P_{ie1}(\omega, z) \right\}, \quad (10)$$

получим систему уравнений для функций  $P_{ie0}$  и  $P_{ie1}$  (обоснование представления функции  $\Phi_{ie2}$  в виде (10) см. в работе [1])

$$\frac{\partial P_{ie1}}{\partial z} - \frac{\partial P_{ie0}}{\partial \omega} = \int_{-1}^1 \Phi_{ie1} d\eta; \quad \frac{1}{3} \frac{\partial P_{ie0}}{\partial z} - \frac{\partial P_{ie1}}{\partial \omega} + P_{ie1} = 0. \quad (11)$$

Решая эту систему с учетом формулы (9) для функции  $F_{ie1}$ , имеем следующий результат:

$$\Phi_{ie2}(\omega, \eta, z) = \frac{1}{4\pi b v_0^2} \frac{v(\omega)\sigma(v(\omega))}{\varphi(v(\omega))} \left(1 + \eta_0 \ln \frac{1 + \eta_0}{\eta_0}\right) a(\eta_0) \times \\ \times \exp \left[ a(\eta_0)(\omega - \omega_0) \right] T(\omega_0 - \omega) \left(1 + \frac{3}{2}|\eta|\right), \quad (12)$$

где

$$a(\eta_0) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{3\eta_0^2 + 2}{3\eta_0^2 - 1} + \sqrt{\frac{(3\eta_0^2 + 2)^2}{4(3\eta_0^2 - 1)^2} + \frac{1}{3\eta_0^2 - 1}}; & \eta_0 > \frac{1}{\sqrt{3}}, \\ -\frac{1}{2} \frac{3\eta_0^2 + 2}{3\eta_0^2 - 1} - \sqrt{\frac{(3\eta_0^2 + 2)^2}{4(3\eta_0^2 - 1)^2} + \frac{1}{3\eta_0^2 - 1}}; & \eta_0 < \frac{1}{\sqrt{3}}. \end{cases} \quad (13)$$

Функция распределения по углам и энергиям потока обратно рассеянных ионов есть сумма  $f_{ie}(v, \eta) = \Phi_{ie1}(\omega(v), z) + \Phi_{ie2}(\omega(v), z)$ , где первое слагаемое определено формулой (9). Отметим, что нормировка этой функции такова, что под углом,  $\theta_0 = \arccos \eta_0$  на единицу площади поверхности твердого тела падает один ион. Интегральные характеристики обратного рассеяния  $R_N$  и  $R_E$  определяются через  $f_{ie}$  по очевидным формулам.

Перейдем к обсуждению полученных результатов. Из формулы (9) видно, что функция распределения обратно рассеянных ионов, испытавших одно столкновение, при увеличении угла падения увеличивается — растет множитель  $(1 - \eta_0 \ln(1 + \eta_0)/\eta_0)$ . Этого следовало ожидать, так как при возрастании  $\theta_0$  ион будет в среднем испытывать первое столкновение на глубине  $\lambda_i \eta_0$  (где  $\lambda_i$  — длина свободного пробега), уменьшающейся с увеличением  $\theta_0$ . Поэтому на обратном пути при большом угле падения однократно рассеянный ион испытывает меньшее электронное торможение, которое пропорционально пройденному пути.

Зависимость от угла падения функции распределения потока обратно рассеянных ионов, испытавших два и более столкновений, носит более сложный характер. При увеличении  $\theta_0$  предэкспоненциальный множитель в формуле (12) уменьшается, а величина  $a(\eta_0)$ , определенная формулой (13), растет. Первое обстоятельство обусловлено тем, что из-за уменьшения пути при увеличении  $\theta_0$ , который проходят однократно рассеянные ионы, двигаясь к поверхности, падает вероятность второго и т.д. столкновений иона с атомом вещества. Вместе с тем тот факт, что первое столкновение ион испытывает ближе к поверхности, приводит к уменьшению суммарного электронного торможения многократно рассеянных ионов до того, как они достигнут поверхности твердого тела. Отражением этого факта и является рост величины  $a(\eta_0)$  при увеличении угла падения иона на поверхность. Нетрудно видеть, что следствием вышеописанных зависимостей функций распределения  $\Phi_{ie1}$  и  $\Phi_{ie2}$  от угла  $\theta_0$  является то, что функция  $f_{ie}$  становится все более высокоэнергетичной при увеличении  $\theta_0$ . Это обусловлено теми же физическими причинами, что и рост функции  $f_{ie}$  и, следовательно, коэффициента отражения частиц  $R_N$ . Из сказанного также следует, что величина  $R_E$  должна расти быстрее, чем  $R_N$  при увеличении  $\theta_0$ .

Отметим, что полученное выражение для функции распределения  $f_{ie}$  справедливо только, если на границе падающий поток не испытывает разрыва, проходя первый слой атомов твердого тела. Другими словами, если сечение рассеяния  $S_i$  иона на атоме гораздо меньше, чем квадрат расстояния между атомами вещества  $d^2$ . При нарушении этого условия необходимо учитывать отражение от первого слоя атомов.

При попытке сравнения зависимостей коэффициентов отражения  $R_N$  и  $R_E$  от угла падения ионов, рассчитанных с помощью полученного нами выражения для  $f_{ie}$ , с экспериментальными данными обнаружилось, что рассчитанные величины увеличиваются с ростом  $\theta_0$  заметно медленнее экспериментальных даже при энергиях в несколько кэВ, т.е. когда выполняется условие  $S_i \ll d^2$ . На наш взгляд, это вызвано как раз неучетом отражения от первого слоя атомов и тем, что при таких энергиях сами величины  $R_N$  и  $R_E \ll 1$  и могут быть сравнимы с  $S_i/d^2 \ll 1$ . Следует иметь в виду также, что рассеяние потока ионов на первом слое атомов твердого тела кроме отражения приводит к тому, что половина рассеянных ионов (в силу изотропности сечения рассеяния) продолжает движение в глубь твердого тела, но не под углом  $\theta_0$ , а имея изотропное распределение. Для определения вероятности рассеяния в первом слое необходимо задаться так называемой элементарной ячейкой поверхности твердого тела. С учетом того что мы рассматриваем модельное твердое тело, в котором все атомы отстоят друг от друга на одинаковом расстоянии, мы выбрали элементарную ячейку в виде шестиугольника, атомы при этом расположены в вершинах его угла и в центре.

Опираясь на вышеизложенные соображения, можно записать выражение для функции распределения потока обратно рассеянных ионов в виде

$$F_i(v, v_0, \eta, \eta_0) \approx \frac{S_i(v_0)}{4\pi v_0^2 \sqrt{3} d^2 \eta_0} \delta \left[ v - v_0 \left( 1 - \frac{\xi}{(1 + \xi)^2} \right) \right] + \frac{S_i}{\sqrt{3} d^2 \eta_0} \int_0^1 f_i(v, v_0, \eta, \eta_0) d\eta_0 + \left( 1 - \frac{2S_i}{\sqrt{3} d^2 \eta_0} \right) f_i(v, v_0, \eta, \eta_0), \quad (14)$$

если

$$S_i \ll d^2 \eta. \quad (15)$$

Здесь первое слагаемое учитывает отражение от первого слоя, второе — рассеяние в глубь твердого тела на первом слое атомов вещества, а третье — нерассеянную в первом слое часть потока ионов. Расчет коэффициентов отражения  $R_N$  и  $R_E$  с помощью формулы (14) производится очевидным способом.

Перейдем теперь к результатам сравнения интегральных характеристик рассеяния, вычисленных нами, с известными экспериментальными данными и расчетами, выполненными методом компьютерного моделирования процесса обратного рассеяния.

На рис. 1 приведены экспериментальные данные из работы [17] о зависимости коэффициента отражения энергии протонов поверхностью золота от приведенной энергии. Учитывая разброс экспериментальных точек, можно утверждать, что наблюдается хорошее соответствие рассчитанных и измеренных величин  $R_E$ . На рис. 2 приведены результаты измерений зависимости этой же величины от угла для ионов  $\text{He}^+$ ,

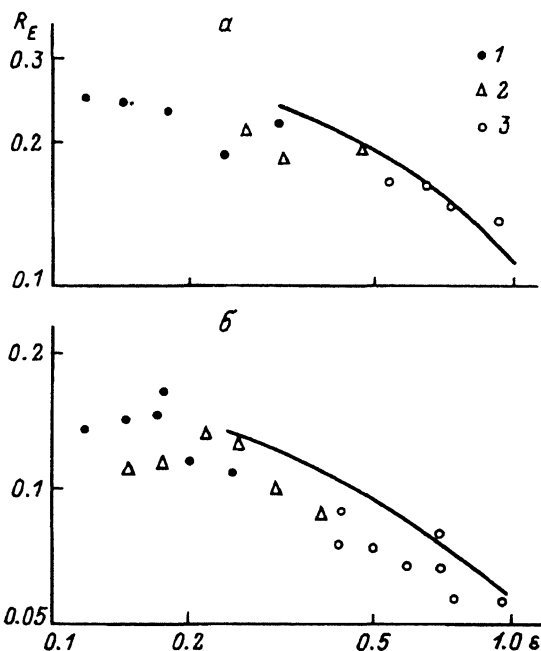


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  протона на золоте от приведенной энергии Линдхарда  $\epsilon$  [4].

$\theta_0$ , град: а — 60, б — 0, 1 —  $\text{H}_3^+ \rightarrow \text{Au}$ , 2 —  $\text{H}_2^+ \rightarrow \text{Au}$ , 3 —  $\text{H}^+ \rightarrow \text{Au}$  (экспериментальные данные из [17]); сплошная кривая — наш расчет. Для  $\text{H}_2^+ \rightarrow \text{Au}$  и  $\text{H}_3^+ \rightarrow \text{Au}$  авторы работы [17] считали, что ионы  $\text{H}_2^+$  диссоциируют на поверхности на ион и атом водорода с энергиями частиц, равными  $E_{\text{H}} = E_{\text{H}^+} = 0.5 E_{\text{H}_2^+}$ , а ионы  $\text{H}_3^+$  — на  $\text{H}^+$  и  $2\text{H}$  с энергиями, равными  $1/3$  энергии иона  $\text{H}_3^+$ .

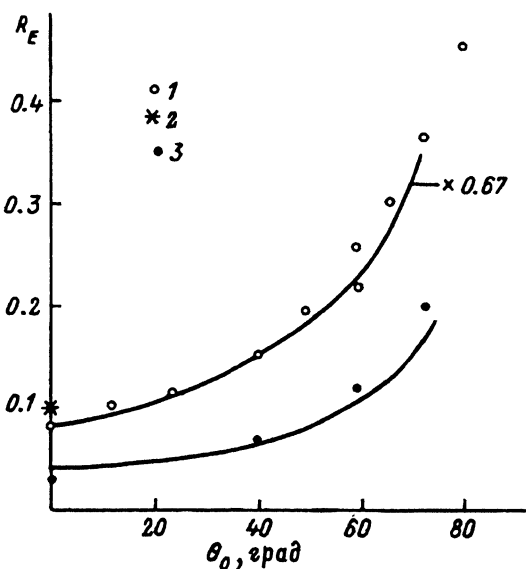


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  ионов  $\text{He}^+$  от угла падения.

1 —  $\text{He}^+ \rightarrow \text{Cu}$ ,  $E_0 = 4$  кэВ [18]; 2 —  $\text{He}^2 \rightarrow \text{Cu}$ ,  $E_0 = 4$  кэВ [18]; 3 —  $\text{He}^+ \rightarrow \text{Ti}$ ,  $E_0 = 5$  кэВ [18]; сплошные кривые — наш расчет.

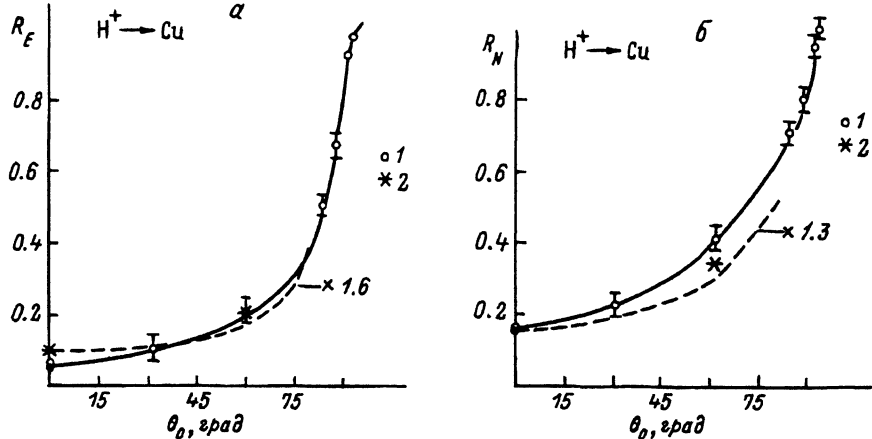


Рис. 3. Зависимость коэффициента отражения энергии  $R_E$  (а) и частиц  $R_N$  (б) от угла падения для  $H^+ \rightarrow Cu$  ( $E_0 = 5$  кэВ).

1, 2 — результаты расчетов, выполненные в [20,21] соответственно; штриховые кривые — наш расчет.

а также наши расчеты. Видно, что и в этом случае соответствие экспериментальных данных и наших расчетов хорошее. Обратимся к рассеянию  $He^+ \rightarrow Cu$ . Наши расчеты хорошо описывают относительный ход зависимости  $R_E(\theta_0)$ , однако по абсолютной величине они примерно в полтора раза выше. Результат измерений величины  $R_E$  авторами работы [19] в пределах ошибок эксперимента совпадает с нашим расчетом. Различие экспериментальных данных в работах [18,19], может быть вызвано тем, что в [18] использовали медь, имеющую частично кристаллическую структуру, что, как известно [20], приводит к уменьшению величин  $R_N$  и  $R_E$ .

Наконец, на рис. 3 сравниваются наши расчеты с данными, полученными в работах [20,21] путем машинного моделирования для  $H^+ \rightarrow Cu$ . На этих же рисунках нанесены результаты экстраполяции экспериментальных данных измерений  $R_E$  [22] и  $R_N$  [19] в случае нормального падения протонов на поверхность  $Cu$ . Как видно из рис. 3, эти точки хорошо совпадают с нашими расчетами. Компьютерное же моделирование дает как для  $R_N$ , так и для  $R_E$  завышенные результаты. Кроме того, видно, что величина  $R_N(\theta_0)$ , рассчитанная нами, растет несколько медленнее, чем вычисленная авторами работы [20]. Причиной указанного расхождения может быть наличие анизотропии индикатрисы рассеяния ионов на первом слое атомов твердого тела, которую мы не учитываем. Расчеты выполнены нами до углов  $75^\circ$ , так как при больших углах падения начинает нарушаться неравенство (15).

Подводя итог, можно сказать следующее. Развита аналитическая теория процесса обратного рассеяния легких ионов поверхностью аморфных материалов, состоящих из атомов одного сорта, в случае наклонного падения иона. Теория справедлива, когда рассеяние в первом слое мало по сравнению с единицей, но может быть сравнимо с общим коэффициентом отражения. Расчеты по полученным формулам для отражения ионов  $H^+$ ,  $He^+$  хорошо совпадают с известными экспериментальными данными и удовлетворительно с результатами компьютерных расчетов.

- [1] Сутомлинов В.С., Фафурина Э.Н. // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 4. С. 9–19.
- [2] Сутомлинов В.С. // ЖТФ. В печати.
- [3] Harrison D.E. // Rad. Eff. 1983. Vol. 70. P. 1–64.
- [4] Behrish R., Eckstein W. // Physic of Plasma-Wall Interactions in controlled Fusion / Ed. D.E. Post, R. Behrish, New York; London: Plenum Press, 1986. P. 413–438.
- [5] Biersack J.P., Haggmark L.G. // Nucl. Instr. Meth. 1980. Vol. 174. P. 257–269.
- [6] Eckstein W. // J. Nucl. Mater. 1980. Vol. 93–94. P. 518–523.
- [7] Oen O.S., Robinson M.T. // J. Nucl. Mater. 1976. Vol. 63. P. 210–214.
- [8] Robinson J.E., Jackson D.P. // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 76–77. P. 353–358.
- [9] Goktepe O.F. // Nucl. Instr. Meth. B. 1991. Vol. 59–60. Pt1. P. 28–32.
- [10] Yueyuen Xia, Xiangang Xu, Chunyu Tan et al. // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. P. 439–446.
- [11] McCracken G.M., Freeman N.J. // J. Phys. B. 1969. Ser. 2. Vol. 2. P. 661–668.
- [12] Bandurko N.V., Koborov N.N., Kurnaev V.A. et al. // J. Nucl. Mater. 1990. Vol. 176–177. P. 630–634.
- [13] Weismann R., Sigmund P. // Rad. Eff. 1973. Vol. 19. P. 7–14.
- [14] Bottiger J., Winterbon K.B. // Rad. Eff. 1973. Vol. 20. P. 65–67.
- [15] Andersen H.H., Ziegler J.F. // Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements / Ed. J.F. Ziegler, New York: Pergamon Press, 1977.
- [16] Ziegler J.F. Helium Stopping Powers and Ranges in All Elements. New York: Pergamon Press, 1977.
- [17] Sorensen H. // Appl. Phys. Lett. 1976. Vol. 29. P. 148–151.
- [18] Koborov N.N., Kurnaev V.A., Telkovsky V.G. et al. // Rad. Eff. 1983. Vol. 69. P. 135–142.
- [19] Mashkova E.S. // Rad. Eff. 1981. Vol. 54. P. 1–28.
- [20] Oen O.S., Robinson M.T. // Nucl. Instr. Meth. 1976. Vol. 132. P. 647–653.
- [21] Рыжов Ю.А. // Проблемы механики теплообмена в космической технике / Под ред. О.М. Белоцерковского. М.: Машиностроение, 1982. С. 99–114.
- [22] Andersen H.H., Lenskjaer T., Sidenius G. et al. // J. Appl. Phys. 1976. Vol. 47. P. 13–16.
-