

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЙНИЯ В МЕТОДАХ АНАЛИЗА НА ПУЧКАХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

*А.И.Кульментьев, канд.физ.-мат.наук, ведущий научный сотрудник
Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская, 58,
г. Сумы, 40030*

В работе проанализирована проблема описания процессов многократного рассеяния в методах анализа на пучках заряженных частиц. Подробно рассмотрены существующие в литературе подходы к решению этой проблемы в спектрометрии резерфордовского обратного рассеяния (РОР). В рамках разработанной динамической модели выполнена серия компьютерных экспериментов, в которых непосредственно измерено энергетическое распределение частиц, рассеянных на заданный угол после двух столкновений, и вероятность подобного процесса. Проанализированы качественные различия этих величин в моделях одно- и двукратных столкновений. Показано, что для учета кратных столкновений в спектрах РОР необходимо разработать новый подход к вычислению дифференциального сечения рассеяния.

1 ВВЕДЕНИЕ

Одна из тенденций развития современных технологий состоит в возрастании роли поверхности и приповерхностных областей твердого тела. Это связано с тем, что зачастую такие области определяют физико-химические свойства материалов, представляющие наибольший интерес для микроэлектроники или материаловедения. Поэтому не случайно, что многие технологии, например, ионная имплантация, воздействие импульсными электронными пучками и лазерами, приводят к модификации именно этих областей обрабатываемого изделия. Такие области можно также специально создавать посредством нанесения или выращивания тонких слоев с помощью самых разнообразных источников. В значительной степени практическая применимость указанных способов обработки стала возможной благодаря развитию специальной группы методов анализа, среди которых важное место занимают методы анализа с применением высокоэнергетичных пучков заряженных частиц [1,2]. Это направление объединяет группу методов, основанных на исследовании разнообразных излучений, которые возникают в объеме материала, облученного пучком ускоренных ионов с энергией порядка нескольких мегаэлектронвольт.

К основным аналитическим задачам, решаемым при анализе материалов с помощью пучков заряженных частиц, относятся следующие: определение элементного состава, исследование распределения примесей по глубине, определение толщин слоев в многослойных образцах, исследование процессов перемешивания и взаимной диффузии. Растущие требования практики делают весьма актуальной задачу более полного извлечения информации из экспериментально измеренных спектров. Традиционный путь решения этой задачи состоит в усовершенствовании теоретического описания тех процессов, которые влияют на формирование спектра.

Одной из нерешенных до сих пор проблем в рассматриваемой области является адекватное описание вкладов в измеряемые спектры, связанных с процессами многократного рассеяния в образце частиц исходного пучка. В настоящей работе эта проблема проанализирована на примере спектрометрии резерфордовского обратного рассеяния (РОР) путем постановки компьютерных экспериментов, адекватно отражающих некоторые аспекты реальных физических процессов.

2 СУЩЕСТВУЮЩИЕ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЙНИЯ В СПЕКТРОМЕТРИИ РОР

Метод РОР является в настоящее время одним из наиболее распространенных неразрушающих методов исследования как состава приповерхностных областей твердых тел, так и распределения в них элементов по глубине. В этом методе пучок легких ионов, ускоренных до энергии порядка 1 МэВ , направляется на поверхность образца, и измеряется энергетический спектр частиц, рассеянных под большим углом (обратно рассеянных частиц). Многочисленные исследования показали, что во многих случаях спектры РОР могут быть адекватно описаны в рамках модели однократного рассеяния [3]. На рис. 1 приведена классификация возможных типов траекторий обратно рассеянных ионов. Показано поперечное сечение мишени, глубина которой увеличивается справа налево. Рисунок соответствует случаю нормального падения на мишень ионного пучка, который коллинеарен оси X .

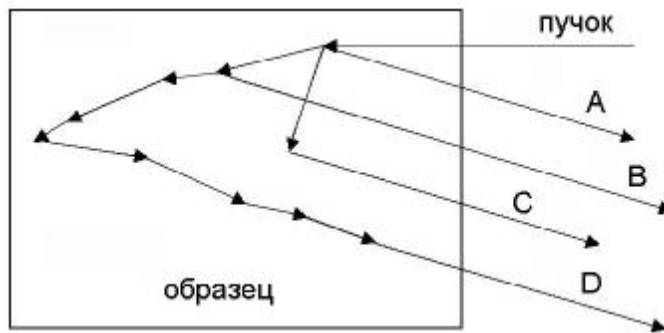


Рисунок 1 – Классификация обратно рассеянных ионов. Траектории A и C соответствуют однократно и двукратно рассеянным ионам; траектории B и D – ионам, испытавшим множественное рассеяние, которое обязательно включает одно рассеяние на большой угол [4]

В модели однократного рассеяния предполагается, что история детектируемого иона в образце состоит из движения внутрь мишени вдоль прямолинейной траектории с непрерывно уменьшающейся энергией, единственного рассеяния на большой угол на первоначально неподвижном атоме образца и движения наружу из мишени также с постепенно убывающей энергией (траектория A на рис.1). С общей точки зрения положение и форма спектра зависят от трех основных факторов: энергетических потерь иона, движущегося в мишени; поперечного сечения, определяющего вероятность рассеяния; кинематики процесса столкновения. В частности, модель предсказывает, что спектр тонкой самоподдерживающейся пленки будет представлять собой одиночный пик в интервале энергий от $E_{\min}^{(1)}$ до $E_{\max}^{(1)}$. Верхний индекс указывает на число столкновений иона в мишени. Обычно это предсказание качественно согласуется с экспериментальными данными, хотя имеются и отличия [5]: в эксперименте рассеянные частицы детектируются как с энергией $E > E_{\max}^{(1)}$ – в высокоэнергетической части спектра, так и с энергией $E < E_{\min}^{(1)}$ – в низкоэнергетическом фоне.

Существует несколько приложений метода РОР, для которых очень важно корректное описание как низкоэнергетического фона, так и высокоэнергетической части спектра. К ним можно отнести:

1) анализ загрязнения пленки легкими примесями. В этом случае сравнительно слабый сигнал от примеси попадает в область фона пленки

и для правильной интерпретации спектра необходимо их предварительное разделение;

2) исследование результатов диффузионного или баллистического перемешивания на границе раздела тяжелой пленки и легкой подложки. Такое перемешивание приводит к появлению сигнала в промежутке между пиками от легкого и тяжелого элементов. Для выделения этого сигнала также необходимо знать как точную форму низкоэнергетического фона тяжелого элемента, так и точную форму высокоэнергетической части спектра легкого элемента.

Если ограничиться рассмотрением мишени простейшего вида – тонкой самоподдерживающейся пленки, то в модели однократного рассеяния ион, детектируемый с энергией $E_{\max}^{(1)}$, испытывает рассеяние на передней поверхности пленки, т.е. обладает максимально возможной в рамках такого приближения энергией. Аналогично, ион, детектируемый с энергией $E_{\min}^{(1)}$, испытывает рассеяние на задней поверхности пленки, т.е. проходит в мишени максимально возможное в рамках этой модели расстояние. Следовательно, чтобы описать части спектра с $E > E_{\max}^{(1)}$ и $E < E_{\min}^{(1)}$, необходимо либо сохранить основные приближения модели, но включить в рассмотрение частицы, рассеянные не только на мишени, а и на других узлах экспериментальной установки, либо отказаться от некоторых ограничений модели однократного рассеяния. Например, можно считать, что среди детектируемых ионов есть те, которые испытали не одно, а два или более рассеяния каждый раз на большие углы, а в промежутках между столкновениями по-прежнему двигались вдоль отрезков прямолинейных траекторий (траектория *C* на рис. 1). Напротив, можно считать, что детектируемый ион по-прежнему испытывает единственное рассеяние на большой угол, но до и после столкновения движется не вдоль прямой, а вдоль слегка изломанной траектории, т.е. проходит больший путь (траектории *B* и *D* на рис.1). Такая изломанная траектория может возникнуть в результате множества малоугловых рассеяний движущейся частицы на первоначально неподвижных атомах мишени. Соответственно в первом случае говорят о многократном, а во втором – о множественном рассеянии. Различие между многократным и множественным рассеянием до некоторой степени условно, поскольку оно зависит от определения того, что считать "большим" или "малым" углом рассеяния. Однако их влияние на экспериментальный спектр различно. Различаются также теоретические подходы к описанию многократного и множественного рассеяния. Заметим, что основной эффект последнего состоит в создании дополнительного вклада в разброс энергетического распределения пучка частиц.

Впервые предположение о том, что низкоэнергетический фон в спектре обратного рассеяния ионов He^{2+} с начальной энергией 280 кэВ на мишени – пленке платины толщиной 1130 \AA на подложке SiO_2 – может возникать благодаря многократному рассеянию, было высказано 30 лет назад на I Международной конференции по анализу на пучках ионов [6]. На этой же конференции было замечено, что рассеяние пучка на формирующих щелях также может вносить вклад в низкоэнергетическую часть спектра [7]. С тех пор было выполнено большое число экспериментальных и теоретических работ, посвященных описанию низкоэнергетического фона в спектрах POP, однако эта проблема до сих пор далека от завершения и является предметом активных исследований. Достаточно сказать, что спустя 20 лет – в 1995 году в [8] был сделан вывод о том, что низкоэнергетический фон в спектре POP нельзя объяснить многократным, множественным рассеянием и рассеянием

частиц на системе формирующих щелей. На этом основании в [8] было высказано предположение о том, что существует некое важное физическое явление, которое не учитывалось при проведении анализа.

Интерпретация спектра РОР, как правило, проводится путем сравнения экспериментальных данных с модельным спектром, генерируемым с помощью компьютерной программы. Существует множество таких программ, причем во всех без исключения учитывается вклад в спектр от однократно рассеянных ионов, и лишь в отдельных – дополнительный вклад от ионов, испытавших двукратное рассеяние. Причина этого состоит в том, что рассмотрение двукратного рассеяния приводит к существенному усложнению программы и значительному возрастанию времени компьютерного моделирования.

С теоретической точки зрения спектр РОР является непрерывной функцией энергии, однако дискретный характер многоканального анализатора энергии приводит к естественной дискретизации экспериментального спектра. Как следствие, и модельный спектр рассчитывается для дискретной модели [9,10]. В ней мишень разбивается на N_s неравных друг другу субслоев, таких, что в пределах каждого из них состав мишени и тормозные способности иона постоянны. В основе моделирования спектра лежит расчет траектории отдельного иона, под которой понимается не только путь, проходимый частицей, но и значение энергии в каждой точке пути. При этом рассматриваются траектории не всех ионов в пучке, а лишь тех, которые вносят вклад в спектр. Соответственно в дискретной модели мишени рассчитывается не непрерывная траектория, а ее дискретный аналог. Для мишени, содержащей N_a различных атомов для расчета спектра в модели однократного рассеяния необходимо вычисление $N_s \times N_a$ дискретных траекторий для частиц типа А на рис.1.

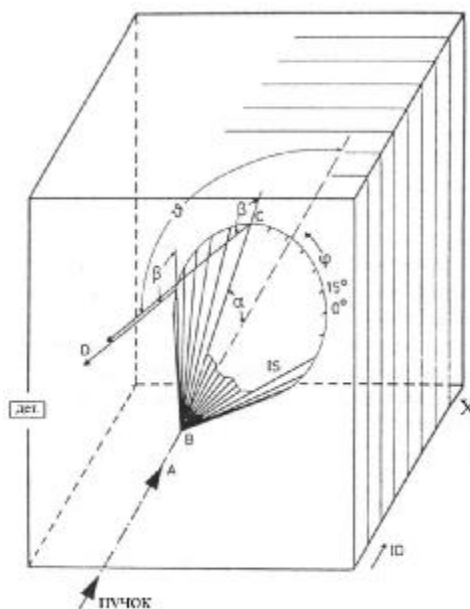


Рисунок 2 – Геометрия двойного рассеяния в мишени: А – точка входа пучка в мишень; В – точка в субслое ID, в которой частица рассеивается первый раз на угол α с азимутальным углом φ ; после прохождения расстояния IS вдоль поверхности конуса с углом полураствора α частица в точке С рассеивается второй раз в направлении детектора на угол β ; D – точка, в которой частица покидает мишень и движется к детектору (дет.); θ – полный угол рассеяния [5]

Моделирование вклада в спектр от двукратных столкновений может быть выполнено аналогичным образом. При этом следует иметь в виду, что после первого рассеяния ион может двигаться в любом направлении в полном телесном угле 4π . В дискретной модели последний также должен быть разбит на совокупность из N_d конечных телесных углов. При движении в каждом из этих углов ион может испытать второе рассеяние на произвольном расстоянии от первого и в общем случае – на любом из атомов мишени (рис.2). Поэтому для вычисления вклада в спектр РОР от двукратных столкновений необходимо учесть $N_s^p \times N_d \times N_a^2$ дискретных траекторий, где показатель степени $1 < p < 2$. Полагая $N_s = 100$, $p = 1,5$, $N_d = 120$ и $N_a = 5$, получим, что в модели однократных столкновений необходимо рассчитать 500, а в модели двукратных столкновений – $3 \cdot 10^6$ дискретных траекторий (т.е. в 6 000 раз больше).

Подобный подход был впервые реализован в [5,11,12]. Для сокращения объема вычислений рассматривался только случай нормального падения пучка ионов на мишень (рис.2). При этом предполагалось, что угол первого рассеяния α должен быть больше некоего минимального угла α_{min} , который в этих работах выбирался равным 15° . Необходимость ограничения $\alpha > \alpha_{min}$ связана с видом используемого сечения рассеяния – и в первом, и во втором столкновениях оно выбиралось равным резерфордскому сечению, которое не определено для $\alpha = 0$ и не обосновано экспериментально в интервале углов рассеяния, меньших 15° [13]. Заметим, что подобной проблемы не возникает в модели однократного рассеяния.

В рассматриваемых работах был рассчитан низкоэнергетический фон в спектрах РОР, обусловленный двойным рассеянием протонов, ионов гелия и углерода на тонких самоподдерживающихся металлических пленках. В большинстве случаев высота экспериментального фона превышала предсказываемые теоретически значения от 1,6 до 3 раз [12].

Дальнейшее развитие этот подход получил в [14-16], где он был обобщен для произвольной геометрии эксперимента, то есть когда угол падения пучка на мишень может быть любым. В расчетах полный телесный угол разбивался на 120 интервалов (10 – для полярного и 12 – для азимутального углов) и использовалось значение $\alpha_{min} = 20^\circ$. Учет двукратных столкновений был включен в коммерчески распространяемый пакет SIMNRA интерпретации спектров РОР.

Сравнительно высокая вычислительная эффективность описываемого подхода обусловлена тем, что в нем рассматривается лишь малая часть всех частиц пучка, а именно: лишь те, которые вносят вклад в спектр РОР. В свою очередь, на множестве M обратно рассеянных ионов можно определить отношение эквивалентности следующего вида: две частицы пучка считаются эквивалентными, если они детектируются в одном и том же канале анализатора после рассеяния на атомах мишени одного и того же вида. Легко проверить, что это бинарное отношение действительно является отношением эквивалентности, т.е. обладает свойствами рефлексивности, транзитивности и симметричности, а следовательно, определяет разбиение множества M на непересекающиеся классы.

Отдельный i -й класс описывает вклад I_i в спектр от частиц, рассеянных на атомах данного сорта в пределах i -го субслоя, расположенного на интервале $[t_i, t_{i+1}]$, где I_i – число отсчетов, t – глубина мишени. Можно показать, что в случае нормального падения

$$I_i \sim \int_{t_i}^{t_{i+1}} \sigma(E(t)) dt, \quad (1)$$

где σ – сечение рассеяния в охватываемый детектором телесный угол, и что для расчета I_i достаточно вычислить траекторию единственного иона. Таким образом, для моделирования спектра достаточно рассчитать лишь сравнительно небольшое число траекторий.

Альтернативный подход заключается в моделировании спектра РОР методом Монте-Карло (ММК). В нем также рассчитываются траектории ионов, но никакого предварительного разбиения всех частиц на классы не производится. Соответственно для получения статистически достоверного спектра РОР необходимо разыграть траектории огромного числа ионов. Траектория отдельной частицы описывается в рамках теории рассеяния, т.е. представляет собой ломаную линию, составленную из отрезков *in*- и *out*-асимптот [17]. Поэтому для восстановления траектории необходимо последовательно для всех столкновений рассчитать точку пересечения асимптот и угол рассеяния.

Очевидно, что эффективность метода Монте-Карло будет намного ниже, чем у описанного выше подхода, и поэтому его вряд ли можно использовать для рутинной обработки спектров РОР. Однако у него есть и некоторые преимущества. К их числу можно отнести то, что в ММК автоматически учитываются эффекты многократного и множественного рассеяния. Более того, если ввести граничный угол, позволяющий разделить мало- и большеугловое рассеяние (см. рис.1), то в спектре можно легко выделить вклады от одно- двух- и трехкратных столкновений.

Приложению ММК к задаче моделирования спектров РОР посвящены работы [18-21]. В частности, в [18] показано, что вклад от однократного рассеяния в ММК-спектр РОР для следующих параметров эксперимента: $100 \text{ кэВ } H^+ \rightarrow Au \text{ } 1000 \text{ E}$, $\alpha_{min} = 23^\circ$ очень близок к спектру, полученному в модели однократного рассеяния. Важным выводом этих работ является заключение о том, что малоугловое рассеяние оказывает существенное влияние на форму низкоэнергетического фона в спектре РОР, по крайней мере, для рассматриваемых в [18-20] низкоэнергетических пучков. В частности, в этой ситуации модель двукратного рассеяния оказывается непригодной для количественного описания этой части спектра при выборе $\alpha_{min} = 15 - 20^\circ$.

3 АНАЛИЗ НЕДОСТАТКОВ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПОДХОДОВ

Общим результатом анализируемых выше работ является то, что переход от модели однократных столкновений к модели двукратных столкновений сопровождается значительным увеличением сложности алгоритмов и объема вычислений. Однако основные физические приближения, и выражения для тормозных способностей ионов, сечения рассеяния и кинематического множителя при таком переходе остаются неизменными, что вполне оправданно только для тормозных способностей, поскольку последние в рассматриваемой энергетической области описывают процесс взаимодействия налетающего иона только с электронной подсистемой мишени.

Формальное выражение для кинематического множителя K вытекает из рассмотрения упругого столкновения двух частиц, одна из которых – атом мишени – первоначально покоится. Применимость этого выражения зависит от того, насколько свободным можно считать атом мишени, а также от наличия неупругих потерь в процессе столкновения. В модели однократных столкновений положение высокоэнергетического края $E_{max}^{(1)}$ сигнала от атома мишени с массой m_2 определяется выражением

$$E_{max}^{(1)} = E_0 K(\theta; m_1, m_2), \quad (2)$$

где E_0 – энергия исходного пучка, θ – угол рассеяния, m_1 – масса иона. Поэтому процесс формирования сигнала от данного компонента в методе РОР можно представить следующим образом. Для очень тонкой мишени этот сигнал будет представлять собой узкий пик, верхняя граница которого соответствует энергии $E_{\max}^{(1)}$. Увеличение толщины мишени приводит к расширению сигнала, причем его высокоэнергетическая граница остается неизменной и равной $E_{\max}^{(1)}$.

Ниже на основе результатов прямого компьютерного эксперимента показано, что учет многократных столкновений приводит к необходимости пересмотра уравнения (2). Если формально ввести обобщенный кинематический множитель $\tilde{K}(\theta; m_1, m_2)$, который, как и ранее, определяется в виде отношения кинетической энергии иона после двух столкновений к его исходной энергии, то для очень тонкой мишени сигнал будет представлять пик конечной ширины, что можно записать в виде аналогичном уравнению (2):

$$\left[E_{\min}^{(2)}, E_{\max}^{(2)} \right] = E_0 \tilde{K}(\theta; m_1, m_2), \quad (3)$$

причем

$$E_{\min}^{(2)} \leq E_{\max}^{(1)} \leq E_{\max}^{(2)}. \quad (4)$$

При увеличении толщины мишени интервал $\left[E_{\min}^{(2)}, E_{\max}^{(2)} \right]$ расширяется. При этом, как и в модели однократных столкновений, его высокоэнергетическая граница остается неизменной и равной $E_{\max}^{(2)}$.

Более глубокому пересмотру должно быть подвергнуто определение сечения двукратного рассеяния. Действительно, согласно определению дифференциальное сечение рассеяния $\sigma(\theta)$ – это доля числа частиц, рассеиваемых в единичный телесный угол в направлении угла рассеяния θ , при условии, что в падающем плоскопараллельном пучке в одну секунду через единичную поверхность проходит одна частица [17]. Однако после первого рассеяния траектории ионов образуют расходящийся, а не параллельный пучок, и поэтому ко второму столкновению обычная формула для сечения не применима. Как следствие, при описании вклада двукратного рассеяния необходимо рассматривать рассеяние на двух пространственно разделенных атомах мишени в виде единого события. Падающий пучок при этом является плоскопараллельным, и мы возвращаемся в область применимости понятия дифференциального сечения.

Заметим, что рассеивающий центр – два пространственно разделенных атома мишени – в общем случае не обладает сферической симметрией и поэтому момент импульса частицы в акте взаимодействия с таким центром не сохраняется. В этом отношении сечение двукратного рассеяния радикально отличается от сечения однократного рассеяния на сферически симметричном потенциале.

В рассмотренных выше работах, посвященных учету вклада многократных столкновений в спектр РОР сечение двукратного рассеяния факторизовывалось, т.е. представлялось в виде произведения сечений отдельных одночастичных процессов. Ниже показано, что такая процедура некорректна и приводит к появлению погрешности, величину которой трудно оценить заранее.

4 РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Для доказательства высказанных выше утверждений были выполнены две серии компьютерных экспериментов. В первой серии измерялось

энергетическое распределение частиц, которые после двух столкновений рассеиваются на угол θ . Измерения производились с помощью динамической компьютерной модели газа твердых сфер [22]. Суть эксперимента состояла в том, что для иона массы m_1 с исходной энергией E_0 случайным образом выбирался партнер для первого столкновения – неподвижный атом мишени массы m_2 . При этом предполагалось, что распределение атомов является равномерным в плоскости, перпендикулярной вектору скорости иона. Далее рассчитывался результат первого столкновения и аналогичным образом выбирался партнер для второго столкновения. Зная скорость иона после двух столкновений, можно было рассчитать полный угол рассеяния θ и его кинетическую энергию, а следовательно, и величину обобщенного кинематического множителя \tilde{K} .

В эксперименте весь интервал возможных значений угла θ разбивался на конечное число отрезков шириной $\Delta\theta$ и для каждого иона определялся тот интервал, в который он попадает после двух столкновений. Среди всех частиц, зарегистрированных в данном интервале, выбиралась та, которая характеризуется минимальным \tilde{K}_{\min} (соответственно – максимальным \tilde{K}_{\max}) значением обобщенного кинематического множителя. На рис. 3 представлены графики функций $\tilde{K}_{\min}(\theta)$, $\tilde{K}_{\max}(\theta)$ для разного полного числа испытаний N .

Из рисунка видно, что для однократного рассеяния все частицы с данным углом рассеяния θ имеют одну и ту же энергию $E_0 K(\theta; m_1, m_2)$. Однако для двух столкновений частицы могут обладать любой энергией из некоторого интервала, причем границы этого интервала при увеличении числа испытаний сходятся к некоторым вполне определенным значениям. Кроме того, из рисунка видно, что для любого угла рассеяния $\theta \neq 180^\circ$ учет кратных столкновений приводит к появлению частиц, которые имеют энергию большую, чем $E_{\max}^{(1)}$, и эти частицы, очевидно, будут вносить вклад в высокоэнергетическую часть спектра РОР. Величина этого вклада определяется значением дифференциального сечения многократных столкновений, которые были измерены во второй серии компьютерных экспериментов.

Суть отдельного эксперимента второй серии состояла в том, что из плоскопараллельного пучка частиц, ориентированного вдоль оси X , случайным образом выбиралась отдельная частица, а затем прослеживалась ее траектория до момента попадания в детектор. Частица рассеивалась на первоначально неподвижном атоме мишени (который помещался в начале координат), а затем могла испытать еще одно рассеяние на втором (также первоначально неподвижном) атоме.

Полный телесный угол 4π был разделен на конечное число интервалов (в эксперименте на 2500), каждый из которых охватывал одинаковый телесный угол и задавался полярным углом θ и азимутальным углом φ . Полярный угол отсчитывался от оси X , а азимутальный – от некоторой проходящей через ось X фиксированной плоскости. Была выполнена серия компьютерных экспериментов, в каждом из которых центр второго атома имел одни и те же угловые координаты (θ, φ) (в эксперименте рассматривался случай $\theta = \pi/2$, $\varphi = \pi$), но располагался на разном расстоянии от первого атома.

В модели твердых сфер характерным линейным масштабом является сумма R радиусов частиц, в данном случае – частицы пучка и атома мишени. В экспериментах варьировалось расстояние Δ между первым и вторым атомом мишени, которое измерялось в единицах R . Отдельный

эксперимент продолжался до тех пор, пока число частиц пучка, испытавших два последовательных рассеяния, не достигало 10^7 . Для сравнения был также выполнен эксперимент по измерению в тех же условиях обычного дифференциального сечения однократного рассеяния.

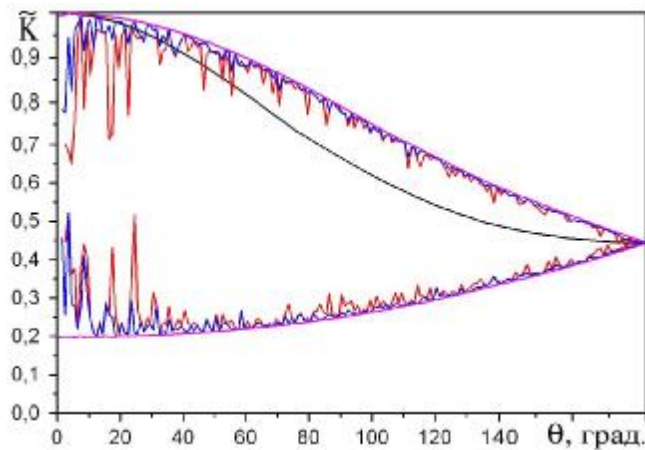


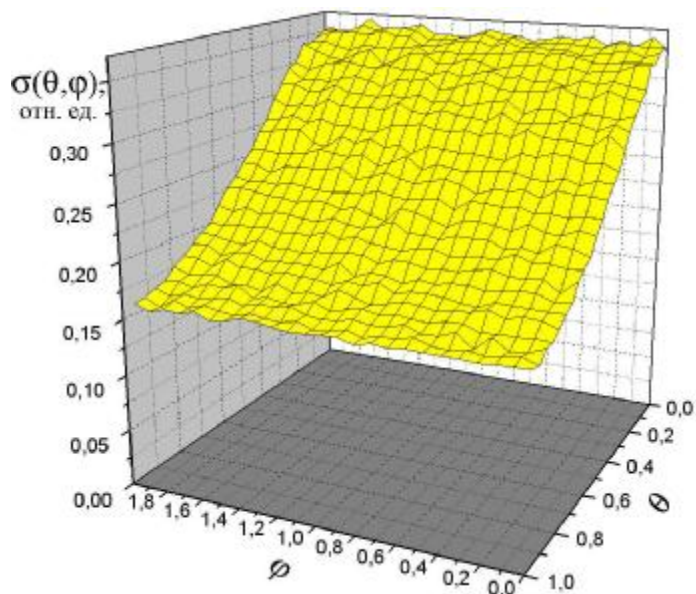
Рисунок 3 – Зависимости $\bar{K}_{\min}(\theta)$ и $\bar{K}_{\max}(\theta)$, измеренные с помощью модели твердых сфер для следующих параметров компьютерного эксперимента: $m_1/m_2 = 0,2$, $\Delta\theta = 1^\circ$ и $N = 4\,000$ (красные кривые), $N = 10\,000$ (синие кривые) и $N = 1\,000\,000$ (пурпурные кривые). Черная кривая соответствует результатам аналогичного эксперимента для однократного рассеяния

Заметим, что полное сечение двукратного рассеяния быстро убывает при увеличении расстояния Δ . Поэтому лишь незначительная доля разыгрываемых в эксперименте ионов испытывает два последовательных столкновения. Большинство из них либо испытывает только одно столкновение, либо не испытывает столкновений вообще. Как следствие, суммарное число разыгрываемых ионов может стать намного больше 10^7 . С учетом того, что каждый ион характеризуется двумя случайными начальными координатами, суммарное число обращений к генератору случайных чисел может в отдельных экспериментах достигать порядка 10^{10} . Это обстоятельство выдвигает жесткие требования к периоду такого генератора. Поэтому при моделировании использовался предложенный Лекюйе [23] метод, основанный на объединении нескольких мультипликативных линейных конгруэнтных датчиков с различными периодами. Период такого объединенного генератора, как правило, очень большой. Для параметров, использованных в компьютерных экспериментах, он составлял $\approx 2,3 \cdot 10^{18}$.

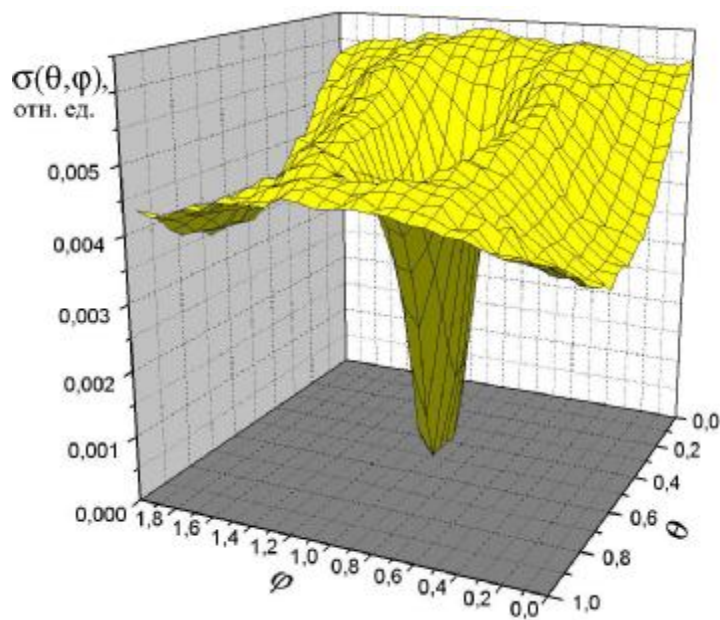
Результаты компьютерных экспериментов представлены на рис.4. Как и следовало ожидать, сечение $\sigma(\theta, \varphi)$ однократного рассеяния не зависит от азимутального угла φ , что является следствием наличия в рассматриваемой системе оси симметрии, совпадающей с полярной осью. Другими словами, система симметрична относительно любой из пучка плоскостей, проходящих через полярную ось. Дифференциальное сечение отлично от нуля для всех значений углов θ и φ , т.е. налетающая частица после рассеяния на более тяжелом, первоначально неподвижном атоме мишени, может быть детектирована в любом телесном угле.

Симметрия пары атомов намного ниже — из всех плоскостей симметрии, характерных для однократного рассеяния, остается одна, а именно плоскость, в которой лежит как ось пучка, так и отрезок, соединяющий центры атомов. В рассматриваемых экспериментах — это

плоскость, соответствующая азимутальному углу $\varphi = \pi$. Из рис.4 видно, что дифференциальное сечение $\sigma(\theta, \varphi)$ двукратного рассеяния действительно симметрично относительно этой плоскости. Понижение симметрии функции $\sigma(\theta, \varphi)$ отражает первое отличие процессов однократного и двукратного рассеяния.



a



б

Рисунок 4 – Результаты компьютерных экспериментов по измерению в рамках модели газа твердых сфер дифференциального сечения $\sigma(\theta, \varphi)$: а – однократного рассеяния; б – двукратного рассеяния для $\Delta = 4R$. Величина сечения приведена в единицах, для которых $R = 1$

Второе отличие связано с монотонным убыванием величины сечения по мере возрастания расстояния Δ между рассеивающими центрами. Это связано с тем, что увеличение Δ приводит к уменьшению величины телесного угла $\Delta\Omega$, в который после первого рассеяния должна попасть налетающая частица, чтобы испытать второе рассеяние. Заметим, что в использованных на рис.4 единицах полное сечение однократного рассеяния должно быть равно π . Это условие было, во-первых, использовано при тестировании разработанного программного обеспечения, а во-вторых, позволило оценить нижнюю границу числа необходимых испытаний.

Третье, наиболее существенное, отличие состоит в том, что для двукратного рассеяния характерно существование области "тени", в которую не попадают частицы исходного пучка. На рис. 4 область тени соответствует резкому уменьшению величины дифференциального сечения до нуля. Появление такой области связано с тем, что после первого рассеяния траектории ионов образуют расходящийся пучок, и второй атом, помещенный в этот пучок, будет отбрасывать "тень", угловые характеристики которой определяются величиной телесного угла $\Delta\Omega$.

Таким образом, выполненные компьютерные эксперименты доказывают, что сечения однократного и двукратного рассеяний качественно отличаются друг от друга и поэтому последнее нельзя факторизовать, то есть представить в виде произведения двух отдельных сечений однократных рассеяний. Некорректное определение сечения двукратного рассеяния является общим недостатком выполненных до сих пор исследований, посвященных учету вклада многократных столкновений в спектр РОР.

5 ВЫВОДЫ

В работе проанализированы существующие в настоящее время подходы к описанию вклада двукратных столкновений в спектр РОР. С физической точки зрения эти вклады определяются теми же процессами взаимодействия налетающего иона с электронной и ионной подсистемами мишени, что и в модели однократных столкновений. Однако это не означает, что можно без изменений пользоваться способами формального описания этих процессов, что было проиллюстрировано прямыми измерениями в компьютерных экспериментах.

В экспериментах многократно интегрировались уравнения движения некоторой классической системы для случайных начальных условий. Эти условия адекватно отражали случайный характер взаимодействия отдельного иона пучка с атомами мишени. В предложенной модели был выбран наиболее простой вид потенциала взаимодействия, что позволило получить статистически достоверные результаты и выявить ряд качественных особенностей, которые могут иметь место для любого потенциала.

Введено понятие обобщенного кинематического множителя. Проанализированы его отличия от соответствующей величины для случая однократного рассеяния. Показано, что кратные столкновения полностью определяют высокоэнергетическую часть спектра РОР.

Выявлены качественные особенности дифференциального сечения двукратного рассеяния, которые сохраняются и при рассмотрении других потенциалов. Полученные данные компьютерных экспериментов могут быть использованы в дальнейшем при разработке эффективной схемы сечения кратного рассеяния.

Автор выражает благодарность профессору Г.С. Воробьеву за полезные обсуждения работы.

SUMMARY

THEORETICAL DESCRIPTION OF PLURAL SCATTERING PROCESSES IN THE ION BEAM BASED METHODS OF ANALYSIS

A.I. Kulment'ev

Applied Physics Institute, 58, Petropavlovskaya St., 40030, Sumy, Ukraine

In the paper the problem of plural scattering treatment in the ion beam based methods was analyzed. Different existing approaches to this problem in the RBS spectrometry were considered. In the framework of developed dynamical model set of computer experiments were carried out and both energy distribution of double scattering particles and probability of such processes were measured. Qualitative distinctions of those quantities in single scattering model and double scattering one was analyzed. It was shown that for proper treatment of double scattering events in RBS spectra it is necessary to develop new approach for differential cross-section calculation.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Брандон Д., Каплан У. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля. – М.: Техносфера, 2006. – 384 с.
2. Методы анализа на пучках заряженных частиц / А.А. Ключников, Н.Н. Пучеров, Т.Д. Чеснокова, В.Н. Щербин – К.: Наук. думка, 1987. – 152 с.
3. Chu W.K., Mayer J.M., Nicolet M.-A. Backscattering Spectrometry. – New York: Academic Press, 1978. – 384 p.
4. Barradas N.P. Double scattering in grazing angle Rutherford backscattering spectra // Nucl. Instr. and Meth. – 2004. – V.B225. – P.318-330.
5. Weber A., Mommsen H., Sarter W., Weller A. Double scattering in Rutherford backscattering spectra // Nucl. Instr. and Meth. - 1982. – V.198. – P.527-533.
6. Scherzer B.M.U., Borgesen P., Nicolet M.-A., Mayer J.W. Determination of stopping cross sections by Rutherford backscattering / Ion Beam Surface Layer Analysis / Ed. O.Meyer, G.Linker, F.Kдрpeler. – New York: Plenum Press, 1976. –P.33-46.
7. Blewer R.S. Some practical aspects of depth profiling gases in metals by proton beams / Ion Beam Surface Layer Analysis /Ed. O.Meyer, G.Linker, F.Kдрpeler. – New York: Plenum Press, 1976. –P.122-130.
8. Gurbich A.F. On the origin of the low energy tail in charged particle spectra // Nucl. Instr. and Meth. -1995. – V.A364. – P.496-500.
9. Кульмент'ев О.І. Розв'язування рівняння виходу в задачі аналізу спектра зворотного розсіяння. 1 // Укр.фіз.журн. - 2003. – Т.48, №3. – С.281-289.
10. Кульмент'ев О.І. Розв'язування рівняння виходу в задачі аналізу спектра зворотного розсіяння. 2 // Укр.фіз.журн. - 2003. – Т.48, №5. – С.492-499.
11. Weber A., Mommsen H. Background in Rutherford backscattering spectra: a simple formula // Nucl. Instr. and Meth. - 1983. – V.204. – P.559-563.
12. Weber A., Fazly Q., Mommsen H. Background in proton-, alpha- and ¹²C- Rutherford backscattering spectra // Nucl. Instr. and Meth. - 1984. – V.B4. – P.79-87.
13. Andersen H.H., Besenbacher F., Loftager P., Müller W. Large-angle scattering of light ions in the weakly screened Rutherford region // Phys. Rev. A. - 1980. - V.21, N6. - P.1891-1901.
14. Mayer M. SIMNRA User's Guide // Report IPP 9/113 – Garching: Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, 1997. – 215 p.
15. Eckstein W., Mayer M. Rutherford backscattering from layered structures beyond the single scattering model // Nucl. Instr. and Meth. - 1999. – V.B153. – P.337-344.
16. Mayer M. Ion beam analysis of rough thin films // Nucl. Instr. and Meth. - 2002. – V.B194. – P.177-186.
17. Сунакава С. Квантовая теория рассеяния. – М.: Мир, 1979. – 268 с.
18. Steinbauer E., Bauer P., Biersack J. Monte-Carlo simulation of RBS spectra - Comparison to experimental and empirical results // Nucl. Instr. and Meth. - 1990. – V.B45. – P.171-175.
19. Bauer P., Steinbauer E., Biersack J. The width of an RBS spectrum: influence of plural and multiple scattering // Nucl. Instr. and Meth. - 1992. – V.B64. – P.711-715.
20. Steinbauer E., Bauer P., Biersack J., Bortels G. What can we learn about high-energy ion-scattering from computer-simulations // Rad. Eff. Def. Solids. -1994. – V. 130-131. – P.77-86.
21. Li M.M., O'Connor D.J. Simulation of multiple scattering background in heavy ion backscattering spectrometry //Nucl. Instr. and Meth. - 1999. – V.B149. – P.460-468.
22. Кульмент'ев А.И., Кульмент'ева О.П. ЭВМ-эксперименты с одноатомными газами. I. Компьютерная модель идеального газа. // Вісник СумДУ. - 1997. – N1(7). – С.100-104.
23. Brandt S. Data analysis. Statistical and computational methods for scientists and engineers. – N.-Y.: Springer-Verlag, 2001. – 686 p.

Поступила в редакцию 18 октября 2006 г.