

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-87-249

Р.А.Ильхамов*, Д.Махайдик

**ПРОГРАММА ДЛЯ АНАЛИЗА СПЕКТРОВ
УПРУГО РАССЕЯННЫХ ИОНОВ
МЕТОДОМ МОДЕЛИРОВАНИЯ**

* Научно-исследовательский институт
прикладной физики ТашГУ

ВВЕДЕНИЕ

Физическое явление упругого рассеяния на большие углы ионов на ядрах атомов хорошо известно. Теоретическое описание этого явления достаточно подробно дано в работе^{/1/}, где показаны основные направления его прикладного использования. В последнее время применение упругого рассеяния в прикладных исследованиях достигло большого развития. Метод широко используется при определении концентрации атомов, ввиду того, что он дает количественные результаты, информацию о распределении концентрации атомов по глубине образца и не требует калибровки с использованием стандартов. Эти особенности метода позволяют проводить анализ сложных многослойных образцов, которые невозможно количественно анализировать каким-либо другим способом. Как правило, проведение количественного анализа оказывается слишком сложным для вычислений вручную. Поэтому было разработано несколько вычислительных программ для анализа спектров упругого рассеяния. Существует два подхода при анализе спектра с помощью ЭВМ. Первый подход — это деконволюция экспериментального спектра, т.е. получение спектра, свободного от влияния функции разрешения спектрометрического тракта. Математический аппарат, необходимый для метода деконволюции, весьма сложен и в некоторых случаях приводит к нефизическим результатам. В этой связи такой подход не нашел широкого применения, хотя на этом принципе построена, например, программа, опубликованная в работе^{/2/}. Суть второго подхода состоит в построении модели образца (количество и толщина слоев, их химический состав), для которого генерируется теоретический спектр. Этот спектр сравнивают с экспериментальным и таким образом получают ответ на вопрос, насколько наше представление об образце совпадает с настоящим образцом. Такой подход реализован в работе^{/3/}. В связи с тем, что спектр упругого рассеяния в случае многослойной структуры может оказаться очень сложным, требуется предварительная информация, на основе которой можно построить начальную модель образца. Исходя из полученных отклонений экспериментального и теоретического спектров, модифицируют исходную модель и вычисления повторяют. Таким образом, в нескольких итерациях получается модель образца, для которой теоретический спектр хорошо совпадает с экспериментальным. Преимуществом такого подхода является его универсальность. Этим методом можно анализировать образцы практически любой степени сложности. В настоящей статье описывается диалоговая программа RBSM, в которой реализован алгоритм анализа спектров упругого рассеяния методом моделирования теоретического спектра.

ОБЩАЯ СХЕМА АНАЛИЗА СПЕКТРОВ

При моделировании исследуемый образец разбивается по глубине на n слоев, в пределах каждого из которых dE/dx можно считать постоянными. Максимальное значение n может быть равно 25. Задается химический состав слоев, в каждом из которых может быть до пяти элементов. Эти слои необходимо отличать от созданных использованной технологией, о которых речь шла в предыдущем параграфе. Схема работы с программой RSBM изображена на рис. 1. При работе с ней используются следующие файлы:

- *.DAT — файл с экспериментальным спектром,
- *.EXP — файл с входными экспериментальными данными,

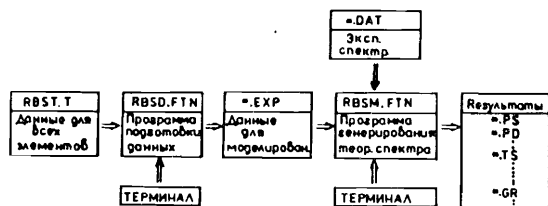


Рис. 1. Общая схема компьютерной обработки спектров упруго рассеянных ионов.

Для создания файла *.EXP используется вспомогательная программа RBSD, которая вызывает файл RBST.T. Последний содержит необходимые табличные данные для каждого элемента от водорода до висмута: порядковый номер элемента, массовое число, атомная плотность и данные по dE/dx . Результаты расчетов заносятся в файлы *.PS, *.PD, *.TS, *.GR, о которых будет сказано ниже. Программа разбита на самостоятельные сегменты, последовательно вызываемые в оперативную память. На рис. 2 изображена структура программы RBSM, где:

RBSM1 — вспомогательный сегмент, содержащий информацию об общей последовательности проведения анализа, о подготовке входа данных, о вызове подпрограмм в каждом из сегментов и о виде транслирования и компиляции программы, если это необходимо пользователю.

RBSM2 — основной сегмент, обеспечивающий генерирование спектра. Во время генерирования последовательно вычисляются парциальные спектры от каждого элемента и каждого слоя, которые затем записываются в отдельных фай-

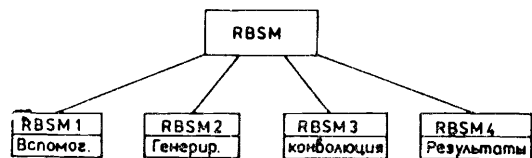


Рис. 2. Структура программы RBSM.

лах *.PS (см. рис. 1), создаваемых программой во время вычислений. Таким же образом программа создает для каждого парциального спектра файл *.PD (см. рис. 1), где содержится шкала по глубине (перевод каналов в нанометры). Генерирование протекает следующим образом:

1) Прежде всего определяется канал, в котором находится начальная граница спектра. Начиная с этой границы для каждого канала вычисляется высота спектра и глубина от поверхности образца, принадлежащая этому каналу. Этот цикл повторяется до тех пор, пока вычисленная толщина не больше толщины слоя, заданной в модели. Процедура повторяется для каждого элемента каждого слоя.

2) После окончания генерирования парциальных спектров пользователь решает вопрос, нужно ли учесть влияние страгглинга и разрешения измерительного тракта на форму спектра. Если в этом нет необходимости, то программа суммирует все парциальные спектры и таким образом создает полный спектр упруго рассеянных ионов для использованной модели образца, записываемый во вновь созданный файл *.TS (рис. 1).

RBSM3 — сегмент, в котором учитывается влияние страгглинга и разрешения измерительного тракта. Эта часть программы вызывается в случае, если пользователь решил модифицировать генерированный спектр с учетом влияния этих факторов. В программе реализован подход учета страгглинга, в котором модифицируется только граница спектра. Это приближение в большинстве случаев является достаточно хорошей аппроксимацией^{1/}. Влияние разрешающей способности измерительного тракта реализовано заменой содержания каждого канала гауссовским распределением с заданной дисперсией.

RBSM4 — сегмент выдачи результатов. Если пользователь решает, что полученное согласие теоретического и экспериментального спектров достаточно хорошее и не требует выполнения последующих итераций, то на этой стадии анализа он может записать результаты вычислений в файлы *.GR (рис. 1). Первая версия этого файла всегда содержит таблицы с данными эксперимента и полное описание модели образца, с помощью которой получено наилучшее согласие спектров. В этой же таблице находится пересчет каналов спектра на глубину слоя образца в нанометрах и в атомах на $см^2$. В следующих версиях файла записываются экспериментальный и теоретический спектры или части этих спектров; количество этих файлов определяет пользователь. Эти файлы после распечатки информируют о степени достигнутого согласия в табличном и графическом виде. Точное сравнение спектров может быть проведено по графическому изображению указанных спектров, полученному на графопостроителе. Таким же образом в случае необходимости можно получить изображение и спектров от отдельных слоев, находящихся в файлах *.PS.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для ЭВМ PDP-11/70 в операционной системе RSX-11M-PLUS реализована диалоговая вычислительная программа RBSM для анализа энергетических спектров упруго рассеянных ионов, измеряемых на пучке ионов ^4He или ^1H .

Для заданной модели образца программа моделирует теоретический спектр и изображает его совместно с экспериментальным спектром на алфавитно-цифровом дисплее. Пользователь после визуального сравнения спектров модифицирует исходную модель образца и повторяет вычисления до тех пор, пока не получится удовлетворительное согласие спектров. Для проведения расчетов образец разбивается на глубинные слои числом до 25, в каждом из которых может содержаться до пяти элементов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Chu W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A. *Backscattering Spectrometry*. Academic Press, New York, 1978.
2. Ziegler J.F., Baglin J.E.E. — *J. Appl. Phys.*, 1971, 42, p.2031.
3. Saunders P.A., Ziegler J.E. — *Nucl. Instr. and Meth.*, 1983, 213, p.67.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 апреля 1987 года.

Ильхамов Р.А., Махайдик Д. P10-87-249
Программа для анализа спектров
упруго рассеянных ионов методом моделирования

Описана диалоговая вычислительная программа для анализа сложных многослойных образцов. Метод расчета основан на моделировании энергетического спектра упруго рассеянных ионов и сравнении его с экспериментальным спектром, измеренным на пучке ионов водорода или гелия-4. При проведении моделирования учитывается влияние на форму спектра энергетического страгглинга ионов и разрешения измерительного тракта. Программа написана на языке ФОРТРАН-77 в операционной системе RSX-11M-PLUS для ЭВМ PDP-11/70.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов.

Il'khamov R.A., Machajdik D. P10-87-249
The Program for Modelling of the Spectra
of Backscattered Ions

The interactive computer program for the analysis of complex multilayer samples is described. The method is based on the modelling of the energy spectra of backscattered ions and their subsequent comparison with experimental ones measured with proton or helium-4 ion beams. The energy straggling of ions and energy resolution were taken into account. The developed program has been written in FORTRAN-77 for PDP-11/70 computer operated under RSX-11M-PLUS system.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987