

**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

**P10-86-774**

**Р.А.Ильхамов, Ли Зен Хо, Д.Махайдик,  
Г.М.Осетинский**

**ПРОГРАММА РАСЧЕТА  
КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ПРОФИЛЯ ВОДОРОДА  
ПО ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРАМ  
ПРОТОНОВ ОТДАЧИ**

**1986**

## ВВЕДЕНИЕ

Целью настоящей работы является разработка методики расчета концентрационного профиля водорода на основании энергетического спектра протонов отдачи, образующихся при бомбардировке исследуемого образца пучком ионов  ${}^4\text{He}$  с энергией 2-3 МэВ. Изучение этой проблемы имеет большое прикладное значение, поскольку присутствие водорода оказывает влияние на электрические и физико-химические свойства многих материалов. Успешное решение этой задачи требует использования, для получения конечного результата, программы расчета на ЭВМ. Представляемый здесь метод расчета глубинных распределений атомов водорода основан на моделировании теоретического спектра протонов отдачи и сравнении его с экспериментальным спектром. При проведении моделирования учитывается влияние на форму спектра энергетического страгглинга ионов  ${}^4\text{He}$  и протонов отдачи, а также влияние разрешения спектрометрического тракта. Отправной точкой расчетов является задаваемая модель образца, которая может быть в процессе подгонки изменена с целью приближения моделированного спектра к экспериментальному. Окончательным результатом по концентрационному профилю водорода является тот вариант модели, который обеспечивает удовлетворительное совпадение теоретического спектра с экспериментальным.

Приведем кратко схему опыта /рис. 1/, более подробное описание которой дано в нашей работе /1/. Как видно из рисунка, ионы  ${}^4\text{He}$  с энергией  $E_0$  падают на мишень под углом  $\theta_1$  к нормали поверхности. При взаимодействии падающих ионов с атомами водорода образуются протоны отдачи, которые регистрируются детектором, установленным под углом  $\theta$  к оси пучка. Как видно из рисунка, между мишенью и детектором устанавливается  $\text{Al}^2$  фильтр для поглощения ионов  ${}^4\text{He}$ , упруго рассеиваемых в направлении детектирования. Ионы  ${}^4\text{He}$ , испытывающие столкновения с атомами водорода на поверхности мишени, образуют протоны отдачи с энергией  $kE_0$ , которые после прохождения  $\text{Al}^2$  фильтра регистрируются детектором с энергией  $(kE_0)^4$ , определяющей верхнюю границу спектра протонов отдачи. Здесь  $k$  - кинематический фактор отдачи:

$$k = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cos^2 \theta,$$



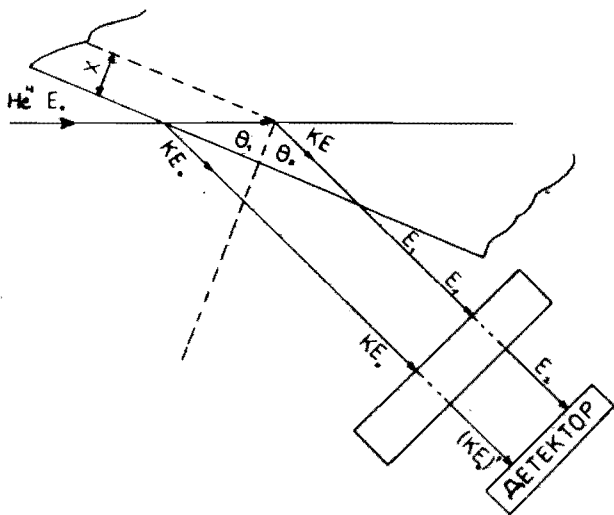


Рис. 1. Схема опыта.

где  $M_1$  и  $M_2$  - масса иона  ${}^4\text{He}$  и протона соответственно. Ионы  ${}^4\text{He}$ , достигающие глубины  $x$  с энергией  $E(x)$ , дают выход протонов, регистрируемых детектором с энергией  $E_2(x)$ . При этом эти протоны на пути к детектору имеют соответственно энергии: сразу после соударения  $kE$ , а после прохождения мишени  $E_1$ /см. рис. 1/. Энергия регистрируемых протонов отдачи  $E_2(x)$ , выбиваемых с глубины  $x$ , определяется уравнением

$$E_2(x) = k(E_0 - \int_0^{x/\cos\theta_1} S_a(x') dx') - \int_0^{x/\cos\theta_2} S_p(x') dx' - \int_0^m S(x') dx', \quad /2/$$

где  $k$  - кинетический фактор.

В уравнении /1/:  $E_0$  - энергия пучка ионов  ${}^4\text{He}$ . Второй член, заключенный в скобки, представляет потерю энергии ионов  ${}^4\text{He}$ , проходящих путь от поверхности до глубины  $x$ . Третий член представляет потерю энергии протонов, проходящих путь с глубины  $x$  до поверхности мишени в направлении детектирования. Четвертый член представляет потерю энергии протонами  $\Delta E$  в фольге толщиной  $m$ . В указанной формуле  $S_a$  и  $S_p$  - тормозные способности для ионов  ${}^4\text{He}$  и протонов отдачи соответственно. В дальнейшем, предполагая, что глубина  $x$  настолько мала, что в ее пределах тормозные способности постоянны, можно получить соотношение, связывающее энергию  $E_2(x)$  с глубиной  $x$ , с которой выбиваются протоны отдачи. Это соотношение имеет вид

$$E_2 = kE_0 - [S]x - \Delta E_{\phi}, \quad /3/$$

где

$$[S] = k \frac{S_a(E_0)}{\cos\theta_1} + \frac{S_p(kE_0)}{\cos\theta_2}; \quad /4/$$

$S_a$  и  $S_p$  определены ранее;  $\Delta E_{\phi}$  - потеря энергии протонов отдачи в фильтре.

Рассмотрим, как происходит построение теоретического спектра на основе предполагаемой модели образца. Образец делится на тонкие слои толщиной  $\Delta x_i$ , выбранные таким образом, чтобы протоны отдачи, выбиваемые из задней и передней поверхностей слоя, падая в детектор, имели бы фиксированную разницу в энергии  $\delta E$ , равную энергетической ширине канала в многоканальном анализаторе импульсов.

Для связи величины  $\delta E$  с толщиной  $\Delta x_i$  рассмотрим, согласно рис. 2, прохождение протонов отдачи от передней и задней по-

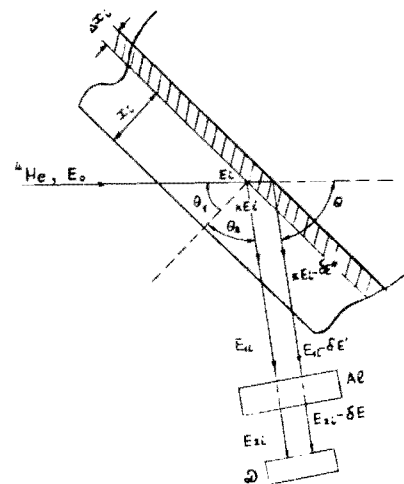


Рис. 2. Схема послойного разбиения образца для моделирования энергетического спектра протонов отдачи.

верхностей слоя  $x_i$  к детектору. Пусть на исследуемый слой  $x_i$  падают ионы  ${}^4\text{He}$  с энергией  $E_i$ . Тогда протоны отдачи от передней поверхности слоя в направлении угла детектирования  $\theta_2$  будут иметь энергию  $kE_i$ , а после прохождения ими слоя  $\Delta x_i$  - энергию  $kE_i - \delta E''$ ; где  $\delta E'' = [S(E_i)] \Delta x_i$ ,  $\delta E''$  - разница в энергии протонов отдачи при выходе их из передней и задней поверхностного слоя.

Здесь параметр энергетических потерь  $[S(E_i)]$  определяется по аналогии с /4/:

$$[S(E_i)] = \frac{k S_a(E_i)}{\cos\theta_1} + \frac{S_p(kE_i)}{\cos\theta_2}, \quad /5/$$

где  $S_a(E_i)$  и  $S_p(kE_i)$  - постоянные значения  $\frac{dE}{dx}$  для энергии  $E_i$  налетающих ионов  ${}^4\text{He}$  и энергии  $kE_i$  протонов отдачи соответственно. Индекс  $i$  в указанных соотношениях относится к  $i$ -му слою на глубине  $x_i$ .

В дальнейшем протоны отдачи, рассеянные от передней и задней поверхностей, на выходе из мишени будут иметь энергии  $E_{1i}$  и  $E_{1i} - \delta E'$  соответственно, где  $\delta E'$  - разница в энергии протонов отдачи от этих поверхностей при выходе протонов отдачи из мишени. После прохождения фильтра эти энергии изменяются до значений  $E_{2i}$  и  $E_{2i} - \delta E$  /см. рис. 2/. Разность этих энергий и определяет  $\delta E$ .

Дальнейший этап расчета состоит в том, чтобы выразить  $\delta E''$  через энергетический интервал  $\delta E$  на позиции  $E_{2i}$  на спектре. Для этого рассмотрим потери энергии протонов отдачи на их пути выхода из мишени в направлении детектирования. Рассмотрим две частицы, энергии которых сразу после соударений на глубине  $x_i$  отличаются на  $\delta E''$ . Потери энергии на выходном пути описываются следующим образом:

$$\frac{x_i}{\cos \theta_2} = - \int_{kE_i}^{E_{1i}} \frac{dE}{S(E)}, \quad /6/$$

где  $S(E) = \frac{dE}{dx}$  - тормозная способность для протонов в мишени.

Т.к. толщина слоя  $\Delta x_i$  мала по сравнению с глубиной  $x_i$ , то можно считать, что протоны, выбиваемые соответственно с передней и задней поверхностей  $i$ -го слоя, проходят в направлении детектирования одинаковый путь в мишени, и можно написать равенство

$$\int_{kE_i}^{E_{1i}} \frac{dE}{S(E)} = \int_{kE_i - \delta E''}^{E_{1i} - \delta E'} \frac{dE}{S(E)}. \quad /7/$$

Поскольку  $\delta E''$  и  $\delta E'$  малы по сравнению с  $kE_i$  и  $E_{1i}$ , тогда, согласно работе В.К.Чу /2/, можно записать:

$$\frac{\delta E'}{S(E_{1,i})} = \frac{\delta E''}{S(kE_i)}, \quad /8/$$

откуда

$$\frac{\delta E''}{\delta E'} = \frac{S(kE_i)}{S(E_{1,i})}. \quad /9/$$

Аналогично, для прохождения протонов через тормозную фольгу можно записать, что

$$\int_{E_{1,i}}^{E_{2,i}} \frac{dE}{S(E)} = \int_{E_{1,i}}^{E_{2,i} - \delta E} \frac{dE}{S(E)}, \quad /10/$$

и

$$\frac{\delta E'}{\delta E} = \frac{S(E_{1,i})}{S(E_{2,i})}. \quad /11/$$

В конечном итоге, подставляя /11/ в /9/, получим связь между разницей в энергии протонов отдачи, выходящих соответственно из передней и задней поверхностей слоя, и энергетической шириной канала  $\delta E$ :

$$\frac{\delta E''}{\delta E} = \frac{S_M(kE_i)}{S_M(E_{1,i})} \frac{S_\Phi(E_{1,i})}{S_\Phi(E_{2,i})}. \quad /12/$$

Индексы "М" и "Ф" здесь относятся к потерям энергии соответственно в мишени и в фольге.

Тогда, подставляя полученное выражение /12/ в /5/, получим соотношение

$$\delta E = \frac{S_M(E_{1,i})}{S_M(kE_i)} \frac{S_\Phi(E_{2,i})}{S_\Phi(E_{1,i})} [S(E_i)] \Delta x_i, \quad /13/$$

которое осуществляет связь между шириной  $i$ -го слоя  $\Delta x_i$  и шириной  $i$ -го канала  $\delta E$  энергетического спектра. Таким образом, это соотношение дает возможность, начиная с поверхности мишени, провести соответствие между каждым каналом энергетического спектра и глубиной залегания в образце соответствующего слоя.

Дальнейший этап расчетов состоит в нахождении связи между высотой энергетического спектра и числом атомов водорода в единице объема внутри образца, где образуются протоны отдачи. Как уже указывалось ранее, каждая энергетическая ширина  $i$ -го канала в многоканальном анализаторе представляется  $i$ -м слоем толщины  $\Delta x_i$ , с которого идет выход в  $i$ -й канал. Поэтому число отсчетов  $N_i$  в канале  $i$  определяется двумя факторами: толщиной слоя  $\Delta x_i$  и числом атомов водорода  $N(x_i)$  в этом слое. Тогда, учитывая, что при угле падения  $\theta_1 > 0$  траектория пучка через  $i$ -й слой имеет длину  $\Delta x_i / \cos \theta_1$ , общее число протонов, детектируемое в  $i$ -м канале, будет:

$$N_i = \sigma(E_i) \Omega Q N(x_i) \Delta x_i / \cos \theta_1, \quad /14/$$

где  $\sigma(E_i)$  - дифференциальное сечение выхода протонов отдачи, вычисляемое для энергии  $E_i$  ионов  $^4\text{He}$ ;  $\Omega$  - телесный угол, стягиваемый детектором;  $Q$  - общее число ионов  $^4\text{He}$ , падающих на мишень. С учетом соотношения /13/ между  $\delta E$  и  $\Delta x_i$  это выражение можно записать в виде

$$N_i = \sigma(E_i) \Omega Q N(x_i) \frac{\delta E}{[S(E_i)] \cos \theta_1} \frac{S_M(kE_i)}{S_M(E_{1,i})} \frac{S_\Phi(E_{1,i})}{S_\Phi(E_{2,i})} \sqrt{15/}$$

Это выражение используется для расчета амплитуды спектра в  $i$ -м канале.

При моделировании важно ориентироваться в общих закономерностях описываемого метода. Рассмотрим эти закономерности:

1. По мере того, как падающий пучок проходит через образец, уменьшается энергия ионов  $^4\text{He}$ , возрастает сечение протонов отдачи, и как следствие этого возрастает выход  $N_i$ .

2. С другой стороны, из-за энергетической зависимости  $dE/dx$  этот эффект будет усиливаться или ослабляться. Заметим, что выход обратно пропорционален к  $[S(E_i)]$ .

3. Вклад в величину выхода от изменения отношений  $S_M(kE_i)/S_M(E_{1,i})$  и  $S_\Phi(E_{1,i})/S_\Phi(E_{2,i})$  с изменением энергии менее значителен по сравнению с  $\sigma(E_i)$  и  $[S(E_i)]$ .

4. Величина выхода практически не зависит от угла  $\theta_1$ . Это можно проследить по формуле  $\sqrt{15/}$ , где величина  $[S(E_i)]$  пропорциональна  $(\cos \theta_1)^{-1}$ .

При моделировании спектра протонов отдачи необходимо учитывать влияние на его форму энергетического страгглинга. В расчетах используется боровское приближение для страгглинга энергии после прохождения ионом  $Z_1$  слоя вещества с атомным номером  $Z_2$  и атомной плотностью  $N$  толщиной  $t$ :

$$\sigma_B^2 = 4\pi (Z_1 e^2)^2 N Z_2 t.$$

Общий страгглинг энергии регистрируемых протонов отдачи  $\sigma^2$  складывается из страгглинга в мишени  $\sigma_M^2$  и в фильтре  $\sigma_\Phi^2$ :  $\sigma^2 = \sigma_M^2 + \sigma_\Phi^2$ , где  $\sigma_M^2$ , в свою очередь, складывается из страгглинга ионов  $^4\text{He}$   $\sigma_{\text{He}}^2$  и страгглинга протонов отдачи  $\sigma_H^2$  следующим образом:  $\sigma_M^2 = k\sigma_{\text{He}}^2 + \sigma_H^2$ , где  $k$  - кинематический фактор для протонов отдачи.

#### ПРОГРАММА РАСЧЕТА

Для расчета и построения теоретического спектра на базе выбранной модели образца нами была разработана программа "ERDM".

Алгоритм, положенный в основу программы ERDM, учитывает ряд ограничений, налагаемых выбранной моделью: именно, любой образец представляется в виде определенного количества слоев, число которых не может превышать 25 и в пределах каждого из которых  $dE/dx$  и  $[S]$  можно считать постоянными; задаваемый химический состав может содержать до 5 элементов в каждом слое. Отметим, что данные слои не имеют отношения к элементарным слоям /упомянутым в предыдущем параграфе/, каждый из которых дает вклад в один канал спектра протонов отдачи.

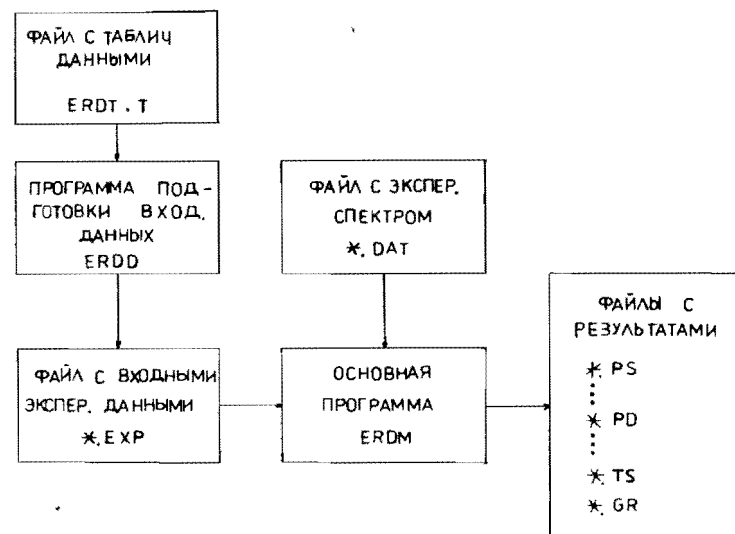


Рис. 3. Схема работы с программой ERDM.

Блок-схема работы с программой ERDM изображена на рис. 3. При работе с программой используются следующие файлы:

\*.DAT - файл с экспериментальным спектром,

\*.EXP - файл с входными экспериментальными данными, куда входят: энергия ионов  $^4\text{He}$ ; геометрия опыта; калибровка энергетической шкалы; общее число ионов  $^4\text{He}$ , падающее на мишень; телесный угол детектора; разрешение измерительного тракта, а также данные модели образца: количество, толщина и стехиометрический состав каждого слоя.

Для создания файла \*.EXP используется вспомогательная программа ERDD, которая вызывает файл ERDT.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, которые последовательно вызываются в оперативную память по мере необходимости /см. рис. 4/.

ERDM1 - вспомогательный сегмент, вызываемый пользователем по мере необходимости при работе с программой и содержащий текстовую информацию о структуре программы ERDM, о назначении составляющих подпрограмм сегментов ERDM1, ERDM2, ERDM3, ERDM4, об общей последовательности анализа, о подготовке входных данных и, наконец, о виде транслирования и компоновке программы ERDM.

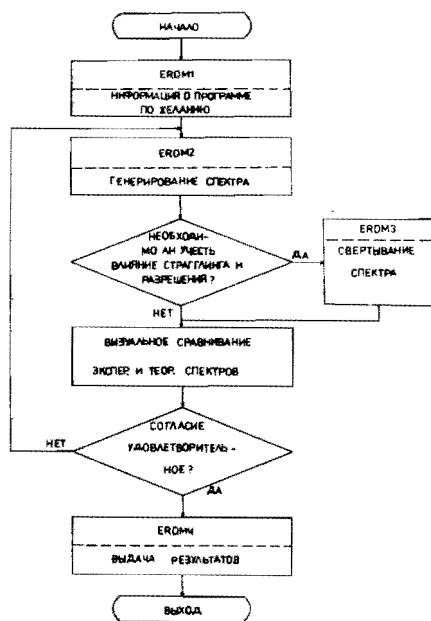


Рис. 4. Структура программы ERDM.

ERDM2 является основным сегментом, обеспечивающим генерирование спектра. Во время генерирования последовательно вычисляются парциальные спектры от каждого слоя, которые затем записываются в отдельных файлах \*.PS;1...,\*.PS;n, где n – количество слоев /см.рис.3/, создаваемых программой во время вычислений. Таким же образом программа создает для каждого парциального спектра файлы \*.PD;1...,\*.PD;n /см.рис.3/, где содержится шкала по глубине /перевод каналов в нанометры/. Генерирование протекает следующим образом:

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

2/ После окончания генерирования парциальных спектров пользователь определяет необходимость учета влияния страгглинга и разрешения на форму генерируемого спектра. Это осуществляется с помощью подпрограмм сегмента ERDM3. Влияние страгглинга в мишени и в фольге и влияние разрешения измерительного тракта реализовано заменой содержания каждого канала гауссовским распределением с дисперсией, являющейся квадратичной суммой дисперсии этих трех компонент. В итоге программа суммирует все парциальные спектры, вычисляет полный спектр протонов отдачи для используемой модели образца, записывая его в рабочий файл \*.TS;1.

ERDM4 – сегмент выдачи результатов. По желанию, при полученном достаточно хорошем согласии теоретического и экспериментального спектров, не требующем дополнительных итераций, результаты вычислений могут быть записаны в рабочие файлы \*.GR /рис. 3/. Первая версия этого файла содержит таблицы с данными эксперимента и полное описание модели образца, с помощью которой получено наилучшее согласие спектров. В этих же таблицах находится пересчет каналов спектра на глубину слоя образца в нанометрах и в атомах на см<sup>2</sup>. В следующих версиях файла \*.GR /рис. 3/ можно за-

писать полные экспериментальные и теоретические 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 экспериментального /файл \*.DAT/ и теоретического /файл \*.TS/ спектров, полученному на графопостроителе. Таким же образом в случае необходимости можно получить изображение спектров от отдельных слоев, находящихся в файлах \*.PS.

В качестве примера на рис. 5 представлено сравнение моделированного и измеренного спектров для образца кремния, имплантиро-

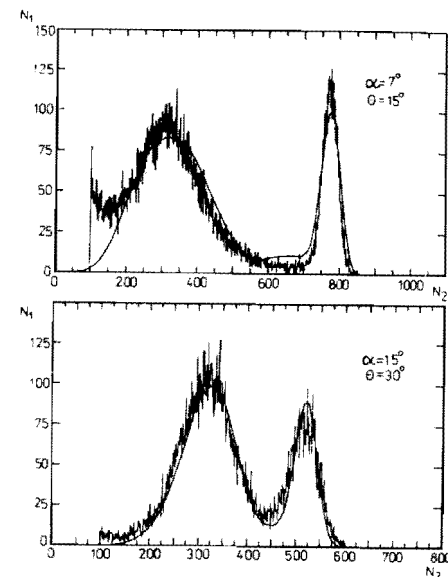


Рис. 5. Подгонка моделированного спектра к экспериментальному энергетическому спектру протонов отдачи для образца кремния, имплантированного водородом при энергии 30 кэВ и дозе  $8 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Энергия пучка ионов  $^4\text{He}$  2,4 МэВ. Подгонка проведена в двух геометриях:  $\theta_1 = 83^\circ$ ;  $\theta = 15^\circ$ ;  $\theta_1 = 75^\circ$ ;  $\theta = 30^\circ$ .

ванного водородом при энергии 30 кэВ и дозе  $8 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Энергия пучка ионов  $^4\text{He}$   $E_0 = 2,4 \text{ МэВ}$ . Геометрия эксперимента:  $\theta_1 = 75^\circ$ ,  $\theta = 30^\circ$ . На рисунке высокоэнергетичный пик соответствует водороду в слое углеводородов, осаждающихся на

мишень в условиях вакуума  $\sim 10^{-6}$ . Спектр строился по модели образца, где профиль концентрации атома водорода по глубине кремния описан симметричным гауссовским распределением с дисперсией  $\sigma = 700 \text{ \AA}$  и центром распределения  $x_0 = 3400 \text{ \AA}$ . Как видно из рисунка, это распределение достаточно хорошо аппроксимирует реальный профиль концентрации водорода. В табл. 1 и на рис. 6 представлены данные расчета концентрации водорода по глубине для описываемого здесь образца кремния. На оси абсцисс рисунка 6 приведена глубина в кремнии в  $\text{ \AA}$ , а по оси ординат – концентрация водорода в ат. % и в ат./см<sup>3</sup> /правая ось ординат/. Пунктирная линия на рисунке представляет гауссовское распределение, принятое нами при моделировании; гистограмма – результат расчета профиля концентрации, выдаваемый ЭВМ при введении в программу расчета указанного распределения. На рис. 7 приведен ряд теоретических спектров, отличающихся друг от друга по глубине на

ТАБЛИЦА 1

Результаты расчета профиля концентрации водорода в образце кремния, имплантированного водородом при энергии 30 кэВ и дозе  $8 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$

Номер слоя от поверхности	Толщина слоя $\text{\AA}$	Концентрация водорода	
		ат %	ат/см <sup>3</sup>
1	2	3	4
1	1300	0,58	$3,0 \cdot 10^{20}$
2	420	0,32	$1,66 \cdot 10^{20}$
3	420	1,11	$5,75 \cdot 10^{20}$
4	420	2,61	$1,36 \cdot 10^{21}$
5	420	4,23	$2,19 \cdot 10^{21}$
6	420	4,93	$2,56 \cdot 10^{21}$
7	420	4,93	$2,56 \cdot 10^{21}$
8	420	4,23	$2,19 \cdot 10^{21}$
9	420	2,61	$1,36 \cdot 10^{21}$
10	420	1,11	$5,75 \cdot 10^{20}$
11	420	0,32	$1,66 \cdot 10^{20}$

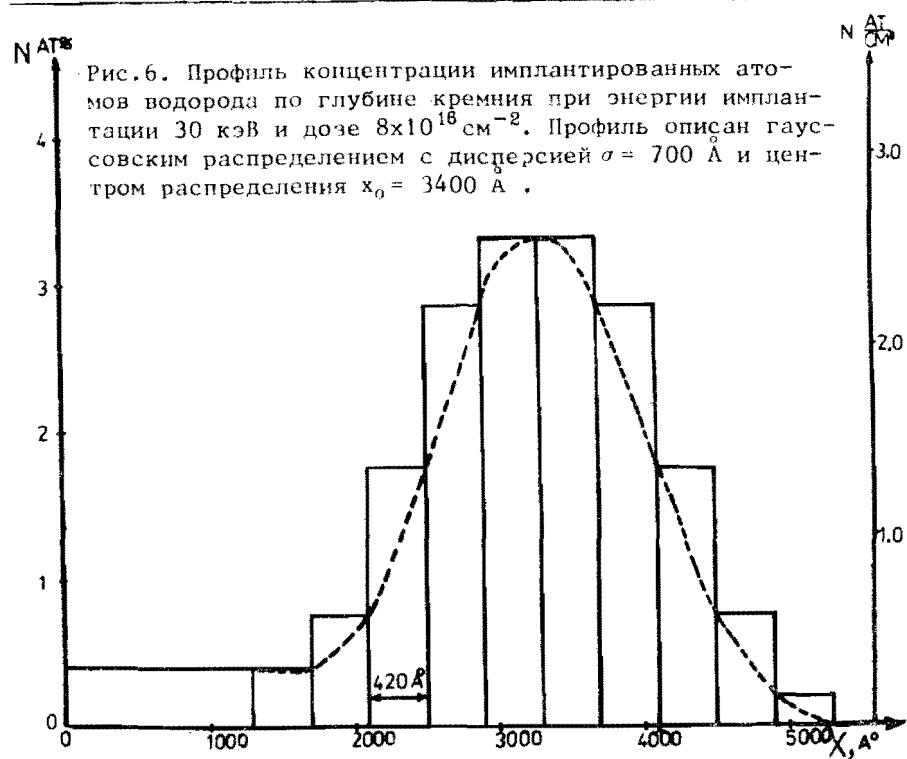


Рис. 6. Профиль концентрации имплантированных атомов водорода по глубине кремния при энергии имплантации 30 кэВ и дозе  $8 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Профиль описан гауссовским распределением с дисперсией  $\sigma = 700 \text{ \AA}$  и центром распределения  $x_0 = 3400 \text{ \AA}$ .

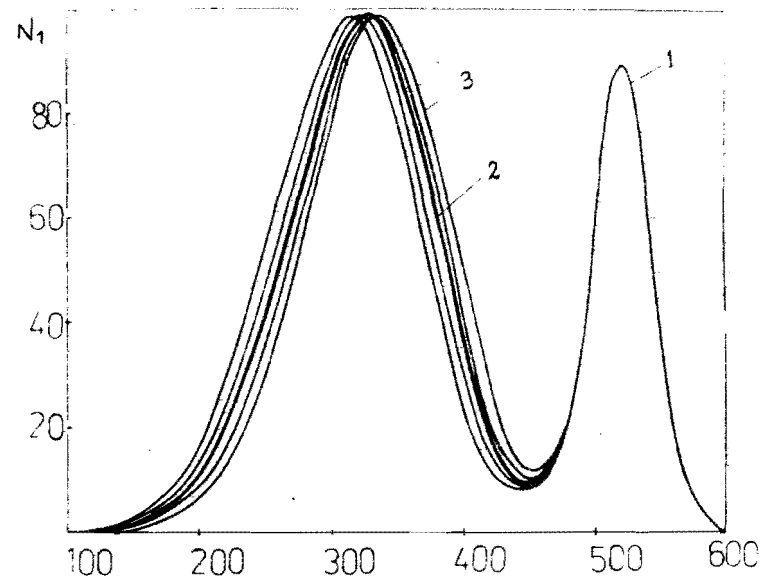


Рис. 7. Теоретические спектры протонов отдачи, отличающиеся друг от друга по глубине на  $100 \text{ \AA}$ . 1 - пик, относящийся к поверхностному слою водорода. Утолщенная линия представляет спектр, совпадающий с экспериментальным при геометрии  $\theta_1 = 75^\circ$ ,  $\theta = 30^\circ$ . /кривая 2/. 3 - один из моделированных спектров.  $N_1$  - счет в канале;  $N_2$  - каналы анализатора импульсов.

ТАБЛИЦА 2

Данные по обработке измерений на кремнии, имплантированном водородом при разных энергиях и дозах имплантации

Энергия имплантации, E/кэВ/	Доза имплантации, D(ат/см <sup>2</sup> )	Расчет числа атомов, N(ат/см <sup>3</sup> ) по программе ERDM	$\delta_N = \frac{N-D}{D}$	Пробег имплантированных атомов водорода R(мкм), из таблиц [3]	Расчет глубины залегания водорода, $x_0$ (мкм), по программе ERDM	$\delta_R = \frac{x_0-R}{R}$
20	$4 \times 10^{15}$	$4 \times 10^{15}$	+5%	0,27 0,21	0,23	-5%
30	$8 \times 10^{14}$	$8,6 \times 10^{14}$	+7%	0,35; 0,27 0,30	0,34	+10%
30	$8 \times 10^{16}$	$6,6 \times 10^{16}$	-17%	-	-	-

100 Å. Как видно из рисунка, спектры хорошо отличаются между собой, что позволяет с погрешностью не хуже  $\pm 100$  Å определить совпадение моделированного спектра с экспериментальным.

В табл. 2 приведены, с целью сравнения, результаты расчетов числа атомов и глубины залегания водорода в различных образцах кремния, имплантированных водородом и принятых нами в качестве стандартов. В указанной таблице в первой колонке - энергия имплантации в кэВ; во второй - доза имплантации  $D$  (ат./см<sup>2</sup>); в третьей - расчетное значение числа атомов водорода в кремнии по программе ERDM,  $N$  (ат./см<sup>2</sup>); в четвертой - величина  $\delta_N (\delta_N = (N-D)/D)$ , характеризующая отличие величин  $N$  и  $D$  между собой; в пятой - пробег имплантированных атомов водорода,  $R$  /мкм/, взятый из таблиц /3/; в шестой - расчет глубины залегания водорода,  $x_0$  /мкм/, по программе ERDM; в последней колонке - величина  $\delta_R (\delta_R = (x_0 - R)/R)$ , характеризующая отличие  $x_0$  и  $R$  между собой. Измерения проводились в двух режимах:  $\theta_1 = 75^\circ$ ,  $\theta = 30^\circ$  и  $\theta_1 = 83^\circ$ ,  $\theta = 15^\circ$ .

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для ЭВМ PDP-11/70 с операционной системой RSX-11M-PLUS реализована диалоговая вычислительная программа ERDM для анализа энергетических спектров протонов отдачи, измеряемых на пучке ионов <sup>4</sup>He с энергиями 2-3 МэВ.

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 расчета образец разбивается на глубинные слои, число которых может достигать 25, в каждом из которых может содержаться до 5 элементов.

Авторы благодарны М.Пайеку и Р.Шандрику за полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ильхамов Р.А. и др. ОИЯИ, P13-85-288, Дубна, 1985.
2. Chu W.K. Backscattering Spectrometry. Pergamon Press, New-York, 1978.
3. Ziegler J.F. The Stopping Powers and Ranges in Matter. Vol.3, Pergamon Press, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел  
3 декабря 1986 года.

Ильхамов Р.А. и др.

P10-86-774

Программа расчета концентрационного профиля водорода по энергетическим спектрам протонов отдачи

Описан метод расчета глубинного профиля концентрации водорода, основанный на моделировании энергетического спектра протонов отдачи и сравнении его с экспериментальным спектром, измеренным на пучке ионов <sup>4</sup>He с энергиями 2-3 МэВ, ускоренных на электростатическом ускорителе Ван-де-Граафа ОИЯИ. При проведении моделирования учитывалось влияние на форму спектра энергетического страгглинга ионов <sup>4</sup>He и протонов отдачи, а также влияние разрешения измерительного тракта. Для проведения расчетов концентрации водорода по описываемому методу создана программа на языке ФОРТРАН-1У для ЭВМ PDP - 11/70 в операционной среде RSX-11M-PLUS.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.  
Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Ilkhamov R.A. et al.

P10-86-774

Program for Calculating the Hydrogen Concentration Profile by Energy Spectra of Recoil Protons

The method of hydrogen profile determination, using 2-3 MeV <sup>4</sup>He ion beams from the Van de Graaf generator of JINR, based on the modelling the proton recoil spectra and subsequent their comparison with experimental ones is described. The energy straggling of <sup>4</sup>He ions and protons, and energy resolution were taken into account in the modelled spectra. For this purpose the FORTRAN code has been written with 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 1986