

УДК 539.1.01

## ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОТРАЖЕННЫХ ИОНОВ ОТ ВИДА АТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА

© 2020 г. А. И. Толмачев<sup>а, \*</sup>, Л. Форлано<sup>б</sup>

<sup>а</sup>Российский новый университет, Москва, 105005 Россия

<sup>б</sup>Университет Калабрии, Козенца, 87036 Италия

\*e-mail: [tolmachev.alex@rambler.ru](mailto:tolmachev.alex@rambler.ru)

Поступила в редакцию 26.07.2019 г.

После доработки 12.08.2019 г.

Принята к публикации 12.08.2019 г.

Теоретически и методом компьютерного моделирования рассчитан низкоэнергетический спектр ионов, отраженных от поверхности твердого тела. Теория основана на численном решении уравнения переноса методом дискретных потоков, компьютерное моделирование – на модели парных столкновений и локальных неупругих потерь энергии. Показано, что при малых энергиях отраженных ионов их энергетическое распределение описывается универсальной формулой, содержащей единственную постоянную. Значение постоянной меняется незначительно при переходе от потенциала твердых сфер к кулоновскому потенциалу.

**Ключевые слова:** отражение ионов, энергетическое распределение, атомный потенциал, сечение рассеяния, теоретический анализ.

**DOI:** 10.31857/S1028096020050192

### ВВЕДЕНИЕ

Исследование отражения ионов от твердого тела имеет важное значение для получения информации о поверхностных слоях вещества. Основными характеристиками отраженных ионов являются коэффициент отражения по числу частиц  $R_N$ , коэффициент отражения энергии  $R_E$ , а также энергетическое распределение [1].

Значение коэффициента отражения определяется главным образом числом частиц, обладающих малыми энергиями. Энергетическое распределение отраженных ионов, проинтегрированное по всем углам вылета, при малых энергиях имеет вид:

$$R(E)dE = C \left( \ln \frac{E_0}{E} \right)^{-3/2} \frac{dE}{E}, \quad E \ll E_0, \quad (1)$$

где  $E_0$  и  $E$  – энергии бомбардирующих и отраженных ионов соответственно. Множитель  $1/E$  в уравнении (1) является результатом решения задачи в приближении бесконечной мишени. Дополнительный логарифмический множитель появляется после учета поверхности мишени. Коэффициент  $C$  зависит от отношения масс  $A = M_1/M_2$  иона и атома мишени, а также от вида атомного потенциала. Для случая степенного

атомного потенциала приближенные значения  $C$  были найдены в [2].

В настоящей работе получены точные зависимости коэффициента  $C$  от отношения  $A$  для различных видов потенциалов – от кулоновского до потенциала твердых сфер. Рассматривается случай легких ионов, при котором масса иона не превышает массы атома мишени,  $A \leq 1$ .

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

#### Сечение рассеяния

Для рассмотрения различных типов атомных потенциалов мы используем модельное дифференциальное сечение рассеяния, выраженное в виде функции угла рассеяния  $\omega$  в системе центра масс [3, 4]:

$$d\sigma = \frac{2\eta(1+\eta)\sin\omega d\omega}{(1+2\eta-\cos\omega)^2}. \quad (2)$$

Параметр экранирования  $\eta$  связан с нормированной энергией ионов  $\varepsilon$  соотношением [5]:

$$\eta = \frac{1}{4\varepsilon(1+\varepsilon)}, \quad \varepsilon = \frac{E_0}{E_{at}}. \quad (3)$$

Предельной случай больших параметров экранирования  $\eta \gg 1$  описывает рассеяние на потенциале твердых сфер, а предельный случай малых па-

раметров  $\eta \ll 1$  – резерфордовское рассеяние на кулоновском потенциале. Другие типы атомных потенциалов соответствуют промежуточным значениям параметра экранирования. Переход в уравнении (2) к лабораторной системе координат дает сечение рассеяния  $d\sigma$  для столкновений ионов и атомов мишени. Соответствующее отношение  $\Delta$  энергии иона после столкновения к его энергии до столкновения может быть найдено из кинематических уравнений.

### Уравнение переноса

Теоретический анализ основан на решении уравнения переноса для функции распределения рассеянных ионов  $f(x, \mu, u)$ . Функция распределения зависит от нормированной глубины мишени  $x$ , косинуса  $\mu$  угла между скоростью частицы и внутренней нормалью к поверхности мишени, а также от относительной энергии  $u = E/E_0$ .

Выполним преобразование Меллина по энергетической переменной:

$$F(x, \mu) = \int_0^1 u^s f(x, \mu, u) du, \quad (4)$$

и запишем уравнение переноса как

$$\mu \frac{\partial F(x, \mu)}{\partial x} + F(x, \mu) = \int_{-1}^1 p(\mu, \mu') F(x, \mu') d\mu', \quad (5)$$

где угловая функция

$$p(\mu, \mu') = \int_0^{2\pi} \Delta^s(\cos \Omega) \sigma(\cos \Omega) \frac{d\varphi}{2\pi} \quad (6)$$

представляет собой сечение рассеяния, взятое с весом  $\Delta^s$  и усредненное по азимутальному углу, появляющемуся в уравнении для угла рассеяния в лабораторной системе координат,

$$\cos \Omega = \mu\mu' + \sqrt{1-\mu^2}\sqrt{1-\mu'^2}\cos\varphi. \quad (7)$$

При положительных  $\mu$  функция распределения должна удовлетворять дельтаобразному граничному условию, указывающему угол падения ионов на мишень. В настоящей работе рассматривается случай нормального падения ионов. Необходимо подчеркнуть, что поведение энергетического распределения при малых энергиях отраженных ионов не требует выполнения обратного преобразования Меллина, а только исследования поведения функции  $F(0, -\mu, s)$  в окрестности точки  $s \approx 0$ .

### Решение уравнения переноса

Уравнение (5) представляет собой односкоростное транспортное уравнение с законом рассеяния, определяемым угловой функцией (6). Мы решили уравнение (5) методом дискретных потоков [6]. Интервал интегрирования по  $\mu'$  разбивался на  $N$  равных частей и рассматривались значения неизвестной функции распределения в  $N + 1$  дискретной точке. Для определения этих значений решение разлагалось в ряд экспоненциально убывающих по глубине мишени функций и решалась задача о собственных векторах квадратной матрицы. Коэффициенты разложения вычислялись из граничного условия при положительных  $\mu$  и затем подставлялись в решение для отрицательных  $\mu$ . В результате решения определяли коэффициент отражения как функция параметра  $s$ :

$$R_N(s) = \int_0^1 \mu F(0, -\mu, s) d\mu, \quad (8)$$

после чего постоянная  $C$  находилась из предельного перехода

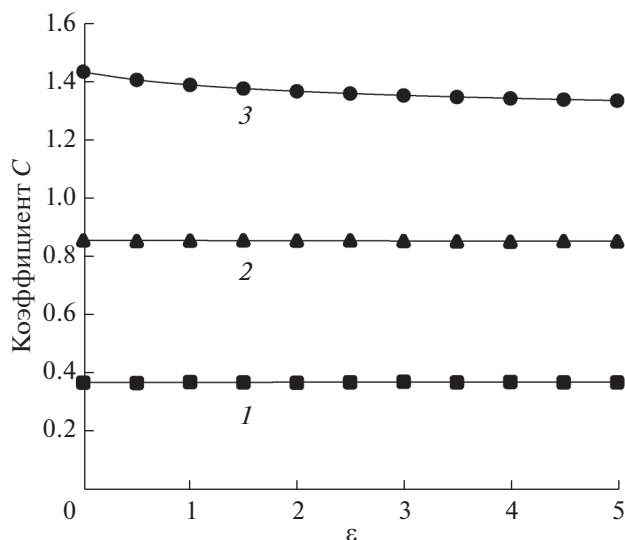
$$C = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{1 - R_N(s)}{2\sqrt{\pi s}}. \quad (9)$$

Сходимость метода контролировалась путем увеличения числа дискретных потоков до максимального значения  $N = 500$ . Корректность метода была проверена на тестовых задачах с известными аналитическими решениями, а также с помощью программы компьютерного моделирования PAOLA [7].

На рис. 1 представлена зависимость коэффициента  $C$  в уравнении (1) от отношения масс  $A$  и вида атомного потенциала. Из рисунка следует, что число низкоэнергетических отраженных ионов увеличивается с ростом отношения масс  $A$ , но практически не зависит от атомного потенциала. Последний результат важен для теории отражения. При движении ионов в мишени их энергия постоянно уменьшается, и сечение рассеяния меняется от столкновения к столкновению. Как следует из рис. 1, пренебрежение изменением сечения рассеяния вполне допустимо, и оно не приводит к большим погрешностям в окончательном решении.

### Учет неупругих потерь энергии

Неупругие потери энергии увеличивают число отраженных ионов с малыми энергиями, следовательно, увеличивают значение множителя  $C$ . В настоящей работе предполагалось, что неупругие потери являются локальными и пропорциональны энергии. Это означает, что в каждом упругом столкновении иона энергии  $E$  теряется дополнительная энергия, равная  $DE$ , где  $D$  – без-



**Рис. 1.** Изменение коэффициента  $C$  при переходе от потенциала твердых сфер (малые  $\varepsilon$ ) к кулоновскому потенциалу (большие  $\varepsilon$ ). Отношение масс:  $A = 0.1$  (кривая 1),  $A = 0.5$  (кривая 2) и  $A = 1.0$  (кривая 3). Сплошные линии – теория, маркеры – компьютерное моделирование по программе PAOLA.

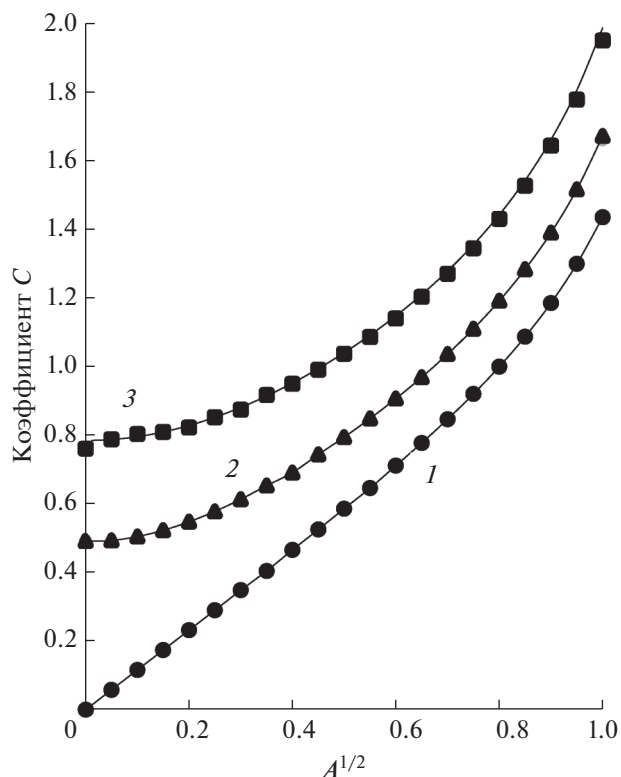
размерный параметр. Если неупругие потери отсутствуют, то  $D = 0$ .

На рис. 2 представлена зависимость коэффициента  $C$  от отношения масс  $A$  для потенциала твердых сфер при различных значениях параметра неупругих потерь. Как и следовало ожидать, неупругие потери энергии увеличивают число отраженных ионов с малыми энергиями. Кроме того, при учете неупругих потерь энергии значение коэффициента  $C$  для  $A = 0$  принимает конечное значение, отличное от нуля. Если же неупругие потери отсутствуют, то при малых  $A$  коэффициент  $C$  пропорционален  $A^{1/2}$ .

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически исследована низкоэнергетическая часть энергетического распределения ионов, отраженных от поверхности твердого тела, для различных законов взаимодействия ионов и атомов мишени. Показано, что число отраженных ионов малых энергий увеличивается с ростом массы ионов и меняется незначительно при переходе от взаимодействия по закону твердых тел к кулоновскому взаимодействию.

Неупругие потери энергии увеличивают число отраженных ионов в низкоэнергетической части спектра. В предельном случае очень малых масс ионов энергетическое распределение становится конечным.



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента  $C$  от отношения масс  $A$  для потенциала твердых сфер при различных значениях параметра неупругих потерь энергии:  $D = 0$  (неупругие потери отсутствуют, кривая 1),  $D = 0.3$  (кривая 2) и  $D = 0.6$  (кривая 3). Сплошные линии – теория, маркеры – компьютерное моделирование по программе PAOLA.

Результаты теории проверены с помощью программы компьютерного моделирования PAOLA. Расхождение между теорией и моделированием не превышает погрешности датчика случайных чисел.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. 176 с.
2. Waldeer K.T., Urbassek H.M. // Appl. Phys. A. 1988. V. 45. P. 207.
3. Leibfried G., Oen O.S. // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. № 7. P. 2257.
4. Eckstein W. Computer Simulation of Ion-Solid Interactions. Berlin: Springer, 1991. 296 p.
5. Толмачев А.И., Форлано Л. // Поверхность. Рентген, синхротрон и нейтрон. исслед. 2019. № 5. С. 108.
6. Толмачев А.И. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1990. Т. 54. № 7. С. 1247.
7. Толмачев А.И., Форлано Л. // ЖТФ. 2018. Т. 88. № 10. С. 1502.

## Dependence of the Energy Distribution of Backscattered Ions on the Type of Atomic Potential

A. I. Tolmachev<sup>1,\*</sup>, L. Forlano<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Russian New University, Moscow, 105005 Russia*

<sup>2</sup>*University of Calabria, Cosenza, Rende, City of Cosenza, 87036 Corso Italia*

*\*e-mail: tolmachev.alex@rambler.ru*

We calculated the low energy spectrum of the ions backscattered from a solid theoretically and by computer simulation method. The theory is based on the numerical solution of the transport equation by the method of discrete streams, and the computer simulation uses binary collision approximation and the model of local inelastic energy losses. We showed that the low energy part of energy distribution satisfies the universal formula with the only constant. The value of the constant varies weakly with transition from the hard-core potential to the Coulomb potential.

**Keywords:** ion backscattering, energy distribution, atomic potential, scattering cross section, theoretical analysis.