

Факторы, ограничивающие применимость модели однократного резерфордовского обратного рассеяния ионов: двукратное рассеяние ионов

Кибардин А. В.

Кибардин Алексей Владимирович / Kibardin Alexey Vladimirovich - кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра вычислительной техники, физико-технологический институт, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург

Аннотация: в работе рассматриваются вопросы численного моделирования факторов, влияющих на формирование спектров резерфордовского обратного рассеяния ионов в тонких пленках: двукратного рассеяния ионов в мишенях.

Abstract: the work deals with the numerical modeling of factors influencing the formation of the Rutherford backscattering spectra of ions in thin films: double scattering of ions in targets.

Ключевые слова: тонкие пленки, ионы, состав ионного пучка, упругое рассеяние, энергетические спектры, аппаратная функция, математическое моделирование.

Keywords: thin films, ions, composition of the ion beam, elastic scattering, the energy spectra, the instrumental function, mathematical modeling.

Анализ энергетических спектров ионов, отраженных от твердотельных мишеней – весьма информативный способ исследования физических процессов, таких как диффузия и твердофазные реакции в тонких и поверхностных слоях [1]. Для энергетических спектров резерфордовского обратного рассеяния ионов с начальной энергией порядка 1 МэВ/нуклон характерна высокая чувствительность к виду мишени: одно- или многокомпонентная, толстая или тонкая, поли- или монокристаллическая. При данных энергиях принято считать, что основной вклад в спектры рассеяния вносит механизм однократного резерфордовского обратного рассеяния [2-4]. Однако при определенных условиях приближение однократного рассеяния требует дополнения. Во-первых, необходим учет состава исходного пучка ионов, падающего на мишень. Этот вопрос рассмотрен нами в предыдущей статье [5]. Во-вторых, для толстых мишеней, когда толщина мишени много больше полного пробега ионов в веществе, заметный вклад в форму спектров вносит механизм многократного рассеяния ионов. Кроме того, при энергиях ионов порядка 200 кэВ/нуклон следует учитывать экранирование заряда атома мишени, что приводит к отклонению сечения рассеяния от резерфордовского.

В случае обратного рассеяния тяжелых ионов от тонких пленок (толщина пленки много меньше полного пробега ионов) для объяснения формы спектров, а именно, фона между пленкой тяжелого компонента и легкой подложкой следует включить еще один механизм, ответственный за низкоэнергетичную часть спектра рассеяния – двукратное рассеяние ионов. Необходимость рассмотрения этого механизма с точки зрения извлечения данных о процессах атомпереноса в тонких слоях, очевидна: речь идет об определении нижних порогов чувствительности спектров резерфордовского рассеяния к процессам взаимодиффузии атомов в таких структурах. Такой механизм был предложен в работе [6]. Согласно этому механизму ион испытывает два последовательных акта упругого рассеяния, так что суммарный угол оказывается большим (рис.1). Однако авторам в этой работе не удалось в рамках этой модели удовлетворительно описать спектр обратного рассеяния от тонких пленок.

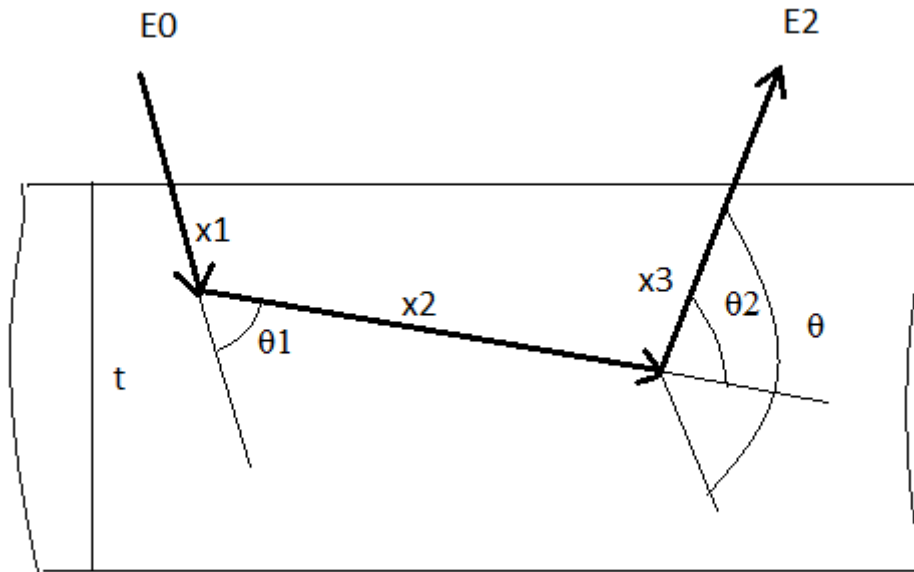


Рис. 1. Схема движения иона в мишени: проекция на плоскость

Нами, в отличие от авторов этой работы, решавших задачу с помощью численного моделирования, предложено аналитическое выражение для энергетических спектров двукратного рассеяния [7]. При этом мы исходили из следующих упрощений:

- масса атомов мишени M_2 много больше массы ионов M_1 , так что упругими потерями частицы при рассеянии на углы θ_1 и θ_2 можно пренебречь;
- толщина мишени настолько мала, что можно пренебречь торможением ионов на участках пути x_1 и x_3 . Тогда выражение для энергетического спектра упругого рассеяния ионов можно выразить следующей формулой:

$$F(E_2) = N \Delta \Omega n^2 dx / dE_2 \int_0^t dx_1 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\theta_1^{\min}}^{\theta_1^{\max}} d\theta_1 \sin \theta_1 \sigma(E_0, \theta_1) \sigma(E_2, \theta_2) \quad (1)$$

где N – число ионов, упавших на мишень; $\Delta \Omega$ – телесный угол детектора; n – концентрация атомов мишени; $\sigma(E, \theta)$ – сечение упругого рассеяния с энергией E на угол θ . Углы θ_1 и θ_2 (рис.1) связаны соотношением:

$$\cos \theta_2 = \cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos \varphi \quad (2)$$

Пределы интегрирования по углу θ_1 определяются из геометрии эксперимента:

$$\cos \theta_1^{\min} = \frac{t - x_1}{x_2}, \cos \theta_1^{\max} = \frac{-x_1}{x_2} \quad (3)$$

Область применимости выражения (1) ограничена таким диапазоном энергий (свыше нескольких десятков кэВ), для которых применимы приближение непрерывного торможения иона в среде и предположение о том, что процесс рассеяния ионов мишенью можно рассматривать как последовательность парных столкновений частиц.

Чтобы конкретизировать выражение (1), необходимо задать тип комбинации ион-мишень, энергетический диапазон ионов – это позволит определить вид зависимости удельных потерь и сечение рассеяния.

Для проверки модели мы измерили спектры обратного рассеяния протонов с начальной энергией 600 кэВ от самоподдерживающейся пленки золота толщиной 0,15 мкм. Регистрировалось рассеяние частиц на большие ($>90^\circ$) углы. Согласно предложенной модели рассеяние на угол θ_1 происходит практически с энергией E_0 , когда потенциал ион-атомного взаимодействия с хорошей точностью является кулоновским, а сечение рассеяния определяется формулой Резерфорда. Рассеяние на угол θ_2 происходит практически

при энергиях ионов, равных энергии выхода частицы из мишени, которые уже достаточно малы, так что необходим учет экранировки заряда ядра атома. В наших расчетах мы использовали аппроксимацию экранированного потенциала в виде $U(r) \sim 1/r^2$ [8].

Выражение для сечения рассеяния на потенциале этого типа позволяет получить следующую формулу:

$$F(E_2) = N\Delta\Omega n^2 0.028 e a_{TF} z_1^3 z_2^3 E_0^{-2} E_2^{-1} S^{-1}(E_2) \times \\ \times \int_0^t dx_1 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\theta_1^{\min}}^{\theta_1^{\max}} \frac{\sin \theta_1 d\theta_1}{(1 - \cos \theta_1)^2 (1 - \cos \theta_2)^{3/2}} \quad (4)$$

где $a_{TF} = 0.8853 a_0 (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{-1/2}$; $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ м; e - заряд электрона.

Для оценки чувствительности спектров двукратного рассеяния к виду потенциала взаимодействия получено выражение для случая, когда рассеяние на угол θ_2 является чисто Резерфордским:

$$I = \frac{x_2}{16(1-\alpha)^2} \left\{ \frac{2(1+\alpha)}{1-\alpha} \ln \left[\frac{\alpha^2(1-\xi)}{\alpha^2 - \xi^2} \right] - \frac{\xi^2(1-\alpha^2)}{\alpha(\alpha^2 - \xi^2)} + \right. \\ \left. + \frac{3(1+\alpha)}{1-\alpha} \ln \left[\frac{(1+\xi)(\xi-\alpha)}{(1-\xi)(\xi+\alpha)} \right] \right\}, \quad (5)$$

$$\alpha = \cos \theta, \quad \xi = \frac{t}{x_2}$$

Разлагая выражение (5) в ряд по степеням малости ξ и пренебрегая членами, содержащими ξ в степени больше двух, получим более простое выражение:

$$F(E_2) = N\Delta\Omega n^2 z_1^4 z_2^4 e^8 E_0^{-2} E_2^{-1} S^{-1}(E_2) x_2^{-1} |\cos \theta|^{-3} / 16 \quad (6)$$

На рис.2 приведены результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными. Эти результаты подтверждают справедливость модели двукратного рассеяния ионов для объяснения экспериментальных спектров от тонких пленок и позволяют определить пределы чувствительности спектров обратного рассеяния к процессам атомпереноса в тонких слоях.

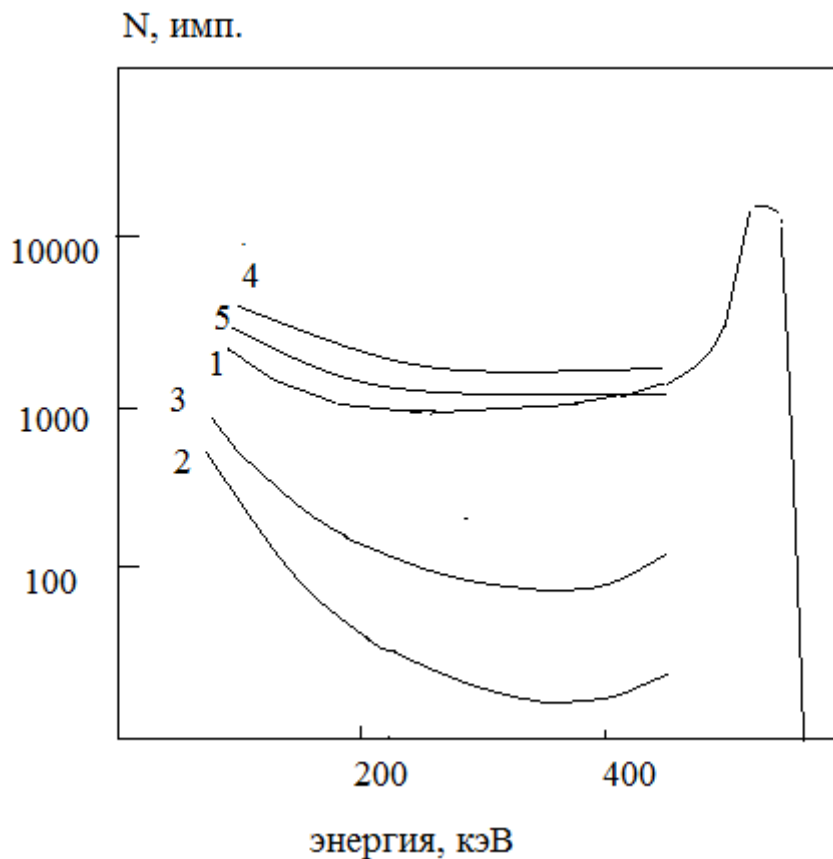


Рис. 2. Спектры резерфордского обратного рассеяния протонов с начальной энергией 600 кэВ на угол 130° от пленки золота толщиной 0.15 мкм: 1 – эксперимент; 2 – расчет по формуле (6); 3 – расчет по формуле (6) в плоской геометрии; 4 – расчет по формуле (4); 5 – расчет по формуле (4) в плоской геометрии

Отметим, что для обеспечения наилучшего согласия расчетов с экспериментами, в расчетах необходимо также учесть немонотонность исходного пучка ионов [5].

Литература

1. Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции. Под редакцией Поуга Дж., Ту К., Мейера Дж. М.: Мир. 1982. 576 с.
2. *Chi W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A.* Backscattering spectrometry. N.-Y.:Academic Press. 1978. 384 p.
3. *Кибардин А.В.* Изменение профилей концентрации атомов в тонкопленочных структурах Me-Si при тепловом и радиационном воздействиях: Дисс. канд. физ.- мат. наук. Екатеринбург: УГТУ. 1996.
4. *Кибардин А.В.* Численное моделирование спектров резерфордского обратного рассеяния ионов от многослойных многокомпонентных мишеней. Проблемы современной науки и образования. 2016. №1(43). С.30-34.
5. *Кибардин А.В.* Исследования факторов, ограничивающих применимость модели однократного резерфордского обратного рассеяния ионов: учет состава исходного пучка частиц. Проблемы современной науки и образования. 2016. №2 (44). С.10-13.
6. *Weber A., Mommsem H., Sarter W., Weller A.* Double scattering in Rutherford backscattering spectra. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.1982. V. 198, p.527-533.
7. *Бажуков С.И., Кибардин А.В., Пузанов А.А., Пяткова Т.М.* Двукратное рассеяние протонов от самоподдерживающейся пленки. Поверхность: физика, химия, механика. 1988. №5. С.42-45.
8. *Машкова Е.С., Молчанов А.А.* Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М., 1980. 256 с.