

Влияние многократности соударений на измерения электронных тормозных потерь при столкновениях атомных частиц с твердым телом

А. Н. Зиновьев¹⁾, П. Ю. Бабенко

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН,
194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 25 марта 2022 г.

После переработки 7 апреля 2022 г.

Принята к публикации 7 апреля 2022 г.

Показано, что различие данных измерений электронных потерь энергии при столкновениях атомных частиц (ион, атом) с твердым телом методом обратного рассеяния и методом прохождения пучка через тонкую пленку связано с влиянием многократности столкновений на длину траектории частиц в твердом теле. При низких энергиях (0.7 кэВ) длина траектории налетающей частицы может превышать толщину пленки более чем в 2.5 раза, поэтому традиционное определение тормозной способности как отношение потери энергии на единицу длины проективного пробега неприменимо.

DOI: 10.31857/S1234567822090105

При описании торможения частиц в веществе различают потери энергии, связанные с упругим рассеянием налетающей частицы на ядрах атомов мишени – ядерные тормозные способности (*nuclear stopping*), и электронные тормозные способности (*electronic stopping*), связанные с возбуждением и ионизацией электронной системы. Для столкновений сложных частиц в работе [1] предложена модель электронных тормозных потерь, связанная с образованием и распадом автоионизационных состояний. Торможение частиц характеризуется удельными потерями (тормозной способностью) – dE/dx , т.е. потерями энергии dE на единицу длины dx . Значения ядерных тормозных потерь достаточно хорошо вычисляются, если известен потенциал взаимодействия атомных частиц [2].

В физике атомных столкновений в твердых телах до сих пор остается существенным вопрос точного экспериментального определения электронных тормозных потерь. Данные о потерях необходимы для понимания процессов, происходящих при взаимодействии атомов с твердым телом. Они важны при рассмотрении вопросов повреждения первой стенки и дивертора в токамаке-реакторе, для разработки методов ионной имплантации пучками ионов с энергиями ниже 10 кэВ, что связано с миниатюризацией создаваемых наноструктур, а также для анализа поверхности материалов с использованием пучков

ионов. Данные об электронных тормозных потерях обязательно включаются в современные коды [3–6] для моделирования процессов распыления, отражения, пробегов и энерговыделения при облучении пучками атомов и ионов твердых тел.

Существует общедоступная база электронных потерь энергии, созданная под руководством Пауля [7] и поддерживаемая ИАЕА. База постоянно пополняется новыми измерениями. Однако, в области малых энергий данные очень скудные и имеет место существенное различие в величинах экспериментально определенных потерь энергии, полученных различными методами – с использованием времяпролетной техники при анализе энергетических спектров обратно отраженных частиц и анализа спектров частиц, прошедших сквозь тонкие пленки. Как было показано в работе Моро [8], при энергиях свыше 10 кэВ, данные, полученные обоими методами, согласуются в пределах экспериментальных ошибок. Однако при меньших энергиях для многих комбинаций при бомбардировке протонами Si, Ni, Cu, Zn, Ag, Au [9–25] абсолютные величины потерь отличаются в 2–3 раза.

Следует отметить, что при использовании времяпролетной методики (метод обратного рассеяния) регистрируются все отраженные частицы независимо от заряда. В другом методе при анализе энергетических спектров частиц, прошедших сквозь тонкие пленки, как правило, регистрируется только заряженная компонента. При прохождении пучка через твердое тело мы имеем дело с распределением чис-

¹⁾e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

ла частиц пучка по заряду. Данное распределение определяется соотношением сечений захвата и потери электрона при столкновениях частиц пучка с атомами мишени. Как правило, после двух, трех соударений устанавливается равновесное распределение по заряду, которое при дальнейшем прохождении частицы практически не меняется, если не учитывать торможение частиц. Поэтому трудно ожидать, что энергетический спектр частиц, прошедших пленку, зависит от заряда. В работе Блюм и др. [23] этот факт был проверен экспериментально. В рассматриваемом случае электронная тормозная способность также не зависит от начального заряда налетающей частицы (ион, атом).

Причины различия результатов, полученных разными методами, широко обсуждаются на специализированных международных конференциях, и в ряде статей (Пауль [26] Зигмунд [27], Гобль [28] и др.). В частности, в работе Пауля [26], подробно анализируются возможные ошибки при измерениях, а также влияние различия в угловых распределениях для обратно рассеянных частиц и частиц, прошедших сквозь тонкие пленки, но объяснение различий в получаемых значениях электронных тормозных потерь не дано. В работе Зигмунда [27] это различие приписывается зависимости неупругой потери от параметра удара. Конечно, такая зависимость может быть, но как показывают многочисленные эксперименты, выполненные в газовой фазе, величина неупругой потери энергии растет при уменьшении параметра удара, тогда как в методике регистрации обратно рассеянных частиц измеренная величина, как правило, меньше, чем при измерении методом прохождения через тонкие пленки. Таким образом, до сих пор не установлена природа наблюдаемого различия.

Общепринятым способом определения электронных тормозных потерь при прохождении частиц через тонкие пленки является следующий алгоритм (см., например, Андерсен [14]): измеряется энергетический спектр частиц, прошедших пленку толщиной d (в нашем случае 200 \AA) и из энергетического спектра находят среднюю (наиболее вероятную) энергию частиц E_1 , прошедших пленку. Далее разницу начальной энергии частиц E_0 и средней энергии частиц после пленки E_1 делят на толщину пленки d и получают значение тормозной способности или среднюю потерю энергии на единицу длины dE/dx . Таким образом

$$\Delta E = E_0 - E_1 \quad \text{и} \quad \frac{dE}{dx} = \frac{\Delta E}{d}.$$

Для достаточно больших энергий частиц этот алгоритм дает правильные результаты.

При использовании обратного рассеяния (см. Маркин [25]) значения тормозной способности определялись из энергетических спектров обратно рассеянных частиц, измеренных с помощью времяпролетной методики. Угол регистрации $\theta = 129^\circ$, частица снаряд – водород, мишень – пленка из золота 62 \AA на кремниевой подложке. Измеренный спектр описывался с помощью программы TRBS [29], и при этом варьировалось значение тормозной способности для рассматриваемой энергии соударения и ее зависимость от энергии налетающей частицы. В качестве итогового результата фиксировалось значение, которое позволяло максимально точно описать экспериментальный энергетический спектр. Мы предположили, что различие в значениях тормозной способности, получаемой различными методами, объясняется различной трактовкой измеряемых величин и связано с необходимостью учета многократности рассеяния на получаемые данные. С помощью разработанного нами кода [4] мы провели компьютерное моделирование обоих экспериментов. В нашем коде использовался метод Монте-Карло и приближение парных взаимодействий. Имелась возможность варьировать как используемую модель потенциала взаимодействия, так и модель, описывающую потерю энергии при торможении на электронах мишени. Структура мишени из Au задавалась в виде случайно ориентированного в пространстве кристаллического микрокластера размером в одну постоянную решетки (4.078 \AA). Столкновения рассматривались в рамках приближения бинарных соударений. Положение первого атома задавалось случайным образом, а для последующего соударения микрокластер случайным образом ориентировался в пространстве. Подобный подход при описании аморфной или микрокристаллической мишени позволяет учесть коррелированное расположение в пространстве соседних рассеивающих центров. Учитывались также тепловые колебания атомов мишени. При получении энергетического спектра происходило усреднение для 10^6 случаев рассеяния частиц. Использовались потенциалы Мольера [30] и Зиновьева [31] с коррекцией длины экранирования Фирсова на 15 %.

В случае моделирования эксперимента Маркина [25] (обратное рассеяние) наши результаты совпали с результатами моделирования с помощью программы TRBS, при этом потери энергии, связанные с рассеянием на ядрах мишени рассчитывались точно с использованием законов сохранения, а величина поправки на торможение на электронах задавалась как величина, пропорциональная длине траектории между последовательными соударениями. Далее эта ве-

личина суммировалась по всем рассматриваемым актам соударения. Таким образом, величина полученной в данной методике неупругой потери энергии, есть dE/dL , где L – средняя длина траектории снаряда в твердом теле.

Той же программой было проведено моделирование энергетических спектров атомов водорода, прошедших пленку из золота толщиной 200 \AA . Для таких условий проводился эксперимент (Андерсен [14]) по определению потерь энергии при прохождении пленки ионами водорода. С помощью нашей программы мы определили соотношение между средней длиной траектории снаряда L в пленке из золота и толщиной пленки $d = 200 \text{ \AA}$. Диапазон энергий налетающих атомов водорода $E_0 = 0.7\text{--}40 \text{ кэВ}$. На рисунке 1 представлены результаты моделирования отно-

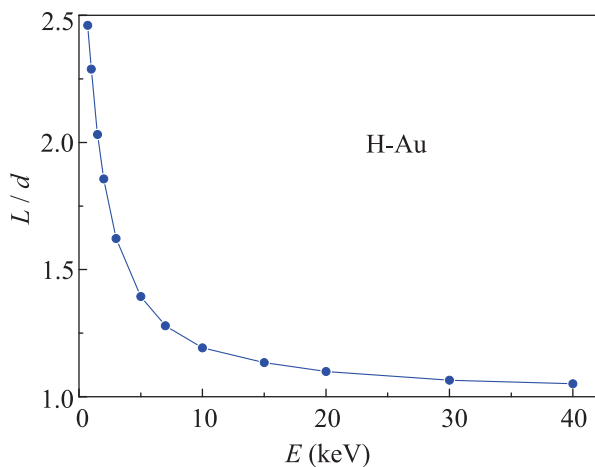


Рис. 1. (Цветной онлайн) Отношение средней длины траектории L к толщине пленки из золота d ($d = 200 \text{ \AA}$). Результаты моделирования нашей программой для системы H-Au

шения средней длины траектории L к толщине пленки из золота d . Из рисунка 1 видно, что это отношение изменяется от 1.05 для 40 кэВ до 2.5 для 0.7 кэВ. Таким образом, если использовать стандартный алгоритм, ошибка в определении величины тормозной способности будет составлять 2.5 раза для энергии 0.7 кэВ.

На рисунке 2 приведены величины электронной тормозной способности (Маркин [25]), полученные методом обратного рассеяния, и из работы (Андерсен [14]), измеренные при прохождении протонами пленки из золота толщиной 200 \AA . Видно, что данные Маркина [25] в области малых энергий лежат гораздо ниже данных Андерсена [14]. При этом в случае Маркина потери описываются зависимостью $dE/dx \sim E^{0.722}$, а в случае Андерсена $dE/dx \sim$

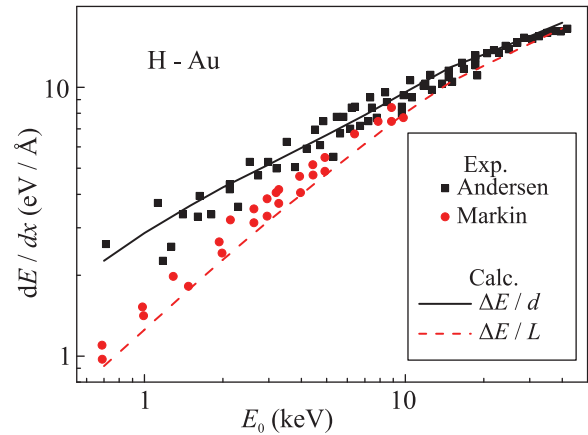


Рис. 2. (Цветной онлайн) Величины электронных тормозных способностей dE/dx в зависимости от энергии бомбардирующей частицы. Точки – экспериментальные данные работ Андерсен [14] и Маркин [25]. Линии – наш расчет величин $\Delta E/d$ и $\Delta E/L$ с помощью модели [4]

$\sim E^{0.455}$. При моделировании энергетических спектров атомных частиц, прошедших пленку толщиной 200 \AA с помощью нашей программы, мы получим следующий результат: если поделить среднюю потерю энергии частиц ΔE , прошедших пленку, на толщину пленки d , получим данные Андерсена [14], а если поделить среднюю потерю энергии ΔE на среднюю длину траектории L , получим результаты Маркина [25] (см. рис. 2).

Таким образом при трактовке измеряемых величин, получаемых различными методами, нужно учитывать поправки, связанные с многократностью соударения. Для рассматриваемого случая рассеяния атомов водорода на пленке золота для энергии 0.7 кэВ средняя длина траектории L превышает проективный пробег в 2.5 раза. При энергии соударения 10 кэВ они отличаются на 10% и далее это различие становится несущественным. Таким образом, при измерениях методом на прострел требуется учет поправки на многократное рассеяние, а классическое понятие тормозной потери энергии как отношения средней потери энергии и проективного пробега требует ревизии. В случае методики обратного рассеяния следует трактовать получаемые данные как потерю энергии на единицу длины траектории.

Следует отметить, что влияние длины траектории на получаемые результаты ранее не рассматривалось. Гибкость нашего кода позволила рассчитать этот параметр. Таким образом устраняется неопределенность в выборе экспериментальных данных о тормозных потерях для моделирования столкновений

атомов и ионов с твердым телом. При энергиях соударения менее 10 кэВ рекомендуется использовать понятие тормозной способности на единицу длины траектории и данные полученные времяпролетным методом при регистрации энергетических спектров обратно отраженных частиц. При больших энергиях данные, полученные различными методами, не отличаются в пределах экспериментальных ошибок.

1. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, Д. С. Мелузова, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **108**, 666 (2018) [A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, JETP Lett. **108**, 633 (2018)].
2. A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, and K. Nordlund, Nucl. Instr. Meth. B **508**, 10 (2021).
3. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Matter – code. <http://srim.org>.
4. Д. С. Мелузова, П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев, Поверхность **4**, 74 (2019) [D. S. Meluzova, P. Yu. Babenko, A. P. Shergin, and A. N. Zinoviev, Journal of Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques **13**, 335 (2019)].
5. P. Sigmund and A. Schinner, Nucl. Instr. Meth. B **195**, 64 (2002).
6. G. Schiwietz and P. L. Grande, Phys. Rev. A **84**, 052703 (2011).
7. NDS – data base. <https://www-nds.iaea.org>.
8. M. V. Moro, P. M. Wolf, B. Bruckner, F. Munnik, R. Heller, P. Bauer, and D. Primetzhofer, Nucl. Instr. Meth. B **498**, 1 (2021).
9. M. Mery, J. D. Uribe, M. Flores, N. R. Arista, V. A. Esaulov, and J. E. Valdes, Rad. Eff. Def. Sol. **176**, 73 (2021).
10. M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, N. R. Arista, J. E. Gayone, E. Sanchez, and F. Lovey, Nucl. Instr. Meth. B **193**, 91 (2002).
11. T. T. Tran, L. Jablonka, B. Bruckner, S. Rund, D. Roth, M. A. Sortica, P. Bauer, Z. Zhang, and D. Primetzhofer, Phys. Rev. A **100**, 03275 (2019).
12. G. Konac, S. Kalbitzer, Ch. Klatt, D. Niemann, and R. Stoll, Nucl. Instr. Meth. B **136–138**, 159 (1998).
13. S. P. Möller, A. Csete, T. Ichioka, H. Knudsen, U. I. Uggerhoj, and H. H. Andersen, Phys. Rev. Lett. **88**, 193201 (2002).
14. H. H. Andersen, A. Csete, T. Ichioka, H. Knudsen, S. P. Moller, and U. I. Uggerhoj, Nucl. Instr. Meth. B **194**, 217 (2002).
15. B. Bruckner, D. Roth, D. Goebel, P. Bauer, and D. Primetzhofer, Nucl. Instr. Meth. B **423**, 82 (2018).
16. E. D. Cantero, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, and N. R. Arista, Phys. Rev. A **80**, 032904 (2009).
17. J. E. Valdes, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, and N. R. Arista, Phys. Rev. A **49**, 1083 (1994).
18. S. N. Markin, D. Primetzhofer, M. Spitz, and P. Bauer, Phys. Rev. B **80**, 205105 (2009).
19. G. Martinez-Tamayo, J. C. Eckardt, G. H. Lantscher, and N. R. Arista, Phys. Rev. A **51**, 2285 (1995).
20. D. Goebel, W. Roessler, D. Roth, and P. Bauer, Phys. Rev. A **90**, 042706 (2014).
21. J. E. Valdes, G. Martinez-Tamayo, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, and N. R. Arista, Nucl. Instr. Meth. B **73**, 313 (1993).
22. D. Goebel, D. Roth, and P. Bauer, Phys. Rev. A **87**, 062903 (2013).
23. J. E. Valdes, C. Agurto, F. Ortega, P. Vargas, R. Labbe, and N. R. Arista, Nucl. Instr. Meth. B **164–165**, 268 (2000).
24. R. Blume, W. Eckstein, and H. Verbeek, Nucl. Instr. Meth. **168**, 57 (1980).
25. S. N. Markin, D. Primetzhofer, S. Prusa, M. Brunmayr, G. Kowarik, F. Aumayr, and P. Bauer, Phys. Rev. B **78**, 195122 (2008).
26. H. Paul and A. Schinner, Phys. Scr. **69**, C41 (2004).
27. P. Sigmund and A. Schinner, Nucl. Instr. Meth. B **410**, 78 (2017).
28. D. Goebel, K. Khalal-Kouache, D. Roth, E. Steinbauer, and P. Bauer, Phys. Rev. A **88**, 032901 (2013).
29. J. P. Biersack, E. Steinbauer, and P. Bauer, Nucl. Instr. Meth. B **61**, 77 (1991).
30. G. Moliere, Naturforsch. A **2**, 133 (1947).
31. A. N. Zinoviev, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **269**, 829 (2011).