

УДК 533.924

ОЦЕНКА ВЕРОЯТНОСТИ ВЫЖИВАНИЯ ИОНОВ ГЕЛИЯ ПРИ ОТРАЖЕНИИ ОТ ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ КОДА БИНАРНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

© 2020 г. Н. В. Мамедов¹, *, И. М. Мамедов¹

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

*E-mail: NVMamedov@mephi.ru

Поступила в редакцию 09.01.2020 г.

После доработки 07.02.2020 г.

Принята к публикации 26.02.2020 г.

Описан простой метод оценки вероятности выживания ионов гелия He^+ , отраженных от поверхности различных металлов, с помощью моделирования в кодах бинарных столкновений (SCATTER и TRIM). По энергетическим спектрам отраженных частиц гелия оценена вероятность выживания ионов гелия при отражении, как отношение площадей полученных спектров. Рассчитаны зависимости вероятности выживания ионов He^+ , отраженных от Cu, Al, от обратной перпендикулярной скорости и выполнена оценка характерной скорости перехода электрона из металла на налетающий ион.

DOI: 10.31857/S0367676520060174

ВВЕДЕНИЕ

Спектроскопия ионного рассеяния низких энергий (1–10 кэВ) является широко распространенным методом анализа поверхности [1, 2]. По узким пикам в энергетических спектрах рассеянных ионов инертных газов и ионов отдачи можно определить состав самого поверхностного слоя [3] в отличие от широких куполообразных спектров отраженных ионов водорода, образующихся из-за их глубокого проникновения в мишень [4, 5]. Основным преимуществом анализа поверхности с помощью ионов инертных газов является высокая чувствительность к первому слою атомов на поверхности. Это обусловлено малой начальной энергией ионов (благодаря чему их пробег в веществе мал) и высокой вероятностью нейтрализации отраженных ионов, которая увеличивается с глубиной проникновения налетающей частицы в твердое тело [3]. Однако для количественного анализа поверхности крайне важно определить вероятность нейтрализации (вероятность выживания иона), поскольку в данном методе обычно детектируются отраженные ионы [3, 6, 7].

В данной работе представлен простой метод оценки вероятности выживания ионов гелия He^+ , отраженных от поверхности различных металлов, с помощью моделирования в кодах SCATTER [8] и TRIM [9].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ОТРАЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НЕ ОТ ТОНКИХ СЛОЕВ

При проникновении налетающего иона низкой энергии в глубину материала вероятность его рассеяния в виде иона существенно падает. Частицы, отражающиеся от поверхностного слоя в результате однократного соударения, практически не теряют энергии и характеризуются наличием узкого пика в энергетическом спектре. При выходе из более глубоких слоев энергетический спектр уширяется, а максимум сдвигается в низкоэнергетическую область. В кодах TRIM и SCATTER моделировали энергетические спектры отраженных частиц He от тонких слоев различных материалов. Компьютерный расчет проводили, начиная с одного слоя с постепенным увеличением толщины образца на один атомный слой, до тех пор, пока промоделированные спектры не совпадали (положение максимума спектра, ширина на полувысоте спектра, форма спектра), с экспериментально измеренными в работах [10–14]. Например, на рисунке 1 представлены экспериментальные данные и результаты подобного моделирования (рис. 2а и 2б) для случая облучения ионами He^+ с энергией 1 кэВ при их падении по нормали ($\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 129^\circ$ [10]) на поверхность золота. Как видно, наилучшее совпадение данных наблюдается при толщине золота в один атомный слой ($\sim 3 \text{ \AA}$). Тем самым можно предположить, что

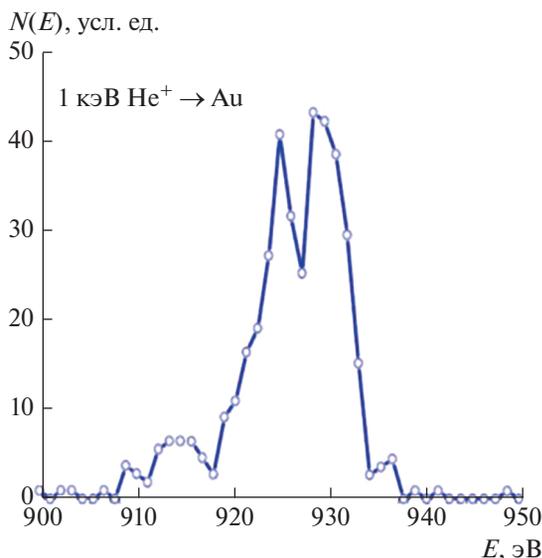


Рис. 1. Экспериментально измеренный энергетический спектр ионов He^+ (1 кэВ), отраженных от поликристаллического золота (перпендикулярное падение, $\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 129^\circ$) [10].

все частицы отраженные от такого слоя, вылетели в виде ионов, а те частицы, что пролетели “насквозь” попадут в “объем материала” и вылетят оттуда в виде нейтралов.

При однократном рассеянии на угол 129° энергия отраженного иона составляет 930.1 эВ при потенциале взаимодействия Кг–С, используемом в коде Scatter [8]. Если же частица отразилась на этот угол в результате 2 последовательных соударений с близко расположенными на поверхности атомами золота, то ее энергия увеличивается. При рассеянии сначала на 90° , а потом еще на 39° от второго атома, энергия рассеянной части-

цы (без учета неупругой составляющей потери при однократном соударении) составляет 950 эВ.

Более низкоэнергетичный пик отраженных ионов, по-видимому, связан с той частью ионов, которые испытали неупругое рассеяние и потеряли дополнительную энергию за счет неупругого однократного соударения. Наличие рассеянных частиц в полном по зарядовым состояниям спектре с энергиями выше 930 эВ, и отсутствие в этом диапазоне энергий отраженных ионов, свидетельствуют о дополнительной нейтрализации рассеивающихся частиц в электронах мишени. Наличие пика при кинетическом моделировании в диапазоне 900–910 эВ – ниже энергии однократного отражения может быть также связано с большей длиной пути в электронных облаках при последовательных двукратных соударениях с атомами мишени, расположенными дальше других от выбранного. Отсутствие подобного пика при моделировании с помощью кода SCATTER, возможно, связано с несколько отличным способом учета неупругого торможения. В спектре отраженных ионов интенсивность такого пика должна быть сильно подавлена, что мы и наблюдаем при сравнении экспериментального и расчетного спектров. Поэтому в качестве ионной фракции отраженных ионов гелия следует рассматривать пики в диапазоне 920–930 эВ, а остальные даже для “однослойной” мишени не учитывать, что приведет к примерно двукратно уменьшению оценки количества частиц, отраженных в виде ионов при использовании кода TRIM. Аналогичным образом были промоделированы энергетические спектры при отражении гелия от Cu, Al (см. рис. 3), и проведено сравнение с экспериментальными данными [10–15]. Следует отметить, что ни в экспериментах по отражению ионов, ни при кинетическом моделировании с помощью кода

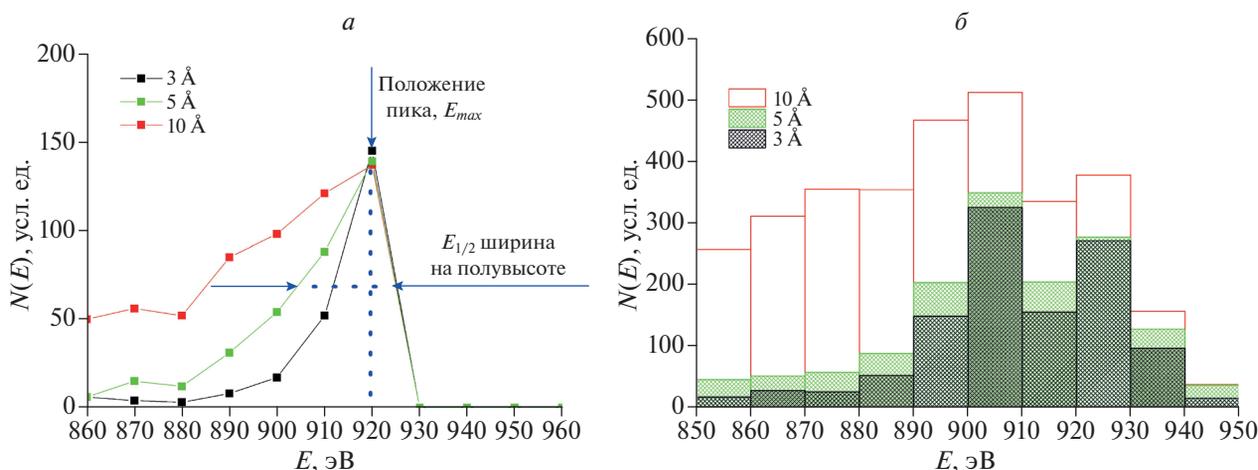


Рис. 2. Энергетические спектры отраженных частиц для различных толщин золота (3, 5, 10 Å) для того же случая, что и на рис. 1. Расчет в кодах TRIM (а) и Scatter (б).

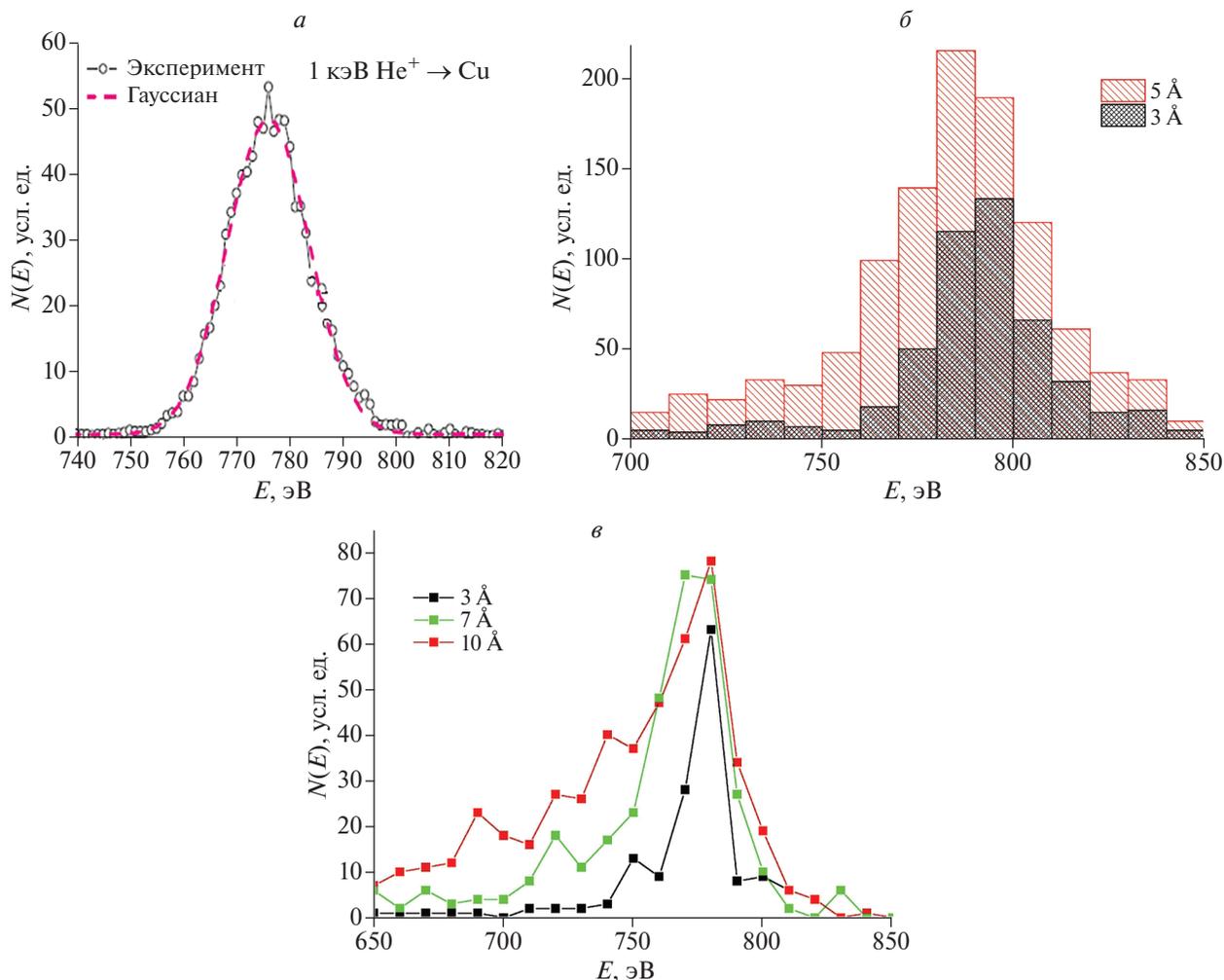


Рис. 3. Экспериментально измеренный энергетический спектр ионов He^+ (1 кэВ), отраженных от меди (при перпендикулярном угле падения $\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 129^\circ$) [11] (а). Энергетические спектры отраженных частиц для различных толщин золота (3, 5, 10 Å) для того же случая (б, в).

TRIM отражения от поверхностного слоя мишени, двухпиковая структура не наблюдалась.

ОЦЕНКА ВЕРОЯТНОСТИ ВЫЖИВАНИЯ ИОНОВ ГЕЛИЯ ПРИ ОТРАЖЕНИИ ОТ ПОВЕРХНОСТИ

На рисунке 5 показаны экспериментальные энергетические спектры отраженных ионов и нейтралов гелия He (1 кэВ) от поликристаллического золота [8], которые качественно сравниваются с энергетическими спектрами, промоделированными в кодах TRIM (рис. 6а) и SCATTER (рис. 6б). Предполагалось, что все отраженные частицы гелия от слоя золота толщиной 3 Å являются заряженными, а от слоя 1000 Å (заведомо большего полного пробега падающих частиц в мишени) — суммой нейтральных и заряженных частиц.

Вероятность выживания ионов гелия при отражении от мишеней можно попытаться оценить как отношение части площадей спектров, отраженных от тонкого поверхностного слоя (3 Å) и от “массивной мишени” толщиной 1000 Å: (см. рис. 4): $P^+ = N^+ / (N^+ + N^0) \approx S_{\text{surface}} / S_{\text{volume}}$, где N^+ — число ионов отраженных в данный угол рассеяния, N^0 — число нейтралов, отраженных в данный угол рассеяния, S_{surface} — площадь под спектром частиц, отраженных от поверхности, S_{volume} — площадь под спектром частиц, отраженных из всего объема. Соотношение площадей зависит от эффективной глубины проникновения ионов в образец, т.е. от величины, которая сама является функцией скорости иона и угла падения. Однако при перпендикулярном падении ионов с энергией несколько кэВ в первом приближении можно считать, что соотношение площадей слабо зависит от глубины проникновения ионов.

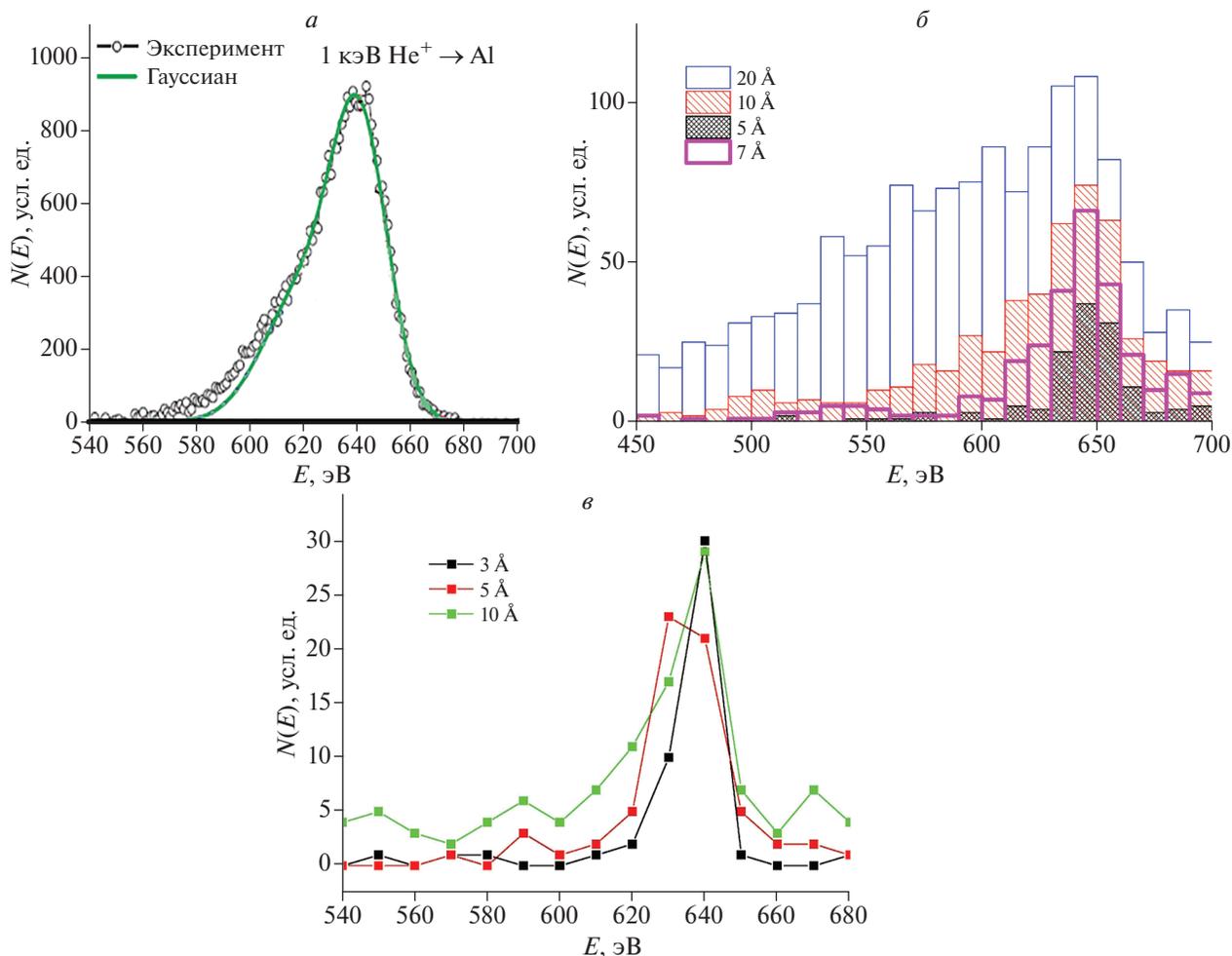


Рис. 4. Экспериментально измеренный энергетический спектр ионов He^+ (1 кэВ), отраженных от алюминия (перпендикулярное падение, $\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 136^\circ$) [15] (а). Энергетические спектры отраженных частиц для различных толщин золота (3, 5, 10 Å) для того же случая (б, в).

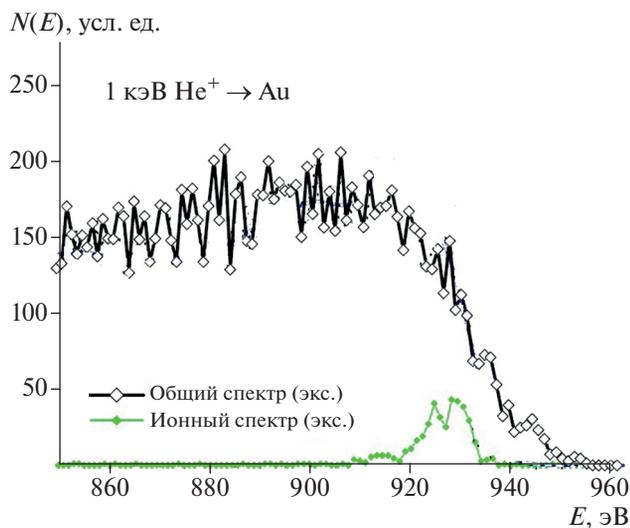


Рис. 5. Экспериментальный энергетический спектр отраженных ионов и нейтралов гелия He (1 кэВ) от поликристаллического золота (перпендикулярное падение, $\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 129^\circ$) [10].

Аналогичным образом оценена вероятность выживания ионов He по промоделированным энергетическим спектрам при отражении гелия от Cu , Al . Результаты оценки вероятности вылета частицы с поверхности в заряженном состоянии по описанной выше методике показаны в табл. 1.

Значения, полученные в кодах TRIM и SCATTER, совпали с точностью до погрешности. Величину погрешности определяли из разности ширин на полувысоте энергетических спектров для близких по толщине отражающих ионы слоев. Оцененная подобным образом ионная фракция для алюминиевой мишени хорошо совпала с экспериментальными результатами, а для меди расчеты дали примерно в 3 раза меньшее значение.

Как указано в работе [3], нейтрализация в диапазоне низких энергий (до 10 кэВ) происходит в результате Оже-процесса, поскольку энергия ионизации гелия составляет 24 эВ, что ниже дна зоны проводимости для многих металлов. Тем не менее, не вдаваясь в природу процесса нейтрали-

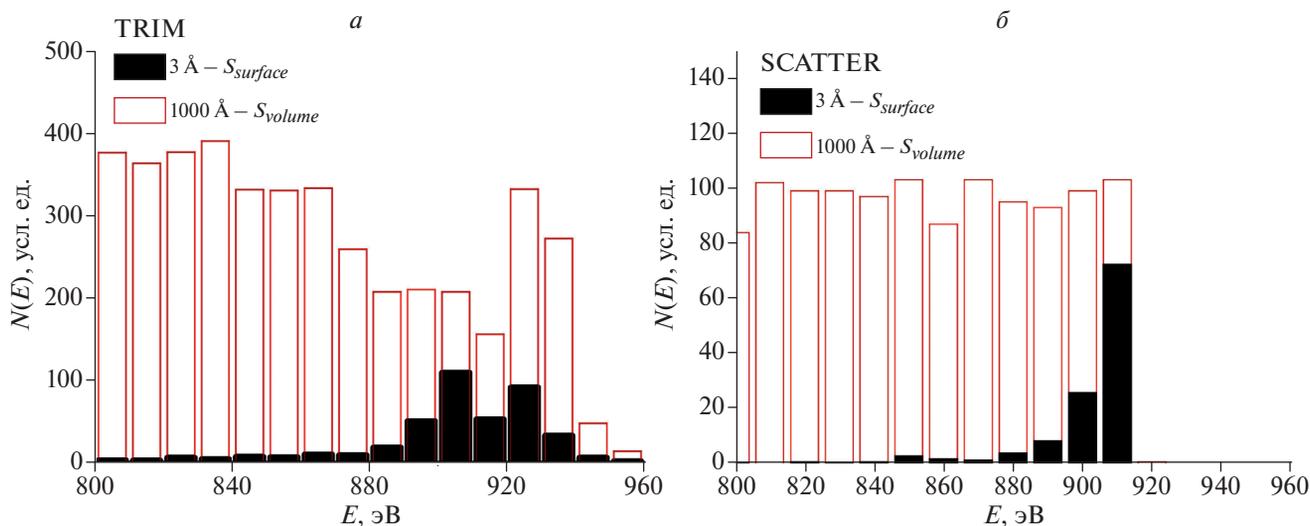


Рис. 6. Энергетические спектры He (1 кэВ), полученные с помощью моделирования для различных толщин (3 и 1000 Å) поликристаллического золота (перпендикулярное падение, $\alpha = 0^\circ$, угол рассеяния $\theta = 129^\circ$) в кодах TRIM (а) и Scatter (б).

зации (резонансная или Оже), будем считать, что вероятность электронного перехода пропорциональна времени, проведенному ионом вблизи поверхности [13]. Обратный переход электрона с атомной частицы на поверхность не рассматривается. Согласно [3, 14] вероятность выживания иона определяется как: $P^+ \sim \exp\left(-\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{\tau(t)}\right) \sim \exp\left(\frac{v_c}{v_\perp}\right)$, где τ – характерное время перехода электрона из металла в налетающий ион He⁺, v_c – характерная скорость этого процесса (уникальное число для каждой комбинации налетающего иона и поверхности), v_\perp – проекция скорости налетающего иона на нормаль поверхности.

Полученные из моделирования значения P^+ , построенные в логарифмическом масштабе в зависимости от величины $1/v_\perp$ (рис. 7), совпали для Al с точностью до погрешности, а для Cu оказались в 3 раза меньше. При этом угловые коэффициенты наклона прямых, а именно значения скорости перехода v_c , в пределах погрешности совпа-

дают с экспериментально измеренными в работе [10]. Значения характерной скорости перехода электрона из металла на налетающий ион приведены в таблице 2.

Таким образом, предложен простой метод для оценки вероятности выживания ионов гелия при моделировании отражения гелия от поверхности в кодах SCATTER и TRIM. В рамках подхода предполагается, что все частицы, отраженные от такого слоя, вылетели в виде ионов, а те частицы, что пролетели “насквозь”, попадают в “объем материала” и вылетают оттуда в виде нейтралов. По энергетическим спектрам отраженных частиц гелия от слоя материала толщиной 3 Å (5 Å) (модель отраженных заряженных частиц) и 1000 Å (модель отраженных нейтралов и заряженных частиц) можно оценить вероятность выживания ионов гелия при отражении как отношение площадей полученных спектров.

Проведено моделирование для энергий ионов He в диапазоне 0.5–5 кэВ. Построены графики зависимости вероятности выживания ионов He

Таблица 1. Вероятность вылета частицы с поверхности в заряженном состоянии

| Литературный источник, частица → поверхность, энергия, угол падения, угол рассеяния | TRIM, % | SCATTER, % | Эксперимент, % |
|--|---------------|---------------|----------------|
| [10], He ⁺ → Au, $E_0 = 1$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$, $\theta = 129^\circ$ | 4.3 ± 0.7 | 6.1 ± 1.7 | – |
| [11, 14], He ⁺ → Cu, $E_0 = 2$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$, $\theta = 136^\circ$ | 6.4 ± 1.1 | 6.6 ± 1.5 | ~22% |
| [12, 14], He ⁺ → Al, $E_0 = 3$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$, $\theta = 142^\circ$ | 9.3 ± 2 | 6.9 ± 2.5 | ~6% |
| [15, 14], He ⁺ → Al, $E_0 = 1$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$, $\theta = 136^\circ$ | 4.2 ± 1.5 | 3.5 ± 1.5 | ~3% |
| [13, 14], He ⁺ → Cu, $E_0 = 1$ кэВ, $\alpha = 0^\circ$, $\theta = 136^\circ$ | 5.3 ± 1.1 | 4.3 ± 1.5 | ~12% |

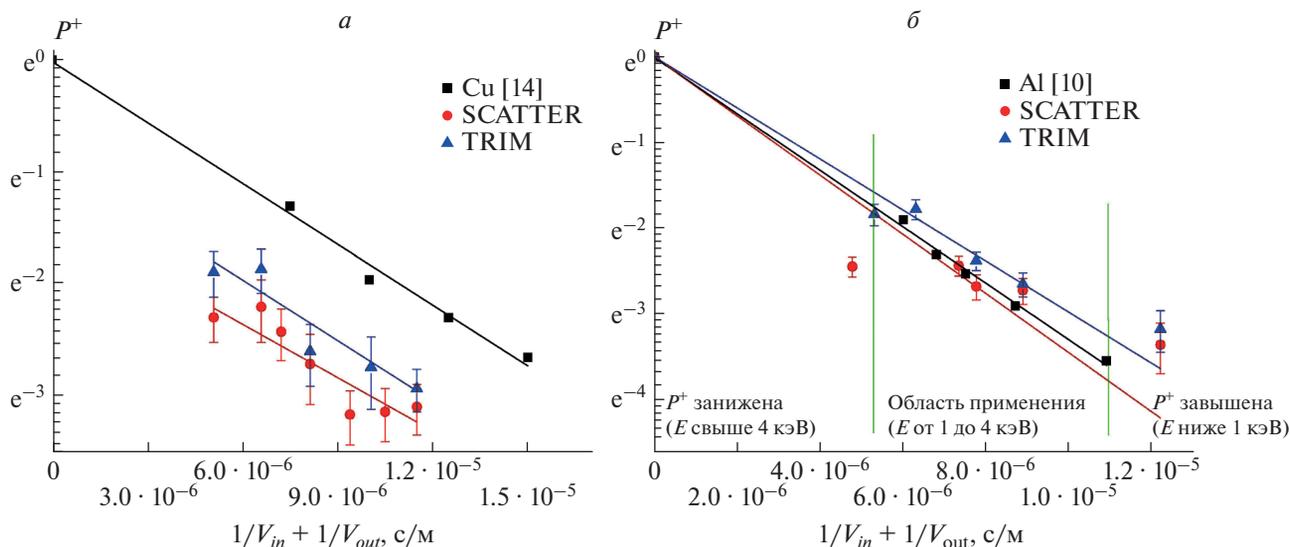


Рис. 7. Полулогарифмический график зависимости вероятности выживания ионов He, отраженных от Cu (а) и Al (б), от обратной перпендикулярной скорости. Экспериментальные данные из [10, 14].

отраженных от Cu, Al от обратной перпендикулярной скорости в логарифмическом масштабе. Показано, что в диапазоне от $1.2 \cdot 10^{-5}$ с/м до $5.5 \cdot 10^{-6}$ с/м (1–4 кэВ) полученные из моделирования значения P^+ совпали с точностью до погрешности для Al и оказались в 3 раза меньше для Cu. При этом углы наклона прямых (значения скорости перехода в Оже процессе v_c) в пределах погрешности для данного диапазона скоростей совпадают с экспериментально полученными в работе [10]. Линейная зависимость логарифма вероятности выживания подтверждает правильность предложенного подхода.

При энергиях ниже 1 кэВ из-за малой глубины проникновения все частицы отражаются от первых атомных слоев, таким образом, значение P^+ получается завышенным. При больших энергиях (свыше 5 кэВ) частицы пролетают первые слои и таким образом количество обратно отраженных частиц падает и значение P^+ , определенное данным методом, сильно занижено.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено моделирование энергетических спектров ионов He, отраженных от тонких слоев различных материалов (Au, Cu, Al). Полученные спектры сравнены с экспериментальными энергетическими спектрами ионов He [10–15]. Найдены толщины пленок и флуктуации (погрешности) толщины, при которых промоделированные спектры совпадают с экспериментальными (положение максимума спектра E_{max} , ширина на полувысоте спектра $E_{1/2}$, форма спектра). Промоделированные спектры соответствуют узким спектрам однократного рассеяния. По энергетическим спектрам отраженных частиц гелия оценена вероятность выживания ионов гелия при отражении, как отношение площадей полученных спектров. Полученные углы наклона прямых, а именно значения характерной скорости перехода электрона в Оже-процессе, в пределах погрешности совпадают с экспериментально полученными в работе [14]. При энергиях ниже 1 кэВ из-за малой глубины проникновения все частицы и так отражаются от первых атомных

Таблица 2. Значения характерной скорости перехода электрона из металла на налетающий ион [10]

| Металл | Al | | Cu | |
|---|---------------|---------------|---------------|---------------|
| Значение $v_c/10^5$ м/с из эксперимента | 3.3 | | 1.9 | |
| Расчетные значения $v_c/10^5$ м/с | 3.5 ± 0.3 | 3.0 ± 1.2 | 1.8 ± 0.3 | 1.6 ± 0.3 |
| Код | TRIM | SCATTER | TRIM | SCATTER |

слоев и значение P^+ получается завышенным. При энергиях выше 5 кэВ частицы пролетают первые слои, что дает заниженное значение вероятности выживания иона.

Авторы благодарят д.ф.-м.н., профессора В.А. Курнаева (зав. кафедрой “Физика плазмы” МИФИ, Москва) и к.ф.-м.н., доцента И.К. Гайнуллина (МГУ, Москва) за ценные советы при обсуждении полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Boerma D.O.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2001. V. 183. P. 73.
2. *Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. 192 с.
3. *Brongersma H.H., Draxler M., Ridder M., Bauer P.* // Surf. Sci. Rep. 2007. V. 62. P. 63.
4. *Bulgadaryan D., Sinelnikov D., Kurnaev V. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2018. V. 434. P. 9.
5. *Bulgadaryan D., Sinelnikov D., Kurnaev V. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2019. V. 438. P. 54.
6. *Goebel D., Bruckner B., Roth D. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2015. V. 354. P. 3.
7. *Gainullin I.K.* // Surf. Sci. 2018. V. 677. P. 324.
8. *Трифонов Н.Н.* Взаимодействие ионов водорода термоядерных энергий с тонкими слоями вещества. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Москва: МИФИ, 2002.
9. <http://www.srim.org>.
10. *Draxler M., Zeppenfeld P., Beikler R. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2005. V. 232. P. 266.
11. *Markin S.N., Primetzhofner D., Bauer P.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2009. V. 267. P. 634.
12. *Brongersma H.H., Jacobs J.P.* // Appl. Surf. Sci. 1994. V. 75. P. 133.
13. *Draxler M., Valdés J. E., Beikler R. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2005. V. 230. P. 290.
14. *Sasaki M., Scanlon P.J., Ermolov S., Brongersma H.H.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2002. V. 190. P. 127.
15. *Rund S., Primetzhofner D., Markin S.N. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2011. V. 269. P. 1171.
16. *Woodruff D.P., Delchar T.A.* Modern techniques of surface science. Cambridge Univ. Press, 1986.
17. *Winter H.* // Phys. Rep. 2002. V. 367. P. 387.