УДК 539.1.01

## РАСЧЕТ ОТРАЖЕНИЯ ИОНОВ ОТ ТВЕРДЫХ ТЕЛ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕОРИЯ

© 2019 г. А. И. Толмачев<sup>1,</sup> \*, Л. Форлано<sup>2,</sup> \*\*

<sup>1</sup>Российский новый университет, 105005 Москва, Россия <sup>2</sup>Университет Калабрии, 87036 Козенца, Италия \*E-mail: tolmachev.alex@rambler.ru \*\*E-mail: forlano@vegachess.com Поступила в редакцию 21.05.2018 г. После доработки 06.06.2018 г. Принята к публикации 06.06.2018 г.

Разработана программа компьютерного моделирования для исследования отражения ионов от поверхности твердого тела. Программа использует усеченный кулоновский потенциал, приближение парных столкновений и модель локальных неупругих потерь энергии. Для фиксированной комбинации ион—мишень коэффициент отражения вычисляется как функция энергии и угла падения ионов. Построена теория отражения для сечения рассеяния, зависящего от переданной энергии по степенному закону. Получено хорошее согласие результатов моделирования с экспериментом и теорией.

Ключевые слова: отражение ионов, коэффициент отражения, атомный потенциал, компьютерное моделирование, теоретический анализ.

DOI: 10.1134/S0207352819050196

#### введение

Исследования отражения заряженных частиц от поверхности твердого тела играют важную роль при конструировании термоядерных реакторов и при анализе поверхностных слоев вещества [1]. Теоретическое рассмотрение проблемы затруднено в связи с тем, что при движении в мишени энергия ионов уменьшается, и сечение рассеяния иона на атоме мишени меняется с кажлым новым столкновением. Основным методом исследования в настоящее время является компьютерное моделирование процесса отражения. Большинство известных компьютерных программ [2-5] используют сложные атомные потенциалы, содержащие большое число подгоночных параметров, зависящих от порядковых номеров и масс ионов и атомов мишени. Значения параметров определяют путем сравнения результатов моделирования и эксперимента.

В настоящей работе создана программа компьютерного моделирования PAOLA, использующая усеченный кулоновский потенциал. В этом случае все упругие столкновения ионов и атомов мишени описываются аналитическими формулами, численное интегрирование не требуется, время расчета уменьшается, и число пробных ионов может быть увеличено. Число подгоночных параметров уменьшено до трех. Алгоритм расчета аналогичен алгоритму, примененному в [6] для вычисления распределения отраженных ионов по пробегам в мишени.

#### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Решим следующую задачу. Ионы с энергией  $E_0$  падают на поверхность полубесконечной мишени, в которой они испытывают упругие столкновения с атомами, а также теряют энергию за счет неупругих процессов. В результате столкновений часть ионов возвращается к поверхности с некоторой энергией *E*. Если энергия *E* превышает высоту потенциального барьера  $E_{\min}$ , ион выходит из мишени и вносит вклад в коэффициент отражения. Если же энергия иона меньше  $E_{\min}$  либо у поверхности, либо в любой другой точке мишени, то этот ион выбывает из рассмотрения.

В случае усеченного кулоновского потенциала энергия взаимодействия двух зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  на расстоянии r друг от друга равна:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0}\right) \text{ при } r \le r_0,$$
(1)  
$$U(r) = 0 \text{ при } r \ge r_0,$$

где  $r_0$  — радиус отсечки, e — заряд электрона,  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная. Удобно ввести приведенную энергию:

$$\varepsilon = \frac{E}{E_{\rm at}}, \quad E_{\rm at} = \left(1 + \frac{M_1}{M_2}\right) \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0},\tag{2}$$

где  $Z_1, Z_2, M_1, M_2$  — атомные номера и атомные массы ионов и атомов мишени соответственно.

Алгоритм расчета основан на следующих уравнениях. Программа генерирует три случайных числа  $R_1, R_2, R_3$  в интервале от нуля до единицы. Эти числа определяют длину свободного пробега

$$\lambda = -\lambda_0 \ln R_1, \tag{3}$$

полярный угол рассеяния о в системе центра масс

$$\cos\omega = \frac{(1+2\eta)R_2 - \eta}{R_2 + \eta}$$
(4)

и азимутальный угол рассеяния

$$\psi = 2\pi R_3, \tag{5}$$

где  $\lambda_0$  — средняя длина свободного пробега,  $\eta = [4\epsilon (1 + \epsilon)]^{-1}$  — параметр экранирования. Угол рассеяния в лабораторной системе координат  $\Omega$ связан с углом  $\omega$  соотношением:

$$\cos\Omega = \frac{A + \cos\omega}{\sqrt{1 + 2A\cos\omega + A^2}},\tag{6}$$

 $A = M_1/M_2$  — отношение массы иона к массе атома мишени. Если полярный угол  $\theta_n$  определяет направление скорости иона до столкновения, а угол  $\theta_{n+1}$  — после столкновения, то из формул сферической геометрии получаем:

$$\cos\theta_{n+1} = \cos\theta_n \cos\Omega - \sin\theta_n \sin\Omega \cos\psi.$$
(7)

Из законов сохранения находим отношение энергии иона после столкновения  $E_{n+1}$  к его энергии  $E_n$  до столкновения [8]:

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \frac{1 + 2A\cos\omega + A^2}{(1+A)^2}.$$
 (8)

Уравнения (3)–(8) носят универсальный характер и справедливы как для легких ( $A \le 1$ ), так и для тяжелых ионов (A > 1). Следует подчеркнуть, что для атомного потенциала (1) угол рассеяния в уравнении (4) выражается в аналитическом виде. В случае сложных атомных потенциалов, используемых в программах MARLOWE, TRIM, OKSANA и других [2–5], угол рассеяния определяется путем численного интегрирования, что влияет на точность результатов и увеличивает время расчета.

Программа PAOLA использует три параметра. Первым параметром является высота потенциального барьера  $E_{\min}$ . Второй параметр – отношение радиуса отсечки к боровскому радиусу,  $C = r_0/r_B$ . Третьим параметром является число D < 1, отвечающее за неупругие потери энергии. Предположим, что неупругие потери локальны и пропорциональны энергии. Это означает, что если после некоторого столкновения энергия иона приобретает значение *E*, то за счет неупругих процессов она немедленно уменьшается на дополнительную величину  $\Delta E = DE$ .

На рис. 1 и 2 результаты моделирования сопоставляются с экспериментальными данными [7]. Рис. 1 показывает энергетическую зависимость коэффициента отражения частиц R<sub>N</sub> для ионов дейтерия и гелия, бомбардирующих мишень из нержавеющей стали. Значения параметров оказались равными: C = 0.70, D = 0.40, для дейтерия иC = 0.66, D = 0.50 для гелия. В обоих случаях высота потенциального барьера составляла  $E_{\min} = 3 \Im B$ . На рис. 2 изображена зависимость коэффициента отражения энергии R<sub>E</sub> от угла падения ионов гелия с энергией 5 кэВ на мишени из золота и титана. Моделирование хорошо согласуется с экспериментом и позволяет экстраполировать экспериментальные данные на более широкий диапазон значений энергии и углов.

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Закон рассеяния (4) не может быть использован для построения теории отражения, так как угол рассеяния зависит от энергии и меняется при движении иона в мишени. По этой причине обычно используют сечение рассеяния, зависящее от переданной энергии по степенному закону: вероятность образования атома отдачи с энергией от T до T + dT для иона с энергией E равна:

$$K(E,T)dT = \frac{nT^{n-1}dT}{(\gamma E)^n}, \quad \gamma = \frac{4A}{(1+A)^2}.$$
 (9)

Если допустить, что показатель степени *n* зависит от начальной энергии  $E_0$ , но не зависит от текущей энергии *E*, то формулу (9) можно использовать для построения теории. При *n* = 1 уравнение (9) описывает рассеяние в поле потенциала твердых сфер, а при  $n \ll 1$  – в кулоновском поле.

Функция распределения ионов в мишени  $f(x,\mu,u)$  зависит от глубины x, выраженной в единицах длины свободного пробега, косинуса  $\mu$  угла между скоростью иона и внутренней нормалью к поверхности и относительной энергии иона  $u = E/E_0$ . Уравнение переноса, усредненное по азимутальному углу, имеет вид [9]:



**Рис. 1.** Результаты моделирования энергетической зависимости коэффициента отражения частиц  $R_N$  для комбинаций гелий—железо (*1*) и дейтерий—железо (*2*). Маркеры— экспериментальные данные [7].

$$\mu \frac{\partial f(x,\mu,u)}{\partial x} + f(x,\mu,u) =$$

$$= \int_{-1}^{1} d\mu' \int_{0}^{2\pi} f\left(x,\mu',\frac{u}{\Delta}\right) \sigma\left(\cos\Omega\right) \frac{d\varphi'}{2\pi},$$
(10)

где  $\sigma(\cos\Omega)$  — дифференциальное сечение рассеяния (9), пересчитанное на угол рассеяния в лабораторной системе координат.

Первое слагаемое в уравнении (10) описывает изменение потока ионов при их движении между столкновениями. Второе и третье слагаемые представляют собой интеграл столкновений – число частиц, покидающих состояние ( $\mu$ ,u), и число частиц, приходящих в состояние ( $\mu$ ,u) из состояния ( $\mu$ ',u'). Угол рассеяния  $\Omega$  определяется уравнением:

$$\cos\Omega = \mu\mu' + \sqrt{1 - \mu^2} \sqrt{1 - {\mu'}^2} \cos(\varphi - \varphi'),$$
 (11)



**Рис. 2.** Результаты моделирования угловой зависимости коэффициента отражения энергии *R<sub>E</sub>* для комбинаций гелий—золото (*1*) и гелий—титан (*2*). Маркеры экспериментальные данные [7]. Энергия ионов 5 кэВ.

 $\phi$  и  $\phi'$  – азимутальные углы,  $\Delta$  обозначает отношение энергии иона после столкновения к его энергии до столкновения:

$$\Delta(\cos\Omega) = \left(\frac{A\cos\Omega + \sqrt{1 - A^2\sin^2\Omega}}{1 + A}\right)^2.$$
 (12)

В результате преобразования Меллина по энергетической переменной

$$F(x,\mu) = \int_{0}^{1} u^{s-1} f(x,\mu,u) du$$
 (13)

уравнение (10) принимает вид:

$$\mu \frac{\partial F(x,\mu)}{\partial x} + F(x,\mu) = \int_{-1}^{1} p(\mu,\mu')F(x,\mu')d\mu', \quad (14)$$

где угловая функция

$$p(\mu,\mu') = \int_{0}^{2\pi} \Delta^{s}(\cos\Omega) \sigma(\cos\Omega) \frac{d\phi}{2\pi}$$
(15)

ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ № 5 2019

**Таблица 1.** Потенциал твердых сфер (коэффициенты отражения частиц  $R_N$ , полученные при моделировании и по теоретическим формулам для различных значений энергии и отношений масс ионов и атомов мишени)

$E_0$	$M_1/M_2 = 0.1$		$M_1/M_2 = 0.5$		$M_1/M_2 = 1.0$	
E <sub>min</sub>	PAOLA	теория	PAOLA	теория	PAOLA	теория
10 <sup>1</sup>	0.5591	0.5594	0.1766	0.1767	0.0047	0.0047
$10^{2}$	0.6740	0.6759	0.3389	0.3388	0.0719	0.0719
10 <sup>3</sup>	0.7295	0.7295	0.4293	0.4297	0.1564	0.1564
$10^{4}$	0.7639	0.7654	0.4906	0.4903	0.2264	0.2264
10 <sup>5</sup>	0.7878	0.7871	0.5356	0.5355	0.2825	0.2825
106	0.8056	0.8063	0.5705	0.5712	0.3283	0.3283
107	0.8196	0.8165	0.5985	0.5988	0.3665	0.3666

представляет собой сечение рассеяния, взятое с

весом  $\Delta^s$  и усредненное по азимутальному углу. Уравнение (14) решается при граничном условии, описывающем падение ионов на поверхность мишени под углом  $\theta_0$ :

$$F(0,\mu) = \delta(\mu - \mu_0) / \mu_0, \qquad (16)$$

где  $\mu_0 = \cos \theta_0$ ,  $\delta$  – дельта-функция.

Чандрасекар показал [10], что решение транспортной задачи в виде уравнения (14) и граничного условия (16) равносильно решению системы интегральных уравнений для функции отражения  $R(\mu,\mu_0)$ :

$$S_{1}(\mu,\mu_{0}) = p(\mu,-\mu_{0}) + \mu_{0} \int_{0}^{1} p(\mu,+\mu') R(\mu',\mu_{0}) d\mu', (17)$$

$$S_{2}(\mu,\mu_{0}) = p(\mu,+\mu_{0}) + \mu_{0} \int_{0}^{1} p(\mu,-\mu')R(\mu',\mu_{0})d\mu', (18)$$

$$(\mu + \mu_0) R(\mu, \mu_0) = S_1(\mu, \mu_0) + + \mu \int_0^1 S_2(\mu, \mu') R(\mu', \mu_0) d\mu'.$$
(19)

Уравнения (17) и (18) описывают источники частиц, движущихся в отрицательном и положительном направлениях. Уравнение (19) выражает принцип инвариантности.

Была решена система уравнений (17)—(19) методом последовательных приближений [11], выполнено обратное преобразование Меллина, и получено энергетическое распределение отраженных ионов. Интегрирование в пределах от  $E_{\rm min}$  до  $E_0$  дало коэффициент отражения  $R_N$ , зависящий только от отношения  $E_0/E_{\rm min}$ . В табл. 1 результаты теории сравниваются с результатами моделирования для различных значений энергии

и масс ионов в частном случае n = 1. При изменении энергии в  $10^6$  раз максимальное расхождение не превысило 0.4%. Аналогичное совпадение наблюдалось и для других показателей степени n.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Создана программа компьютерного моделирования для расчета зависимости коэффициента отражения от энергии и угла падения ионов на поверхность твердого тела. Программа использует три параметра: энергию отсечки, параметр упругих столкновений и параметр неупругих потерь энергии. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными для зависимостей коэффициента отражения частиц  $R_N$  от энергии и коэффициента отражения энергии  $R_E$  от угла падения ионов.

Для проверки корректности алгоритма построена теория отражения для сечения рассеяния, зависящего от переданной энергии по степенному закону. Теория основана на уравнении переноса, преобразованном в систему интегральных уравнений Чандрасекара. Расхождение между моделированием и теорией оказалось очень незначительным и вряд ли может быть уменьшено в рамках методики Монте-Карло. Результаты теории имеют самостоятельное значение, подтверждают правильность алгоритма, а также могут использоваться для тестирования других программ.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. 176 с.
- Robinson M.T., Torrens I.M. // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. № 12. P. 5008.
- 3. *Eckstein W.* Computer Simulation of Ion-Solid Interactions. Berlin: Springer, 1991. 296 p.
- Shulga V.I. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1999. V. 155. P. 382.
- 5. Самойлов В.Н., Носов Н.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 3. С. 81.
- 6. Толмачев А.И., Форлано Л. // ЖТФ. 2017. Т. 87. № 7. С. 973.
- 7. Mashkova E.S. // Rad. Effects. 1981. V. 54. P. 1.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: ФИЗ-МАТЛИТ, 2012. 224 с.
- Tolmachev A.I. // Nuclear Instrum. Methods Phys. Res. B. 1994. V. 93. P. 415.
- Chandrasekhar S. Radiative Transfer. Oxford: Clarendon Press, 1950. 393 p.
- 11. *Толмачев А.И., Форлано Л.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2017. № 11. С. 106.

# Calculation of Ion Backscattering from Solids: Computer Simulation and Theory

### A. I. Tolmachev, L. Forlano

A computer simulation program has been developed to study the ion reflection from solid surfaces. The program uses truncated Coulomb potential, binary collision approximation, and the model of local inelastic energy losses. For a known ion-target combination, the reflection coefficient is calculated as a function of ion energy and incidence angle. A reflection theory has been created for the scattering cross section depending on the transferred energy in accordance with the power law. A good agreement of the simulation results with experiment and theory has been obtained.

Keywords: ion backscattering, reflection coefficient, atomic potential, computer simulation, theoretical analysis.