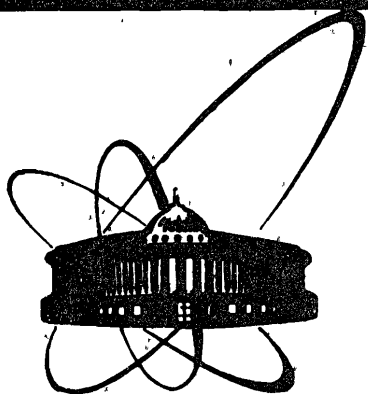


87-535



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-87-535

Р.А.Ильхамов*, Д.Махайдик

**ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ
УПРУГОРАССЕЯННЫХ ИОНОВ**

* Научно-исследовательский институт прикладной физики ТашГУ, Ташкент

1987

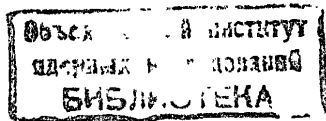
ВВЕДЕНИЕ

Как известно, метод резерфордовского обратного рассеяния является удобным средством для анализа сложных многослойных структур. Обработка энергетических спектров упругого рассеяния, как правило, проводится с помощью специальных программ на ЭВМ. Однако и машинная обработка не позволяет свести анализ к рутинной процедуре. Причина заключается в том, что форма спектра, измеренного на одном и том же образце, может сильно изменяться в зависимости от условий проведения эксперимента. Кроме того, по форме спектра в некоторых случаях нельзя однозначно провести идентификацию элементов и определить их глубинное распределение. Задачи расшифровки спектров упругого рассеяния нередко может быть решена с помощью метода моделирования. Однако в этом случае для проведения детального анализа необходимо учитывать влияние на форму спектра параметров, посредством которых пользователь управляет моделированием спектра.

В работе^{/1/} дано описание диалоговой программы RBSM, предназначенной для обработки спектров упругорассеянных ионов методом моделирования. Программа оперирует с моделью, представляющей каждый образец в виде набора элементарных слоев, количество которых может достигать 25. Разделение на элементарные слои проводится условно и лишь в определенной мере отражает форму физического распределения. Каждый физический слой может состоять из нескольких элементарных слоев, которые во время моделирования выступают как самостоятельные объекты. Каждый элементарный слой может содержать до пяти элементов. Стехиометрия в пределах слоя считается постоянной.

Для построения теоретического спектра определяется масштаб глубины, т.е. толщина образца Δx_i , соответствующая i -му каналу спектра, которая находится из соотношения: $\Delta x_i = \delta E / [S]$, где δE – энергетическая ширина канала анализатора; $[S]$ – фактор энергетических потерь. Связь между общим числом упругорассеянных ионов N_i , регистрируемых в i -м канале энергетического спектра, и атомной плотностью $N(x_i)$ определяемого элемента в слое Δx_i на глубине x_i определяется формулой

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



где σ - дифференциальное сечение упругого рассеяния; Ω - телесный угол детектора; Q - число ионов, падающих на мишень; Θ_1 - угол между направлением пучка и нормалью к поверхности образца.

В настоящей работе на спектрах, генерированных для моделированных образцов, исследуется влияние параметров, которыми управляет пользователь при проведении обработки спектров. Стехиометрия слоев в образцах представлена в таблице. Стрелка здесь указывает поверхность, на которую падает пучок. В качестве бомбардирующих частиц выбраны ионы ^4He с энергиями $2 \div 3$ МэВ.

Таблица

МОДЕЛЬНЫЕ ОБРАЗЦЫ			
№	Стехиометрия и последовательность слоев	Рис. №	Показано влияние
1.	Sn ←	1	толщины элементарных слоев
2.	Si InGe ₂ Si ₂ InGe ₂ InGe ←	2а,б	толщины физических слоев
3.	Al Au Al Au Al Au ←	3	геометрических параметров
4.	Si FeGeNbBi ←	4а,б, в; 7	геометрических параметров и разрешения измерительного тракта
5.	Au ←	5,6	страгглинга

ВЛИЯНИЕ ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЯ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ

В программе величина удельных потерь энергии вычисляется для каждого элементарного слоя отдельно, с использованием энергии частиц на передней поверхности данного слоя, т.е. вводится так называемое приближение поверхностной энергии для определения энергии частиц на любой глубине образца^[2]. Принятое приближение выполняется тем лучше, чем меньше толщина элементарного слоя. Опыт показывает, что, как правило, хорошей подгонки теоретического спектра к экспериментальному можно достичь, используя толщины слоев не более 1000 Å. Если элементарные слои

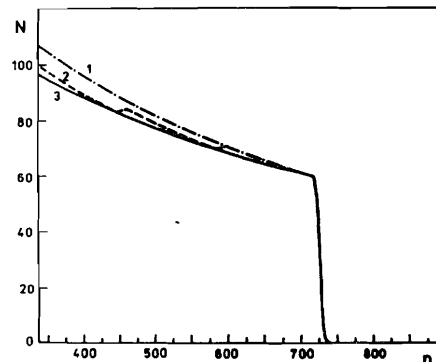


Рис.1. Спектры для образца Sn, вся толщина которого /18000 Å/ разбита на элементарные слои следующим образом: 1 - один слой толщиной 18000 Å, 2 - три слоя по 6000 Å и 3 - 18 слоев по 1000 Å. N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

выбраны слишком толстыми, то на спектре появляются небольшие скачки на границах элементарных слоев, кроме того,

подъем плато в направлении к низким энергиям становится более крутым. Эти особенности хорошо видны на рис.1, на котором изображены три спектра, генерированные для образца № 1 таблицы.

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ СЛОЕВ ОБРАЗЦА

Деформацию формы спектра упругого рассеяния при изменении толщины физических слоев можно иллюстрировать спектрами, генерированными для образца № 2 таблицы. Образец состоит из четырех слоев, в которых находятся в разной стехиометрии элементы In, Ge, Si. В этом случае образец разбивался на элементарные слои в соответствии с физическими границами. Спектры от образцов, в которых толщина каждого слоя составляет 3000 Å и 12000 Å, показаны на рис.2а и 2б соответственно. Заметим,

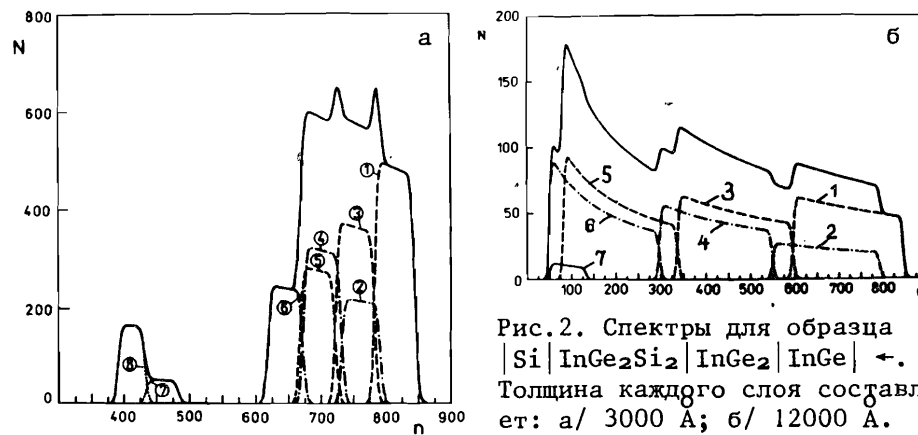


Рис.2. Спектры для образца |Si|InGe₂Si₂|InGe₂|InGe| ←. Толщина каждого слоя составляет: а/ 3000 Å; б/ 12000 Å.

N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

что при толщине слоев, меньшей 500 \AA , спектр упрощается до трех приблизительно гауссовских пиков, принадлежащих элементам In, Ge, Si соответственно. Сплошной линией на рисунках показан суммарный спектр; пунктирными линиями 1, 3, 5 - вклад от In в слоях 1, 2, 3 соответственно; штрихпунктирными линиями 2, 4, 6 - вклад от Ge в слоях 1, 2, 3 соответственно; точечными линиями 7, 8 - вклад от Si в слоях 3, 4. На рис.2а видно, что при наложении парциальных спектров от соответствующих слоев образуются искусственные максимумы, появление которых на спектре можно ошибочно интерпретировать как вклад элементов, не входящих в состав образца. В общем случае задача определения всех элементов и слоев исследуемого образца может оказаться настолько сложной, что решить ее можно только при наличии предварительной информации о составе и последовательности слоев.

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Под геометрическими параметрами подразумеваются углы θ_1 и θ_2 , образованные направлением пучка и направлением детектирования относительно нормали к поверхности образца. Эти углы входят в выражения для трех физических параметров, существенным образом влияющих на форму спектра упругого рассеяния: кинематического фактора, дифференциального сечения упругого рассеяния и фактора энергетических потерь. Кинематический фактор упругого рассеяния определяется выражением

$$K = \left[\frac{(1 - X^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} + X \cdot \cos \theta}{1 + X} \right]^2,$$

где $X \equiv M_1/M_2$ - отношение масс налетающей частицы и ядра мишени; $\theta = 180^\circ - \theta_1 - \theta_2$ - угол рассеяния. Дифференциальное сечение упругого рассеяния выражается в виде

$$\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{4}{\sin^4 \theta} \frac{[(1 - X^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} + \cos \theta]^2}{(1 - X^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}},$$

где Z_1, Z_2 - атомные номера налетающей частицы и атома мишени соответственно; e - заряд электрона; E - энергия частицы в момент рассеяния.

Фактор энергетических потерь определяется выражением

$$[S] \cong \left[\frac{K}{\cos \theta_1} \cdot S_1 + \frac{1}{\cos \theta_2} \cdot S_2 \right],$$

где S_1, S_2 - удельные потери иона до и после рассеяния в образце.

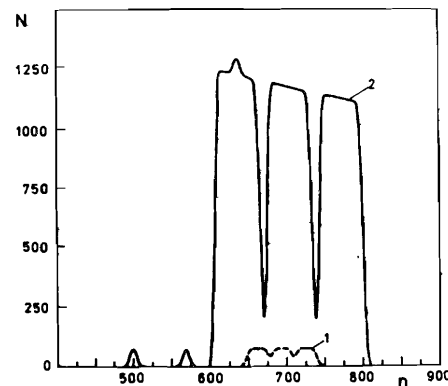


Рис.3. Спектры для образца $|\text{Al}|\text{Au}|\text{Al}|\text{Au}|\text{Al}|\text{Au}|$, где толщины слоев золота составляют 500 \AA , а алюминия 200 \AA . Спектры соответствуют геометрическим условиям: 1/ $\theta_1=45^\circ$, $\theta_2 = 0^\circ$, $\theta = 135^\circ$ /пунктирная линия/; 2/ $\theta_1 = 60^\circ$, $\theta_2 = 70^\circ$, $\theta = 50^\circ$ /сплошная линия/. N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

Влияние всех трех параметров на характер спектра видно на рис.3, где изображенные спектры соответствуют образцу №3 таблицы. Образец состоит из трех слоев золота толщиной 500 \AA , разделенных слоями алюминия толщиной 200 \AA . Спектр 1 /пунктирная линия/ соответствует геометрическим условиям: $\theta_1 = 45^\circ$, $\theta_2 = 0^\circ$, $\theta = 135^\circ$; а спектр 2 /сплошная линия/ - углам $\theta_1=60^\circ$, $\theta_2 = 70^\circ$, $\theta = 50^\circ$. Спектры представляют собой триплеты, образованные парциальными спектрами, соответствующими слоям золота. Провалы в спектрах обусловлены наличием в образце слоев алюминия, разделяющих слои золота. Три пика в каналах 641, 573, 504 на спектре 2 представляют собой вклад от слоев алюминия /один из пиков наложился на пик золота/. Смещение передней грани спектра, соответствующего поверхностному слою золота, из канала 739 на спектре 1 в канал 801 на спектре 2 вызвано изменением кинематического фактора упругого рассеяния на золоте с 0,9330 на 0,9856. Изменение высоты пиков связано с изменением величины дифференциального сечения упругого рассеяния при переходе от одних геометрических условий к другим. В данном случае $\sigma(50^\circ)/\sigma(135^\circ) = 22,8$. Углубление провалов на спектре 2 в сравнении со спектром 1 обусловлено увеличением разрешения по глубине при переходе к меньшему углу рассеяния. Наблюдается также растяжение триплета в результате изменения масштаба глубины. На спектрах 1 и 2 один канал составляет $18,5 \text{ \AA}$ и $8,6 \text{ \AA}$ золота соответственно.

Изменение формы спектра из-за геометрических условий наблюдается также на спектрах рис.4 /образец №4 таблицы/. Модельный образец состоит из сравнительно толстого кремния с нанесенным слоем состава FeGeNbBi толщиной 1000 \AA . Спектр на рис.4а вычислен для геометрии $\theta_1 = 45^\circ$, $\theta_2 = 0^\circ$, $\theta = 135^\circ$, а спектр на рис.4б - для $\theta_1 = \theta_2 = 70^\circ$, $\theta = 40^\circ$. В спектрах имеются следующие различия: плато, соответствующее кремнию,

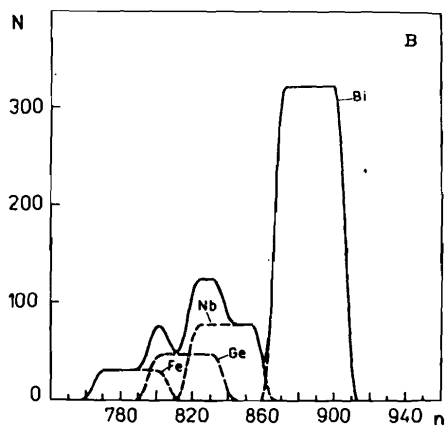
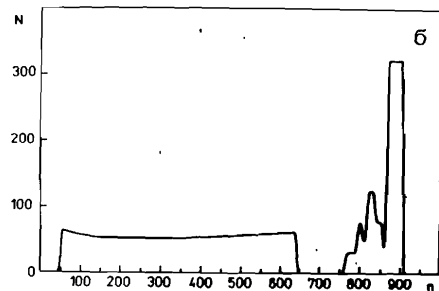
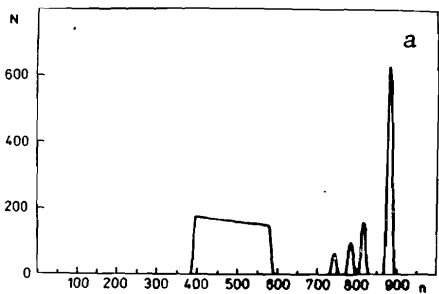


Рис.4. Спектры для образца сравнительно толстого кремния с нанесенным слоем состава FeGeNbBi толщиной 1000 Å. Спектры соответствуют геометрическим условиям: а/ $\theta_1 = 45^\circ$, $\theta_2 = 0^\circ$, $\theta = 135^\circ$; б/ $\theta_1 = \theta_2 = 70^\circ$, $\theta = 40^\circ$; в/ разложение спектра "б" на парциальные спектры от отдельных элементов. N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

в спектре "б" сильно растянуто, и его передняя грань сместилась из 575-го канала в спектре "а" в 643-й канал в спектре "б". Пики, соответствующие элементам Fe, Ge, Nb, Bi, которые в спектре "а" четко разрешаются, в спектре "б" в значительной степени перекрываются. Парциальные спектры от отдельных элементов показаны на рис.4в.

ВЛИЯНИЕ СТРАГГЛИНГА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНОГО ТРАКТА

Страгглинг накладывает ограничение на разрешение по массам при идентификации элементов и разрешение по глубине при определении масштаба глубины энергетических спектров упругого рассеяния. Поэтому необходимо иметь количественную информацию о величине страгглинга. Программа содержит подпрограмму, которая обеспечивает модифицирование формы спектра, генерированного для выбранного образца, с учетом страгглинга. Дисперсия

распределения энергии частиц после прохождения слоя образца толщиной t вычисляется с использованием приближения Бора, в котором страгглинг не зависит от энергии и определяется выражением

$$\Omega_S = (4\pi(Z_1e^2)^2 NZ_2t)^{1/2},$$

где N - атомная плотность вещества в слое. Страгглинг необходимо учитывать как при прохождении частицы вглубь образца, так и на пути выхода ее из образца после акта рассеяния, поэтому общая дисперсия выражается формулой

$$\Omega_S^2 = \Omega_{S, \text{вх.}}^2 \cdot K^2 + \Omega_{S, \text{вых.}}^2.$$

При расчете страгглинга в многоэлементной мишени программа использует принцип линейной аддитивности, в соответствии с которым дисперсия слоя, состоящего, например, из двух элементов ($A_m C_n$), равна

$$\frac{(\Omega_{S, A_m C_n}^2)}{N^{A_m C_n} \cdot t} = m \cdot \frac{(\Omega_S^A)^2}{N^A \cdot t} + n \cdot \frac{(\Omega_S^C)^2}{N^C \cdot t},$$

где N^A , N^C , $N^{A_m C_n}$ - количество атомов A, C и молекул $A_m C_n$ в 1 см³ соответственно; Ω_S^A , Ω_S^C - дисперсии для слоев, состоящих из атомов одного элемента (A, C); $\Omega_{S, A_m C_n}^2$ - дисперсия для слоя, состоящего из молекул $A_m C_n$.

Точный учет влияния страгглинга на форму спектра увеличивает затраты времени на вычисления. Поэтому в программе реализован упрощенный подход, который в большинстве случаев является достаточно хорошей аппроксимацией реально протекающих процессов^[2]. Упрощение состоит в том, что модифицируются лишь задние грани парциальных спектров с помощью кривой, описываемой функцией вида

$$\text{erf}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Omega_S} \int_{-\infty}^E e^{-\frac{E^2}{2\Omega_S^2}} dE.$$

На рис.5 показаны задние грани спектра для образца золота /образец № 5 таблицы/ в случае, когда толщина образца равна: 1 - 1500 Å, 2 - 3000 Å, 3 - 9000 Å, 4 - 24000 Å. Соответствующие им дисперсии также указаны на рисунке. Если иметь в виду,

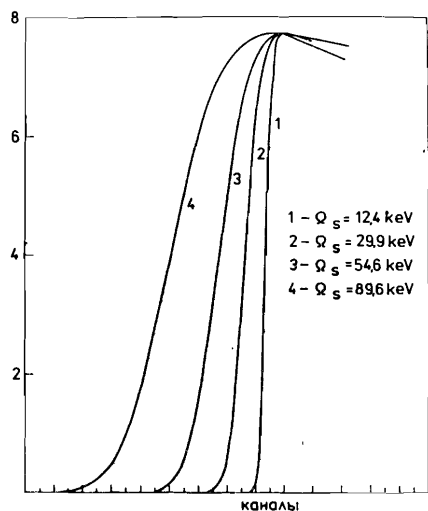


Рис.5. Задние грани спектра для образца золота. Кривые соответствуют различным толщинам образца: 1 - 1500 Å, 2 - 3000 Å, 3 - 9000 Å, 4 - 24000 Å. Указаны соответствующие дисперсии распределения энергии частиц после прохождения слоя образца.

что энергетическое разрешение измерительного тракта обычно составляет около 20 кэВ, то очевидно, что в образцах с тяжелыми элементами влияние страгглинга на форму спектра

уже в области спектра, соответствующей глубине около 2000 Å от поверхности образца, сравнимо по величине с влиянием функции разрешения измерительного тракта.

Модификация задних граней всех парциальных спектров создает в определенных случаях сложности при моделировании. Это происходит, например, в случае, когда толстый образец, состоящий из одного элемента, в модели разбит на несколько элементарных слоев, для которых генерируются парциальные спектры. При сшивании этих спектров после модификации задних граней в суммарном спектре появляются скачки, обусловленные наложением модифицированной грани от предыдущего слоя на начало спектра от следующего слоя. Этот эффект показан на рис.6, где изображен спектр для образца № 5 таблицы. Для устранения подобных искажений моделированного спектра при работе с программой пользователь имеет возможность выбора: модифицировать с учетом страгглинга все парциальные спектры или только выбранные. В рассматриваемом примере /рис.6/ пользователь должен требовать модифи-

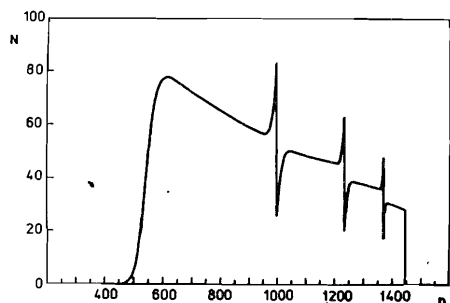


Рис.6. Спектр для толстого образца золота, образованный в результате сшивания парциальных спектров от отдельных элементарных слоев после модификации задних граней всех парциальных спектров. N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

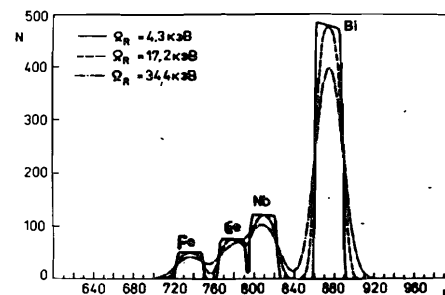


Рис.7. Спектры для слоя FeGeNbV_1 толщиной 1000 Å. Кривые на рисунке соответствуют разным разрешениям измерительного тракта. N - счет в канале, n - номер канала анализатора импульсов.

цирования только последнего парциального спектра. При этом дисперсия будет вычислена с учетом суммарной толщины всех слоев.

Изменение формы спектра с учетом разрешения измерительного тракта программа осуществляет после выполнения модификации формы спектра с учетом страгглинга. Вычисленное содержание каждого канала спектра заменяется нормированным гауссовским распределением в диапазоне $\pm 3 \Omega_R$, где дисперсия Ω_R вычисляется на основании заданного во входных данных энергетического разрешения измерительного тракта. На рис.7 изображены пики, соответствующие элементам Fe, Ge, Nb, V1 из поверхностного слоя образца № 4 таблицы.

Рассмотренные особенности формирования энергетического спектра упругорассеянных ионов следует учитывать при практической работе с диалоговой программой RBSM.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ильхамов Р.А., Махайдик Д. Сообщение ОИЯИ, P10-87-249, Дубна, 1987.
2. Chu W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A. Backscattering Spectrometry, Academic Press, New York, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 июля 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р.55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р.00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р.50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р.30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р.50 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программирования и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р.50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р.75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.00 к.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р.80 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р.75 к.
Д3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р.50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/	13 р.50 к.
Д1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/	7 р.35 к.
Д9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. /2 тома/	13 р.45 к.
Д7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986	7 р.10 к.
Д2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа-86". Дубна, 1986	4 р.45 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Ильхамов Р.А., Махайдик Д. P10-87-535
Особенности моделирования энергетических спектров упругорассеянных ионов

Исследуется влияние на форму энергетического спектра упругого рассеяния таких факторов, как потери ионов в образце, толщина слоев образца, геометрические условия проведения эксперимента, страгглинг и энергетическое разрешение измерительного тракта. Закономерности формирования спектра упругого рассеяния иллюстрируются с помощью спектров, генерированных для специально подобранных модельных образцов. Расчеты проводились с использованием диалоговой программы RBSM.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Il'khamov R.A., Machajdik D. P10-87-535
Some Features in Modelling the Energy Spectra of Backscattered Ions

The influence of the energy loss of ions in the sample, the width of the sample layers, geometrical conditions of experiment, the energy straggling of ions and the energy resolution on the form of backscattering spectra is investigated. Some characteristic features are demonstrated for the spectra of special testing samples. The calculations were performed using RBSM code.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987