

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-84-754

Д. Бардош

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ
ОСАЖДЕННЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ
В АМОРФНОМ МАТЕРИАЛЕ**

1984

Для экспериментального исследования взаимодействия энергетических ионов с веществом одним из важных средств изучения является измерение параметров распределения осажденных ионов. Это такие параметры, как средняя глубина и ширина распределения осажденных частиц. Учитывая, что по экспериментальным данным функция распределения приблизительно гауссовская, эти параметры хорошо ее характеризуют.

Теоретические методы, применяя которые непосредственно можно получить эти параметры, основаны на использовании обратного больцмановского уравнения переноса, которое было впервые написано для этой проблемы Линдхардом^{/1/}. При низких энергиях /порядка несколько кэВ/ столкновением иона с электронами можно пренебречь, и в этом диапазоне энергий достаточно учитывать только столкновение с ядрами мишени. Здесь предполагается, что эти столкновения двухчастичные, упругие, при которых изменяются энергия и направление движения ионов. В этой области энергий моменты для функции распределения ионов можно также получить в аналитическом виде, используя обратные уравнения переноса^{/2/}.

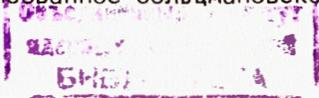
При увеличении энергии ионов необходимо учитывать взаимодействие с электронами. Так как это взаимодействие коллективного типа, то можно предположить, что энергия ионов непрерывно уменьшается, поэтому взаимодействие иона с электронами проявляется как торможение. Это так называемое электронное торможение зависит от энергии ионов. Его можно описать аналитической формулой, как показал Линдхард^{/3/}, в диапазонах энергии меньше чем $Z_1^{2/3} v_0$ и больше чем $Z_1 v_0$ /где Z_1 атомное число иона, $v_0 = e^2 / \hbar$ /.

Хотя аналитическая форма электронного торможения в первом диапазоне энергий простая, линейно зависит от скорости иона, моменты для функции распределения не выражаются в аналитическом виде из больцмановского уравнения. Численное решение находится в^{/4/}. В области энергий, где электронное торможение можно вычислить только численно, естественно решать уравнение Больцмана также численно. Такой метод был предложен в^{/5/}, где авторы получили систему дифференциальных уравнений для моментов функции распределения из интегральных уравнений и решили их итерационным методом.

В этой работе был использован метод^{/5/}, где для электронного торможения использовались данные работы^{/6/}.

ТЕОРИЯ ПЕРЕНОСА ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОСАЖДЕННЫХ ЧАСТИЦ

Метод получения интегрального уравнения для распределения осажденных частиц известен из^{/1,2,5/}. Если $F dx$ - вероятность того, что ион потеряет всю свою энергию в слое dx , который находится на глубине x мишени, то для него можно получить следующее обратное линеаризованное больцмановское уравнение:



$$-\eta \frac{\partial F(E, x, \eta)}{\partial x} = N \int d\sigma_n [F(E, \eta, x) - F(E - T_n, \eta'; x)] + N \int d\sigma_e [F(E, \eta, x) - F(E - T_e, \eta, x)]. \quad /1/$$

Здесь N - плотность мишени, $d\sigma_n(E, T_n, \eta, \eta')$ - сечение столкновения иона с ядром, если его энергия и направление движения до и после столкновения - E, η и $E - T_n, \eta'$ соответственно, $d\sigma_e(E, T_e, \eta, \eta')$ - сечение столкновения иона с электронами. F нормировано на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx F(E, \eta, x) = 1. \quad /2/$$

Разложив в ряд второй член в интеграле столкновений иона с электроном по энергии, получаем:

$$N \int d\sigma_e [F(E, \eta, x) - F(E - T_e, \eta, x)] = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\partial^k F}{\partial E^k} \frac{(-1)^k}{k!} \int d\sigma_e T_e^k. \quad /3/$$

Из этого ряда для вычисления распределения осажденных ионов сохраняют только первый член, который дает электронное торможение:

$$N \int d\sigma_e T_e = NS_e(E). \quad /4/$$

Интеграл столкновения иона с ядром нельзя сразу разложить в ряд по энергии, потому что в этом случае не только энергия, но и направление движения иона изменяется. Поэтому сначала выразим F с помощью полиномов Лежандра:

$$F(E, \eta, x) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) F_{\ell}(E, x) P_{\ell}(\eta). \quad /5/$$

Для $F_{\ell}(E, x)$ из /1/ получаем следующую систему уравнений:

$$\ell \frac{\partial}{\partial x} F_{\ell-1}(E, x) + (\ell+1) \frac{\partial}{\partial x} F_{\ell+1}(E, x) = \quad /6/$$

$$= NS_e(E) \frac{\partial}{\partial E} F_{\ell}(E, x) + N \int_0^{\infty} d\sigma(E, T) [F_{\ell}(E, x) - F_{\ell}(E - T, x) P_{\ell}(\cos \phi')],$$

где $y = 4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$ и

$$\cos \phi' = (1 - T/E)^{1/2} + 1/2 (1 - M_2/M_1)(T/E) (1 - T/E)^{-1/2}, \quad /7/$$

M_1, M_2 - масса иона и атома мишени. Систему уравнений для моментов $F_{\ell}^n(E)$:

$$F_{\ell}^n(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n F_{\ell}(E, x) \quad /8/$$

получаем из /6/, интегрируя по x :

$$\frac{n}{2\ell+1} [\ell F_{\ell-1}^{n-1}(E) + (\ell+1) F_{\ell+1}^{n-1}(E)] = NS_e(E) \frac{d}{dE} F_{\ell}^n(E) + N \int_0^{\infty} d\sigma [F_{\ell}^n(E) - P_{\ell}(\cos \phi') F_{\ell}^n(E - T)]. \quad /9/$$

Нормировка:

$$F_{\ell}^0(E) = \delta_{\ell}^0. \quad /10/$$

Разложив в ряд $F_{\ell}^n(E - T)$ по T , получаем систему дифференциальных уравнений для моментов:

$$\frac{n}{2\ell+1} [\ell F_{\ell-1}^{n-1}(E) + (\ell+1) F_{\ell+1}^{n-1}(E)] = NS_e \frac{d}{dE} F_{\ell}^n(E) + F_{\ell}^n(E) N \int d\sigma [1 - P_{\ell}(\cos \phi')] - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d^k}{dE^k} F_{\ell}^n(E) \frac{(-1)^k}{k!} N \int d\sigma T^k P_{\ell}(\cos \phi'). \quad /11/$$

Средний продольный пробег можно получить из первого момента:

$$R_p(E) = 3F_1^1(E), \quad /12/$$

а квадрат разброса из вторых и первого моментов:

$$\sigma^2(E) = F_0^2(E) + 5F_2^2(E) - 9[F_1^1(E)]^2. \quad /13/$$

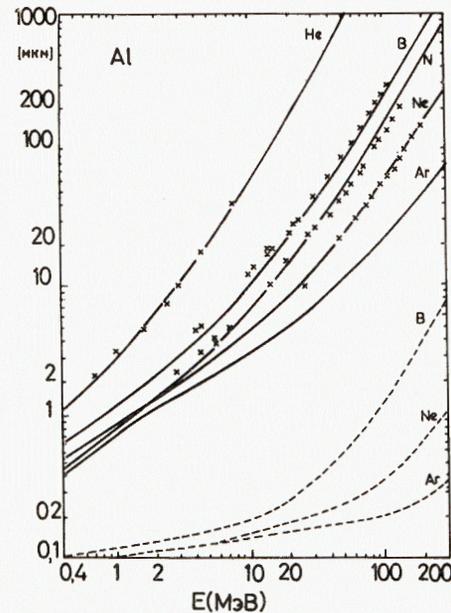


Рис.1. Средний продольный пробег /сплошная кривая/ и разброс /штриховая кривая/ для ионов He, B, N, Ne, Ar в Al. Экспериментальные данные взяты из /8/.

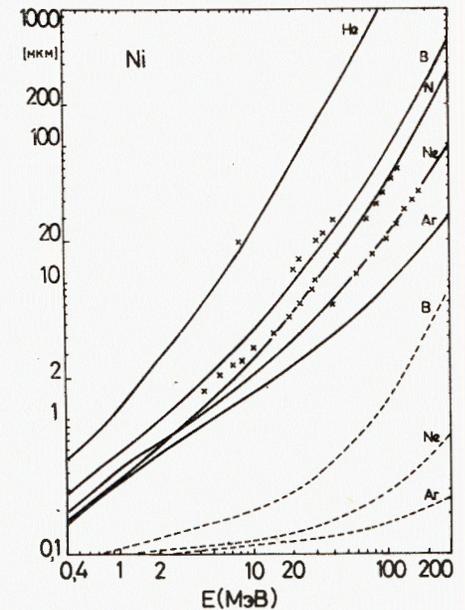


Рис.2. Средний продольный пробег /сплошная кривая/ и разброс /штриховая кривая/ для ионов He, B, N, Ne, Ar в Ni. Экспериментальные данные взяты из /8/.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Средний продольный пробег и разброс были рассчитаны для ионов He, B, N, Ne и Ar в мишени Al и Ni в диапазоне энергий от 0,4 до 300 МэВ. Результаты численных расчетов вместе с экспериментальными данными представлены на рис.1,2.

Для сечения столкновения была использована формула Линдхарда^{7/}:

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}). \quad /14/$$

Здесь $t = \epsilon^2 T / \gamma E$, $\epsilon = \left(\frac{M_2 E}{M_1 + M_2} \right) \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a} \right)^{-1}$, Z_1, Z_2 - атомное число иона и атомов мишени, $a = 0,8853 a_0 Z^{-1/3}$, $Z^{2/3} = Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}$,

$$f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/2-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q}. \quad /15/$$

В функции /15/ были использованы параметры $\lambda = 3,35$, $m = 0,233$, $q = 0,445$ из^{5/}.

Электронное торможение $S_e(E)$ получили по методам, описанным в^{6/}.

При использовании итерационного метода для решения уравнений /11/ в рамках сделанных упрощений уже первое приближение дало хорошее решение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lindhard J., Scharff M., Schiøtt H.E. Mat.Fys.Medd.Dan. Vid.Selsk., 1963, 36, No.10.
2. Winterbon K.B., Sigmund P., Sanders J.B. Mat.Fys.Medd. Dan.Vid.Selsk., 1970, 37, No.14.
3. Lindhard J. Proc.Roy.Soc., 1969, A311, p.11.
4. Sigmund P., Mattheis M.T., Phillips D.L. Rad.Effects, 1971, 11, p.39.
5. Littmark U., Ziegler J.F. Phys.Rev., 1981, A23, p.64.
6. Бардош Д., Гавриленко Г.М. ОИЯИ, P17-84-371, Дубна, 1984.
7. Lindhard J., Nielsen V., Scharff M. Mat.Fys.Medd.Dan. Vid.Selsk., 1968, 36, No.10.
8. Littmark U., Ziegler J.F. Handbook of Range Distributions for Energetic Ions in All Elements. Pergamon Press Inc., 1980, vol.6.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 ноября 1984 года.

Бардош Д.

P17-84-754

Распределение осажденных энергетических ионов
в аморфном материале

Исследованы распределения остановившихся ионов в аморфном материале. Вычислены средняя глубина проникновения в материал и ширина функции распределения ионов. Расчеты были произведены на основе уравнений для моментов функции распределения, полученных из линеаризованного обратного уравнения Больцмана. Вычисления проводились для ионов He, B, N, Ne, Ar, имеющих энергии в диапазоне от 0,4 до 300 МэВ, тормозящихся в Al и Ni. Результаты хорошо согласуются с экспериментом.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Bardos G.

P17-84-754

Ranges of Energetic Ions in Amorphous Materials

The range distribution for a beam of energetic ions in amorphous target material has been studied. The mean range and range straggling are obtained from calculation of spatial moments of range distribution. The calculation is based on the linear backward Boltzmann equation. The range parameters has been calculated for He, B, N, Ne and Ar ion projectiles in Al and Ni substates. Ion energies range from 0.4 MeV to 300 MeV. The calculated results are in good agreement with experimental data.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984