

УДК 537:534

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ДЕЙТЕРИЯ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ ПРИ ОТРАЖЕНИИ ОТ ДВУХСЛОЙНОЙ МИШЕНИ

© 2022 г. В. И. Шульга*

Институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

**e-mail: vish008@yandex.ru*

Поступила в редакцию 12.01.2022 г.

После доработки 18.02.2022 г.

Принята к публикации 18.02.2022 г.

Методом компьютерного моделирования исследовано влияние электронного торможения на энергетические спектры отраженных ионов при облучении двухслойной мишени Ag/Si ионами дейтерия с энергией 1.5 и 5 кэВ. В расчетах использовались различные зависимости $S_e(E)$, где S_e – сечение электронного торможения в серебре (кремнии) и E – энергия частиц. Для пары D–Ag наилучшее согласие с экспериментом дали результаты, полученные методом отражения с помощью компьютерной программы TRBS. Показано, что зависимость $S_e(E)$, генерируемая программой SRIM-2013, существенно завышает торможение изотопов водорода в серебре в области низких энергий. В этой области энергий форма энергетического спектра зависит от использованного в расчете межатомного потенциала. Хорошее согласие с экспериментом получено, в частности, для потенциала Томаса–Ферми–Мольера с длиной экранирования Линдхарда.

Ключевые слова: ионная бомбардировка, рассеяние, сечение электронного торможения, изотопы водорода, дейтерий, серебро, компьютерное моделирование.

DOI: 10.31857/S1028096022080155

ВВЕДЕНИЕ

Изучение закономерностей рассеяния легких ионов поверхностями твердых тел представляет большой интерес как с точки зрения анализа состава и структуры поверхностей, так и в исследованиях по управляемому термоядерному синтезу [1–4]. Для анализа поверхности методами ионного рассеяния необходимы данные о торможении частиц в веществе в области низких энергий. Такие данные чаще всего получают из энергетических спектров частиц, прошедших через тонкие пленки или отраженных от поверхности массивной мишени. Замечено, что сечения электронного торможения S_e , найденные в геометрии прямого и обратного рассеяния, не всегда согласуются друг с другом. Например, в случае торможения изотопов водорода в серебре значения S_e , найденные при отражении частиц от поверхности [5], оказались в 2–2.5 раза ниже тех, что были получены ранее из спектров частиц, прошедших через тонкие пленки [6].

При анализе причин расхождения отмечалось, прежде всего, качество мишени, используемой в экспериментах: ее однородность и кристалличность, шероховатость поверхности, наличие примесей, имплантированных атомов, важная роль угла захвата детектора и др. [6, 7]. В геометрии обратного рассеяния для получения значений S_e из экспериментальных спектров часто применяют-

ся компьютерное моделирование, причем особенности компьютерной программы также могут влиять на результаты. Отмечалось, в частности, что результаты моделирования могут зависеть от способа расчета траекторий частиц в мишени и от используемых межатомных потенциалов. Они зависят также от того, учитывается в расчетах или не учитывается зависимость $T(p)$, где T – неупругие потери энергии в элементарном столкновении и p – прицельный параметр столкновения [8, 9].

В работе методом компьютерного моделирования проведен расчет отражения ионов дейтерия с энергией 1.5 и 5 кэВ от двухслойной мишени Ag(21 нм)/Si, что отвечает условиям эксперимента [5].

В цели работы входило: получить спектры отраженных частиц на основе зависимостей $S_e(E)$, предложенных другими авторами; сопоставить результаты расчетов с экспериментальными данными. Для сравнения часть расчетов проведена с учетом зависимости $T(p)$, а также с использованием различных межатомных потенциалов.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Расчеты выполнены с помощью программы OKSANA, первый вариант которой был разработан в середине 1980-х гг. [10]. Программа предна-

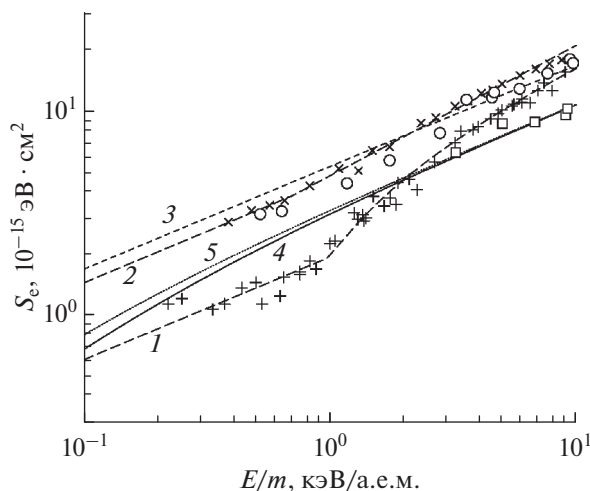


Рис. 1. Энергетические зависимости сечения электронного торможения изотопов водорода в серебре (m – масса изотопа). Экспериментальные данные: + [5], × [6], ○ [19], □ [20]. Кривые 1 и 2 аппроксимируют результаты работ [5] и [6], кривая 3 – SRIM [21]. Кривые 4 и 5 рассчитаны с использованием уравнения (1) для изотопов H и D соответственно.

значена для расчета распыления кристаллических и неупорядоченных (аморфных) мишеней при ионной бомбардировке. Моделирование траекторий частиц в мишени ведется в приближении парных столкновений с учетом слабых взаимодействий в одновременных соударениях. Классическое рассеяние в столкновениях частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом. Расчеты углов рассеяния и отдачи и других характеристик парного столкновения ведутся методом молекулярной динамики, не прибегая к расчету углового и временного интегралов столкновения, что упрощает решение задачи. Аморфная мишень моделируется вращением кристаллического атомного блока, процедура вращения повторяется для каждого нового столкновения. Подробное сравнение программы OKSANA с программами TRIM.SP и SRIM проведено в работах [11, 12].

В настоящей работе рассчитывалось отражение ионов D с начальной энергией $E_0 = 1.5$ и 5 кэВ от двухслойной мишени Ag(21 нм)/Si при нормальном падении, что соответствует условиям эксперимента [5]. Мишень считалась аморфной, а ее поверхность гладкой. Регистрировались частицы, рассеянные на угол 129° , угол захвата детектора составлял $\pm 2^\circ$. В расчетах использовался вариант программы, который описан в работе [9]. Как и в [9], в качестве межатомного потенциала взят потенциал Томаса–Ферми–Мольера (ТФМ) с длиной экранирования a , рассчитанной по формуле Линдхарда [13]. Часть расчетов выполнена с длиной экранирования Фирсова [14], а также с эмпирическими значениями a , предложенными О’Коннором и Бирсаком [15] и Робинсоном [16].

Электронное торможение задавалось двумя способами [9]: 1) как непрерывное торможение вдоль траектории, характеризуемое функцией $S_e(E)$; 2) с учетом неупругих потерь энергии в каждом столкновении, определяемых функцией $T(p)$. В качестве $T(p)$ взята зависимость, предложенная Оеном и Робинсоном для легких ионов [17]:

$$T(p) = (0.045kE^{1/2}/\pi Na^2) \exp[-0.3R(p, E)/a], \quad (1)$$

где k – параметр электронного торможения [18], N – атомная плотность мишени, R – расстояние наибольшего сближения частиц при столкновении. Зависимость $S_e(E)$, которая следует из (1) интегрированием по прицельному параметру, также использовалась в расчетах. Напомним, что величина S_e связана с электронными потерями энергии на единицу длины пути $(dE/dx)_e$ простым соотношением: $S_e = -(dE/dx)_e/N$.

Зависимости $S_e(E)$, использованные в данной работе для описания торможения изотопов водорода в Ag, показаны на рис. 1. Рисунок охватывает область энергий $E = 0.1$ – 10 кэВ/а.е.м., что соответствует скоростям частиц $V/V_0 = 0.063$ – 0.63 , где V_0 – орбитальная скорость электрона в атоме водорода. Кривые 1 и 2 аппроксимируют результаты измерений, выполненных методами отражения от двухслойной мишени Ag(21 нм)/Si [5] и прохождения через слой Ag толщиной 25 нм [6]. Излом на кривых при $E = 0.7$ кэВ связан с включением в торможение слабо связанных электронов $4d$ -оболочки [5, 6]. На рис. 1 показаны также экспериментальные данные более ранних работ по прохождению протонов через тонкие пленки серебра [19, 20]. Кривая 3 построена по данным программы SRIM-2013 [21]. Кривые 4 и 5 относятся к модели Оена и Робинсона [17]. Отметим, что при одинаковой скорости атомов H и D значения R в формуле (1) отличаются друг от друга, поэтому соответствующие значения S_e (рис. 1) также не совпадают.

Рис. 2 аналогичен рис. 1, но описывает электронное торможение изотопов водорода в кремнии. Экспериментальные данные почерпнуты из работ [22–28]. В расчетах данной работы была использована зависимость SRIM [21], которая хорошо согласуется с большинством экспериментальных данных (рис. 2). Исключение составляют расчеты для модели [17], когда формула (1) применялась для описания торможения частиц не только в слое серебра, но и в кремниевой подложке.

Заметим, что расчеты данной работы проведены для дейтерия, наиболее полно изученного экспериментально.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчета энергетических спектров дейтерия, отраженных от двухслойной мишени Ag/Si, показаны на рис. 3 для начальной энергии ионов $E_0 = 5$ и 1.5 кэВ (рис. 3а, 3б соответствен-

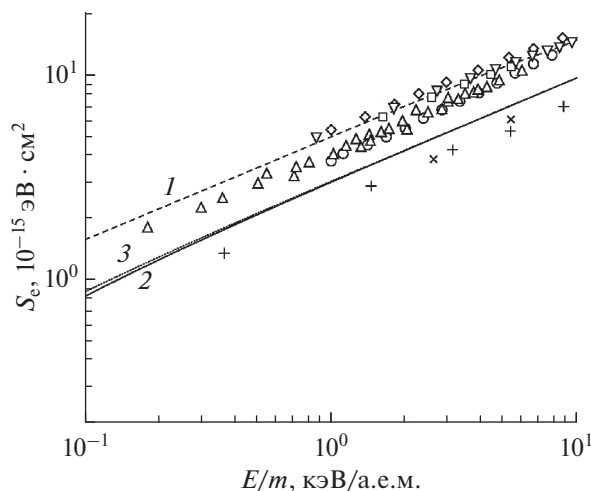


Рис. 2. Энергетические зависимости сечения электронного торможения изотопов водорода в кремнии. Экспериментальные данные: + [22], × [23], ○ [24], □ [25], ◇ [26], △ [27], ▽ [7]. Кривая 1 – SRIM [21]. Кривые 2 и 3 рассчитаны с использованием формулы (1) для изотопов H и D соответственно.

но). Спектры рассчитаны с использованием зависимостей $S_e(E)$, показанных на рис. 1, и зависимости $T(p)$, которую дает формула (1). Число падающих ионов составляло 5×10^6 (рис. 3а) и 10^7 (рис. 3б). Сплошной линией на рисунках изображены спектры, полученные экспериментально [5]. Следует отметить, что при обработке этих и других спектров такого рода были получены значения S_e , аппроксимированные на рис. 1 кривой 1.

Как видно из рис. 3, энергетические спектры отраженных частиц, как правило, несимметричны и они проходят через максимум. Такая форма энергетических спектров отраженных частиц многократно наблюдалась в более ранних экспериментах при различных условиях облучения легкими ионами разных мишеней, включая Ag [2], и для случая рассеяния на малые углы анализировалась в ряде теоретических работ, например, [29, 30].

На рис. 3а максимумы спектров соответствуют ситуации, когда глубина проникновения частиц в мишень совпадает с толщиной слоя Ag (21 нм). Левее максимума с уменьшением энергии отраженных частиц все больший вклад дает отражение от кремниевой подложки, особенно при слабом электронном торможении. При энергии $E/E_0 = 0.3$ (нижняя граница спектра) этот вклад лежит в пределах 20–70%, где первое значение дает сечение торможения SRIM, а второе – сечение торможения Гоэбла с сотр. [5] (рис. 1, кривые 3 и 1 соответственно).

На рис. 3б максимумы спектров соответствуют глубине проникновения 8–11 нм, т.е. связаны с частицами, траектории которых лежат в пределах слоя Ag и не захватывают кремниевую подложку. Частицы, отраженные от подложки, имеют энергию

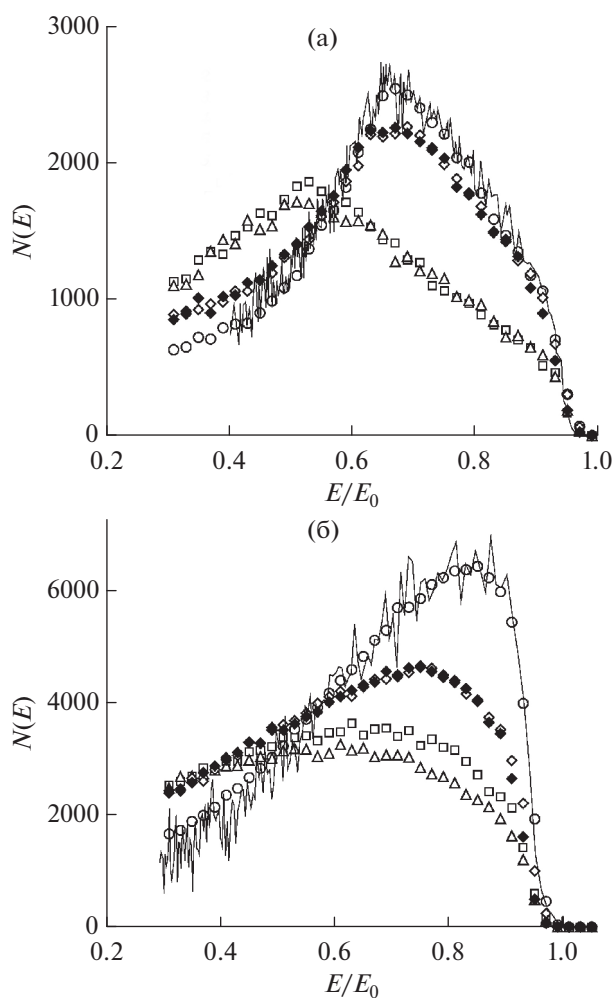


Рис. 3. Энергетические спектры атомов дейтерия с начальной энергией 5 (а) и 1.5 кэВ (б), отраженных от двухслойной мишени Ag/Si в интервал углов рассеяния $\theta = 127^\circ - 131^\circ$ (нормальное падение). ○, □, △, ◇ – расчет с использованием зависимостей $S_e(E)$, показанных на рис. 1 кривыми 1, 2, 3 и 5 соответственно; ◆ – расчет с учетом зависимости $T(p)$ (формула (1)). Ломаная линия – эксперимент [5].

$E/E_0 < 0.5$, но даже при энергии $E/E_0 = 0.3$ их вклад не превышает 6%. Как и на рис. 3а, лучшее согласие с экспериментом наблюдается для спектра, который рассчитан с функцией $S_e(E)$, представленной на рис. 1 кривой 1. Это подтверждает корректность использованного в [5] метода определения сечения неупругого торможения, которое проводилось с помощью программы TRBS [31]. Хуже всего согласуется с экспериментом зависимость $S_e(E)$, генерируемая программой SRIM [21].

Данные (рис. 3), относящиеся к модели Оена и Робинсона [17], показывают, что учет зависимости неупругих потерь энергии от прицельного параметра соударения дает слабый эффект. Исключение составляет область энергий, близких к E_0 , когда траектории частиц в мишени явля-

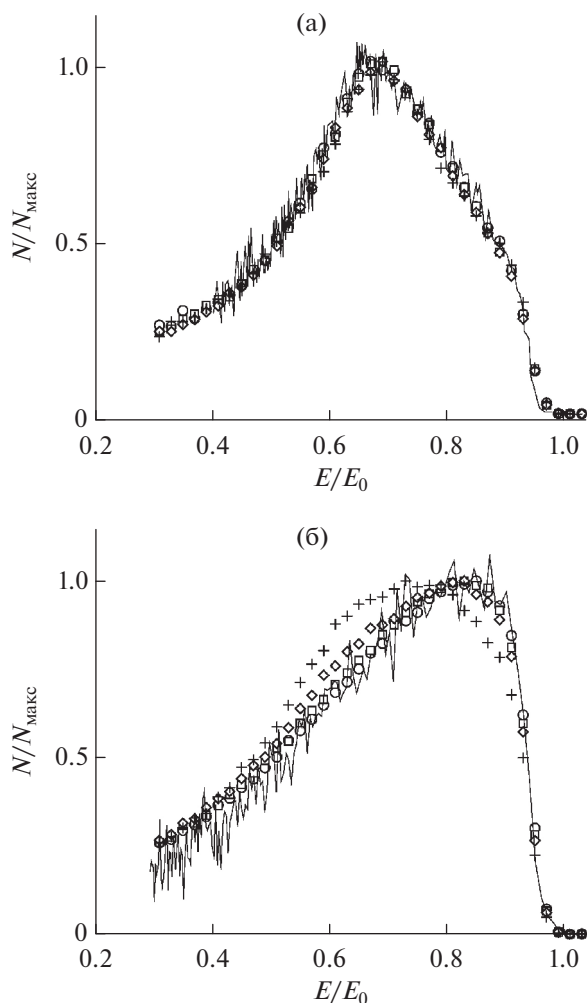


Рис. 4. Энергетические спектры атомов дейтерия с начальной энергией 5 кэВ (а) и 1.5 кэВ (б), рассчитанные при разных значениях длины экранирования в потенциале ТФМ: \circ – Линдхард [13], \square – Фирсов [14], \diamond – О’Коннор и Бирсак [15], \triangle – Робинсон [16]; ломаная линия – эксперимент [5]. Расчет проведен с использованием сечения торможения [5] (рис. 1, кривая *l*).

ются короткими и включают в себя сравнительно небольшое число столкновений [9].

Результаты, приведенные на рис. 3, получены для потенциала ТФМ с длиной экранирования a , рассчитанной по формуле Линдхарда [13]. Как отмечалось выше, в расчетах данной работы использовалась также длина экранирования Фирсова [14] и длины экранирования О’Коннора и Бирсака [15] и Робинсона [16], найденные из экспериментальных данных. Указанные длины экранирования имеют следующие значения: 0.125, 0.119, 0.106 и 0.075 Å (H–Ag) и 0.180, 0.166, 0.125 и 0.075 Å (H–Si).

Для начальных энергий атомов дейтерия 5 и 1.5 кэВ результаты моделирования, выполненного с перечисленными выше значениями a , показаны на рис. 4. Для удобства сравнения спектры нормирова-

ны по максимальному значению. Из рис. 4а следует, что при $E_0 = 5$ кэВ спектры слабо зависят от длины экранирования, тогда как при $E_0 = 1.5$ кэВ эффект потенциала оказался весьма заметным (рис. 4б). Последнее связано с тем, что при $E_0 = 1.5$ кэВ положение максимума определяется не толщиной слоя Ag (см. выше), а глубиной, на которой происходит разворот траекторий ионов к поверхности. Эта глубина тем больше, чем слабее потенциал, т. е., чем меньше длина экранирования a . Как следует из рис. 4б, уменьшение a приводит к смещению спектра в область более низких энергий, что ухудшает согласие с экспериментом. Ясно, что в этом случае для достижения согласия с экспериментом необходимо ослабить электронное торможение. Это означает, что в области низких энергий точность восстановления сечения электронного торможения из энергетических спектров отраженных частиц с помощью компьютерного моделирования зависит от используемого в расчетах межатомного потенциала.

Отметим также тот факт, что длины экранирования Линдхарда [13], Фирсова [14] и О’Коннора [15] дали достаточно близкие к эксперименту результаты даже при $E_0 = 1.5$ кэВ (рис. 4б). Потенциал ТФМ с длиной экранирования [15] был использован в работе [5] для восстановления с помощью компьютерной программы TRBS значений S_e из экспериментальных спектров отражения, в том числе тех, что показаны на рис. 3 и 4. В данной работе, по сути, решена обратная задача, а именно, рассчитаны спектры отражения по заданной зависимости S_e , но с использованием иной компьютерной программы. Хорошее согласие результатов настоящей работы и работы [5] указывает на надежность той и другой программ.

Что касается завышенных значений S_e , полученных в работе [6] (рис. 1), это может быть связано с использованием в эксперименте недостаточно тонкой фольги (25 нм) и, соответственно, удлинением траекторий частиц в мишени за счет их многократного рассеяния. Для проверки этого предположения был проведен расчет длины траекторий протонов с энергией $E_0 = 1$ кэВ, рассеянных пленкой Ag толщиной 25 нм в интервал углов $\theta = 0^\circ - 4^\circ$ (нормальное падение). Для потенциала ТФМ с длиной экранирования Линдхарда расчет дал среднюю длину траекторий, равную 51 нм, что примерно в два раза больше толщины мишени. С ростом E_0 эта разница уменьшается, поскольку траектории частиц все больше приближаются к прямолинейным.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен расчет энергетических спектров отраженных ионов при облучении двухслойной мишени Ag/Si ионами дейтерия с энергией 1.5 и 5 кэВ с использованием различных зависимостей $S_e(E)$. Расчет продемонстрировал высокую чувстви-

тельность спектров отраженных частиц к процессам электронного торможения. Наилучшее согласие с экспериментом получено для зависимости $S_e(E)$, найденной Гоэблом и др. [5] с использованием компьютерной программы TRBS. Расчет показал, что в области низких энергий форма энергетического спектра зависит от использованного в расчете межатомного потенциала. Хорошее согласие с экспериментом получено, в частности, для потенциала Томаса—Ферми—Мольера с длиной экранирования Линдхарда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Goml Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
2. *Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. 172 с.
3. *Sigmund P.* Particle penetration and radiation effects. Berlin: Springer, 2006. 437 p.
4. *Paul H., Semrad D., Seilinger A.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1991. V. 61. P. 261.
5. *Goebel D., Roth D., Bauer P.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 062903.
6. *Cantero E.D., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Arista N.R.* // Phys. Rev. A. 2009. V. 80. P. 032904.
7. *Valdés J.E., Martínez Tamayo G., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Arista N.R.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1993. V. 73. P. 313.
8. *Primetzhofer D., Markin S.N., Efrosinin D.V., Steinbauer E., Andrzejewski R., Bauer P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2011. V. 269. P. 1292.
9. *Shulga V.I., Schinner A., Sigmund P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2020. V. 467. P. 91.
10. *Shulga V.I.* // Radiat. Eff. 1984. V. 82. P. 169.
11. *Shulga V.I., Eckstein W.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 145. P. 492.
12. *Shulga V.I.* // Appl. Surf. Sci. 2018. V. 439. P. 457.
13. *Lindhard J., Nielsen V., Scharff M.* // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1968. V. 36. P. 1.
14. *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 696.
15. *O'Connor D.J., Biersack J.P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1986. V. 15. P. 14.
16. *Робинсон М.Т.* // Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Вып. 1. Физическое распыление одноэлементных твердых тел / Ред. Бернш Р. М.: Мир, 1984. С. 99.
17. *Oen O.S., Robinson M.T.* // Nucl. Instrum. Methods. 1976. V. 132. P. 647.
18. *Lindhard J., Scharff M.* // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 128.
19. *Гомл Ю.В., Тельковский В.Г.* // ФТТ. 1967. Т. 9. С. 2221.
20. *Nomura A., Kiyono S.* // J. Phys. D. 1975. V. 8. P. 1551.
21. *Ziegler J.F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 136–138. P. 141. <http://www.srim.org>
22. *Arkhipov E.P., Gott Y.V.* // ЖЭТФ. 1969. Т. 29. С. 615.
23. *Grahmann H., Kalbitzer S.* // Nucl. Instrum. Methods. 1976. V. 132. P. 119.
24. *Konac G., Kalbitzer S., Klatt Ch., Niemann D., Stoll R.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 136–138. P. 159.
25. *Fama M., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Arista N.R., Gayone J.E., Sanchez E., Lovey F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 193. P. 91.
26. *Hobler G., Bourdelle K.K., Akatsu T.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2006. V. 242. P. 617.
27. *Tran T.T., Jablonka L., Bruckner B., Rund S., Roth D., Sortica M.A., Bauer P., Zhang Z., Primetzhofer D.* // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. P. 032705.
28. *Mery M., Uribe J.D., Flores M., Arista N.R., Esaulov V.A., Valdés J.A.* // Radiat. Eff. Def. Solids. 2021. V. 176. P. 73.
29. *Firsov O.B., Mashkova E.S., Molchanov V.A., Snisar V.A.* // Nucl. Instrum. Methods. 1976. V. 132. P. 695.
30. *Тилинин И.С.* // Поверхность. Физика, химия, механика. 1983. № 4. С. 35.
31. *Biersack J.P., Steinbauer E., Bauer P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1991. V. 61. P. 77.

Energy Spectra of Low-Energy Deuterium Ions Reflected from a Two-Layer Target

V. I. Shulga*

D.V. Skobel'sin Institute of Nuclear Physics, M.V. Lomonosov State University, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: vish008@yandex.ru

The paper presents the results of computer simulation study of the reflection of 1.5 and 5 keV D ions from a two-layer Ag/Si target, using different $S_e(E)$ dependences, where S_e is the electronic-stopping cross section in silver (silicon) and E is the ion energy. For D–Ag pair, the best agreement with the experiment was found for the results obtained by the reflection method using the TRBS computer program. It is shown that the $S_e(E)$ dependence generated by the SRIM-2013 program significantly overestimates the electronic stopping of hydrogen isotopes in Ag in the low-energy range. In this energy range, the shape of the energy spectrum depends on the interatomic potential used. A good agreement with the experiment was obtained, in particular, for the Thomas–Fermi–Molière potential with the Lindhard screening length.

Keywords: ion bombardment, scattering, electronic-stopping cross section, hydrogen isotopes, deuterium, silver, computer simulation.