

02

## Моделирование прохождения пучка протонов через тонкие пленки золота

© П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, Д.С. Тенсин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 8 июня 2022 г.  
В окончательной редакции 27 июля 2022 г.  
Принято к публикации 1 августа 2022 г.

Представлены результаты расчета энергетических спектров протонов, прошедших тонкие слои золота и отразившихся от таких слоев. Результаты моделирования сравниваются с экспериментальными данными. Показано, что на результаты измерений тормозных потерь энергии влияют такие факторы, как многократность рассеяния, геометрия эксперимента, морфология и шероховатость мишени. Анализ угловой зависимости для частиц, прошедших через тонкую пленку, позволил получить сведения о потенциале взаимодействия частица–твердое тело, заметно отличающемся от потенциала, определенного из рассеяния частиц в газовой фазе. Результаты проведенных на основании полученного потенциала расчетов согласуются с экспериментальными данными по отражению частиц от поверхности твердого тела.

**Ключевые слова:** энергетические спектры, угловое распределение, потенциалы межатомного взаимодействия, электронные тормозные способности, страгглинг.

DOI: 10.21883/JTF.2022.11.53436.151-22

### Введение

Понимание процессов, происходящих при прохождении частицами средних энергий (несколько keV) тонких слоев вещества, очень важно для создания новых материалов методами ионной имплантации. Использование энергий ниже 10 keV позволяет уменьшить пробег частиц в веществе и, следовательно, уменьшает размеры создаваемых наноструктур. Пучки ионов и атомов средних энергий широко применяются для анализа состава и структуры поверхности. Моделирование процессов отражения, пробегов, энерговыделения, образования дефектов и распыления при бомбардировке пучками ионов крайне важно для правильного представления о взаимодействии частиц плазмы со стенкой в токамак-реакторе и для моделирования воздействия солнечного ветра на космические аппараты.

При моделировании взаимодействия ионов с твердым телом с помощью компьютерных кодов необходимо знание структуры мишени, потенциала межатомного взаимодействия, зарядового состояния взаимодействующих частиц, ядерных и электронных потерь энергии при соударении. Работа по накоплению этих данных ведется постоянно уже много лет. Приближение парных соударений для ускорения счета было предложено в работе [1]. Значительный вклад в развитие моделирования рассеяния частиц на поверхности внесли отечественные авторы [2–4]. Различные методики моделирования поверхности описаны в монографии [5].

Широко применяется код SRIM [6], который основывается на использовании так называемого универсального потенциала. К недостаткам кода можно отнести

отсутствие возможности расчета рассеяния на кристаллических и поликристаллических мишенях, а также отсутствие возможности свободно менять рассеивающий потенциал и модель, учитывать неупругие потери энергии при торможении на электронах. Для моделирования расчета на кристаллической мишени следует отметить программу MARLOWE [7], которая имеется в свободном доступе. Был сделан ряд попыток создать программы для поликристаллической мишени, которые до сих пор не получили широкого распространения [8–10]. Настоящая работа мотивирована необходимостью создать код, который свободен от перечисленных недостатков.

Для проверки получаемых результатов нами выбрана система  $p$ -Au, для которой имеются многочисленные экспериментальные данные. Из последних работ можно отметить [11–14]. В этих работах приведены результаты исследования прохождения пучка протонов средних энергий через тонкие слои золота. Выбор золота связан с возможностью получать тонкие пленки при минимальном наличии примеси на поверхности.

### 1. Моделирование. Описание кода

Применялась разработанная нами программа, использующая метод Монте–Карло и приближение бинарных соударений для описания траекторий частиц. В приближении бинарных соударений рассеяние атомных частиц в твердом теле рассматривается как последовательность парных соударений с атомами твердого тела. При этом траектория движения частицы заменяется асимптотами траектории. При энергиях соударения ниже 50 eV

применимость приближения нарушается. Приближение бинарных соударений позволяет значительно ускорить проведение расчетов. В настоящей работе анализировалось до 50 млн траекторий частиц, что позволяло иметь хорошую статистику при анализе энергетических и угловых распределений как для частиц, отраженных от поверхности, так и для частиц, прошедших сквозь тонкую пленку.

Разработанная программа позволила проводить расчеты как для монокристалла, так и для поликристаллических и аморфных мишеней. При моделировании рассеяния на кристалле расположение атомов в пространстве задается кристаллической решеткой, при этом поверхность задается выбранной гранью кристалла. При моделировании рассеяния на поликристаллической поверхности ориентация поверхностной грани кристалла задается случайным образом. Размеры кристаллита являются параметром задачи. Поверхность считается шероховатой при наличии неровностей с величиной порядка постоянной решетки или более. При моделировании рассеяния на аморфной мишени учитывается наличие ближнего порядка. Расстояние между атомами определяется из плотности мишени. Задается плотно упакованный кластер атомов, случайно ориентированный в пространстве. При последующем соударении ориентация кластера в пространстве разыгрывается заново. Поверхность определяется как случайный срез первоначального кластера. Шероховатость можно моделировать, варьируя толщину пленки.

Обычно различают ядерные тормозные способности, связанные с рассеянием частицы на атомах мишени, и электронные тормозные способности, связанные с возбуждением и ионизацией, т.е. с взаимодействием с электронной компонентой мишени. Потери энергии при рассеянии на атомах решетки рассчитываются точно, если известен потенциал взаимодействия. Потери энергии при торможении на электронах учитываются при каждом соударении путем умножения теоретического значения электронной тормозной способности на длину траектории между соударениями. К достоинствам программы можно отнести возможность варьировать потенциал взаимодействия и модель для описания зависимости электронных тормозных потерь от энергии. Учитываются тепловые колебания атомов мишени. Имеется возможность построения карты поверхности для анализа области, приводящей к отражению частиц от поверхности. Также фиксируется слой, до которого дошла частица. Более детальное описание алгоритма можно найти в работе [15].

## 2. Электронные тормозные способности

Проблеме правильного учета электронных тормозных способностей при компьютерном моделировании посвящено множество работ [16–18]. Существует база

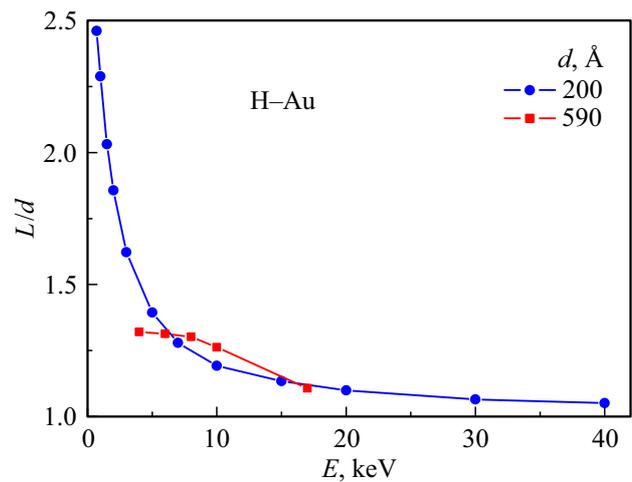


Рис. 1. Отношение средней длины траектории  $L$  к толщине пленки  $d$  для системы Н–Аu для толщин 200 и 590 Å.

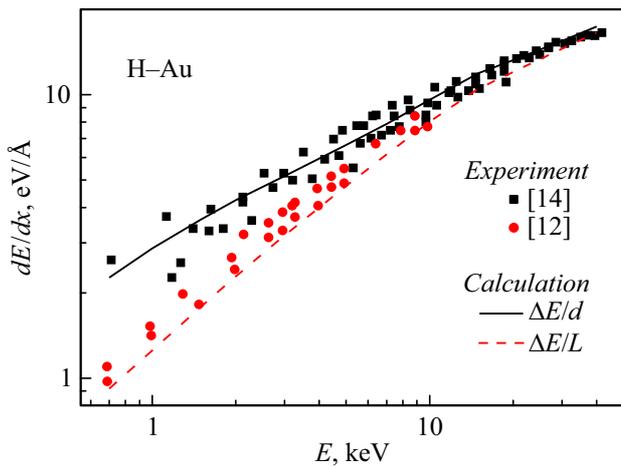
данных [19], где собраны экспериментальные данные по электронным тормозным потерям для различных снарядов и мишеней. Эта база постоянно дополняется новыми данными.

Значения неупругой потери энергии для системы Н–Аu взяты нами из работ [12,13,20–23]. В интересующей нас области энергий эксперимент дает существенно разные значения неупругой потери энергии. Возникает вопрос: какие значения неупругой потери использовать в нашей программе при моделировании?

Данные, полученные при использовании геометрии обратного рассеяния и геометрии на прохождение, дают различные значения тормозных потерь. Объяснение этого явления было найдено в нашей работе [24]. Оказалось, что существенную роль играет многократность соударений в мишени. Как показали наши расчеты, длина траектории частицы  $L$  в веществе при энергиях менее 10 keV существенно больше, чем толщина мишени  $d$ , которую она проходит (рис. 1).

На рис. 2 приведены величины электронной тормозной способности из работы Маркина [12], полученные методом обратного рассеяния, и из работы Андерсена [14], измеренные при прохождении протонами пленки из золота толщиной 200 Å. Видно, что данные Маркина в области малых энергий лежат гораздо ниже данных Андерсена. При моделировании энергетических спектров атомных частиц, прошедших пленку толщиной 200 Å с помощью нашей программы, мы получим следующий результат: если поделить  $\Delta E$  — среднюю потерю энергии частиц, прошедших пленку, на толщину пленки  $d$ , то получим данные Андерсена [14], а если поделить среднюю потерю энергии на среднюю длину траектории  $L$ , то получим результаты Маркина [12] (рис. 2).

Очевидно, что вместо величины „потеря энергии на единицу толщины мишени“ при моделировании необходимо использовать параметр „значение тормозной



**Рис. 2.** Величины электронных тормозных способностей  $dE/dx$  в зависимости от энергии бомбардирующей частицы [24]. Точки — экспериментальные данные работ [12,14]. Линии — наш расчет величин  $\Delta E/d$  и  $\Delta E/L$  с помощью модели [15].

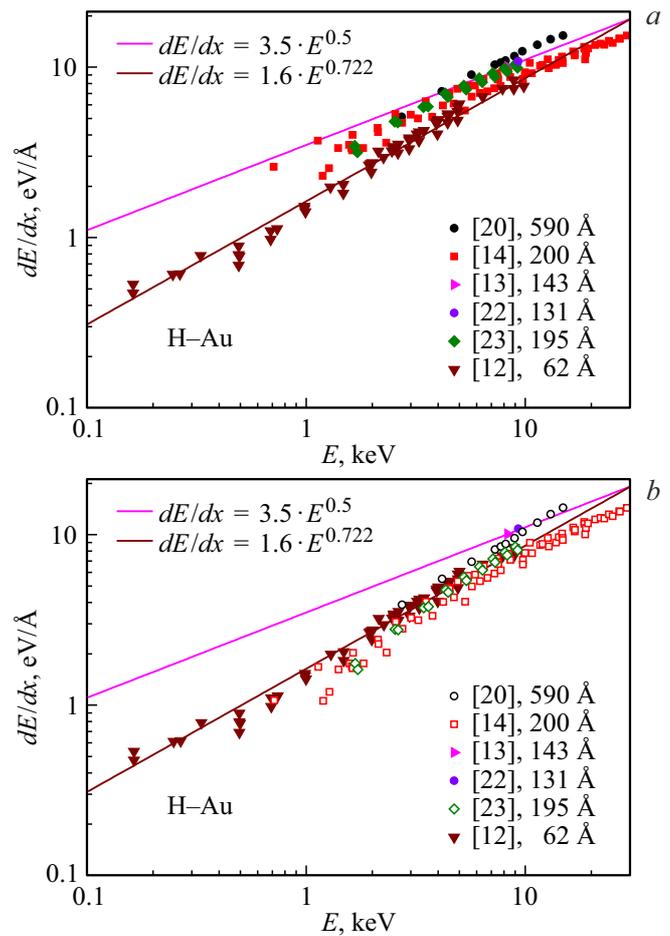
способности на единицу длины траектории“, а при сопоставлении данных разных экспериментов в данные, полученные для толстых пленок, следует вносить поправку на многократность соударений.

Экспериментальные данные, полученные для тонких пленок, вызывают большее доверие в силу меньшего влияния многократности соударений. Например, данные в работе [20] получены для пленки толщиной 590 Å, и мы внесли поправку, учитывающую многократность соударений. В работе [14] использовалось ускорение и замедление частиц, что влияло на геометрию сбора прошедших пленку частиц. При выборе значений неупругой потери энергии мы больше доверяли данным, полученным для пленок с толщинами ближе к 100 Å (143 Å [13], 131 Å [22]). В работе [23] толщина пленки составляла 195 Å. Как видно из рис. 3, учет поправки на многократность рассеяния заметно улучшает согласие с экспериментальными данными. Этот набор данных можно описать зависимостью  $dE/dx = 1.6 \cdot E^{0.722}$ , которую в дальнейшем мы будем использовать.

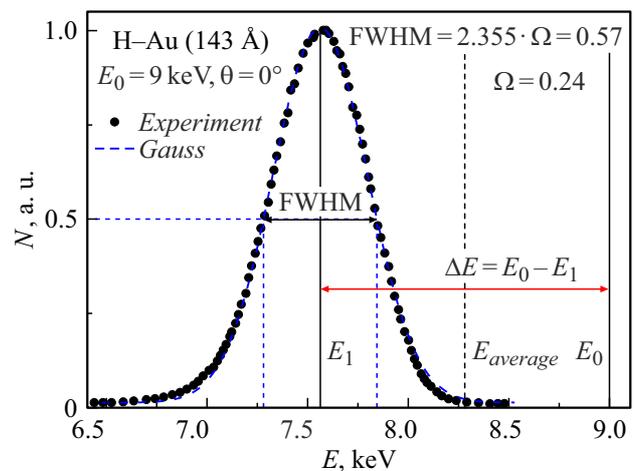
Также следует отметить, что значения неупругой потери энергии, полученной из эксперимента, приводятся не для начальной энергии бомбардирующих частиц, а для некой средней энергии.

На рис. 4 представлен экспериментальный энергетический спектр протонов, прошедших тонкую золотую мишень толщиной 143 Å. Угол наблюдения  $\theta = 0^\circ$ , энергия налетающих протонов  $E_0 = 9$  keV. Известно, что в случае тонкой мишени энергетический спектр частиц, прошедших пленку, описывается распределением Гаусса:

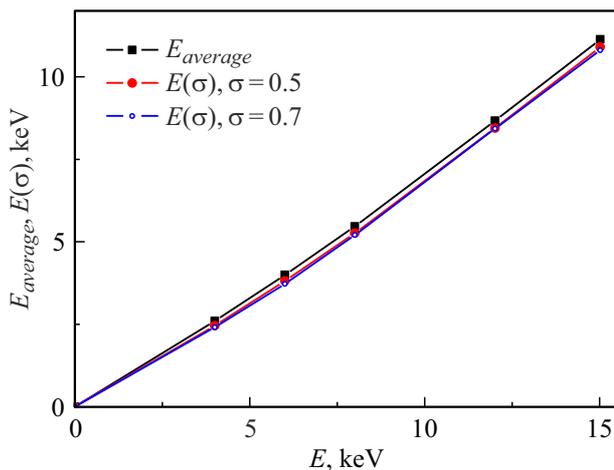
$$\frac{dN}{dE} = A \exp \left[ -\frac{(E - E_1)^2}{2\Omega^2} \right]. \quad (1)$$



**Рис. 3.** Зависимость электронных потерь от энергии бомбардирующей частицы для протонов в мишени из золота: *a* — без учета поправки на многократность соударения, *b* — с учетом поправки.



**Рис. 4.** Энергетический спектр протонов после прохождения золотой пленки толщиной 143 Å. Начальная энергия протонов  $E_0 = 9$  keV.



**Рис. 5.** Зависимость средней энергии частиц от энергии частицы-снаряда для трех вариантов расчета: среднее арифметическое и предложенная нами формула для  $\sigma = 0.5$  и  $0.7$ . Толщина пленки  $d = 590 \text{ \AA}$ .

Здесь  $E_1$  — средняя или наиболее вероятная энергия частиц после прохождения пленки. На рис. 4 штриховой линией показано распределение Гаусса, наилучшим образом описывающее эксперимент. В дальнейшем при обработке энергетических спектров на прострел мы будем описывать их распределением Гаусса и использовать следующие параметры. Энергия бомбардирующих частиц —  $E_0$ , средняя или наиболее вероятная энергия частиц после прохождения пленки —  $E_1$ , энергетический сдвиг —  $\Delta E = E_0 - E_1$ , стандартное отклонение в распределении Гаусса —  $\Omega$ .

Несколько слов о значениях энергии, для которых приводятся неупругие потери. Если  $E_0$  — начальная энергия частицы, а  $E_1$  — средняя энергия частицы после прохождения пленки, то для оценки средней энергии частицы при торможении в тонкой пленке можно использовать среднее арифметическое значение [14]:

$$E_{average} = \frac{E_0 + E_1}{2}. \quad (2)$$

Если предположить, что электронная тормозная способность меняется с энергией частицы по закону  $dE/dx = AE^\sigma$  (кривая на рис. 3), то для средней энергии можно получить выражение

$$E(\sigma) = \frac{(1 - \sigma)(E_1^{2-\sigma} - E_0^{2-\sigma})}{(1 + \sigma)(E_1^{1-\sigma} - E_0^{1-\sigma})}. \quad (3)$$

Для часто используемой аппроксимации с  $\sigma = 0.5$ :

$$E(\sigma = 0.5) = \frac{1}{3}(E_0 + E_1 + E_1^{0.5}E_0^{0.5}). \quad (4)$$

Из рис. 5 видно, что значения для разных моделей отличаются несильно. Для тонких пленок удобнее использовать среднее арифметическое значение, а для более толстых пленок мы предлагаем использовать выражение (3), полученное нами.

### 3. Энергетический страгглинг

При моделировании энергетических спектров после прохождения тонких пленок в ранее применявшихся вариантах программы спектры получались ассиметричными и с резким высокоэнергетическим правым краем. Такое распределение по энергии учитывает только упругие потери энергии при многократном рассеянии на атомах решетки. Необходимо также учитывать случайный характер потерь энергии при торможении частиц (страгглинг) на электронах мишени. Этот разброс связан со случайным характером зарядового состояния налетающей частицы, а также с неравномерным распределением плотности электронов в мишени.

Свой вклад в уширение пика в энергетическом спектре может вносить также шероховатость (неравномерность толщины пленки). На измеряемую ширину пика влияет также энергетическое разрешение спектрометра, используемого для анализа частиц.

Распределение по потерям энергии имеет форму Гауссиана при условии, что передача энергии в индивидуальном столкновении меньше ширины суммарного распределения. Стандартное отклонение  $\Omega$  в распределении Гаусса выражается формулой

$$\Omega^2 = Nd \int T^2 d\sigma(T). \quad (5)$$

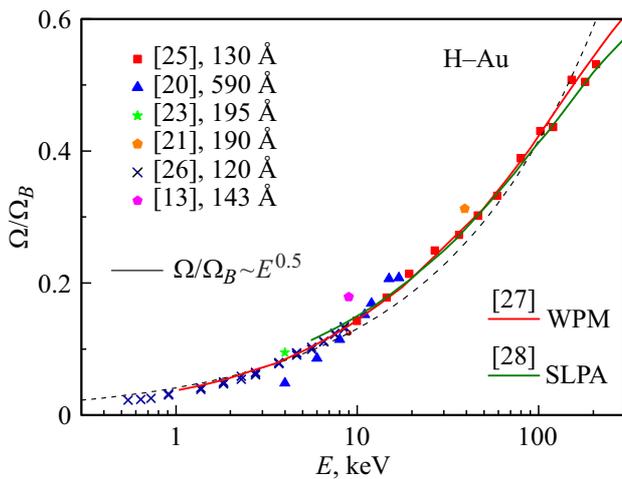
Здесь  $N$  — атомная плотность мишени,  $d$  — толщина мишени,  $T$  — передача энергии,  $d\sigma$  — дифференциальное сечение рассеяния. Для быстрых частиц выражение для страгглинга хорошо аппроксимируется формулой Бора:

$$\Omega_B^2 = 4\pi Z_1^2 e^4 Z_2 N d, \quad (5)$$

которая получается при подстановке формулы Резерфорда для сечения в формулу (5). Здесь  $Z_1$  и  $Z_2$  — атомный номер снаряда и мишени соответственно.

На рис. 6 приведены экспериментальные значения страгглинга для системы Н–Au из работ [13,20,21,23,25,26]. Использование отношения  $\Omega/\Omega_B$  позволяет сравнивать данные измерений для разных толщин мишени. Весь массив данных описан степенной зависимостью  $\Omega/\Omega_B \sim E^{0.5}$ . Предположение, что величина страгглинга пропорциональна скорости частицы, основано на результатах теоретических работ [27,28] (рис. 6). Видно, что теоретические кривые хорошо описывают существующие экспериментальные данные.

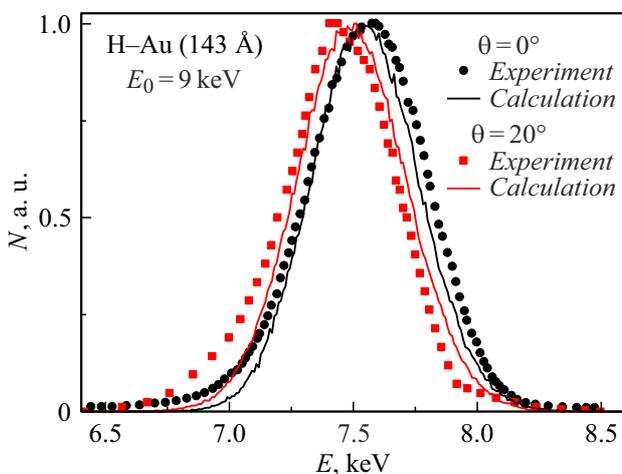
Используя экспериментальные данные о страгглинге при взаимодействии протонов с золотой мишенью, мы включили в наш код модуль, учитывающий страгглинг. Учет страгглинга при моделировании проводился следующим образом: к значению потери энергии между столкновениями добавлялся член, значение которого разыгрывалось случайным образом с учетом гауссова распределения, а  $\Omega$  выбиралась из соответствия получаемых данных кривой на рис. 6.



**Рис. 6.** Зависимость страгглинга от энергии налетающих частиц. Точки — экспериментальные данные. Линии — степенная зависимость и теоретический расчет из работ [27,28].

#### 4. Зависимость неупругой потери от угла наблюдения

На рис. 7 приведен экспериментальный спектр протонов, прошедших фольгу из золота толщиной 143 Å [13]. Энергия налетающих протонов — 9 keV. Приведены данные для двух углов наблюдения  $\theta = 0$  и  $20^\circ$ . Видно, что наблюдается сдвиг положения пика по шкале энергий в зависимости от угла наблюдения частиц. Смещение пика связано с увеличением длины траектории частицы при увеличении угла вылета. Если принять модель, что частица испытывает множество соударений с отклонением траектории на небольшой угол и по крайней мере одно столкновение с отклонением на угол порядка  $\theta$ , то среднее увеличение длины пролета с изменением угла



**Рис. 7.** Энергетические спектры протонов, прошедших пленку из золота толщиной 143 Å. Энергия налетающих протонов  $E_0 = 9$  keV. Углы наблюдения  $\theta = 0$  и  $20^\circ$ . Точки — эксперимент из работы [13], линии — расчет нашей программой.

наблюдения описывается простым выражением

$$\frac{1}{2} \left( \frac{1}{\cos \theta} - 1 \right). \quad (7)$$

При таком предположении изменение электронных тормозных потерь в зависимости от угла наблюдения можно записать в виде

$$\Delta E_{elec}(\theta) - \Delta E_{elec}(0) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\cos \theta} - 1 \right) \Delta E_{elec}(0). \quad (8)$$

где  $\Delta E_{elec}(0)$  — электронные потери энергии, измеренные для нулевого угла наблюдения.

На положение пика влияет также положение упругого пика при рассеянии на заданный угол. Вклад потерь при столкновении с ядрами (упругие потери) для  $M_1 \ll M_2$  примерно равен

$$\begin{aligned} \Delta E_{nucl}(\theta) - \Delta E_{nucl}(0) &\cong \Delta E_{nucl}(\theta) \cong 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \\ &\times E \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

В нашем случае рассеяния протонов на мишени из золота эта поправка небольшая из-за сильного различия масс  $M_1$  и  $M_2$ , например для угла рассеяния  $\theta = 30^\circ$  величина  $\Delta E_{nucl} \approx 1/200 E$ .

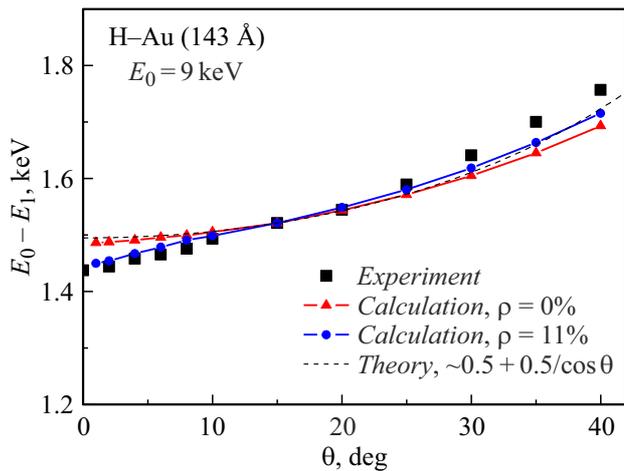
Потеря энергии есть функция угла наблюдения. От углового разрешения детектора зависит величина сдвига энергетического спектра. При анализе экспериментальных данных следует учитывать, что угол сбора рассеянных ионов будет влиять на определяемую величину неупругой потери энергии. Например, разброс данных в эксперименте Андерсена [14] может быть связан с тем, что для сбора частиц применялось дополнительное ускорение и торможение пучка частиц, прошедших пленку, что могло влиять на геометрию сбора частиц и соответственно погрешность измерений.

Из рис. 8 видно, что экспериментальное значение  $\Delta E$  превышает расчетное. Простая модель, учитывающая только увеличение длины траектории при увеличении угла наблюдения (штриховая линия), удовлетворительно описывает наш компьютерный расчет. Однако полного согласия расчета с экспериментом нет, а учет шероховатости улучшает согласие. Метод расчета влияния шероховатости на наблюдаемый сдвиг  $\Delta E$  рассмотрим в следующем разделе.

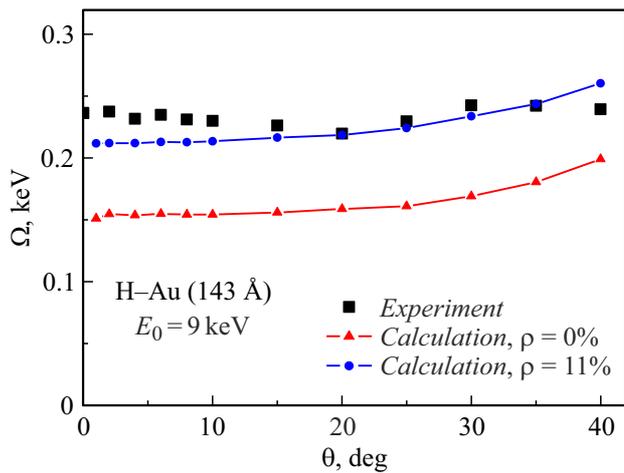
#### 5. Влияние шероховатости пленки на измеряемые величины

На это явление было обращено внимание в работах [13,29]. Очевидно, что шероховатость пленки или ее разброс по толщине должен приводить к увеличению страгглинга. Согласно [30]:

$$\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 + \left( \frac{dE}{dx} \right)^2 \sigma_x^2} \cong \sqrt{\Omega_0^2 + \rho^2 \Delta E^2}. \quad (10)$$



**Рис. 8.** Зависимость величины энергетического сдвига  $\Delta E$  от угла наблюдения. Квадраты — эксперимент из работы [13]. Треугольники — наш расчет без учета шероховатости. Штриховая линия — зависимость, отражающая увеличение длины пробега в зависимости от угла наблюдения. Кружки — расчет для параметра шероховатости  $\rho = 11\%$ .



**Рис. 9.** Страгглинг в зависимости от угла наблюдения. Квадраты — эксперимент из работы [13]. Треугольники — наш расчет без учета шероховатости. Кружки — расчет для параметра шероховатости  $\rho = 11\%$ .

Здесь  $\Omega_0$  — энергетический страгглинг идеальной пленки толщиной  $d$ ,  $\sigma_x$  — стандартное относительное отклонение толщины,  $\Delta E$  — потеря энергии и  $\rho$  — параметр шероховатости, характеризующий толщину мишени, который определяется как  $\rho = \sigma_x/d$ .

Мы оценили влияние шероховатости для параметра  $\rho = 11\%$ . Можно рассчитать энергетический спектр частиц, прошедших пленку для различного набора толщин, а затем сложить получаемые спектры, наблюдаемые под разными углами  $\theta = 1-40^\circ$ , с учетом весового вклада различных толщин пленок для разных шероховатостей. Энергетический спектр для мишени с разбросом по

толщине вычислялся по формуле

$$\left(\frac{dN}{dE}\right)_\Sigma = \sum_{i=1}^9 \left(\frac{dN}{dE}\right)_i k_i. \quad (11)$$

Здесь  $(dN/dE)_i$  — энергетический спектр для  $i$ -той толщины,  $k_i$  — весовой коэффициент данной толщины пленки. Суммарные спектры для различных углов наблюдения обрабатывались стандартной процедурой (вписывание гауссовского распределения). Из расчетных спектров получены положения пиков наиболее вероятной энергии частиц, прошедших пленку, и ширина гауссовского распределения (страгглинг). Учет шероховатости приводит к дополнительному сдвигу пика, соответствующего средней потере энергии (рис. 8). Это явление связано с нелинейностью зависимости вероятности рассеяния частицы от угла и толщины пленки.

На рис. 9 приведены значения ширин энергетических распределений (страгглинга) для экспериментальных спектров и расчеты с  $\rho = 0$  и  $11\%$ . Из рисунка видно, что расчетные значения страгглинга без учета шероховатости существенно меньше экспериментальных значений, а с учетом шероховатости достигается согласие с экспериментом.

Таким же способом были получены положения пиков для параметра шероховатости  $\rho = 11\%$  (рис. 8). Видно, что учет шероховатости пленки позволяет улучшить согласие с экспериментом.

### 6. Угловые распределения частиц, прошедших сквозь тонкие пленки

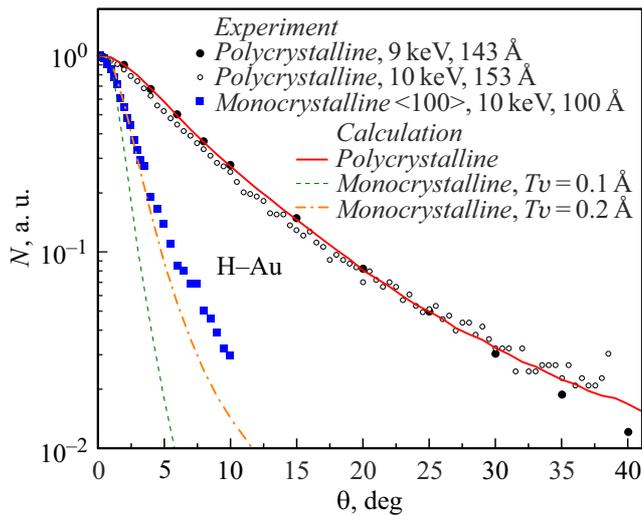
Для практических целей часто нужны угловые распределения интенсивностей частиц, прошедших тонкие пленки. Например, тонкие пленки используются для обдирки пучка нейтральных частиц для их последующего анализа [31].

В работах [13,32] приведены экспериментальные данные по угловому распределению протонов после прохождения пленки из золота. В таблице сведены условия эксперимента, при которых производились измерения в этих работах.

На рис. 10 показаны экспериментальные угловые распределения протонов после прохождения пленок из золота. Данные для поликристаллических мишеней из разных работ хорошо согласуются. Видно, что угловое распределение для монокристалла значительно уже. Для

Условия проведения экспериментов из работ [13,32]

Работа	Энергия протона $E_0$ , keV	Тип мишени	Толщина мишени, Å
[13]	9	Поликристаллическая	143
[32]	10	Поликристаллическая	153
[32]	10	Монокристаллическая	100



**Рис. 10.** Угловые распределения протонов после прохождения пленок из золота. Точки — эксперимент для поликристаллической и монокристаллической пленки. Линии — расчет нашей программой.

того чтобы получить согласие расчета и эксперимента в случае монокристалла, пришлось использовать амплитуду тепловых колебаний  $Tv = 0.2 \text{ \AA}$ , а эта величина в два раза больше амплитуды колебаний, рассчитанной из дебаевской температуры  $Tv = 0.089 \text{ \AA}$ . Несовпадение результатов может быть связано с наличием дефектов в монокристаллической пленке. Как видно из рис. 10, наша программа неплохо описывает эксперимент.

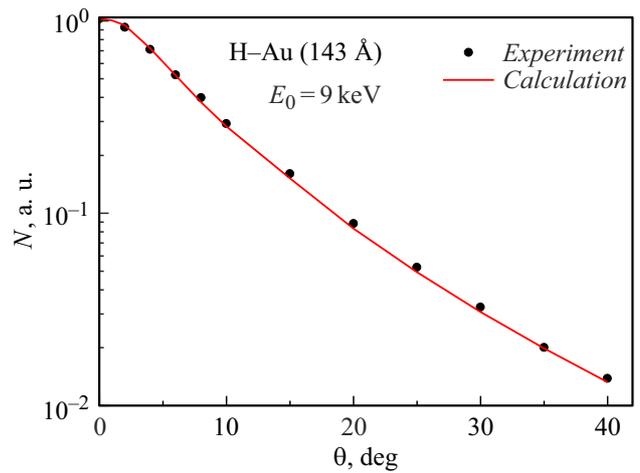
### 7. Получение данных о потенциале межатомного взаимодействия

При моделировании процессов взаимодействия частиц с веществом существенным является выбор потенциала межатомного взаимодействия. Исследования показывают, что угловое распределение рассеянных частиц очень чувствительно к потенциалу взаимодействия. Следовательно, моделируя угловое распределение частиц после прохождения тонких слоев вещества, можно подобрать потенциал межатомного взаимодействия.

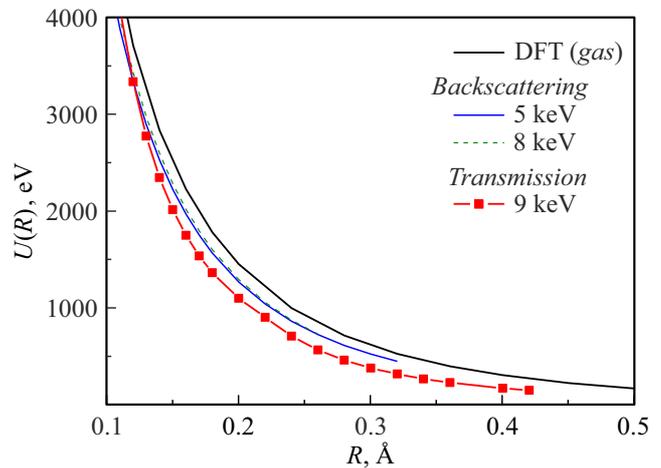
Как видно из рис. 11, подбором потенциала взаимодействия можно хорошо описать наблюдаемую экспериментально зависимость интенсивности рассеяния от угла наблюдения. Наилучшее согласие было получено для потенциала:

$$U(R) = \begin{cases} \frac{13}{R^{2.8}} & \text{if } R > 0.22, \\ \frac{13}{R^{2.8}} \exp[-4(0.22 - R)] & \text{if } R < 0.22 \end{cases} \quad (12)$$

На рис. 12 приведены потенциалы взаимодействия, полученные в настоящей работе, которые неплохо согласуются с данными, полученными из анализа энергетиче-



**Рис. 11.** Угловое распределение протонов после прохождения пленки золота. Точки — эксперимент для поликристаллической пленки. Линия — расчет нашей программой.

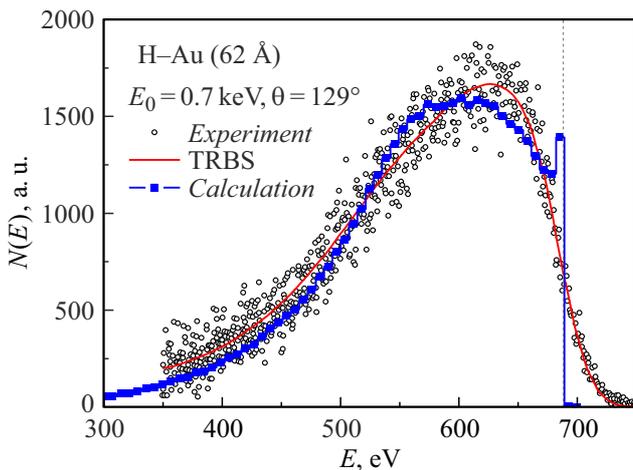


**Рис. 12.** Потенциалы межатомного взаимодействия, полученные в результате подгонки углового распределения для измерений из работы [13].

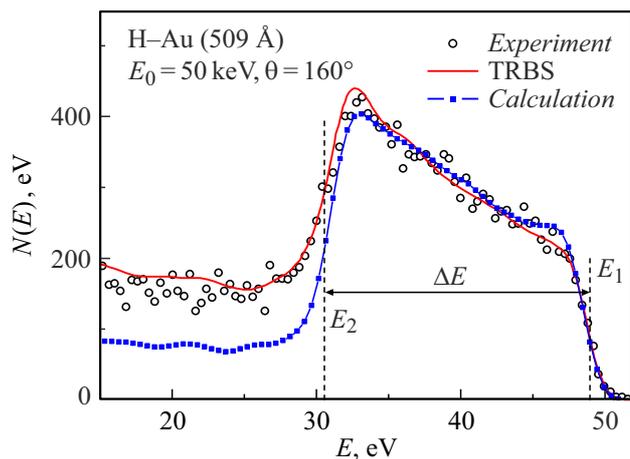
ских и угловых зависимостей коэффициентов отражения частиц при бомбардировке протонами толстых мишеней из золота. В то же время подтверждается факт заметного отличия потенциала для системы атом—твердое тело от данных, получаемых при рассеянии частиц в газовой фазе (кривая DFT). Вследствие большой подвижности электронов в металле пролетающая частица может поляризовать электронный газ, что может приводить к изменению константы экранирования в потенциале.

### 8. Энергетические спектры на отражение

В разд. 8 приведены результаты расчета энергетических спектров протонов, отразившихся обратно (под большими углами) от тонких слоев вещества.



**Рис. 13.** Энергетический спектр протонов, рассеявшихся от мишени из золота на угол  $129^\circ$ . Кружки — экспериментальные данные из работы [12]. Сплошная линия — результат расчета программой TRBS из работы [12]. Квадраты — расчет нашей программой.



**Рис. 14.** Энергетический спектр протонов, рассеявшихся от мишени из золота на угол  $160^\circ$ . Кружки — экспериментальные данные из работы [11]. Сплошная линия — результат расчета программой TRBS из работы [11]. Квадраты — расчет нашей программой.

На рис. 13 приведен расчет для пленки толщиной  $62 \text{ \AA}$  и энергии протонов  $700 \text{ eV}$ . Видно, что моделирование нашей программой дает в спектре особенность, связанную с рассеянием протона на угол  $129^\circ$  на поверхностном слое пленки.

На рис. 14 приведен энергетический спектр протонов, отразившихся назад на угол  $\theta = 160^\circ$  от слоя золота толщиной  $d = 509 \text{ \AA}$ . Также приведен спектр, полученный с помощью компьютерного моделирования программой TRBS [33] и нашей программой. Наилучшее описание экспериментального спектра кодом TRBS достигается для величины неупругой потери энергии  $(dE/dx)_{\text{TRBS}} = 17.8 \text{ eV/\AA}$ . На экспериментальном спек-

тре видны два резких края (обозначены на рисунке, как  $E_1$  и  $E_2$ ). Энергия  $E_1$  соответствует частицам, отразившимся от самого верхнего слоя пленки, а энергия  $E_2$  — частицам, отразившимся от самого глубокого слоя. Чтобы получить оценку тормозной способности, необходимо величину  $\Delta E = E_1 - E_2 = 18430 \text{ eV}$  разделить на путь частицы  $L = d + d/\cos(180^\circ - \theta)$ . Здесь  $d$  — толщина пленки ( $509 \text{ \AA}$ ),  $\theta$  — угол рассеяния, равный  $160^\circ$ . Отсюда  $L = 1051 \text{ \AA}$ . Оценочное значение  $dE/dx \approx 17.5 \text{ eV/\AA}$  отлично согласуется с результатами компьютерного моделирования.

Таким образом, для разных толщин пленок и разных энергий наш код позволяет рассчитывать энергетические спектры частиц, рассеявшихся как вперед, так и назад.

## Заключение

В работе приведены результаты компьютерного моделирования энергетических спектров частиц, прошедших тонкие слои вещества. Моделирование выполнено с помощью кода, основанного на методе Монте-Карло и приближении парных взаимодействий. Код позволяет применять при вычислениях различные типы потенциалов межатомного взаимодействия, моделировать структуру мишени (аморфное тело, поликристалл, кристалл), учитывать амплитуду тепловых колебаний атомов мишени, вводить в рассмотрение энергетический страгглинг частиц.

В работе учтен энергетический страгглинг и проверена применимость кода в двух существенно разных геометриях на прострел и обратное рассеяние. Показано, что при интерпретации данных по рассеянию частиц необходимо учитывать морфологию мишени (монокристалл, поликристалл, аморфное тело). На результаты измерений потерь энергии влияют многократность рассеяния, геометрия сбора частиц и шероховатость мишени, которые вносят поправки в определение неупругих потерь энергии. При моделировании углового рассеяния частиц получены потенциалы межатомного взаимодействия. Данные о потенциале для геометрии на прострел и обратного рассеяния хорошо согласуются. В то же время имеется заметное отличие потенциала для системы атом–твердое тело от данных, получаемых при рассеянии частиц в газовой фазе. Это поведение может быть связано с изменением константы экранирования в потенциале вследствие большой подвижности электронного газа в металле и поляризации электронного газа пролетающей частицей.

## Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-22-20081, <https://rscf.ru/project/22-22-20081/>, а также при поддержке гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением от „14“ апреля 2022 г. № 22/2022.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] M.T. Robinson, I.M. Torrens. *Phys. Rev. B*, **9**(12), 5008 (1974). DOI: 10.1103/PhysRevB.9.5008
- [2] В.М. Кивилис, Э.С. Париллис, Н.Ю. Тураев. *ДАН*, **173** (4), 805 (1967).
- [3] V.E. Yurasova, V.I. Shulga, D.S. Karpuzov. *Can. J. Phys.*, **46** (6), 759 (1968). DOI: 10.1139/p68-094
- [4] Е.С. Машкова, В.А. Молчанов. *Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел* (Энергоатомиздат, М., 1995), 176 с.
- [5] В. Экштайн. *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела* (Мир, М., 1995), [W. Eckstein. *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions* (Springer, Berlin 1991)]
- [6] J.F. Ziegler, J.P. Biersack. SRIM. Режим доступа: <http://www.srim.org>
- [7] Электронный ресурс. Режим доступа: <http://www.oecd-neutron.org/tools/abstract/detail/psr-0137>
- [8] G.E. Thomas, L.J. Beckers, J.J. Vrakking, B.R. Koning. *J. Cryst. Growth*, **56** (3), 557 (1982). DOI: 10.1016/0022-0248(82)90039-2
- [9] M. Hautala. *Phys. Rev. B*, **30** (9), 5010 (1984). DOI: 10.1103/PhysRevB.30.5010
- [10] I. Koponen, M. Hautala. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **33** (1–4), 112 (1988). DOI: 10.1016/0168-583X(88)90525-3
- [11] B. Bruckner, P.M. Wolf, P. Bauer, D. Primetzhofer. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **489**, 82 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2020.08.005
- [12] S.N. Markin, D. Primetzhofer, S. Prusa, M. Brunmayr, G. Kowarik, F. Aumayr, P. Bauer. *Phys. Rev. B*, **78** (19), 195122 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.78.195122
- [13] M. Fama, G.H. Lantschner, J.C. Eckardt, C.D. Denton, N.R. Arista. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **164–165**, 241 (2000). DOI: 10.1016/S0168-583X(99)01086-1
- [14] H.H. Andersen, A. Csete, T. Ichioka, H. Knudsen, S.P. Moller, U.I. Uggerhoj. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **194**, 217 (2002). DOI: 10.1016/S0168-583X(02)00692-4
- [15] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев. *Поверхность*, **4**, 74 (2019). DOI: 10.1134/S0207352819040127 [D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, *J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech.*, **13**, 335 (2019). DOI: 10.1134/S1027451019020332]
- [16] H. Paul, A. Schinner. *Phys. Scripta*, **69**, C41 (2004). DOI: 10.1238/Physica.Regular.069a00C41
- [17] P. Sigmund, A. Schinner. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **410**, 78 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.08.011
- [18] D. Goebel, K. Khalal-Kouache, D. Roth, E. Steinbauer, P. Bauer. *Phys. Rev. A*, **88** (3), 032901 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevA.88.032901
- [19] Электронный ресурс. NDS — data base. Режим доступа: <https://www-nds.iaca.org>
- [20] R. Blume, W. Eckstein, H. Verbeek. *Nucl. Instr. Meth.*, **168** (1–3), 57 (1980). DOI: 10.1016/0029-554X(80)91231-8
- [21] K. Morita, H. Akimune, T. Suita. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **25** (6), 1525 (1968). DOI: 10.1143/JPSJ.25.1525
- [22] C.D. Archubi, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, N.R. Arista. *Phys. Rev. A*, **73** (4), 042901 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevA.73.042901
- [23] J.E. Valdes, G. Martínez-Tamayo, G.H. Lantschner, J.C. Eckardt, N.R. Arista. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **73** (3), 313 (1993). DOI: 10.1016/0168-583X(93)95744-P
- [24] А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко. *Письма в ЖЭТФ*, **115** (9), 603 (2022). DOI: 10.31857/S1234567822090105
- [25] J.C. Eckardt, G.H. Lantschner. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **175–177**, 93 (2001). DOI: 10.1016/S0168-583X(00)00623-6
- [26] E.A. Figueroa, E.D. Cantero, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, N.R. Arista. *Phys. Rev. A*, **75** (6), 064902 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevA.75.064902
- [27] C.D. Archubi, N.R. Arista. *Phys. Rev. A*, **96** (6), 062701 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevA.96.062701
- [28] C.C. Montanari, C.D. Archubi, D.M. Mitnik, J.E. Miraglia. *Phys. Rev. A*, **79** (3), 032903 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevA.79.032903
- [29] M.M. Jakas, N.E. Capuj. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **36**, 491 (1989). DOI: 10.1016/0168-583X(89)90354-6
- [30] F. Besenbacher, J.U. Andersen, E. Bonderup. *Nucl. Instr. Meth.*, **168**, 1 (1980). DOI: 10.1016/0029-554X(80)91224-0
- [31] S.Ya. Petrov, V.I. Afanasyev, A.D. Melnik, M.I. Mironov, A.S. Navolotsky, V.G. Nesenevich, M.P. Petrov, F.V. Chernyshev, I.V. Kedrov, E.G. Kuzmin, B.V. Lyublin, S.S. Kozlovski, A.N. Mokeev. *Phys. Atom. Nucl.*, **80** (7), 1268 (2017). DOI: 10.1134/S1063778817070109
- [32] C. Archubi, C. Denton, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, F. Lovey, J. Valdes, C. Parra, F. Zappa, N.R. Arista. *Phys. Stat. Sol. B*, **241**, 2389 (2004). DOI: 10.1002/pssb.200304862
- [33] J.P. Biersack, E. Steinbauer, P. Bauer. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **61**, 77 (1991). DOI: 10.1016/0168-583X(91)95564-T