УДК 539.211.31

КОЭФФИЦИЕНТЫ ОТРАЖЕНИЯ ЛЕГКИХ ИОНОВ ОТ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

© 2024 г. В. П. Афанасьев[a], *, Л. Г. Лобанова[a], **, В. И. Шульга[b], ***

[a]*Национальный исследовательский университет "МЭИ", Москва, 111250 Россия*
[b]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына, Москва, 119991 Россия*

**e-mail: v.af@mail.ru*
***e-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru*
****e-mail: vish008@yandex.ru*

Поступила в редакцию 31.09.2023
После доработки 22.11.2023 г.
Принята к публикации 22.11.2023 г.

Представлена аналитическая теория отражения легких ионов от твердых тел, основанная на методе решения задачи упругого рассеяния (метод Освальда–Каспера–Гауклера), успешно апробированном в теории электронного рассеяния. Решение граничной задачи отражения легких ионов от поверхности твердого тела построено на основе метода инвариантного погружения Амбарцумяна. Рассмотрено взаимодействие частиц с аморфными и поликристаллическими мишенями. Получены аналитические формулы расчета интегральных коэффициентов отражения частиц и энергии. Показано, что аналитическое решение удается получить только в рамках малоуглового приближения. Вывод аналитических решений построен на основе распределения отраженных легких ионов по длине пробега с учетом максимального остаточного пробега — "тормозного пути". Показано, что в рамках аналитической теории коэффициенты отражения определяются двумя безразмерными параметрами: отношением остаточного пробега к транспортному пробегу и параметром экранирования. Проведено сравнение результатов теоретического рассмотрения с данными компьютерного моделирования. Численные расчеты выполнены для случая отражения протонов с начальной энергией $E_0 = 1–10$ кэВ от мишеней Be, C, Cu и W для различной геометрии рассеяния. Полученные результаты расчетов коэффициентов отражения частиц и энергии показывают удовлетворительное согласие аналитических расчетов и компьютерного моделирования.

Ключевые слова: легкие ионы, твердое тело, рассеяние протонов, коэффициенты отражения частиц и энергии, аналитическая теория, компьютерное моделирование.

DOI: 10.31857/S1028096024070133, **EDN:** EUOGQT

ВВЕДЕНИЕ

Проблема описания отражения легких ионов от поверхности твердых тел возникает при расшифровке сигнала, полученного с помощью различных методик анализа поверхности, таких как спектроскопия резерфордовского обратного рассеяния (Rutherford Backscattering Spectroscopy, RBS), спектроскопия ионов со средней энергией (Medium Energy Ion Spectroscopy, MEIS), спектроскопия низкоэнергетических ионов (Low Energy Ion Spectroscopy, LEIS) [1–3]. Указанная проблема актуальна также с точки зрения многих технологических процессов, например, имплантации легких ионов в твердые тела, ионного перемешивания и др. Важное значение эта задача имеет и для решения проблем "первой стенки" установок управляемого термоядерного синтеза [4, 5].

Подробному описанию задач, решаемых в настоящей работе, посвящены монографии, изданные в 1980–90-е годы [4–8]. Картина взаимодействия легких ионов с поверхностью твердого тела, представленная, например, в [5], актуальна и по сей день.

Наибольшее количество проблем, возникающих при теоретическом рассмотрении взаимодействия легких ионов с поверхностями твердых тел, связано с описанием ионного рассеяния. Так, используемые для этого методы, рассмотренные, например, в [5], такие как приближение прямолинейных траекторий (Straight Line Approximation), модель Бете [7] не способны даже качественно описать процесс рассеяния легких ионов с энергиями в несколько сотен или тысяч эВ. Отметим прогресс, который достигнут при экспериментальном изучении данного явления. К настоящему времени к перечню работ, изложенных в [4, 5], можно добавить эксперименты, выполненные на установке “Большой масс-монохроматор МИФИ” [2, 3], а также многочисленные эксперименты по отражению ионов с использованием времяпролетной методики [9]. При интерпретации экспериментальных результатов в основном применяют численные методы, например, моделирование методом Монте-Карло [8].

Целью настоящей работы являлось построение последовательной аналитической теории рассеяния, базирующейся на нескольких безразмерных параметрах, справедливой в широком интервале энергии от 100 эВ до нескольких МэВ и для любой геометрии рассеяния. При построении теории использован метод, многократно и успешно апробированный при количественном решении задач электронного рассеяния [10, 11]. В [12] данный метод, называемый методом Освальда–Каспера–Гауклера, успешно использован для описания дифференциальных по углам и энергиям спектров отраженных от твердых тел протонов. Предметом исследования в настоящей работе являлись интегральные по углам рассеяния и энергиям коэффициенты отражения легких ионов от поверхности твердых тел.

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ

Воспользуемся представленной в [12] функцией распределения отраженных легких ионов по длине пробега в мишени:

$$R(s,\mu_0,\mu,\varphi_0,\varphi) = \frac{|\mu|\mu_0}{(|\mu|+\mu_0)}\sum_{lm}\frac{(2l+1)}{2}\frac{1}{sl_{\rm el}}\times$$
$$\times\left[\exp\left(-s\left(1-x^l\right)\right)-\exp(-s)\right]\times \qquad (1)$$
$$\times P_l\left(\mu\mu_0+\left(1-\mu^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(1-\mu_0{}^2\right)^{-\frac{1}{2}}\cos(\varphi_0-\varphi)\right),$$

где R — функция отражения ионов; $s=\tau/l_{\rm el}$ — пробег иона в мишени, измеренный в длинах среднего свободного пробега между двумя актами упругого рассеяния $l_{\rm el} = 1/n\sigma_{\rm el}$, n — концентрация атомов мишени, $\sigma_{\rm el}$ — полное сечение упругого рассеяния ионов, τ — глубина в мишени; μ_0 — косинус полярного угла θ_0 влета иона в мишень, отсчитываемого от нормали к поверхности, направленной вглубь мишени; μ — косинус полярного угла θ вылета иона из мишени; φ_0 — азимутальный угол влета иона в мишень; φ — азимутальный угол вылета иона из мишени; x^l — коэффициенты разложения нормированного на единицу дифференциального сечения упругого рассеяния ионов $x_{\rm el}(\theta)=\omega_{\rm el}(\theta)/\sigma_{\rm el}$ в ряд по полиномам Лежандра P_l, $x^l=\int_{-1}^{1}x_{\rm el}(\mu)P_l(\mu)d\mu$, $\omega_{\rm el}(\theta)$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния ионов на угол θ.

Для определения распределения отраженных легких ионов по углам вылета из мишени необходимо проинтегрировать уравнение (1) по всем возможным длинам траектории — от $s=0$ до $s=R_0$, где $R_0=\int_0^{E_0}\frac{dE}{\bar{\varepsilon}(E)}$ — остаточный пробег иона или тормозной путь; $\bar{\varepsilon}(E)$ — средние потери энергии иона на единице длины; E_0 — начальная энергия иона. Таким образом, получим выражение для углового распределения отраженных ионов:

$$R(\mu_0,\mu,\varphi_0,\varphi)=\int_0^{R_0}R\left(\frac{\tau}{l_{\rm el}},\mu_0,\mu,\varphi_0,\varphi\right)d\tau=$$
$$=\frac{|\mu|\mu_0}{(|\mu|+\mu_0)}\exp\left(\frac{-A}{|\mu|}\right)\sum_{lm}\frac{(2l+1)}{2}S_lP_l\times \qquad (2)$$
$$\times\left(\mu\mu_0+\left(1-\mu^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(1-\mu_0{}^2\right)^{-\frac{1}{2}}\cos(\varphi_0-\varphi)\right),$$

где $\exp(-A/|\mu|)$ нужна для учета перезарядки ионов при отрыве от поверхности мишени (если рассматривают суммарный по зарядовым фракциям состав отраженных ионов, то данный процесс не учитывают), A — подгоночный параметр; $S_l=\mathrm{Ei}(-(1-x^l)\varsigma)-\mathrm{Ei}(-\varsigma)-\ln(1-x^l)$ для $l>0$; $S_0=C-\mathrm{Ei}(-\varsigma)+\ln(\varsigma)$, Ei — интегральная экспонента [13], C — постоянная Эйлера, $\varsigma=R_0/l_{\rm el}=\sigma^*/(1-x^1)$; $\sigma^*=R_0/l_{\rm tr}$; $l_{\rm tr}$ — транспортная длина пробега ионов.

Отметим, что безразмерный параметр $\varsigma\gg1$, например, для случая отражения протонов с начальной энергией 1 кэВ от вольфрама $\varsigma_{\rm W}\approx2.21\times10^6$; от бериллия $\varsigma_{\rm Be}\approx4.656\times10^4$. С ростом начальной энергии протонов величина ς заметно изменяется, оставаясь большой, например, при начальной энергии протонов 50 кэВ $\varsigma_{\rm W}=8.481\times10^4$; $\varsigma_{\rm Be}=882.413$. Это обстоятельство необходимо учитывать при выполнении расчетов.

Для определения коэффициента отражения частиц $R_N(\mu_0)$ необходимо проинтегрировать распределение (2) по всем углам вылета ионов из мишени, что приводит к формуле:

$$R_N(\mu_0) = \frac{1}{\mu_0}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{-1} R(\mu_0,\mu,\varphi_0,\varphi)\,d\mu = \\ = \sum_l S_l C_l(\mu_0) P_l(\mu_0), \quad (3)$$

где $C_l(\mu_0) = \pi(2l+1)\int_0^{-1} \frac{|\mu|}{(|\mu|+\mu_0)} P_l(\mu)\,d\mu$.

Коэффициент отражения энергии определяется формулой:

$$R_E(\mu_0) = \frac{1}{(\mu_0 E_0)}\int_0^{R_0} ds \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{-1} R(s,\mu_0,\mu,\varphi_0,\varphi)\,\bar{\varepsilon} s\,d\mu. \quad (4)$$

Подставив (1) в (4), находим:

$$R_E(\mu_0) = C_0(\mu_0)\left(1-\varsigma^{-1}\right) + \sum_{l=1}^{\infty} C_l(\mu_0) P_l(\mu_0)\frac{1}{\varsigma}\times \\ \times\left[\frac{1}{\left(1-x^l\right)}\left\{1-\exp\left(-\varsigma\left(1-x^l\right)\right)\right\}-1\right]. \quad (5)$$

СРАВНЕНИЕ С ЧИСЛЕННЫМ МОДЕЛИРОВАНИЕМ

Результаты аналитического рассмотрения отражения ионов от поверхности твердого тела были сопоставлены с данными компьютерного моделирования. Как и в [12], моделирование было выполнено методом Монте-Карло с помощью программы OKSANA, основанной на приближении парных столкновений [14, 15]. Мишень считали аморфной, а ее поверхность плоской. В качестве межатомного потенциала использовали потенциал Kr–C [8]. Электронное торможение задавали в модели непрерывного замедления, значения средних электронных потерь энергии на единице пути $(-dE/dx)_e$ брали из базы данных SRIM [16]. Расчеты проведены для мишеней Be, C, Cu и W, бомбардируемых протонами с начальной энергией $E_0 = 1$–10 кэВ, угол падения частиц θ изменялся от 0 (нормальное падение) до 88°.

На рис. 1 показаны угловые зависимости коэффициента отражения частиц для начальной энергии протонов 1 кэВ. При аналитическом расчете величины R_N для углов падения $\theta_0 \to 90°$ в формуле для определения величины C_l (уравнение (3)) возникает логарифмическая расходимость. По этой причине на рис. 1 область углов падения, близких к 90°, не представлена. Из рисунка видно, что результаты аналитического расчета удовлетвори-

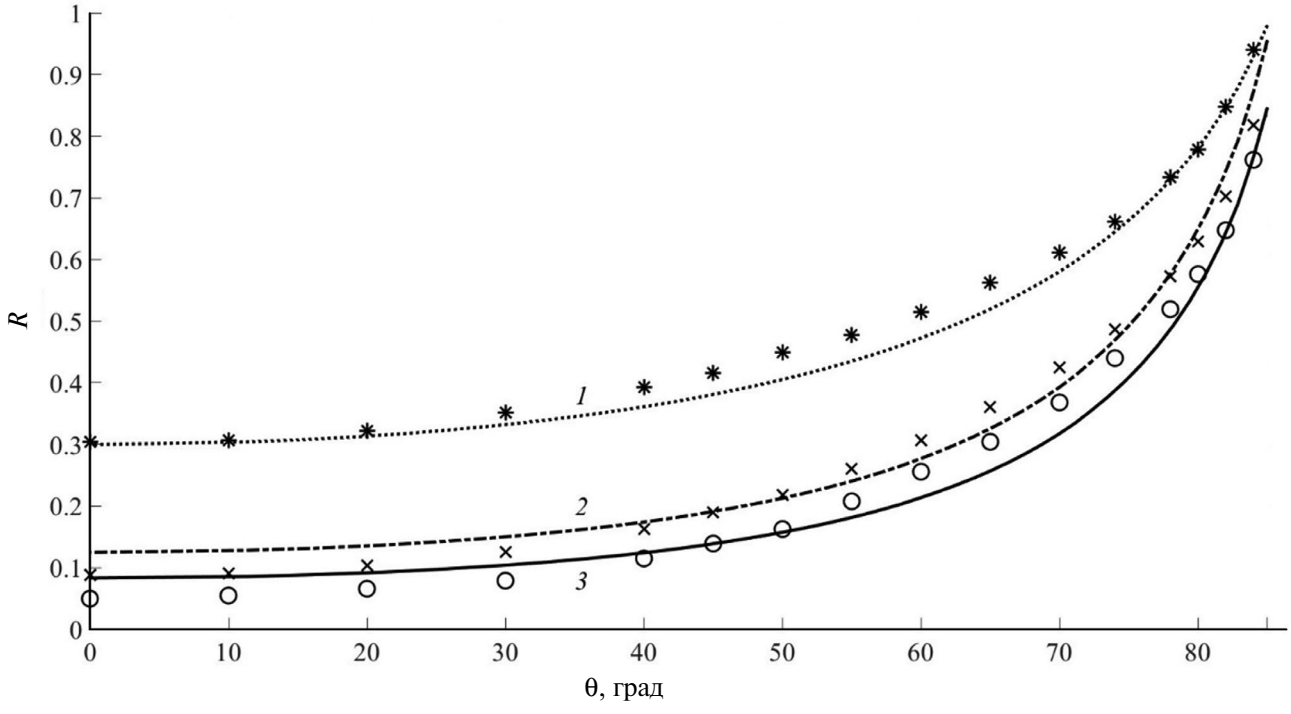

Рис. 1. Коэффициенты отражения частиц R_N как функция угла падения пучка протонов с начальной энергией $E_0 = 1$ кэВ на медь (*1*); углерод (*2*); бериллий (*3*). Линии — расчет по формуле (3); символы — моделирование.

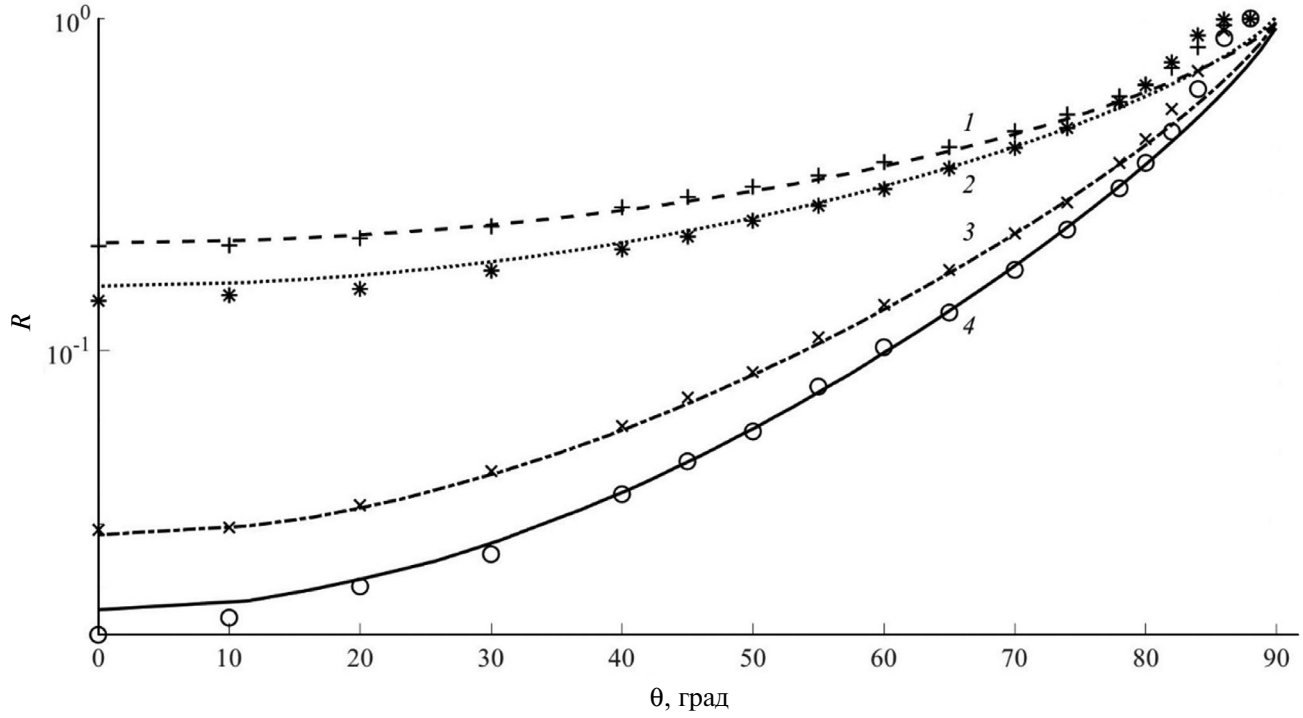

Рис. 2. Коэффициенты отражения энергии R_E как функция угла падения пучка протонов с начальной энергией $E_0 = 1$ кэВ на вольфрам (*1*); медь (*2*); углерод (*3*); бериллий (*4*). Линии — расчет по формуле (5); символы — моделирование.

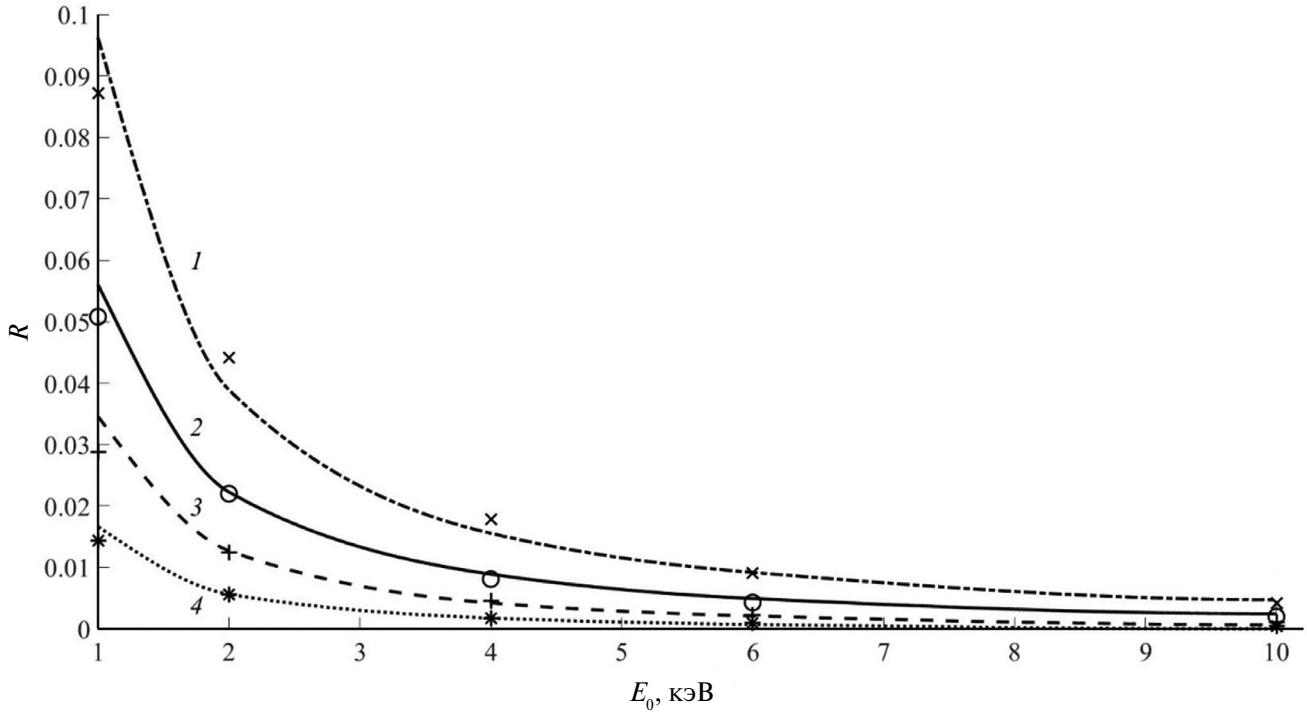

Рис. 3. Коэффициенты отражения частиц R_N (*1*, *2*) и энергии R_E (*3*, *4*) как функция начальной энергии пучка протонов E_0 при падении пучка под углом $\theta_0 = 0°$ на бериллий (*2*, *4*) и углерод (*1*, *3*). Линии — расчет по формулам (3) и (5); символы — моделирование.

тельно согласуются с данными компьютерного моделирования. При углах падения, близких к 90°, моделирование дает значения $R_N = 1$.

Угловые зависимости коэффициента отражения энергии R_E показаны на рис. 2. Из рисунка видно, что аналитические расчеты демонстрируют плавное, без перегибов, стремление к единице при $\theta \to 90°$, в то время как результаты моделирования указывают на существование плато R_E при значениях, близких к 1. Точного совпадения R_E с единицей не наблюдается, так как передача энергии атомам мишени происходит даже при больших углах падения. Такое плато отмечали во многих расчетах, оно связано с полным отражением частиц от поверхности ($R_N = 1$) в условиях сильного взаимного затенения атомов при скользящем падении [5]. При углах $\theta < 83°$ имеет место хорошее соответствие аналитических расчетов (формула (5)) и компьютерного моделирования.

На рис. 3 в качестве примера показаны энергетические зависимости коэффициентов отражения частиц и энергии для протонов, падающих на бериллиевую и углеродную мишени. Как и выше, аналитические расчеты проводились по формулам (3) и (5). Отметим хорошее согласие аналитических результатов с данными компьютерного моделирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены аналитические формулы для расчета коэффициентов отражения частиц R_N и энергии R_E. Для расчета необходимо знать параметр $\varsigma = R_0/l_{el} = R_0/(l_{tr}(1-x^1)) = \sigma^*/(1-x^1)$, зависящий от средней длины свободного пробега ионов между упругими соударениями l_{el} и остаточного пробега R_0, определяемого начальной энергией пучка ионов E_0 и средними потерями энергии ионов на единице длины $\bar{\varepsilon}(E)$. Необходимые для определения параметра ς данные имеются в литературе: величину транспортного пробега ионов l_{tr} надежнее всего определить, используя транспортное сечение Фирсова [19]. Значения остаточного пробега R_0 однозначно связаны со средними потерями энергии ионов на единице длины $\bar{\varepsilon}(E)$, которые подробно табулированы [16, 20]. Знание дифференциального сечения упругого рассеяния ионов $\omega_{el}(\theta)$ необходимо для расчета коэффициентов разложения сечения в ряд по полиномам Лежандра $-x^l$. Надежных апробированных данных по величине $\omega_{el}(\theta)$ не удается найти в современной литературе. В настоящей работе использовано сечение, определенное в первом борновском приближении на основе потенциала Kr–C.

В настоящей работе аналитические расчеты коэффициентов отражения частиц и энергии сверены с результатами численного моделирования. Сравнение показало, что аналитическая теория (формулы (3) и (5)) удовлетворительно описывает интегральные характеристики рассеяния легких ионов поверхностью твердых тел.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование проведено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № FSWF-2023–0016.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы утверждают, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Машкова Е.С.*, *Молчанов В.А.* Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. 174 с.
2. *Булгадарян Д.Г.*, *Синельников Д.Н.*, *Ефимов Н.Е.*, *Курнаев В.А.* // Известия РАН. Серия физическая. 2020. Т. 84. № 6. С. 903. https://www.doi.org/10.31857/S036767652006006X
3. *Bulgadaryan D.*, *Kolodko D.*, *Kurnaev V.*, *Sinelnikov D.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 748. № 1. P. 012016. https://www.doi.org/10.1088/1742-6596/748/1/012016
4. *Курнаев В.А.*, *Машкова Е.С.*, *Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. 192 с.
5. *Mashkova E.S.*, *Molchanov V.A.* Medium energy ion reflection from solids. Amsterdam: North-Holland, 1985. 444 p.
6. *Калашников Н.П.*, *Ремизович В.С.*, *Рязанов М.И.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
7. *Рязанов М.И.*, *Тилинин И.С.* Исследование поверхности по обратному рассеянию частиц. М.: Энергоатомиздат, 1985. 150 с.
8. *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 319 с.
9. *Markin S.N.*, *Primetzhofer D.*, *Spitz M.*, *Bauer P.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. № 20. P. 205105. https://www.doi.org/10.1103/PhysRev B.80.205105
10. *Salvat-Pujol F.*, *Werner W.S.M.* // Phys. Rev. B. 2011. V. 83. № 19. P. 195416. https://www.doi.org/10.1103/PhysRev B.83.195416
11. *Afanas'ev V.P.*, *Efremenko D.S.*, *Kaplya P.S.* // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 2016. V. 210. P. 16. https://www.doi.org/10.1016/j.elspec.2016.04.006
12. *Афанасьев В.П.*, *Лобанова Л.Г.*, *Шульга В.И.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.

2023. № 1. С. 86.
https://www.doi.org/10.31857/S102809602301003X
13. *Янке Е.*, *Эмде Ф.*, *Леш Ф.* Специальные функции. М.: Наука, 1968. 344 с.
14. *Shulga V.I.* // Radiat. Eff. 1984. V. 82. P. 169.
https://www.doi.org/10.1080/00337578408215770
15. *Shulga V.I.*, *Eckstein W.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 145. № 4. P. 492.
https://doi.org/10.1016/S0168-583X(98)00626-0
16. *Ziegler J.F.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 136–138. P. 141.
https://www.doi.org/10.1016/S0168-583X(97)00664-2
http://www.srim.org
17. *Koborov N. N.*, *Kurnaev V. A.*, *Telkovsky V. G.*, *Zhabrev G. I.* // Radiat Eff. Defects Solids. 1983. V. 69. № 1–2. P. 135.
https://www.doi.org/10.1080/00337578308221731
18. *Tabata T.*, *Ito R.*, *Itikawa Y.*, *Itoh N.*, *Morita K.* // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1983. V. 28. № 3. P. 493.
https://www.doi.org/10.1016/0092-640X(83)90004-9
19. *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. С. 447.
20. *Berger M.J.*, *Coursey J.S.*, *Zucker M.A.*, *Chang J.* // NIST Standard Reference Database 124. Last Update to Data Content: July 2017. NISTIR 4999.
https://www.doi.org/10.18434/T4NC7P

Coefficients of Light-Ion Reflection from a Solid Surface

V. P. Afanas'ev[1, *], L. G. Lobanova[1, **], V. I. Shulga[2, *]**

[1]National Research University "MPEI", Moscow, 111250 Russia
[2] Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

**e-mail: v.af@mail.ru*
***e-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru*
****e-mail: vish008@yandex.ru*

An analytical theory of the reflection of light ions from solids is presented. The theory is based on the method of solving the elastic scattering problem (the Oswald–Kasper–Gauckler method), successfully tested in the theory of electron scattering. The solution of a boundary value problem for light ion reflection from solids based on the invariant imbedding method is constructed. Particle interaction with amorphous and polycrystalline samples is considered. Analytical formulas for calculating the integral reflection coefficients of particles and energy are obtained. It is shown that an analytical solution can be obtained only within the framework of a small-angle approximation. Obtained analytical solutions are based on the path length distribution function taking into account the maximum residual range. It was shown that within the framework of an analytical theory the reflection coefficients are determined by two dimensionless parameters — the ratio of the residual range to the transport path length and the screening parameter. The results of theoretical consideration are compared with the data of computer simulation. Numerical calculations are performed for the case of reflection of protons with initial energy $E_0 = 1–10$ keV from Be, C, Cu and W targets for different scattering geometries. The results of the calculated integral reflection coefficients of particles and energy show the satisfactory agreement between analytics and computer simulation.

Keywords: light ions, solids, scattering of protons, integral particle and energy reflection coefficients, analytical theory, computer simulation.