

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

О торможении и рассеянии в веществе атомов с энергиями порядка килоэлектронвольт

П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, А.П. Шергин

Обсуждается существенное уточнение представлений о торможении и рассеянии атомных частиц с энергиями менее 100 кэВ в веществе, возникшее при сопоставлении имеющихся в настоящее время экспериментальных данных с результатами компьютерного моделирования: проблема выбора потенциала для описания рассеяния частиц, уточнение представлений о ядерных и электронных тормозных способностях. Рассматривается решающая роль в формировании электронных потерь механизма, связанного с возбуждением автоионизационных состояний при перестройке молекулярных оболочек в процессе столкновения. Установлен существенный вклад эмиссии быстрых электронов в сечение электронных потерь. Анализируется влияние параметров соударения на процессы рассеяния, распыления и каналирования.

Ключевые слова: атомные столкновения, потенциал взаимодействия атомов, ядерные и электронные тормозные потери, возбуждение автоионизационных состояний, ионизация атомов, эмиссия электронов, рассеяние, распыление, каналирование

PACS numbers: 32.80.Zb, **34.20. – b**, **34.35. + a**, **34.50. – s**, 34.50.Bw, 34.80.Dp, 52.20.Hv, **61.85. + p**, 68.49.Sf

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.03.039666>

Содержание

1. Введение (1059).
 2. Методы компьютерного моделирования (1060).
 3. Потенциалы межатомного взаимодействия (1061).
 4. Универсальная функция Линдхарда для описания рассеяния атомных частиц (1063).
 5. Экранировка взаимодействия частиц в металле (1064).
 6. Ядерные тормозные потери (1065).
 7. Механизм неупругих потерь, связанный с выдвиганием молекулярных орбиталей при столкновениях частиц и образованием автоионизационных состояний (1066).
 8. Вклад элементарных процессов и эмиссии быстрых электронов в электронные тормозные способности (1070).
 9. Влияние многократности соударений на электронные тормозные способности (1072).
 10. Влияние поверхностного потенциального барьера на коэффициенты распыления частиц (1073).
 11. Влияние электронных тормозных потерь, поверхностного потенциального барьера, структуры мишени на коэффициент отражения частиц от поверхности (1075).
 12. Каналирование атомов дейтерия в вольфраме (1076).
 13. Заключение (1078).
- Список литературы (1079).

П.Ю. Бабенко^(а), А.Н. Зиновьев^(б), А.П. Шергин^(с)
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
ул. Политехническая 26, 194021 Санкт-Петербург,
Российская Федерация
E-mail: ^(а) babenko@npd.ioffe.ru, ^(б) Zinoviev@inprof.ioffe.ru,
^(с) A.Shergin@mail.ioffe.ru

Статья поступила 15 ноября 2023 г.,
после доработки 7 марта 2024 г.

1. Введение

Столкновения атомных частиц (атомов, ионов) имеют место в различных лабораторных системах и явлениях природы, что ведёт к необходимости их всестороннего изучения. Существенные успехи современной физики связаны с исследованием взаимодействия пучков заряженных частиц с твёрдым телом. Именно пучки заряженных частиц оказались удобным инструментом исследования атомной структуры. Исследованием этого типа явился опыт Резерфорда, подвергнувшего тонкую металлическую фольгу бомбардировке α -частицами, в результате чего было установлено, что в центре атома находится тяжёлое ядро.

Элементарные процессы, осуществляющиеся при столкновении атомных частиц, определяют условия работы газовых лазеров и газоразрядных источников излучения. Столкновительные процессы играют важную роль в работе различных лабораторных установок, содержащих газ или плазму, таких как магнетогидродинамический генератор, термоэмиссионный преобразователь, плазмотрон и плазмохимический реактор, ударные трубы и т.д.

Наряду с этим элементарные процессы при соударении атомных частиц лежат в основе многочисленных явлений, происходящих в природе: определяют свойства фотосферы и солнечной короны, различные астрофизические явления, свойства атмосферы Земли (причём для разных высот атмосферы существенны различные элементарные процессы). Множество природных явлений, например магнитные бури и полярные сияния, связаны с солнечным ветром — потоком ионизированных частиц, истекающим из солнечной короны в окружающее кос-

мическое пространство. В настоящее время в таких областях исследования, как астрофизика, физика Солнца и физика верхних слоёв атмосферы, необходимо иметь надёжные сведения о сечениях различных процессов атомных столкновений [1].

Перечислим основные области науки и техники, в которых важным является понимание природы атомных столкновений.

Ионная имплантация [2] используется для введения примесей в полупроводниковые кристаллы для изготовления электронных приборов. При больших дозах внедрения становится возможным превращение поверхностного слоя в другое химическое соединение. Для целого ряда металлов с помощью ионной бомбардировки можно провести электрохимическую пассивацию поверхности. Другими возможными областями применения ионной имплантации являются: повышение критической температуры сверхпроводника, увеличение твёрдости металлов, изготовление световодов, а также исследования в области радиационной физики. Именно возможность использовать ионную имплантацию для модификации полупроводниковых материалов и металлов вызвала большой интерес исследователей к данной проблеме, что привело к развитию представлений о взаимодействии частиц с твёрдым телом.

Распыление материалов при ионной бомбардировке [3–6] используется для очистки и травления поверхностей, для изготовления тонких плёнок, для анализа поверхности, а также в распылительных ионных источниках. Важную роль в развитии представлений о взаимодействии частиц с веществом сыграла теория распыления, предложенная Зигмундом [7]. Эта работа и её модификации позволили создать надёжную теоретическую основу для описания практически важных процессов распыления.

Исследования рассеяния налетающих частиц твёрдыми мишенями имеют большое теоретическое и прикладное значение [8–10]. При энергиях частиц 100 кэВ–2 МэВ они широко используются при анализе поверхностного слоя глубиной 500 нм методом спектроскопии резерфордовского рассеяния ионов (РРИ). При энергиях частиц ~ 1 кэВ метод спектроскопии медленных рассеянных ионов (СМРИ) позволяет с высокой чувствительностью исследовать состав поверхностного монослоя. Рассеяние водорода играет важную роль в рециклинге водорода в термоядерных устройствах.

Атомные и молекулярные физические процессы играют существенную роль в нагреве, охлаждении, потерях, диагностике и моделировании высокотемпературной плазмы [11, 12]. Распыление, обратное рассеяние и имплантация оказывают решающее воздействие на стенки термоядерных устройств и плазменных установок. Важной проблемой является повреждение конструктивных материалов ядерных реакторов под действием атомных частиц [13, 14]. В термоядерном реакторе первая, вакуумная, стенка камеры будет подвергаться воздействию больших потоков различного рода излучений. Взаимодействие излучений с материалами стенки приводит к изменению физических и механических свойств последних, к загрязнению плазмы материалами стенки.

Эффекты, происходящие при взаимодействии частиц с твёрдым веществом и плазмой, широко используются в корпускулярной диагностике лабораторной и космической плазмы. Элементная база космических приборов

(микросхемы) подвергается воздействию тяжёлых заряженных частиц и высокоэнергетичных протонов. Необходимо разрабатывать электронику, которая будет устойчиво работать в условиях интенсивного радиационного облучения. В медицине протонная терапия использует пучки протонов высокой энергии для облучения больной ткани, наиболее часто при терапии рака [15].

Подробное описание современных представлений о взаимодействии пучков атомных частиц с веществом, пробегах частиц, образовании радиационных дефектов можно найти в монографиях [16–18]. Тем не менее эта область науки продолжает интенсивно развиваться, что связано с отсутствием понимания физики ряда явлений и отсутствием соответствующих моделей, несогласием предсказаний существующих теорий с имеющимися экспериментальными данными, важности понимания физики явлений для многочисленных приложений. В развитие этой области науки вносят вклад достижения многочисленных исследовательских групп, представленные на международных конференциях ICACS, ISI, IBA и др. В данном обзоре мы сосредоточились на обсуждении только части таких работ, имеющих непосредственное отношение к исследованиям торможения и рассеяния атомов кэВ-энергий в веществе.

Задача настоящего обзора — сопоставление данных компьютерного моделирования с экспериментом с целью проверки и уточнения существующих представлений о взаимодействии атомных частиц с энергиями менее 100 кэВ с веществом. Выбор энергетического диапазона связан с тем, что при больших энергиях имеется хорошее согласие теории и эксперимента и существуют надёжные теоретические модели. При энергиях менее 100 кэВ теоретические модели ионизации и возбуждения частиц требуют применения методов сильной связи множества состояний для учёта динамики соударений. В то же время эта область энергий важна для исследования столкновений в пристеночной области токамака-реактора, а также для разработки методов низкоэнергетической ионной имплантации с целью миниатюризации устройств электроники.

Основными факторами, определяющими точность компьютерного моделирования, являются использование корректных потенциалов взаимодействия для описания многократного рассеяния частиц и ядерных тормозных потерь, а также современных представлений об электронных тормозных потерях. При этом важно учитывать такие факторы, как структура мишени, тепловые колебания атомов мишени и наличие поверхностного потенциального барьера.

2. Методы компьютерного моделирования

Методы компьютерного моделирования подробно описаны в монографии [18]. Атомы, движущиеся в веществе, теряют энергию при рассеянии на ядрах атомов мишени (упругие потери — ядерные тормозные способности — ЯТС) и при возбуждении и ионизации электронной подсистемы (неупругие потери — электронные тормозные способности — ЭТС). На рисунке 1 представлены данные о ЯТС и ЭТС из базы данных SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) [19]. В первом приближении считается, что оба вида потерь не зависят друг от друга и действуют одновременно [20]. К обсуждению этого вопроса мы вернёмся в разделе 4.

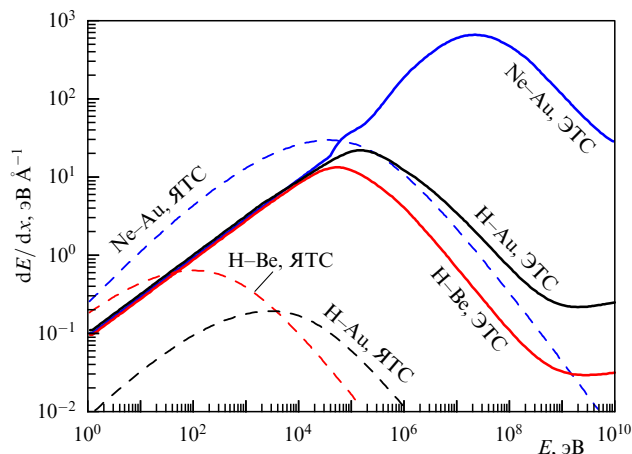


Рис. 1. Электронные и ядерные тормозные способности для систем: H–Be, H–Au и Ne–Au.

Предложение Оена и Робинсона [21] использовать приближение последовательных парных соударений создало возможность моделировать образование дефектов в твёрдых телах при ионной бомбардировке и внесло значительный вклад в методы компьютерного моделирования. В приближении парных соударений рассеяние атомных частиц в твёрдом теле рассматривается как последовательность парных соударений с атомами твёрдого тела. При этом траектория движения частицы заменяется асимптотами траектории. При энергиях соударения ниже 50 эВ применимость приближения нарушается. Приближение парных соударений позволяет значительно ускорить проведение расчётов.

Одним из первых результатов применения компьютерных методов явилось предсказание наличия эффекта каналирования в кристаллах, подтверждённое затем экспериментально.

Важным шагом в развитии метода компьютерного моделирования явились работы Циглера, Бирзака и Литтмарка по анализу пробегов ионов в твёрдых телах, которые привели к созданию широко употребляемого кода SRIM [19]. Использование "магических" формул в этом коде для описания рассеяния частиц даёт неверные результаты, когда важно учитывать рассеяние частиц на большие углы, например, в случае описания спектров обратно рассеянных частиц или распыления материалов лёгкими ионами. Хорошо зарекомендовали себя специализированные коды SDTrimSP (Static and Dynamical TRansport of Ions in Matter for SPuttering) [22] для распыления и T-RBS (Trim-Rutherford BackScattering) [23] для описания обратного рассеяния.

В современных расчётах широко используется метод молекулярной динамики, когда рассчитывается движение всех взаимодействующих атомов как функции времени. Траектории атомов и молекул определяются численным решением уравнений движения Ньютона, где силы между частицами часто вычисляются с использованием межатомных многочастичных потенциалов. Расчёты с помощью этой модели требуют существенных компьютерных мощностей.

В работах [24, 25] использовался программный код, позволяющий свободно менять потенциал взаимодействия, модель электронных тормозных потерь, структуру мишени, учитывать наличие тепловых колебаний,

поверхностного потенциального барьера, страгглинг. В области применимости использовалось приближение парных соударений. При расчёте распыления траектории распылённых частиц рассчитывались с использованием многочастичных потенциалов. При рассмотрении каналирования вычислялись траектории частиц.

3. Потенциалы межатомного взаимодействия

Результаты моделирования рассеяния частиц очень чувствительны к выбору модели потенциала. Эта проблема обсуждалась во многих работах [7, 8, 18, 26–32]. Первые сведения о потенциалах взаимодействия частиц при тесном сближении, когда во взаимодействие вовлекаются внутренние оболочки сталкивающихся атомных частиц, были получены в экспериментах Эверхарта и др. [31] с использованием процедуры обработки сечений рассеяния [33]. Было показано, что потенциал, предложенный Фирсовым [34], на основе статистической теории атома слишком медленно спадает с ростом межъядерного расстояния, и предложено было использовать экранированные кулоновские потенциалы.

В работе [32] изучалось влияние многоканальности рассеяния на получаемые потенциалы и был сделан вывод о хорошей применимости модели одноканального или "среднего" потенциала для описания рассеяния частиц с энергиями 12–300 кэВ.

Циглером, Бирзаком и Литтмарком [29] был предложен потенциал (будем называть его в дальнейшем "потенциал ZBL"), полученный путём усреднения расчётов потенциалов в рамках статистической модели атома для большого числа систем. В работе [30] было проведено сравнение экспериментальных данных о потенциалах, полученных в основном при небольших энергиях соударения, с различными теоретическими моделями и был сделан вывод о сравнительно хорошей применимости потенциала ZBL во многих работах применялись с большим или меньшим успехом потенциалы Мольера [35] и Ленца–Йенсена [36], а также потенциал, известный под наименованием Кг–С, предложенный в работе [37].

Поведение потенциалов при малых межъядерных расстояниях рассмотрено в работах [38, 39], где было показано, что при описании столкновений экранированным кулоновским потенциалом $U(R) = Z_1 Z_2 \exp(-\alpha R)/R$, константа экранирования α может быть вычислена по формуле

$$\alpha = - \frac{(H_{el}(Z_1 + Z_2, 0) - H_{el}(Z_1, \infty) - H_{el}(Z_2, \infty))}{Z_1 Z_2}, \quad (3.1)$$

где Z_1 и Z_2 — заряды ядер сталкивающихся атомных частиц, R — межъядерное расстояние, $H_{el}(Z_1 + Z_2, 0)$ — энергия электронной подсистемы объединённого атома, $H_{el}(Z_1, \infty)$ и $H_{el}(Z_2, \infty)$ — энергии электронных подсистем разъединённых атомов. Используя расчёты [40], энергию электронной подсистемы можно записать в виде

$$H_{el}(Z) = 0,465 Z^{2,432} \text{ [ат. ед.]}. \quad (3.2)$$

Данная формула выполняется с точностью 1,6% для $Z = 2 - 92$. Полученная зависимость несколько отли-

чается от зависимости, предсказываемой моделью атома Томаса–Ферми, в которой $H_{el}(Z) \sim Z^{7/3}$. С учётом (3.1) для константы экранирования получается выражение

$$\alpha = -0,465 \frac{[(Z_1 + Z_2)^{2,432} - Z_1^{2,432} - Z_2^{2,432}]}{Z_1 Z_2}. \quad (3.3)$$

Данное выражение может быть приближённо записано в виде

$$\alpha = 2,815 [1 + 0,022 (Z_1 + Z_2)]. \quad (3.4)$$

Эта формула остаётся справедливой с точностью до 3 % для систем атомов с $Z_{1,2} = 5 - 92$. Поскольку электронная энергия подсистемы уменьшается по абсолютной величине в случае возбуждения или ионизации сталкивающихся частиц, формулы (3.3) и (3.4) дают верхний предел значения константы экранирования. Формула (3.4) подходит для быстрой оценки.

Формулы (3.3) и (3.4) для оценки константы экранирования, полученные из первых принципов, могут быть использованы для поправок в сечение рассеяния при реализации метода обратного резерфордовского рассеяния, а также для оценки поправок, связанных с электронной экранировкой при туннелировании, в сечения ядерного синтеза при проведении измерений на мишенях, содержащих электроны.

Новая попытка сравнения теории и эксперимента была выполнена в работе [41]. Было показано, что данные о сечениях рассеяния для различных значений энергии соударения хорошо укладываются на единую универсальную кривую в приведённых координатах $\rho = \Theta d\sigma/d\Omega \sin \Theta$ и $\tau = E_{cm}\Theta$ (E_{cm} и Θ — энергия соударения и угол рассеяния в системе центра масс). Это означает, что рассеяние носит квазиупругий характер, и возможно применение процедуры, предложенной Фирсовым [33], для получения параметров потенциала из эксперимента. Потенциалы взаимодействия были получены для 13 систем [41]. Ошибка в значении потенциала связана с интегрированием зависимости сечения от угла рассеяния и как правило не превышает 3%. Ошибка в калибровке значений R связана с неточностью в измерении абсолютных значений сечений и оценивается авторами работы в 4%. Для потенциала, наилучшим образом описывающего эксперимент, была предложена функциональная форма — потенциал Зиновьева [41]:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 a_f}{x} \exp\left(-\frac{1,575x}{1 + 0,719x^{0,5} - 0,010x}\right), \quad (3.5)$$

где $x = R/a_f$, $a_f = 0,8853/(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ — длина экранирования Фирсова [34], выраженная в атомных единицах. Было показано, что универсальная запись потенциала применима только для области $x < 7$. Формула (3.5) позволяет сделать экспресс-оценку потенциала взаимодействия.

Для получения более точных значений потенциала для конкретных пар в [42] было предложено в рамках приближения функционала плотности (далее будет использоваться сокращение DFT — Density Functional Theory) использовать пакет программ DMol с расширенным набором волновых функций. В [43] с помощью этой

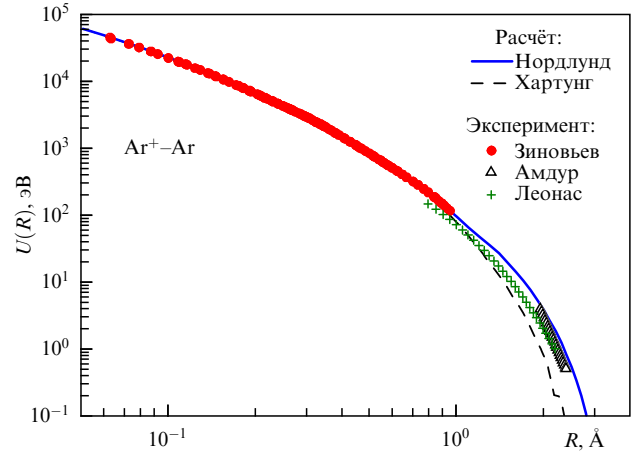


Рис. 2. Потенциал Ar–Ar: сопоставление расчёта и эксперимента. (Рисунок взят из работы [43].)

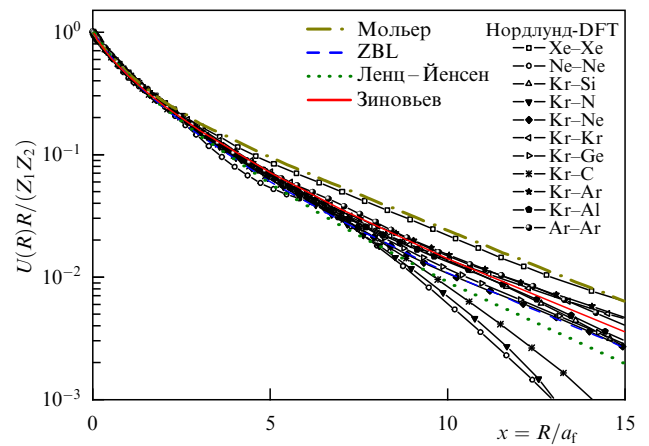


Рис. 3. Сопоставление расчётных DFT потенциалов с популярными теоретическими моделями [43].

модели были вычислены потенциалы взаимодействия для 19 систем, и проведено детальное сравнение с экспериментом (рис. 2). Было достигнуто хорошее согласие с экспериментом.

Рисунок 3 показывает сравнение расчётов потенциала для различных систем с теоретическими моделями. Как видно из рис. 3, для повышения точности расчётов целесообразно использовать индивидуальный потенциал для конкретной системы, рассчитанный в рамках приближения функционала плотности. В случаях, когда имеется притягивающая потенциальная яма, в работе [44] было предложено уточнять параметры потенциальной ямы с использованием данных спектроскопических измерений [45].

Значения DFT потенциалов для различных систем можно найти в работах [43, 75], а данные о параметрах потенциальной ямы — в монографии [45].

При малых энергиях соударения (менее 100 эВ) следует использовать многочастичные потенциалы и применять методы молекулярной динамики.

Примеры расчёта многочастичных потенциалов для мишеней из Be и W можно найти в работах [47–51]. Для систем, содержащих углерод, часто применяется потенциал Терсоффа [52]. Обзор работ по многочастичным потенциалам представлен в [52].

4. Универсальная функция Линдхарда для описания рассеяния атомных частиц

Линдхард, Нильсен и Шарф [54] показали, что для экранированных кулоновских потенциалов:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \Phi\left(\frac{R}{a}\right), \tag{4.1}$$

где $\Phi(R/a)$ — функция экранирования, сечение рассеяния атомных частиц, зависящее от двух переменных: угла рассеяния θ и энергии соударения E — может быть с хорошей точностью описано функцией только одной переменной $\eta = \varepsilon \sin(\theta/2)$, при этом:

$$\varepsilon = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} E, \tag{4.2}$$

где M_1, M_2, Z_1, Z_2 — массы и заряды сталкивающихся частиц, e — заряд электрона, a — длина экранирования в потенциале. В оригинальной работе используется переменная $t^{1/2} = \eta$.

Сечение рассеяния в системе центра масс $d\sigma/d\Omega$ связано с функцией $f(\eta)$, предложенной в работе [54], соотношением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{8\varepsilon} \frac{f(\eta)}{\sin^3(\theta/2)}. \tag{4.3}$$

Для больших значений η , когда рассеяние описывается формулой Резерфорда, $f = 1/(2\eta)$.

С помощью функции $f(\eta)$ можно сосчитать сечение ядерных тормозных потерь $S(E)$:

$$S(E) = 4\pi a Z_1 Z_2 e^2 \frac{M_1}{M_1 + M_2} s(\varepsilon), \tag{4.4}$$

при этом

$$s(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f(\eta) d\eta. \tag{4.5}$$

В литературе $s(\varepsilon)$ и ε называются координатами Линдхарда. В этих координатах удобно сопоставлять данные ЯТС для различных систем.

Можно аналитически описать функцию $f(\eta)$ [55]:

$$f(\eta) = A\eta^{1-2m} [1 + (2A\eta^{2(1-m)q})^{-1/q}]. \tag{4.6}$$

Параметры A, m, q для потенциалов Фирсова, Бора, Мольера и Ленца–Йенсена взяты из [18], для KrC — из работы [56], для последних двух случаев рассчитаны нами.

В работе [57] проверена выполнимость аппроксимации Линдхарда для различных аналитических потенциалов. Для малых энергий соударения расхождение на 10% проявляется при углах 15–20°. С ростом энергии кривые начинают приближаться к универсальной кривой, её пересекают и наблюдается более резкий спад сечения, чем предсказывает универсальная кривая. При дальнейшем росте энергии соударения мы переходим к случаю слабо экранированного кулоновского потенциала и различие уменьшается. Координаты кривой Линдхарда выбраны таким образом, что в случае кулоновского потенциала единая кривая даёт точный результат в соответствии с формулой Резерфорда.

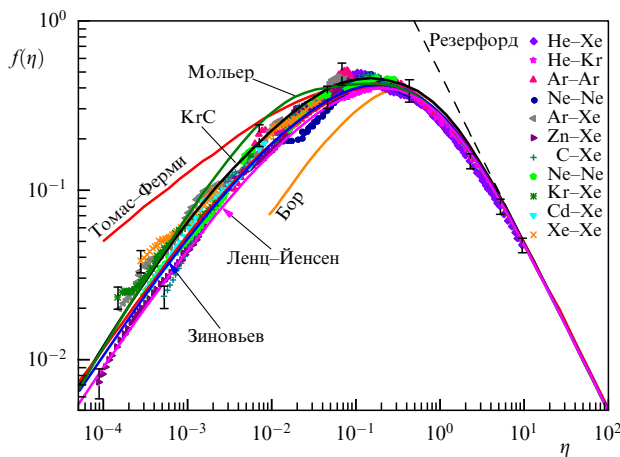


Рис. 4. Сравнение универсальной кривой Линдхарда для различных потенциалов с данными измерений сечений рассеяния. При обработке экспериментальных данных использовалась длина экранирования Линдхарда.

В эксперименте измеряется эффективное сечение рассеяния, которое может включать вклад неупругих каналов. При столкновении частиц кЭВ-энергий вклад неупругих каналов приводит к появлению особенностей в сечениях квазиупругого рассеяния. На рисунке 4 приведены расчёты функции Линдхарда для различных потенциалов и приведено сравнение с данными эксперимента [58–62]. Наилучшее согласие с экспериментом даёт потенциал, предложенный Зиновьевым [41]. Кривые, полученные для потенциала Томаса–Ферми–Фирсова и Бора, заметно отличаются от экспериментальных данных. Разброс экспериментальных данных в районе максимума ($\varepsilon = 0,2$) не превышает $\pm 10\%$. При больших энергиях универсальная кривая неплохо описывает эксперимент. При $\varepsilon = 0,01$ разброс экспериментальных данных составляет $\pm 15\%$, что сопоставимо с разбросом данных, предсказанных различными моделями потенциала. При дальнейшем уменьшении энергии соударения разброс заметно увеличивается.

Разброс экспериментальных данных для разных систем достаточно большой, что не позволяет выбрать потенциал, описывающий все изученные случаи столкновений. Если мы зафиксируем изучаемый случай, то наличие особенностей в дифференциальных сечениях рассеяния приводит к отклонению до 15–25%, хотя общий ход кривой можно описать достаточно точно. Как показано в работе [32], появление особенностей связано с многоканальным неупругим рассеянием. При этом в случае возбуждения внутренних оболочек характерным параметром для оценки величины отклонения сечения от гладкой кривой может служить отношение $Q/U(R_0)$, где Q — величина неупругой потери энергии, а $U(R_0)$ — значение потенциала в точке поворота траектории для угла, когда появляется особенность в сечении. Обычно данное отношение составляет 15–20%, а значит, и приближение независимого рассмотрения ЯТС и ЭТС выполняется с такой же точностью.

Наличие особенности в сечении рассеяния важно учитывать при анализе поверхностного слоя вещества, когда основной вклад даёт однократное рассеяние. Как правило, особенности в сечении возникают вследствие перекрывания молекулярных оболочек взаимодействующих

Таблица. Параметры для описания функции $f(\eta)$ для различных потенциалов

Потенциал	A	m	q
Фирсов	1,309	0,333	0,667
Бор	2,37	0,103	0,570
Мольер	3,07	0,216	0,530
Ленц – Йенсен	2,92	0,191	0,512
KrC	3,35	0,233	0,445
ZBL	2,219	0,228	0,577
Зиновьев	2,682	0,213	0,551

атомов на 10–15 %, поэтому появление особенностей при достижении таких межъядерных расстояний можно предсказать.

В компьютерных расчётах часто используется приближение Линдхарда, связанное с возможностью аддитивно рассматривать ядерные и электронные тормозные потери. Сопоставление с экспериментом, проведённое в данном разделе, показывает, что точность этого приближения составляет 15–20 % в зависимости от интервала рассматриваемых энергий. С указанной точностью универсальная кривая Линдхарда для конкретного потенциала может быть использована для расчёта сечения упругого рассеяния с использованием параметров, приведённых в таблице.

5. Экранировка взаимодействия частиц в металле

Вопрос об отличии потенциала при столкновениях частиц в твёрдом теле от столкновений в газовой фазе является предметом постоянных дискуссий.

При моделировании энергетических спектров рассеянных частиц в работе [63] для лучшего согласия с экспериментом отмечалась необходимость корректировки константы экранирования в потенциале. В работе [25] из анализа данных о радужном рассеянии атомов на поверхности металлических кристаллов были получены потенциалы взаимодействия, которые сильно отличаются от потенциалов, используемых для описания рассеяния в газовой фазе. Это отличие было объяснено влиянием наведённого налетающим атомом заряда в металле [25]. Подобное явление наблюдалось также в работе [64] при описании рассеяния ионов N^{2+} на кристалле меди. В отличие от газовой фазы, определение потенциала из эксперимента для столкновений в твёрдом теле затруднено из-за влияния многократного рассеяния и торможения частиц, а также из-за изменения заряда частицы при прохождении через твёрдое тело.

В работе [65] моделировались энергетические и угловые спектры обратно рассеянных частиц при бомбардировке протонами мишени из золота. Использовались экспериментальные данные из работы [66]. Было показано, что потенциал взаимодействия ион – твёрдое тело заметно отличается от потенциала, описывающего столкновения в газовой фазе. Константа экранирования возросла на 10–15 %.

Это явление было подтверждено при моделировании углового распределения частиц при прохождении протонами тонкой плёнки из золота [67]. Использовались

экспериментальные данные из работ [68, 69]. В данном случае для описания эксперимента потребовалось увеличить константу экранирования в потенциале на 15–20 %.

Теоретическое описание данного явления было дано в работе [70]. При движении иона в твёрдом теле происходит экранировка потенциала иона. Рассматривался случай столкновений со скоростями $v < 1$ а.е., т.е. статическая экранировка.

Потенциал взаимодействия в приближении функции плотности рассчитывается как разность энергии системы атомов при расстоянии R и $R = \infty$. Если не учитывать возмущение электронной плотности системы, то потенциал может быть записан в виде

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - Z_1 N_2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r) \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (5.1)$$

где первый член описывает кулоновское взаимодействие ядер, а второй член — энергию взаимодействия между зарядом Z_1 и электронами второй частицы, N_2 — число электронов иона решётки. Запишем $\rho(r)$ в виде, предложенном в [71]:

$$\rho(r) = \frac{N_2}{4\pi a^2 r} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right), \quad (5.2)$$

где A_i и B_i — коэффициенты разложения в потенциале Мольера [35].

Согласно работе [72], константа экранирования для иона с зарядом Z_2 и числом электронов N_2 может быть записана в виде

$$a = 0,8853 a_B Z_2^{-1,2} N_2^{0,87}, \quad a_B = 0,529 \text{ \AA}. \quad (5.3)$$

Подставляя $\rho(r)$ в виде (5.2), записывая $|\mathbf{R} - \mathbf{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta}$ и интегрируя по θ и φ , имеем:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 N_2}{2R a^2} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \times \int_0^\infty dr \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) (R + r - |R - r|). \quad (5.4)$$

Разбивая интеграл на две части, $r < R$ и $r > R$, получаем:

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right). \quad (5.5)$$

В итоге была получена формула, аналогичная предложенной в [72], которая описывает взаимодействие иона с зарядом Z_1 с ионом ($N_2 < Z_2$) или атомом решётки ($N_2 = Z_2$).

В случае взаимодействия иона в твёрдом теле кулоновский заряд иона экранирован электронами проводимости и потенциал иона может быть записан в виде

$$U_1(R) = \frac{Z_1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right), \quad (5.6)$$

где R_D — длина экранирования Дебая [73]. Для золота $R_D = 1,358$ а.е. Заменяя в формуле (5.1) кулоновский потенциал на потенциал экранированного кулоновского заряда и проводя аналогичное интегрирование, получаем потенциал взаимодействия иона с решёткой ме-

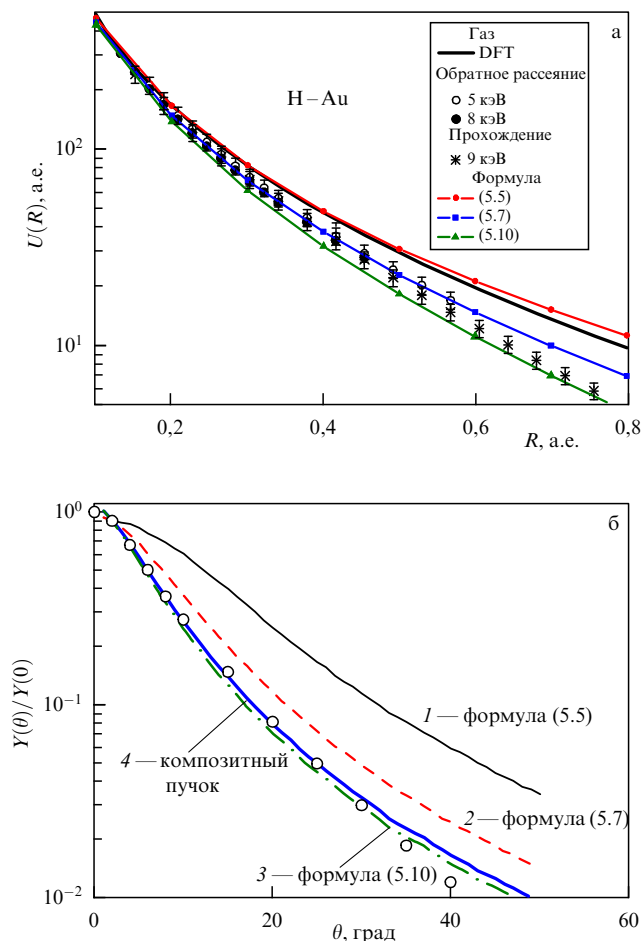


Рис. 5. (а) Потенциал межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния для случая Н – Au. Приведён потенциал DFT для газовой фазы. Точками показаны данные из работ [65, 67], в которых значения потенциалов получены обработкой экспериментальных данных о рассеянии частиц на поверхности или прохождении через тонкие плёнки. Линии с точками — расчёт по формулам (5.5), (5.7), (5.10). (б) Угловое распределение частиц, прошедших тонкую плёнку золота. Точки — эксперимент [68], ошибки измерений ~ 3%. Линии — расчёт [70] для потенциалов (5.5), (5.7), (5.10). Жирная линия — расчёт для композитного пучка с содержанием нейтральных атомов 87,5%.

талла, экранированного электронами проводимости:

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \times \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) \quad (5.7)$$

(см. синюю кривую на рис. 5а).

В случае атома водорода заряд ядра протона экранируется связанным электроном. Для потенциала атома водорода в [74] получено выражение:

$$U_2(R) = \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a_B}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right), \quad (5.8)$$

здесь радиус Бора $a_B = 1$ в атомных единицах. Тот же результат может быть получен, если в формуле (5.1) записать электронную плотность для атома водорода в виде

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-2\frac{r}{a_B}\right) \quad (5.9)$$

и провести соответствующее интегрирование по электронным координатам.

Заменяя в формуле (5.5) член Z_1/R во втором слагаемом на $U_2(R)$ и учитывая, что $Z_2 = N_2$, получаем выражение для потенциала взаимодействия нейтрального атома с решёткой твёрдого тела:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right) \left(1 + \frac{R}{a_B}\right). \quad (5.10)$$

На рисунке 5а показана зависимость потенциала межатомного взаимодействия от расстояния между атомами для системы Н – Au. Точками приведены значения потенциала, полученные из анализа экспериментальных данных об обратном рассеянии частиц [65] и из экспериментов по прохождению тонких плёнок [67]. Сплошная линия — расчёт для газовой фазы методом DFT. Из рисунка 5а видно, что потенциалы для газовой фазы и твёрдого тела сильно разнятся. Красной линией с кружками показан результат расчётов по формуле (5.5), который практически совпадает с DFT потенциалом для газовой фазы. Как видно из рис. 5а, потенциалы, учитывающие экранировку, неплохо описывают экспериментальные данные о потенциале для системы водородная частица в металле.

На рисунке 5б приведено угловое распределение частиц, прошедших тонкую плёнку золота. Также показаны угловые распределения, полученные для потенциалов (5.5, 5.7, 5.10). Потенциал (5.10) позволяет достичь неплохого согласия с экспериментом. Для рассматриваемого случая пучок состоит на 87,5% из нейтральных атомов. Расчёт для композитного пучка полностью совпадает с экспериментом.

Приведённые формулы (5.5, 5.7, 5.10) для потенциалов можно также использовать для расчёта ядерных тормозных потерь [70] при прохождении протонов и атомов водорода в металлах.

Таким образом, при анализе прохождения частиц в проводящих материалах следует учитывать увеличение параметра экранировки в потенциале взаимодействия.

6. Ядерные тормозные потери

Как будет показано ниже, ЯТС полностью определяются потенциалом взаимодействия. В классической механике сечение рассеяния рассчитывается через зависимость угла рассеяния от параметра удара при использовании конкретного потенциала взаимодействия. Сечение ядерного торможения выражается формулой:

$$S_n = 8\pi \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \int_0^\infty \sin^2 \left[\frac{\theta(b)}{2} \right] b db, \quad (6.1)$$

где M_1 и M_2 — массы сталкивающихся частиц, $\theta(b)$ — угол рассеяния в системе центра масс (СЦМ) при параметре удара b , E — энергия налетающей частицы.

Сечение ядерного торможения S_n выражается через транспортное сечение Q_{tr} следующим образом:

$$S_n = Q_{tr} \frac{2M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E. \quad (6.2)$$

В квазиклассическом приближении понятие траектории отсутствует. Для расчёта транспортного сечения в

квазиклассическом приближении обычно применяется формула [75]:

$$Q_{tr} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}), \quad (6.3)$$

здесь $k = p/\hbar$ — волновой вектор, p — импульс в СЦМ, l — орбитальное квантовое число, δ_l — фаза рассеяния.

Фаза δ_l в квазиклассическом приближении определяется выражением [74]:

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} \left[\sqrt{2\mu[E_{cms} - U(r)] - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} - k \right] dr + \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2} \right) - kr_0, \quad (6.4)$$

где r — межъядерное расстояние, μ — приведённая масса ($\mu = M_1 M_2 / \{M_1 + M_2\}$), E_{cms} — энергия в СЦМ, U — потенциал межатомного взаимодействия.

Здесь r_0 — корень уравнения

$$2\mu[E_{cms} - U(r_0)] - \frac{(l+1/2)^2}{r_0^2} = 0. \quad (6.5)$$

Применимость квазиклассического рассмотрения задачи сводится к условию:

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (6.6)$$

где $\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ — дебройлевская длина волны частицы, x — координата частицы. Таким образом, длина волны частицы должна мало меняться на протяжении расстояний порядка характерных для изменения потенциала. В нашем случае это расстояние совпадает с размером потенциальной ямы $a \sim 1 \text{ \AA}$. Критерий $\lambda/2\pi < 0,1a$ выполняется для атома водорода вплоть до энергий $E > 0,3 \text{ эВ}$.

Обычный критерий применимости классики для описания рассеяния $\theta l \gg 1$ в случае расчёта транспортного сечения или ЯТС сводится к более простому условию $l \gg 1$, так как основной вклад в сечение ЯТС вносят углы $\theta \sim 1$.

Из приведённых формул видно, что при расчётах как классических траекторий, так и фазы определяющее значение имеет выбор потенциала для адекватного описания системы взаимодействующих частиц.

В работе [46] были выполнены расчёты ЯТС для 48 систем с использованием потенциала, полученного в рамках приближения DFT с коррекцией параметров потенциальной ямы по результатам спектроскопических измерений.

На рисунке 6а приведены потенциалы для системы Н–С: DFT потенциал и часто используемый в программах компьютерного моделирования потенциал ZBL. Из рисунка видно, что ZBL — это чисто отталкивательный потенциал. Потенциал DFT показывает наличие потенциальной ямы с глубиной $U_0 = 3,5 \text{ эВ}$.

Как видно из рис. 6б, если рассчитать ядерные тормозные потери для потенциала ZBL, то получим куполообразную кривую (штриховая линия). Если же в расчёте использовать потенциал с ямой, то возникает дополнительный пик, связанный с сильным рассеянием атомов потенциальной ямой. То есть если нам интересны значе-

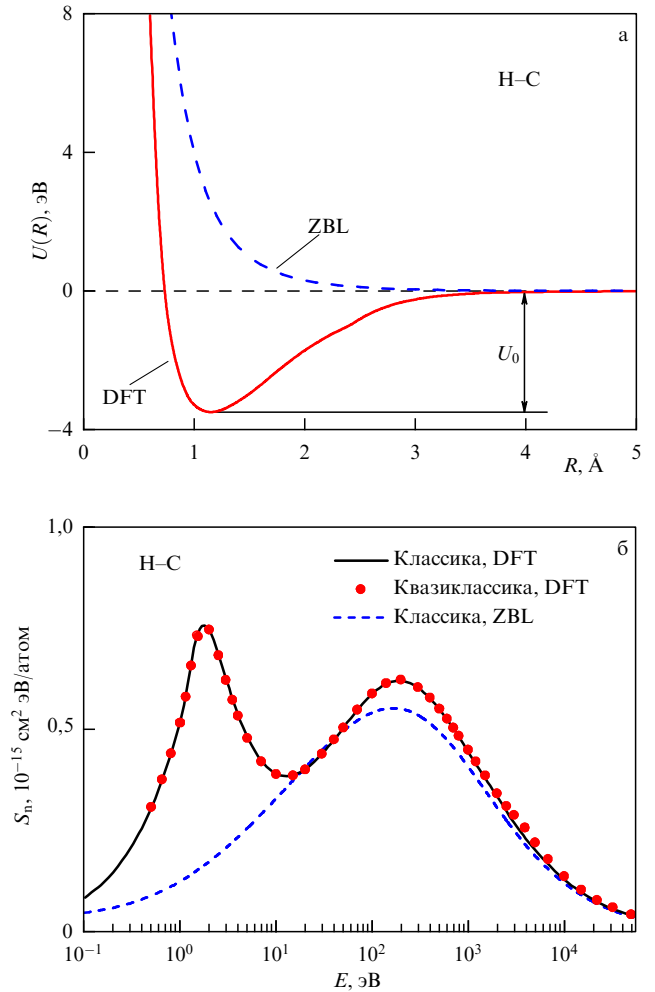


Рис. 6. (а) Зависимость потенциала взаимодействия от расстояния между атомами для пары Н–С. Штриховая линия — потенциал ZBL, сплошная линия — потенциал DFT. Глубина ямы в потенциале обозначена U_0 . (б) Зависимость сечения ядерного торможения от энергии налетающей частицы для пары Н–С. Штриховая линия — "классика" и потенциал ZBL, сплошная линия — "классика" и потенциал DFT, точки — "квазиклассика" и потенциал DFT. (Рисунки взяты из работы [46].)

ния ядерных потерь для малых энергий сталкивающихся частиц, то нельзя использовать универсальный потенциал ZBL без ямы.

Расчёт даёт одинаковые значения потерь энергии как в классическом, так и в квазиклассическом случае при выполнении условия $l \gg 1$.

Наличие дополнительного пика в сечениях ЯТС необходимо учитывать при энергиях соударения менее 100 эВ, особенно это важно при расчёте траекторий частиц отдачи при распылении.

7. Механизм неупругих потерь, связанный с выдвиганием молекулярных орбиталей при столкновениях частиц и образованием автоионизационных состояний

Торможение при высоких энергиях соударения впервые рассматривалось Бете [76] и описывается формулой:

$$S_e = \frac{4\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2} \ln \frac{2mv^2}{I}, \quad (7.1)$$

где v — скорость и Z_1 — атомный номер налетающей частицы, Z_2 — атомный номер вещества мишени и I — величина порядка энергии ионизации (m — масса электрона). В этой области тормозное сечение уменьшается с ростом энергии налетающей частицы. В работе Блоха [77] в данную формулу были введены релятивистские поправки, которые несущественны при энергиях соударения менее 1 МэВ.

В низкоэнергетической области Ферми и Теллер [78] исследовали электронное торможение в металлах, рассматривая электроны металла как свободный вырожденный ферми-газ. Формулу Ферми–Теллера можно записать в виде

$$S_e = \gamma_F \frac{e^2 a_0}{v_0} v, \quad \gamma_F = 4\pi \frac{a^2}{a_0^2} \frac{v_F}{v_0} Z_2^*, \quad (7.2)$$

где $v_0 = e^2/\hbar$ и $a_0 = \hbar/(mv_0)$ — боровские скорость и радиус, v_F — фермиевская скорость, Z_2^* — число электронов проводимости на один атом вещества мишени и $a^2 \sim (e^2/mv_F^2)^2$. Формула (7.2) описывает вклад в торможение электронов проводимости металла; область её применимости $v \ll v_F$.

Позднее Линдхард и Шарфф [20] вывели следующую формулу для сечения неупругого торможения:

$$S_e = 8\pi e^2 a_0 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \frac{v}{v_0} = C v. \quad (7.3)$$

При выводе этой формулы использовалось выражение для диэлектрической проницаемости с параметрами, подогнанными к экспериментальным данным. Формула (7.3) справедлива при скоростях $v < Z_1^{2/3} v_0$. Для того чтобы учесть Z_2 -осцилляции в сечениях неупругого торможения, часто вводят подгоночный параметр c_k , принимающий значения от 0,67 до 2,4 [79–81].

Фирсов [82] предложил модель, согласно которой электронные облака сталкивающихся атомов перекрываются. Исследуя перенос импульса при столкновении, можно определить электронные потери энергии. Используя приближение Томаса–Ферми в сочетании с импульсным приближением движения ядер, Фирсов получил следующую формулу для неупругой потери энергии \mathcal{E} [эВ]:

$$\mathcal{E} = \frac{(Z_1 + Z_2)^{5/3} 4,3 \times 10^{-8} v}{[1 + 3,1(Z_1 + Z_2)^{1/3} 10^7 R_0(p)]^5}, \quad (7.4)$$

где скорость налетающей частицы v выражена в см s^{-1} , а расстояние наибольшего сближения R_0 — в см, p — параметр удара. Для сечения торможения S_e получим выражение:

$$S_e = 2\pi \int_0^{p_{\max}} p \mathcal{E}(p, v) dp, \quad (7.5)$$

где p_{\max} — среднее расстояние между атомами мишени.

Обе модели Линдхарда и Фирсова предсказывают, что сечение торможения пропорционально скорости. В связи с использованием приближения Томаса–Ферми для описания электронных оболочек модель Фирсова целесообразно использовать для столкновений тяжёлых атомов. Оен и Робинсон [83] предложили модификацию модели Фирсова для столкновений с участием лёгких ионов. В обзоре [84] рассмотрены другие модификации моделей Линдхарда и Фирсова, а также часто используемые эмпирические формулы.

Отметим, что модели Линдхарда и Фирсова не учитывают оболочечную структуру атомов, а большинство других предложенных моделей не рассматривают перестройку электронных оболочек атомов при столкновении.

Обзор современного состояния исследований по теории торможения частиц представлен в [85, 86]. Как правило, теория удовлетворительно описывает потери при высоких энергиях частиц и вблизи максимума сечения торможения.

В коде SRIM, как правило, при низких энергиях используется предположение о пропорциональности ЭТС скорости соударения с нормировкой на результаты эксперимента в районе максимума. Данные о низких энергиях столкновений ионов с твёрдым телом менее надёжны и во многих случаях отсутствуют. Они особенно необходимы при решении проблемы повреждения первой стенки и дивертора токамака-реактора, а также при разработке методов ионной имплантации для энергий ионов ниже 10 кэВ, направленных на миниатюризацию создаваемых наноструктур.

В работах [87, 88] была предложена концепция, согласно которой в качестве основного механизма ионизации и неупругих потерь энергии при энергии соударения менее 100 кэВ рассматривалось образование автоионизационных состояний при столкновении атомов. Попытка учесть роль возбуждения автоионизационных состояний была сделана также в [89].

Рассмотрим основные формулы предлагаемой модели. Вклад образования автоионизационных состояний в электронную тормозную способность dE/dx можно описать как

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= \frac{2\pi}{V_0} \int Q[R_0(b)] b db \approx \frac{2\pi}{V_0} \sum_{nlj} \int Q_{nlj} W_{nlj}(R_0) b db = \\ &= \frac{2\pi}{V_0} \sum_{nlj} Q_{nlj}^{\text{aver}} \int W_{nlj}(R_0) b db. \end{aligned} \quad (7.6)$$

$Q[R_0(b)]$ — полная величина неупругих потерь энергии в зависимости от расстояния наибольшего сближения R_0 . Здесь Q_{nlj} — энергии автоионизационных состояний, $W_{nlj}(R_0)$ — вероятности возбуждения автоионизационных состояний в зависимости от R_0 , V_0 — объём одиночного атома в твёрдой мишени, суммирование ведётся по всем прототипированным состояниям с квантовыми числами n, l, j , b — параметр удара. Удаление параметра Q_{nlj} из-под интеграла не снижает общности выражения, если под Q_{nlj}^{aver} понимать усреднённое по диапазону параметров b значение.

Заметим, что парциальное сечение образования автоионизационного состояния

$$\sigma_{nlj}^a = 2\pi \int W_{nlj}(R_0) b db. \quad (7.7)$$

Распад автоионизационного состояния приводит к ионизации с удалением N электронов, поэтому вместо сечения образования автоионизационного состояния можно использовать $N\sigma_{nlj}^{\text{ion}}$, где $\sigma_{nlj}^{\text{ion}}$ — сечение ионизации.

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{V_0} \sum_{nlj} N Q_{nlj}^{\text{aver}} \sigma_{nlj}^{\text{ion}}. \quad (7.8)$$

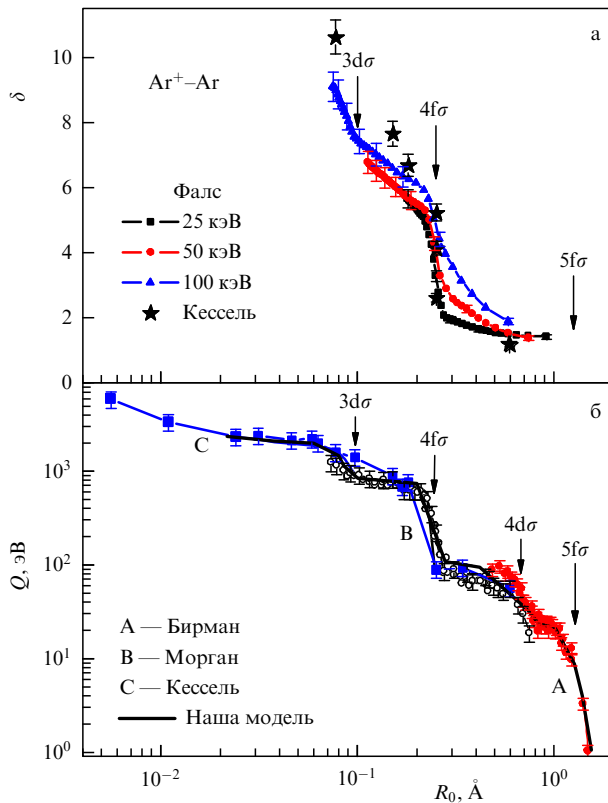


Рис. 7. Зависимость числа эмитированных электронов δ (а) и неупругих потерь энергии (б) для системы $\text{Ag}^+ - \text{Ag}$ от расстояния наибольшего сближения. Стрелки указывают пороги выдвигания различных орбиталей. На рисунке а кривые с точками представляют данные работы [90], звёздочки — измерения методом совпадений [91]. На рисунке б приведены данные работ Бирмана [92], Моргана [93], Кесселя [91, 94]. Толстая сплошная линия — обсуждаемая модель. (Рисунок взят из [95].)

Электронную тормозную способность можно оценить, используя сечение ионизации и значения неупругих потерь энергии для рассматриваемых каналов.

В качестве примера рассмотрим случай столкновения $\text{Ag} - \text{Ag}$.

Как видно из рис. 7, в столкновениях $\text{Ag}^+ - \text{Ag}$ имеет место корреляция между наблюдаемым числом вылетающих электронов и неупругими потерями. Видно резкое увеличение обеих величин при достижении межъядерных расстояний, на которых выдвигается соответствующая МО и происходит перестройка электронных оболочек. При больших межъядерных расстояниях $R_0 \approx 1,4$ а.е. имеет место возбуждение М-оболочек. При $R_0 \approx 0,22$ а.е. вследствие выдвигания $4f\sigma$ орбитали в $L_{2,3}$ -оболочке Ag возникают две вакансии; при выдвигении $3d\sigma$ орбитали возникают ещё две L-вакансии.

Приведём пример расчёта сечения торможения для этого случая. Данные о сечениях ионизации М-оболочки Ag можно взять из работ [96–98]. Данные о сечении возбуждения L-оболочки были получены в работе [99]. Используя экспериментальные данные о неупругих потерях энергии [92] и энергиях образования вакансий в $L_{2,3}$ -оболочке Ag , с помощью формулы (7.8) можно рассчитать dE/dx (рис. 8). Из рисунка 8а видно, что возбуждение L-оболочки удваивает значение dE/dx . Предложенная модель даёт значения, заметно превышающие данные SRIM и предсказывает пороговый характер зависимости dE/dx от энергии соударения.

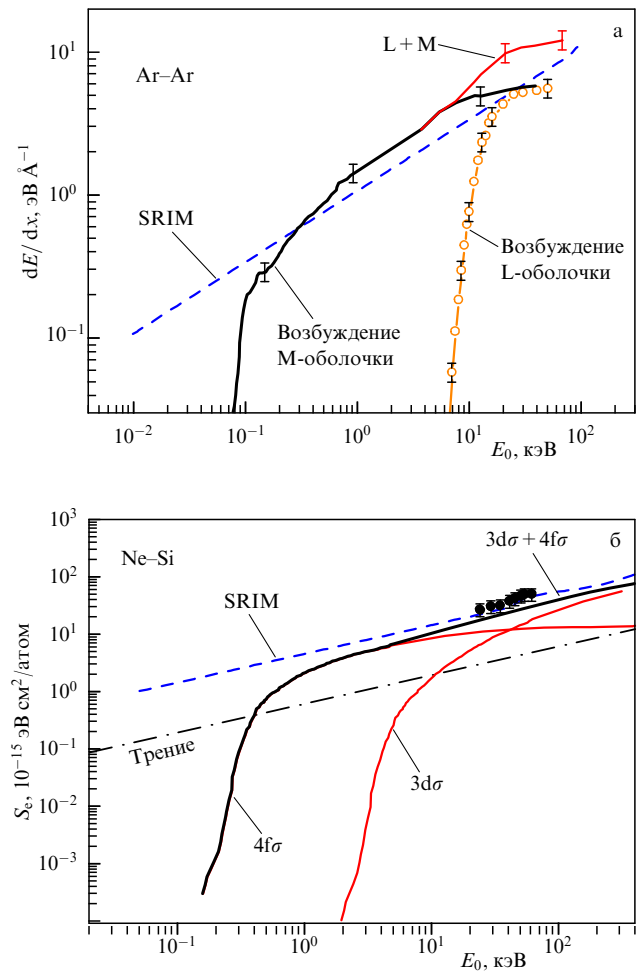


Рис. 8. (а) Электронная тормозная способность при столкновениях Ag с твёрдым Ag . Жирная чёрная линия — оценки, полученные на основе сечения ионизации [96–98]. Вклад ионизации L-оболочки показан кружками [99]. Жирная сплошная красная линия представляет собой сумму вкладов возбуждения L- и М-оболочек. Штриховая синяя линия — расчёт программой SRIM. (б) Зависимость сечения электронного торможения для случая $\text{Ne} - \text{Si}$ от энергии соударения. Точки — эксперимент [101], штриховая линия — данные SRIM [19]. Вклады от выдвигения $3d\sigma$ - и $4f\sigma$ -орбиталей показаны сплошными линиями, штрихпунктирной линией показана оценка вклада торможения на электронах проводимости, жирной сплошной линией — суммарная кривая. (Рисунки взяты из [102].)

В случае отсутствия измерений сечений ионизации рекомендуем использовать скейлинги для возбуждения L- и М-оболочек, предложенные в [88, 103]. Вероятность образования L-вакансии при достижении межъядерного расстояния R_0 может быть описана выражением:

$$W(R_0) = \frac{1}{\beta + \exp[\gamma(R_0/R_b - 1)]}, \quad (7.9)$$

где $\beta = 1,02$, $\gamma = 22,8$, а параметр R_b определяется из условия $W(R_b) = 0,5$ и равен межъядерному расстоянию R_c , на котором $4f\sigma$ -орбиталь пересекает незаполненные верхние уровни. Зависимость R_c от зарядов взаимодействующих частиц была получена в [103] путём обработки данных о порогах возбуждения $L_{2,3}$ -оболочки при столкновениях атомных частиц как в газовой, так и в твёрдой фазах. Сечение ионизации, связанное с возбуждением $L_{2,3}$ -оболочки, рассчитывается путём интегриро-

вания $W[R_0(b)]$ по всем параметрам удара:

$$\sigma(E_0) = 2\pi N \int_0^\infty W[R_0(b)] b db, \quad (7.10)$$

где N — число вакансий, образующихся при малых R_0 .

На рисунке 8б приведён пример столкновений Ne–Si. В данном случае сечения ионизации L- и M-оболочек были получены с помощью масштабирования. Необходимо учесть вклад в тормозные потери взаимодействия налетающей частицы с электронами проводимости (кривая "трение" на рис. 8б). Этот вклад был оценён с использованием формул [100]. Как видно из рис. 8б, полученные данные неплохо согласуются с экспериментом [101]. Вклад в тормозные потери взаимодействия с электронами проводимости составляет $\sim 13\%$.

При возбуждении K-вакансий имеют место два принципиально различающихся случая:

1. При наличии вакансии на 2рп-орбитали до столкновения K-вакансия образуется вследствие вращательных переходов в пределе объединённого атома с 2рσ на 2рп-орбиталь.

На основе работы Бриггса–Масека [104] может быть предложен скейлинг (рис. 9а) для сечения образования K-вакансий [105]:

$$\sigma_{\text{bak}}(E_{\text{cms}}) = f\pi R_{2p}^2 F\left(\frac{E_{\text{cms}}}{(Z_1 + Z_2 - \delta)^2}\right), \quad (7.11)$$

где E_{cms} — энергия соударения в системе центра масс, R_{2p} — радиус 2р-оболочки объединённого атома, $R_{2p} \sim (Z_1 + Z_2 - \delta)^{-1}$, Z_1 и Z_2 — заряды ядер сталкивающихся атомов, $\delta = 4$ — поправка на экранировку 2р-оболочки электронами 1s- и 2s-оболочки объединённого атома. Сечение пропорционально фактору f , отражающему вероятность наличия вакансии на 2рп-орбитали, которая формируется из 2р-оболочки партнёра соударения с большим Z . По сравнению с ранее предложенными скейлингами учтена динамическая поправка вероятности образования вакансий на 2рп-орбитали в процессе соударения. Логарифм функции F даётся выражением $\lg F = -15,767 - 4,493 \exp(-x/0,069) - 1,128 \exp(-x/1,564) - 8,522 \exp(-x/0,026)$, здесь $x = E_{\text{cms}}/(Z_1 + Z_2 - \delta)^2$ [105]. Предложенный скейлинг позволяет оценивать сечения ионизации K-оболочек для неисследованных случаев.

Следует также иметь в виду, что K-вакансия, образующаяся в лёгком партнёре соударения, может перейти на K-оболочку более тяжёлого партнёра вследствие динамической связи 2рσ и 1sσ-состояний, так называемый механизм vacancy sharing. Вероятность этого процесса может быть оценена по формулам, предложенным в [106].

2. При столкновениях атомов и ионов с $Z > 10$ 2рп-орбиталь заполнена и переходы с 2рσ на 2рп-орбиталь невозможны. Делались неоднократные попытки [107–109] предложить эмпирические скейлинги для образования K-вакансий для этого случая. Однако сами авторы указывали на отсутствие теоретического объяснения данного явления.

Поведение термов квазимолекулы в комплексной плоскости межъядерных расстояний исследовалось в [110]. Было обнаружено существование точек ветвления, связывающих различные термы. Вероятность перехода электрона в континуум в рамках этой теории рассчитывается как интеграл по обходу точек ветвления. В [111] в

рамках указанной теории было предложено выражение для сечения испускания электрона с энергией E :

$$\sigma(E) = \frac{4\pi |R(E)|^2 \text{Im} R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right),$$

$$\alpha(E) = 2 \int_{E_0}^E \text{Im} R(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7.12)$$

где $R(E)$ — функция, обратная зависимости рассматриваемого терма $E(R)$ от межъядерного расстояния R , v — скорость соударения, $\text{Im} R(E)$ — мнимая часть зависимости $R(E)$.

Проинтегрируем данное выражение по энергиям испущенного электрона и найдём сечение ионизации σ_i рассматриваемого терма:

$$\sigma_i = \int_0^\infty \sigma(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{4\pi |R(E)|^2 \text{Im} R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right) dE.$$

Принимая во внимание, что $2\text{Im} R(E) dE = d\alpha$, можно заменить переменную:

$$\sigma_i = \int_{\alpha(0)}^\infty 2\pi |R[E(\alpha)]|^2 \frac{v}{\alpha} \exp\left(-\frac{\alpha}{v}\right) d\alpha.$$

Интеграл приближённо вычисляется методом перевала:

$$\sigma_i = 2\pi R_0^2 \frac{v}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{v}\right). \quad (7.13)$$

Введём зависимость терма от межъядерного расстояния R :

$$E = -U_0 \left[1 + \left(\frac{R}{R_0}\right)^m\right].$$

Тогда $\alpha(0) \approx 2(m/(m+1))U_0 \text{Im} R_0$. Рассмотрим ионизацию терма 2рσ при столкновениях р–Н, в данном случае $m = 2$, $U_0 = 0,5$ а.е. — энергия терма в пределе объединённого атома. Положение точки квазипересечения терма 2рσ с континуумом было вычислено в работе [112], при этом $\text{Im} R_0(\text{p–H}) = 1,01$. Таким образом, для системы р–Н величина $\alpha(0) \approx 0,67$. Нужно также учитывать, что в случае р–Н орбиталь 2рσ заполнена с вероятностью 50%.

В случае столкновений сложных атомов на орбитали 2рσ находятся два электрона ($P = 2$). В пределе объединённого атома энергия уровня $U_0 = 0,5Z_{\text{eff}}^2/n^2$, где Z_{eff} — эффективный заряд для рассматриваемого уровня, $n = 2$ — главное квантовое число. $R_0 = n/Z_{\text{eff}}$, таким образом, $Z_{\text{eff}} = (8U_0)^{0,5}$, $R_0^2 = 0,5/U_0$. Положение точки квазипересечения масштабируется при изменении Z_{eff} ,

$$\text{Im} R_0(Z_{\text{eff}}) = \text{Im} R_0(\text{p–H}) \frac{2}{Z_{\text{eff}}}.$$

Следовательно,

$$\alpha(Z_{\text{eff}}) = \frac{m}{m+1} \text{Im} R_0(\text{p–H}) \frac{4}{Z_{\text{eff}}} U_0 \approx \alpha(0) (2U_0)^{0,5}, \quad (7.14)$$

или

$$U_0 \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{\alpha(0)} \right]^2.$$

Для сечения ионизации $2r\sigma$ получаем выражение (в атомных единицах):

$$\sigma_i = \pi P \frac{v}{\alpha(Z_{\text{eff}})U_0} \exp\left(-\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v}\right), \quad (7.15)$$

здесь P — число электронов на уровне $2r\sigma$.

Для сравнения с экспериментом удобно ввести переменную x :

$$x = \frac{m_e}{M} \frac{E}{U_0},$$

где m_e/M — отношение массы электрона к массе налетающей частицы, E — энергия соударения.

Можно увидеть, что

$$\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v} = \frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}},$$

и формулу для сечения переписать в виде

$$\sigma_i [\text{см}^2] U_0 [\text{кэВ}] = K \frac{\sqrt{x}}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{x}\right), \quad (7.16)$$

где константа $K = 1,196 \times 10^{-18} \text{ см}^2 \text{ кэВ}$.

На рисунке 9б показана зависимость приведённого сечения от приведённой энергии для различных экспериментально исследованных комбинаций сталкивающихся частиц. Видно, что в таких координатах экспериментальные точки для большинства случаев ложатся на общую кривую. Эта зависимость хорошо описывается формулой (7.16). Наилучшее согласие с экспериментом достигается при значении $\alpha(0) = 0,75$ и $m = 3$. На том же рисунке изображено сечение ионизации для столкновений $p-H$, умноженное на 4. Видно, что указанная зависимость также очень хорошо согласуется с первой группой экспериментальных данных и формулой (7.16). Область применимости предложенной формулы ограничена диапазоном $x < 1$.

Интересно сопоставить два возможных механизма образования К-вакансий. Как видно из вставки на рис. 9б, расчёт сечения образования К-вакансий в системе $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$, выполненный в работе [104], при энергиях свыше 200 кэВ даёт значения сечений ниже эксперимента [113]. Учёт поправки на ионизацию $2r\sigma$ -орбитали вследствие переходов в континуум с использованием формулы (7.16) приводит к практически полному совпадению с экспериментом.

При небольших энергиях соударения механизм, связанный с переходами между орбиталями, приводит к значительно большему сечению образования К-вакансий по сравнению с сечениями образования вакансий вследствие динамической ионизации, а при больших энергиях необходимо учитывать оба механизма. Следует различать столкновения атомов в газовой и твёрдой фазе. При столкновениях в твёрдой фазе имеет место каскад соударений и может происходить дополнительное образование вакансий во внешних оболочках, которые могут дожить до следующего соударения и привести к большим сечениям образования К-вакансий вследствие разрешённой возможности $2r\sigma - 2r\pi$ переходов.

Можно ожидать, что скейлинг, предложенный для сечений образования К-вакансий в оболочках сталкивающихся атомов, найдёт применение для расчёта электронных тормозных потерь при ионном облучении твёрдых тел.

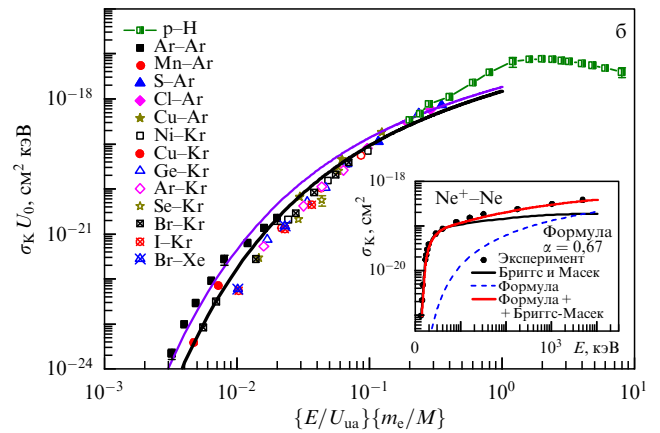
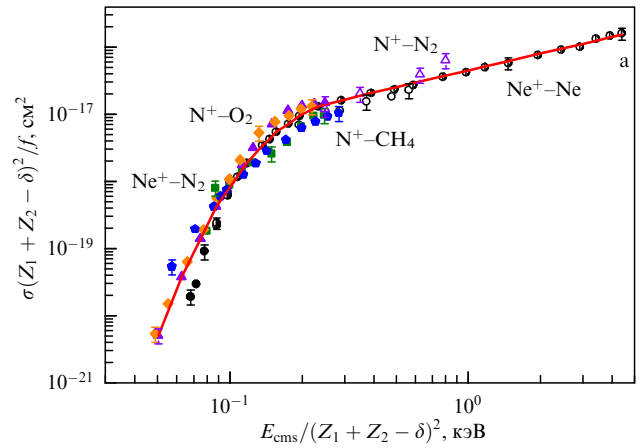


Рис. 9. (а) Скейлинг для сечений образования К-вакансий при соударении лёгких атомов с $Z \leq 10$ при наличии вакансии на $2r\pi$ -орбитали. Точками на рисунке показаны экспериментальные данные из работ Мехси [99], Столтерфохта [113], Авакяна [14]. Жирная линия — предложенная в [105] универсальная кривая. (б) Скейлинг для сечений образования К-вакансий при соударении атомов с $Z > 10$, когда $2r$ -оболочка полностью заполнена и образование вакансии обусловлено ионизацией $2r\sigma$ вследствие динамики соударения. Приведены экспериментальные данные для различных комбинаций сталкивающихся атомов из работы Леннарда [107], а также для столкновений $p-H$ из [14]. Из-за различия в начальной заселённости $2r\sigma$ -уровня сечение ионизации в случае $p-H$ умножено на 4. Тонкой сплошной линией приведена кривая для случая $\alpha(0) = 0,67$. Жирной сплошной линией приведена кривая для $\alpha(0) = 0,75$, которая наилучшим образом описывает эксперимент. На вставке к рисунку приведён вклад рассматриваемых механизмов в образование К-вакансий при столкновениях $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$. Как видно, суммарная кривая хорошо согласуется с экспериментом [113]. (Рисунок взят из работы [105].)

Таким образом, образование автоионизационных состояний вследствие перестройки оболочек сталкивающихся частиц вносит доминирующий вклад в ЭТС при энергиях соударения менее 100 кэВ.

8. Вклад элементарных процессов и эмиссии быстрых электронов в электронные тормозные способности

В работах [114, 115] было проведено сравнение вклада элементарных процессов ионизации, возбуждения и перезарядки при столкновениях $p-He$ и $p-Ag$ в сечения электронных тормозных потерь. Эти случаи были выбраны как наиболее изученные экспериментально. В монографии [14] проведён аккуратный анализ погреш-

ностей измерений и приведены рекомендуемые значения. Большой объём данных имеется также в базе ALADDIN [116]. Данные об электронных потерях энергии собраны в базе NDS [117]. Измерения сечений элементарных процессов и сечений электронного торможения проводились независимыми авторами. Как уже упоминалось, одной из задач настоящей работы было их сопоставление и выяснение вклада различных процессов в сечение электронного торможения. Насколько известно авторам, ранее такое сопоставление, основанное на экспериментальных данных, не проводилось.

Имеются многочисленные теоретические работы по расчёту сечений электронных тормозных потерь. Для выбранных нами систем следует указать работы [118–120]. Подробную информацию об исследованиях электронных тормозных потерь можно найти в обзорах [85, 86]. Ионизация и спектры электронов при столкновениях частиц для простых систем до сих пор изучаются [121–128].

Из теоретических соображений при больших энергиях соударения ожидается доминирование процесса ионизации частиц. Интересен вопрос, какую роль играет кинетическая энергия, уносимая выбитыми электронами, и как этот процесс можно описать.

Рассмотрим вклад элементарных процессов ионизации, возбуждения и перезарядки в сечения электронного торможения при столкновениях атомных частиц.

Связь между сечением электронного торможения S_e и сечениями элементарных процессов можно определить как

$$S_e = \sum_n \left[\sigma_i^n \left(\sum_{n'=1,2,3,\dots} I_{n'} + nW_e \right) \right] + \sigma_{ex} I_{ex} + \sigma_{cx} \left(\Delta E_{cx} + \frac{m_e}{m_p} E \right), \quad (8.1)$$

где σ_i^n — сечение n -кратной ионизации, I_n — соответствующий потенциал ионизации, W_e — средняя энергия, уносимая электроном, второе слагаемое содержит полное сечение возбуждения σ_{ex} и энергию перехода I_{ex} . Третий член отвечает за вклад процессов перезарядки (σ_{cx} — сечение перезарядки, ΔE_{cx} — разность энергий между уровнями при переходе электрона в процессе перезарядки). Согласно [129], при учёте вклада перезарядки в электронное торможение к величине разности энергий между уровнями начального и конечного состояний следует добавить член $(m_e/m_p)E$ (здесь m_e и m_p — массы электрона и протона, E — энергия столкновения), связанный с переносом импульса электроном при переходе из системы координат атома мишени в систему координат, связанную с быстрой частицей.

Рисунки 10а и 10б иллюстрируют сравнение вкладов различных элементарных процессов в сечение электронных тормозных потерь.

Из рисунка 10 видно, что при малых энергиях основной вклад в сечение электронного торможения даёт "H₀-ионизация", а с увеличением энергии доминирует ионизация протонами. Штриховой линией на рис. 10 показано суммарное сечение элементарных процессов без учёта вклада кинетической энергии вылетевших электронов W_e . Сплошная линия показывает сумму сечений элементарных процессов с учётом W_e . В этом случае достигается хорошее согласие суммы вкладов элементарных процессов с измерениями электронных тормозных потерь.

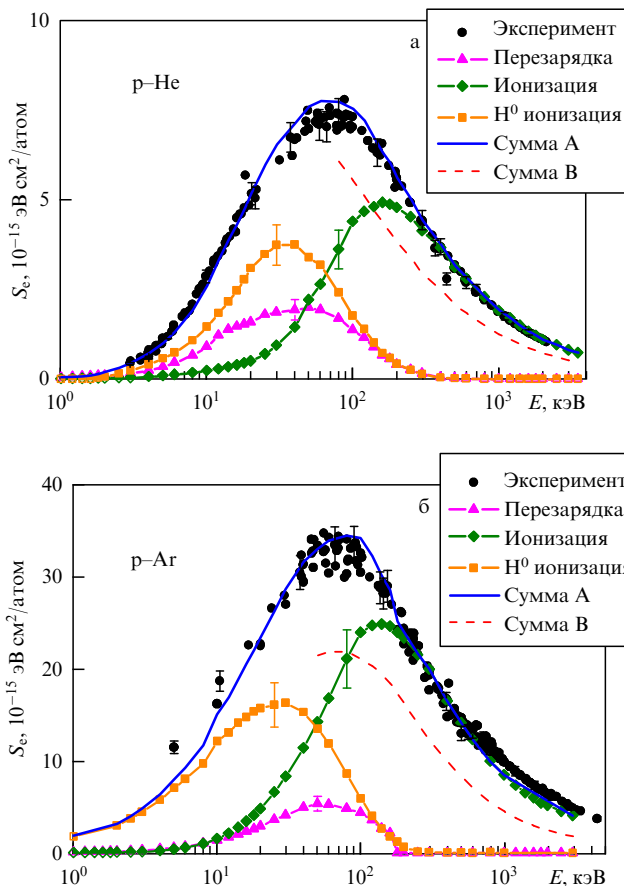


Рис. 10. Сравнение вкладов различных процессов в сечение тормозных потерь для (а) p–He- и (б) p–Ar-столкновений. Сплошная линия представляет собой сумму всех процессов с учётом кинетической энергии электронов (сумма А); штриховая линия — то же самое без учёта вклада энергии быстрых электронов (сумма В) [115].

На рисунке 11 представлена зависимость средней энергии вылетевших электронов от скорости столкновения. Как видно из рис. 11, средняя энергия сначала возрастает, а затем меняется незначительно. Данные, полученные из измерений электронных спектров [130, 131] для рассматриваемых случаев, и значения W_e , полученные с помощью формулы (8.1), хорошо согласуются.

В работе [111] в рамках теории динамической ионизации было предложено выражение (7.12) для сечения испускания электрона с энергией E .

Воспользуемся указанным выражением и оценим среднюю кинетическую энергию выбитых электронов:

$$W_e = \frac{\int_0^\infty E \sigma(E) dE}{\int_0^\infty \sigma(E) dE}. \quad (8.2)$$

Оценив интегралы методом перевала, можно получить простую формулу для W_e [115]:

$$W_e \approx \frac{v}{2 \operatorname{Im} R_0}. \quad (8.3)$$

Полученная формула (8.3) предсказывает пропорциональность средней энергии вылетевшего электрона скорости столкновения, что подтверждается экспериментально (см. рис. 2) при энергиях столкновения $v < 2$ а.е.

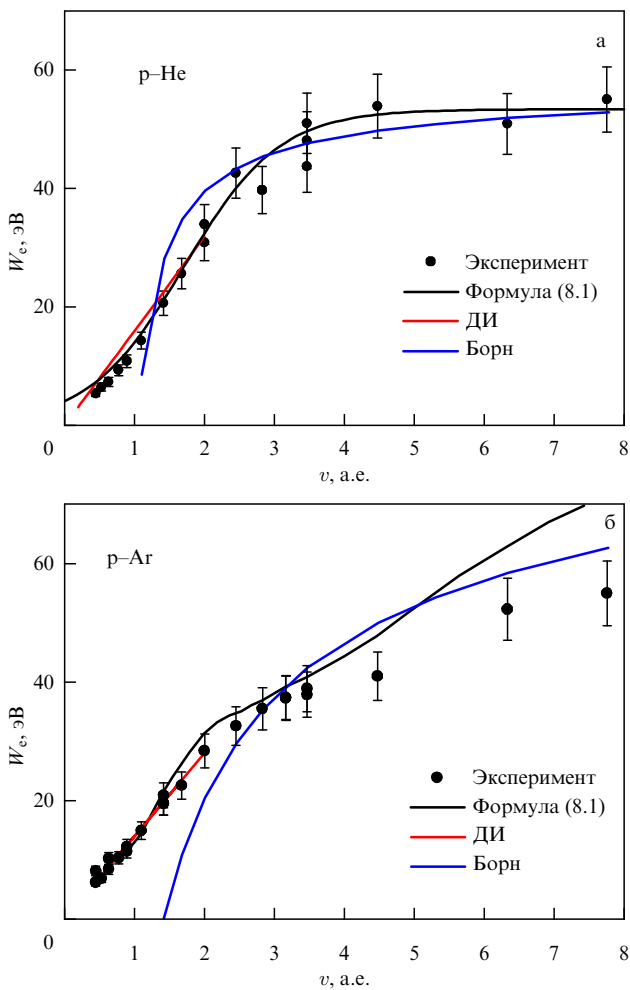


Рис. 11. Сравнение экспериментальной зависимости средней энергии электронов с различными теоретическими моделями. Также продемонстрированы предсказания теории динамической ионизации (ДИ) и борновского приближения. (Рисунок взят из [115].)

При высоких энергиях столкновения (в борновском приближении) параметр W_e можно оценить по формуле:

$$W_e = \frac{S_e - \sigma_{ex} I_{ex}}{\sigma_i} - I. \quad (8.4)$$

Используемые величины описаны в формуле (8.1).

Борновское приближение предсказывает независимость W_e от скорости столкновения при высоких энергиях. Как показано на рис. 11, полученная скоростная зависимость средней энергии электронов хорошо описывается в различных диапазонах скоростей рассматриваемыми моделями.

Таким образом, количественного согласия сечения тормозных потерь и суммы вкладов процессов ионизации, возбуждения и перезарядки удастся достичь, если учесть значительные потери энергии, уносимые быстрыми выбитыми электронами. При больших энергиях соударения до 70% от суммарных тормозных потерь уносится в виде кинетической энергии электронов. Для оценки энергии электронов при $v < 2$ а.е. в приближении динамической ионизации предложена формула, хорошо

описывающая экспериментальные данные, при больших энергиях рекомендуется использовать борновское приближение.

9. Влияние многократности соударений на электронные тормозные способности

Для описания физических процессов, происходящих в твёрдом теле при бомбардировке атомными частицами, необходимо знать величину электронных тормозных потерь для большого набора случаев. Существует база электронных тормозных способностей NDS, которая включает в себя набор экспериментальных данных и результаты компьютерного моделирования электронных (неупругих) потерь энергии атомных частиц в веществе [117].

Для экспериментального определения электронных тормозных потерь используются два типа геометрии: отражение пучка частиц от поверхности массивной мишени и прохождение пучка через тонкие плёнки.

В схеме на отражение измеряется энергетический спектр рассеянных частиц, и форма спектра моделируется компьютерным кодом, в котором подгоночным параметром является величина электронных тормозных потерь.

В схеме на прохождение также измеряется энергетический спектр рассеянных частиц. "Сдвиг" спектра по шкале энергий даёт среднюю потерю частиц после прохождения плёнки. Затем величина потери энергии делится на толщину плёнки, и в результате получаем потерю энергии на единицу длины.

Как было показано в работе Моро [132], при энергиях свыше 10 кэВ данные, полученные обоими методами, согласуются в пределах экспериментальных ошибок. Однако при меньших энергиях для многих комбинаций при бомбардировке протонами Si, Ni, Cu, Zn, Ag, Au [133–149] абсолютные величины потерь отличаются в 2–3 раза.

Причины различия результатов, полученных разными методами, широко обсуждаются на специализированных международных конференциях и в ряде статей [150–152]. В частности, в работе Пауля [150] подробно анализируются возможные ошибки при измерениях, а также влияние различия в угловых распределениях для обратно рассеянных частиц и частиц, прошедших сквозь тонкие плёнки, но объяснения различий в получаемых значениях электронных тормозных потерь не дано. В работе Зигмунда [151] это различие приписывается зависимости неупругой потери от параметра удара. Конечно, такая зависимость может быть, но как показывают многочисленные эксперименты, выполненные в газовой фазе, величина неупругой потери энергии растёт при уменьшении параметра удара, тогда как в методике регистрации обратно рассеянных частиц измеренная величина, как правило, меньше, чем при измерении методом прохождения через тонкие плёнки.

Природа наблюдаемого различия была объяснена в работе [153]. Проанализируем среднюю длину траектории L атомной частицы, прошедшей плёнку. На рисунке 12 представлено отношение средней длины траектории частиц L , рассчитанное в [153], к толщине мишени d в зависимости от энергии бомбардирующих протонов. Приведены данные для мишеней из меди, серебра и золота. Видно, что для энергий порядка 1 кэВ отношение

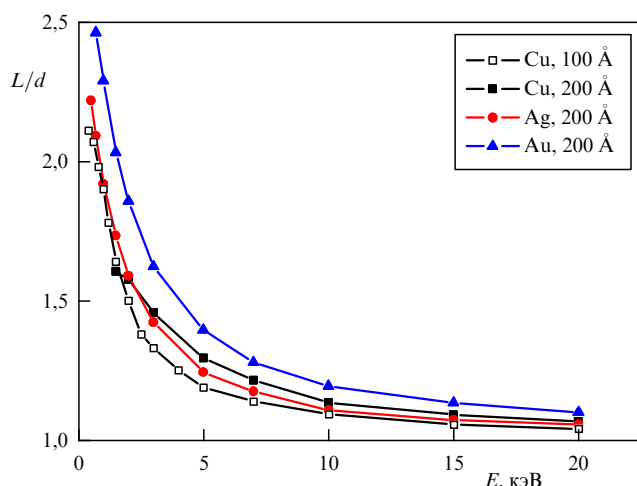


Рис. 12. Отношение средней длины траектории частиц L к толщине мишени d в зависимости от энергии бомбардирующих протонов. Приведены данные для мишеней из меди, серебра и золота.

L/d примерно 2,5, с увеличением энергии оно стремится к единице.

Таким образом, для определения электронных тормозных потерь методом на прострел необходимо величину потерь энергии делить не на толщину плёнки, а на среднюю длину траектории в плёнке.

На рисунке 13а приведены электронные тормозные потери в зависимости от энергии падающих частиц для системы Н–Ag. Точки — экспериментальные данные, штриховая линия — данные расчёта кодом SRIM. Из рисунка видно, что данные, полученные методом на прострел, существенно отличаются от данных, полученных методом на отражение. Если поправить экспериментальные данные, полученные при анализе тонких плёнок, на отношение L/d , то они совпадут с данными на отражение (рис. 13б).

Также из рис. 13 видно, что в области малых энергий код SRIM даёт неправильные величины электронных тормозных потерь. В программе SRIM используется зависимость $dE/dx \sim E^{0,5}$ (штриховая кривая на рис. 13). Описывая скорректированные данные степенным законом, получаем: $dE/dx = 2,08E^{0,68}$ для меди Cu, $dE/dx = 1,56E^{0,81}$ для серебра Ag и $dE/dx = 1,36E^{0,86}$ для золота Au (здесь dE/dx выражено в единицах $\text{эВ } \text{Å}^{-1}$, а E — в кэВ). Таким образом, при энергиях менее 10 кэВ в рассмотренных случаях зависимость электронных тормозных потерь отличается от общепринятых моделей. Для случая Н–Au был выполнен теоретический расчёт [154], который согласуется с скорректированными данными для dE/dx . По мнению авторов [154], это отличие связано с одновременным возбуждением нескольких электронных оболочек атомов мишени.

Как видим, разница данных измерений различными методами связана с трактовкой получаемых результатов. При компьютерном моделировании прохождения частиц через вещество рекомендуем учитывать поправку на многократное рассеяние и использовать как параметр потерю энергии на единицу длины траектории. Также нужно учитывать отклонение зависимости dE/dx от пропорциональности скорости налетающей частицы.

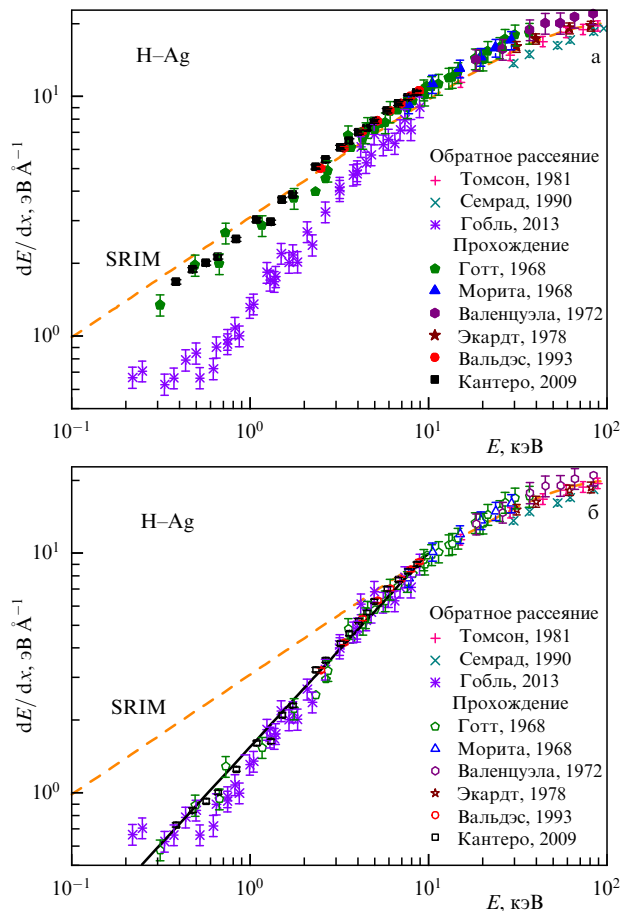


Рис. 13. Электронные тормозные потери в зависимости от энергии налетающих частиц. Система Н–Ag. Точки — эксперимент из базы данных NDS. Штриховая линия — расчёт программой SRIM. (а) Данные на прострел не поправлены на отношение L/d . (б) Данные на прострел поправлены на отношение L/d .

10. Влияние поверхностного потенциального барьера на коэффициенты распыления частиц

Распыление применяется для травления поверхности твёрдых тел, очистки поверхностей от нежелательных примесей, для получения тонких плёнок, для определения состава поверхности, а также в распылительных ионных источниках. Обзор исследований распыления твёрдых тел подробно дан в работах [2–4, 6, 17].

При моделировании распыления необходимо учитывать наличие поверхностного потенциального барьера. В расчётах в качестве поверхностной энергии связи берут теплоту (энергию) сублимации E_s . На результаты расчёта влияет форма потенциального барьера на границе твёрдое тело–вакуум. В большинстве расчётов группы Экштайна [5] используется плоскостной потенциальный барьер. В пользу модели плоскостного потенциального барьера свидетельствует то, что экспериментальные энергетические спектры распылённых частиц содержат максимум [4]. Если на границе твёрдое тело–вакуум был бы изотропный потенциальный барьер, максимум наблюдался бы при нулевой энергии, что противоречит экспериментальным данным. Однако в условиях сильного распыления стенки в условиях токамака-реактора характер поверхности меняется. В качестве предельного случая мы рассмотрели поверхность, состоящую из ост-

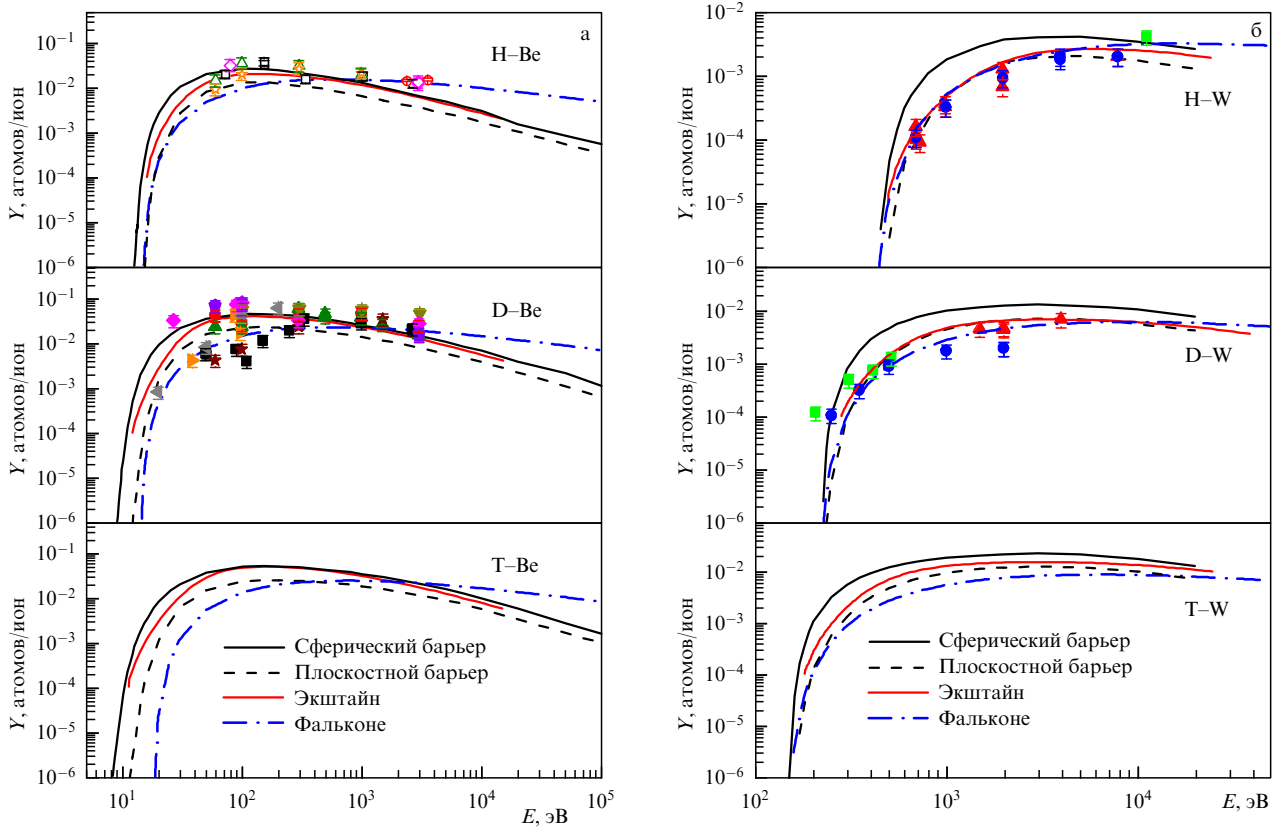


Рис. 14. Зависимость коэффициента распыления (а) бериллия и (б) вольфрама от энергии соударения при нормальном падении пучка на мишень для различных изотопов. Расчёты из работ [155, 156] для сферического барьера — сплошная чёрная линия; для плоскостной барьера — штриховая чёрная линия. Сплошная красная линия — расчёт группы Экштайна программой SDTrimSP [5, 157]. Штрихпунктирная синяя линия — расчёт по формуле Фальконе [158, 159]. Точки — экспериментальные данные различных авторов из монографии [5].

риёв атомного размера. В этом случае применим сферический потенциальный барьер.

При эксплуатации термоядерных установок важной проблемой является стойкость конструкционных материалов. Свой вклад вносит распыление нейтральными атомами, вылетающими из плазмы. В качестве материалов предполагается использовать бериллий и вольфрам. Бомбардирующими атомами будут изотопы водорода.

На рисунке 14 приведены данные для мишени из бериллия [155] и вольфрама [156]. Видно, что экспериментальные данные для Ве имеют большой разброс, значительно превышающий ошибки эксперимента (10–20%). На наш взгляд, это связано с наличием загрязнений на поверхности, окислов и разной шероховатостью поверхности. В случае W данные имеют заметно меньший разброс. В случае W экспериментальные данные лежат ближе к расчёту для плоскостного барьера, описывающего гладкую поверхность. Расчёты группы Экштайна [5, 157] лежат между расчётами для гладкой (плоский барьер) и шероховатой (сферический барьер) поверхности.

В данном случае доминирует распыление поверхностных слоёв потоком обратно рассеянных частиц. Модификация теории Зигмунда для этого случая была сделана в работах [158, 159]. Как видно из рис. 14, расчёт по формуле Фальконе [158, 159] неплохо согласуется с результатами компьютерного моделирования для плоскостного потенциального барьера. Для системы Н–Ве формула неплохо предсказывает порог распыления, для системы Т–Ве согласие хуже. Авторы [158] отмечают, что формула Фальконе даёт хорошие результаты в случае $M_1 \ll M_2$.

Несколько слов о пороговой энергии распыления. Пороговая энергия распыления E_{th} представляет собой минимальную энергию налетающих ионов, при которой возможно распыление. Пороговая энергия распыления не может быть получена напрямую из эксперимента. Обычно используют экстраполяцию существующих экспериментальных или расчётных данных. Экштайн и Преусс предложили формулу [160]:

$$Y(E) = q s_n^{KTC}(\epsilon) \frac{(E/E_{th} - 1)^\mu}{(\lambda/\omega(\epsilon) + (E/E_{th} - 1)^\mu)} \quad (10.1)$$

с ядерными тормозными потерями для потенциала КГС:

$$s_n^{KTC}(\epsilon) = \frac{0,5 \ln(1 + 1,2288\epsilon)}{\epsilon + 0,1728\sqrt{\epsilon} + 0,008\epsilon^{0,1504}} = \frac{0,5 \ln(1 + 1,2288\epsilon)}{\omega(\epsilon)}$$

Приведённая энергия ϵ записывается в виде

$$\epsilon = E \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2}$$

Длина экранирования Линдхарда даётся формулой:

$$a_L = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} a_B (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}, \quad a_B = 0,529177 \text{ \AA},$$

где a_B — радиус Бора, Z_1, Z_2 и M_1, M_2 — атомные номера и атомные массы атома-снаряда и мишени соответственно. Пороговая энергия E_{th} и значения q, λ и μ являются подгоночными параметрами.

В работе [155] при изучении пороговых зависимостей было отмечено, что вблизи порога важно учитывать вклад многократного рассеяния бомбардирующих частиц.

Как ясно из представленных результатов, расчётные методы дают достаточно надёжные значения коэффициентов распыления, однако имеется сильная зависимость от состояния поверхности. На наш взгляд, следует связать получаемые расчётные результаты с количественными параметрами, характеризующими шероховатость поверхности, которые можно было бы определить экспериментально. Для сложной поверхности, например, состоящей из конических выступов, важно отработать процесс перепыления материала, поскольку он также может влиять на получаемые результаты.

11. Влияние электронных тормозных потерь, поверхностного потенциального барьера, структуры мишени на коэффициент отражения частиц от поверхности

Отражение ионов поверхностями твёрдых тел — обширная тема для экспериментальных и теоретических исследований. Результаты многолетнего изучения рассеяния атомных частиц поверхностями твёрдых тел изложены в монографиях [7–9, 161].

Рассеяние ионов поверхностями твёрдых тел успешно применяют для анализа элементного состава поверхностей и плёнок, развиваются аналитические методы структурного анализа. Самыми известными методами элементного анализа состава поверхности являются: Резерфордское обратное рассеяние (РОР) и спектроскопия медленных рассеянных ионов (СМРИ).

Знание коэффициентов отражения частиц необходимо для описания процессов ионной имплантации. В международном термоядерном реакторе ИТЭР материалом первой стенки выбран бериллий (Be), а материалом дивертора — вольфрам (W). Для прогнозирования работы токамака необходимо знать коэффициенты отражения R_N изотопов водорода, гелия и различных примесей от бериллия и вольфрама.

На рисунке 15а представлена зависимость коэффициента отражения R_N от энергии бомбардирующих частиц [162] для мишени из бериллия Be и целого ряда снарядов. Из рисунка 15а видно, что с ростом массы налетающей частицы коэффициент отражения сильно падает. Как видно из рис. 15, в случае если масса налетающей частицы $M_1 \geq M_2$, где M_2 — масса атома мишени, коэффициент отражения сильно падает, что связано с отсутствием вклада в рассеяние на большие углы однократного рассеяния.

На рисунке 15б представлены коэффициенты отражения [162] для мишени из вольфрама и различных снарядов. Видно, что поведение коэффициента отражения для "симметричной" пары W–W существенно отличается от всех остальных случаев. Коэффициент R_N гораздо меньше и резко падает при энергиях порядка 100 эВ, что также связано с отсутствием вклада однократного рассеяния.

На рисунке 16 отдельно приведён расчёт коэффициента отражения для системы W–W. Моделирование проводилось для сферического и плоскостного поверхностного барьера. Видно, что в случае плоскостного барьера пороговая энергия для зависимости коэффициента отражения от энергии соударения больше. Расчёт

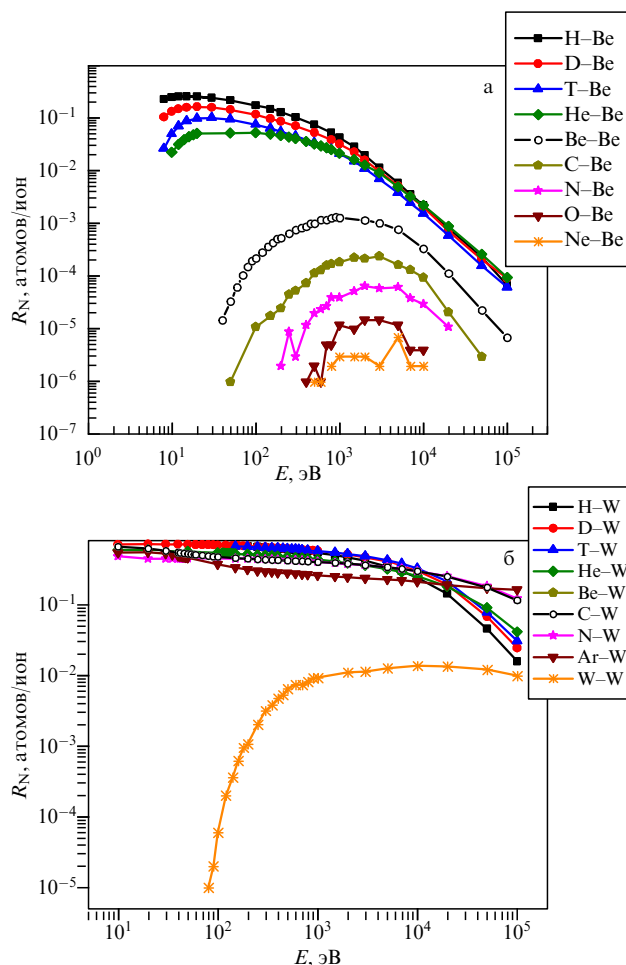


Рис. 15. (а) Коэффициенты отражения частиц для мишени из бериллия в зависимости от энергии для налетающих атомов: H, D, T, He, Be, C, N, O, Ne. Для системы Be–Be приведён расчёт для плоскостного потенциального барьера. (б) Коэффициенты отражения частиц для мишени из вольфрама в зависимости от энергии для налетающих атомов: H, D, T, He, Be, C, N, Ar, W. Данные для системы W–W приведены для плоскостного потенциального барьера. (Рисунки взяты из [162].)

для гладкой поверхности [162] хорошо согласуется с моделированием группы Экштайна [163].

На рисунке 16 для двух моделей поверхностного барьера показан расчёт коэффициента распыления Y . Коэффициенты отражения R_N примерно в 100 раз меньше коэффициентов распыления Y . Если нормировать кривые, то пороги для этих процессов практически совпадают.

В случае компьютерного моделирования отражения частиц от поверхности твёрдого тела существенным является модель электронных тормозных потерь, заложенная в расчёт. Анализ экспериментальных данных из базы NDS [117] показывает, что электронные тормозные потери не совпадают с расчётами широко используемого кода SRIM [19] и требуют коррекции. На рисунке 17 показаны зависимости коэффициента отражения от энергии бомбардирующей частицы для случая H–W. Приведён расчёт [162] для сферического и плоского потенциального барьера. Для гладкой поверхности коэффициент отражения резко падает в области малых энергий. Моделирование проводилось для электронных тормозных потерь, скорректированных на эффект многократности

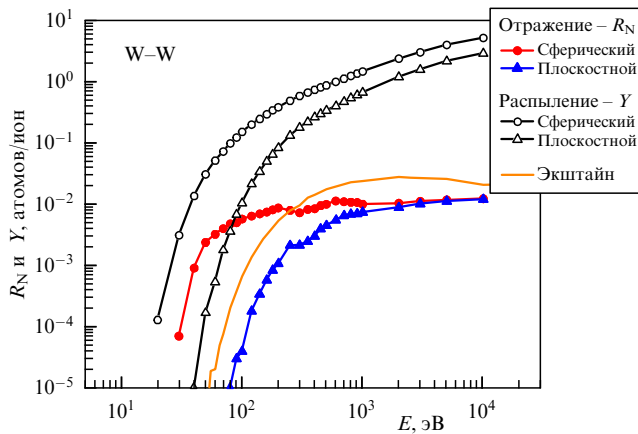


Рис. 16. Сопоставление коэффициентов отражения R_N и распыления Y для системы W–W [162]. Коэффициенты распыления Y представлены светлыми кружками для сферического поверхностного барьера, светлыми треугольниками для плоскостного поверхностного барьера. Коэффициенты отражения R_N показаны красными кружками для сферического поверхностного барьера, синими треугольниками — для плоскостного поверхностного барьера. Оранжевой кривой показан расчёт из работы [163] для случая плоскостного барьера.

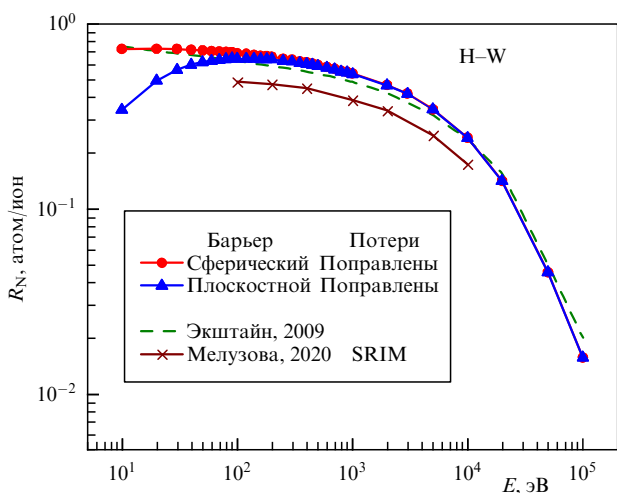


Рис. 17. Коэффициенты отражения R_N для системы H–W. Сплошные точки (кружки и треугольники) — расчёт [162] для потерь энергии, скорректированных с учётом многократности соударений [153]. Кружки — сферический барьер, треугольники — плоскостной барьер. Штриховая кривая — расчёт Экштайна [164]. Кресты — расчёт Мелузова и др. из работы [165].

соударений для малых энергий (см. раздел 9). Видно, что расчёт для скорректированных тормозных потерь лежит выше, чем расчёт для потерь из кода SRIM (Мелузова и др. [165]). Для сравнения также показан расчёт группы Экштайна [164].

На рисунке 18 показаны коэффициенты отражения R_N в зависимости от энергии налетающих частиц для кристаллической и аморфной мишени для системы He–W.

Из рисунка 18 видно, что коэффициенты отражения для кристаллической и аморфной мишеней отличаются. Из-за эффекта каналирования в кристаллической мишени налетающие частицы проникают глубже в мишень и им труднее выйти обратно наружу, поэтому с ростом энергии бомбардирующих частиц резко уменьшается коэффициент отражения. Наблюдается хорошее согла-

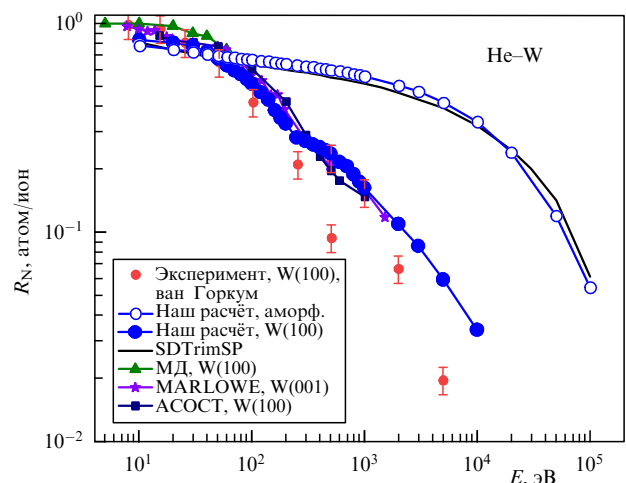


Рис. 18. Коэффициенты отражения R_N в зависимости от энергии налетающих частиц для кристаллической и аморфной мишени для системы He–W. Красные кружки — эксперимент ван Горкум [166]. Синие пустые кружки — расчёт для аморфной мишени, заполненные синие кружки — расчёт для кристаллической мишени W(100). Чёрная кривая — расчёт программой SDTrimSP [164], аморфная мишень. Сплошные треугольники — расчёт методом молекулярной динамики (Боровиков [167]) для мишени W(100). Звёздочки — расчёт программой MARLOWE [168] для ориентации W(001). Квадраты — расчёт программой ACOCT (версия ACAT для кристаллических мишеней) [169] для ориентации W(100). (Рисунок взят из [162].)

сие с экспериментальными данными [166] для кристаллической мишени. Различные коды дают похожую зависимость R_N от E .

К сожалению, надёжные экспериментальные данные для коэффициентов отражения атомных частиц достаточно ограничены. Имеется множество данных по рассеянию ионов, а в большинстве случаев необходимо иметь данные для всех зарядовых состояний, что может быть получено с использованием времяпролётной методики.

Применение метода компьютерного моделирования демонстрирует серьёзное влияние электронных тормозных потерь, поверхностного потенциального барьера, структуры мишени на коэффициент отражения частиц от поверхности. Для дальнейшего развития теоретических представлений необходимо серьёзное расширение фронта экспериментальных работ с обязательным анализом зарядового состояния рассеянных частиц.

12. Каналирование атомов дейтерия в вольфраме

Одним из очень интересных ориентационных эффектов при изучении рассеяния ионов кристаллами является эффект каналирования: при ориентации пучка вдоль открытых кристаллографических направлений пробеги частиц резко возрастают. Впервые такой эффект был обнаружен Робинсоном, Холмсом и Оеном в 1963 г. [170] с помощью компьютерного моделирования. Два года спустя Линдхард разработал теорию каналирования [171]. Значительный вклад в исследование каналирования и некоторых других ориентационных эффектов внёс Тулинов [172]. Обзор исследований каналирования и областей применения этого эффекта представлен в [173].

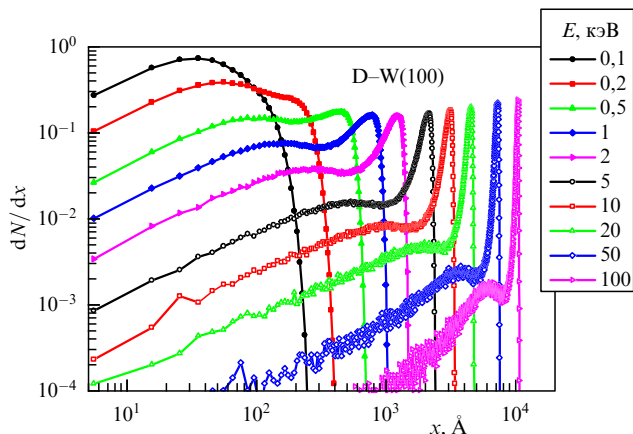


Рис. 19. Распределение пробегов по глубине для случая D–W(100); нормальное падение. (Рисунок взят из [174].)

Рассмотрим пробеги лёгких ионов в тяжёлой мишени на примере системы D–W(100). На рисунке 19 приведено распределение пробегов по глубине, полученное методом компьютерного моделирования [174], для энергий налетающих атомов от 0,1 до 100 кэВ и нормального падения. Видно, что начиная с энергии примерно 1 кэВ распределение распадается на две составляющие. Наблюдаются широкий пик частиц, рассеявшихся в приповерхностных слоях, и узкий пик на больших глубинах частиц, захваченных в канал.

По мере отклонения пучка от перпендикулярного падения распределение трансформируется, что соответствует уменьшению доли частиц, захваченных каналом. При угле наклона 3° интенсивность каналирующей фракции падает более чем в 20 раз. Выражения для критического угла осевого каналирования, т.е. угла захвата частиц пучка в канал, получено в [171]:

$$\psi_L(E) \approx \left(\frac{3Z_1Z_2e^2a_F^2}{d^3E} \right)^{1/4}, \quad E < \frac{2Z_1Z_2e^2d}{a_F^2}, \quad (12.1)$$

здесь Z_1 и Z_2 — заряды атомных ядер частицы и мишени соответственно, $a_F \approx 0,885a_B(Z_1^{0,5} + Z_2^{0,5})^{-2/3}$ — радиус экранирования межатомного взаимодействия, a_B — боровский радиус. Критический угол каналирования для случая D–W при начальной энергии 100 кэВ составляет 3,3°.

На рисунке 20 приведено пространственное распределение частиц, захваченных в канал, для различных глубин проникновения в мишень. Для определения пространственного распределения каналирующих частиц облучался только один канал, отмеченный на рис. 20 квадратом (глубина $L = 1000 \text{ \AA}$). Точки падения пучка были равномерно распределены по площади квадрата. Белые пятна — положения атомов мишени. Видно, что в канале формируется устойчивая пространственная структура, которая сохраняется вплоть до глубины 9000 Å. С увеличением глубины атомы "перетекают" в соседние каналы.

На этих рисунках цвета обозначают значения "концентрации" — количества частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства, масштабированного по наибольшему количеству зарегистрированных частиц (соответствующему значению в центре поперечного сечения канала). Также для каждого случая имеется трёх-

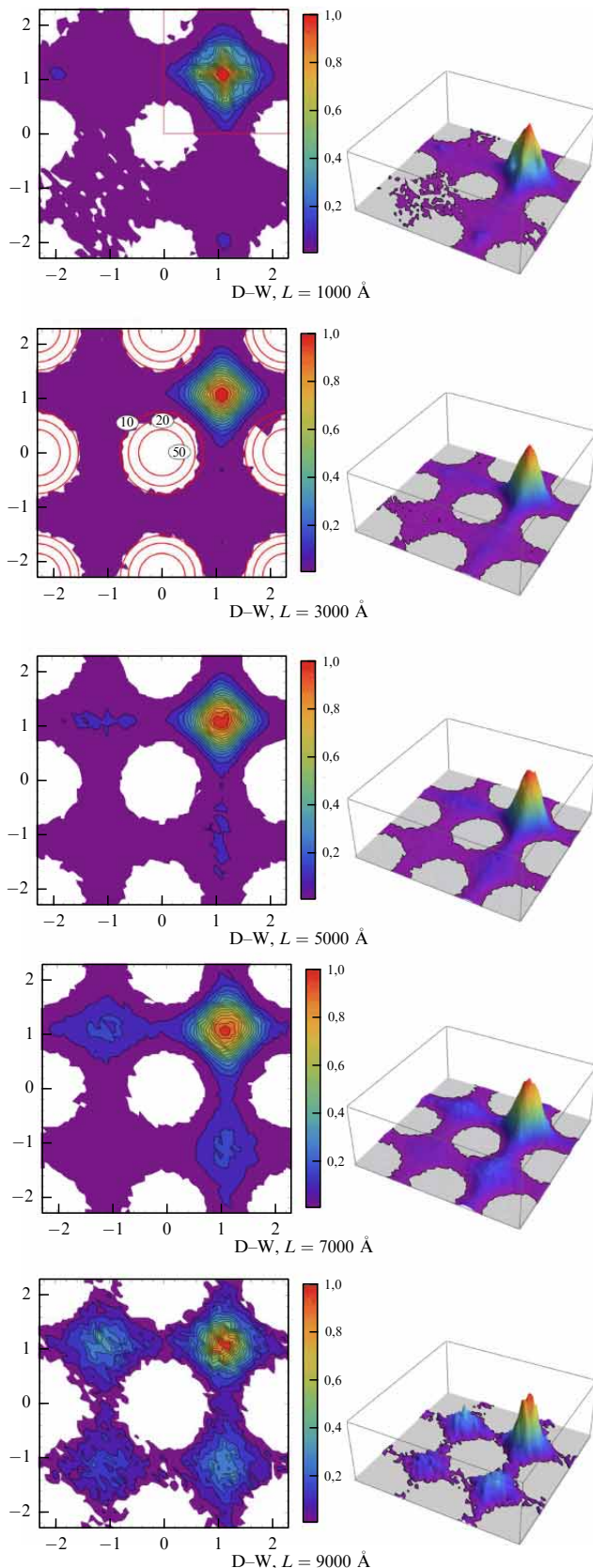


Рис. 20. Пространственное распределение атомов D с энергией 100 кэВ на различных глубинах L в W(100). Расстояние (в Å) отложено на координатных осях. Цветовая шкала показывает количество частиц, зарегистрированных в каждой точке пространства, разделённое на наибольшее количество частиц, зарегистрированных для каждой фигуры. На первом рисунке область, облучаемая пучком D, обозначена красным квадратом. Положения атомов решётки соответствуют центрам пустых участков. Эквипотенциальные линии для непрерывного потенциала 10 эВ, 20 эВ и 50 эВ показаны на глубине $L = 3000 \text{ \AA}$. (Рисунок взят из [174].)

мерное представление концентрации, которое является дополнительным визуальным описанием пространственного распределения ионов внутри канала.

Сравним полученную структуру со структурой потенциала. Согласно теории Линдхарда, поведение частиц в канале описывается непрерывным потенциалом, который представляет собой среднее значение парного потенциала вдоль оси траектории. Для получения непрерывного потенциала использовался потенциал Мольера, при этом варьированием констант (c_1 , c_2 , c_3 , d_1 , d_2 , d_3) достигалось согласие с парным потенциалом, полученным методом DFT. Для потенциала Мольера выражение для непрерывного потенциала может быть записано в виде [175]

$$U(R) = \frac{2Z_1Z_2e^2}{d} \left[c_1 K_0 \left(d_1 \frac{R}{a_{TF}} \right) + c_2 K_0 \left(d_2 \frac{R}{a_{TF}} \right) + c_3 K_0 \left(d_3 \frac{R}{a_{TF}} \right) \right], \quad (12.2)$$

K_0 — функция Бесселя II рода нулевого порядка.

На рисунке 20 для глубины $L = 3000$ Å показаны эквипотенциальные линии для значений непрерывного потенциала 10, 20 и 50 эВ. Пустые кружки на рис. 20 соответствуют областям, куда не проникают каналированные частицы. По границам таких областей можно оценить величину потенциала на краю канала, $U(R_m)$. Данное значение составляет 10 эВ. Заметим, что

$$U(R_m) = E_{\perp} = E \sin^2 \psi, \quad (12.3)$$

здесь E_{\perp} — перпендикулярная составляющая энергии каналированной частицы, ψ — максимальное значение угла отклонения траектории. Используя полученные значения $U(R_m)$, можно получить значение $\psi = 0,57^\circ$ для случая D–W, что заметно меньше критического угла каналирования. Это означает, что пучок каналированных частиц фокусируется при движении через кристалл.

Наблюдаемая пирамидальная пространственная структура формируется на ранних этапах пути ионов и остаётся качественно одинаковой примерно до 90 % пробега ионов в кристалле.

Образование устойчивой пространственной структуры в результате фокусировки при каналировании можно использовать для экспериментального определения потенциала путём изучения углового распределения ионов, прошедших 30–60 % пробега через кристалл в условиях каналирования [176], и для анализа топографии поверхностных слоёв плёнки. Анализ энергетического спектра позволяет определить сечение электронного торможения каналированных частиц.

13. Заключение

Применение методов компьютерного моделирования в сочетании с анализом имеющихся экспериментальных данных позволяет существенно уточнить представления о взаимодействии пучков атомных частиц с веществом, а также предложить задачи для новых экспериментов.

Приведены формулы (3.3) и (3.4) для оценки константы экранирования, полученные из первых принципов, которые могут быть использованы для поправок в сечение рассеяния при реализации метода обратного резерфордского рассеяния, а также для оценки поправок

сечения ядерного синтеза при проведении измерений на мишенях, содержащих электроны.

Приведена формула для потенциала Зиновьева (3.5) [41], позволяющая сделать экспресс-оценку потенциала взаимодействия. При выборе потенциала взаимодействия для описания траекторий частиц рекомендуется использовать расчёт потенциала для конкретных систем с применением приближения функционала плотности [43, 46] и учётом спектроскопических данных о параметрах потенциальной ямы [45].

В компьютерных расчётах часто используется приближение Линдхарда, связанное с возможностью аддитивно рассматривать ядерные и электронные тормозные потери. Сопоставление с экспериментом, проведённое в разделе 4, показывает, что точность этого приближения составляет 15–20 % в зависимости от интервала рассматриваемых энергий. С указанной точностью кривая Линдхарда для конкретного потенциала, полученная с помощью формулы (4.6) и параметров, приведённых в таблице, может быть использована для расчёта сечения упругого рассеяния.

Установлено, что в потенциал взаимодействия при столкновениях частиц с металлами необходимо ввести поправку, учитывающую взаимодействие с электронами проводимости. Приведены конкретные формулы (5.5), (5.7), (5.10) позволяющие учесть экранирование протонов и атомов водорода при прохождении сквозь металлы. Дается пример применения этих формул для оценки прохождения частиц через тонкие плёнки, их рекомендуется использовать для расчёта ядерных тормозных потерь [70].

Выполнены расчёты ЯТС для 48 систем с использованием потенциала, полученного в рамках приближения DFT с коррекцией параметров потенциальной ямы по результатам спектроскопических измерений [46]. Расчёт даёт одинаковые значения потерь энергии как в классическом, так и в квазиклассическом случае при выполнении условия $l \gg 1$.

Следует учитывать дополнительный максимум в сечениях ЯТС при малых энергиях, связанный с рассеянием частиц на потенциальной яме. Наличие дополнительного пика в сечениях ЯТС необходимо учитывать при энергиях соударения менее 100 эВ, особенно это важно при расчёте траекторий частиц отдачи при распылении.

Рассматривается новый механизм для расчёта электронных тормозных потерь, вносящий доминирующий вклад при столкновениях частиц средних масс кэВ-энергий, связанный с выдвиганием молекулярных орбиталей при столкновениях частиц и образованием автоионизационных состояний.

Предложены скейлинги для оценок сечений ионизации при возбуждении K-, L-, M-оболочек. Приведены примеры расчёта тормозных способностей с использованием измеренных сечений для случая Ag–Ag и использования скейлинга для расчёта тормозных потерь для случая Ne–Si.

Показано, что количественного согласия сечения тормозных потерь и суммы вкладов процессов ионизации, возбуждения и перезарядки удаётся достичь, если учесть значительные потери энергии, обусловленные быстрыми выбитыми электронами. При больших энергиях соударения до 70% от суммарных тормозных потерь складываются из кинетических энергий эмитируемых электронов. Для оценки энергии электронов при $v < 2$ а.е. в при-

ближении динамической ионизации предложена формула (8.4), хорошо описывающая экспериментальные данные, при больших энергиях рекомендуется использовать борновское приближение (8.5).

При описании прохождения частиц через вещество рекомендуем учитывать поправку на многократное рассеяние и использовать в качестве параметра потерю энергии на единицу длины траектории. Рекомендуем использовать экспериментальные данные, полученные из анализа спектра обратно рассеянных частиц. Разница данных измерений различными методами связана с трактовкой получаемых результатов.

Показано значительное влияние поверхностного потенциального барьера, шероховатости поверхности, структуры мишени на эффекты распыления и отражения частиц от поверхности, а также важность корректного учёта ЭТС. Приведена оценочная формула (10.1) для коэффициента распыления.

Применение метода компьютерного моделирования демонстрирует серьёзное влияние электронных тормозных потерь, поверхностного потенциального барьера, структуры мишени на коэффициент отражения частиц от поверхности. Делается вывод, что для дальнейшего развития теоретических представлений необходимо серьёзное расширение фронта экспериментальных работ с обязательным анализом зарядового состояния рассеянных частиц.

При анализе каналирования атомов дейтерия в кристаллическом вольфраме W(100) показано, что каналирование атомов проявляется при сравнительно низких энергиях, ~ 2 кэВ. При больших энергиях имеет место фокусировка пучка, и предлагается эксперимент, позволяющий проверить модель непрерывного потенциала и особенности торможения частиц при движении вдоль оси канала.

Список литературы

1. Авакян С В и др. *Сечения процессов ионизации и возбуждения УФ излучения при столкновениях электронов, ионов и фотонов с атомами и молекулами атмосферных газов* (СПб.: ГОИ, 2000); Avakyan S V et al. *Collision Processes and Excitation of UV Emission from Planetary Atmospheric Gases* (New York: Gordon and Breach, 1998)
2. Ryssel H, Ruge I *Ion Implantation* (Chichester: Wiley, 1986); Пер. на русск. яз.: Риссел Х, Руге И *Ионная имплантация* (М.: Наука, 1983)
3. Behrisch R (Ed.) *Sputtering by Particle Bombardment* Vol. 1 *Physical Sputtering of Single-Element Solids* (Topics in Applied Physics, Vol. 47) (Berlin: Springer-Verlag, 1981); Пер. на русск. яз.: Берриш Р (Ред.) *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой* Вып. 1 *Физическое распыление одноэлементных твердых тел* (М.: Мир, 1984)
4. Behrisch R (Ed.) *Sputtering by Particle Bombardment* Vol. 2 *Sputtering of Alloys and Compounds, Electron and Neutron Sputtering, Surface Topography* (Topics in Applied Physics, Vol. 52) (Berlin: Springer-Verlag, 1983); Пер. на русск. яз.: Берриш Р (Ред.) *Распыление твердых тел ионной бомбардировкой* Вып. 2 *Распыление сплавов и соединений, распыление под действием электронов и нейтронов, рельеф поверхности* (М.: Мир, 1986)
5. Behrisch R (Ed.) *Sputtering by Particle Bombardment* Vol. 3 *Characteristics of Sputtered Particles, Technical Applications* (Topics in Applied Physics, Vol. 64) (Berlin: Springer-Verlag, 1991); Пер. на русск. яз.: Берриш Р (Ред.) *Распыление под действием бомбардировки частицами* Вып. 3 *Характеристики распыленных частиц, применения в технике* (М.: Мир, 1998)
6. Behrisch R, Eckstein W (Eds) *Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculations from Threshold to MeV Energies* (Topics in Applied Physics, Vol. 110) (Berlin: Springer, 2007)
7. Sigmund P *Phys. Rev.* **184** 383 (1969)
8. Машкова Е С, Молчанов В А *Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел* (М.: Атомиздат, 1980); Пер. на англ. яз.: Mashkova E S, Molchanov V A *Medium-energy Ion Reflection from Solids* (Amsterdam: North-Holland, 1985)
9. Парилис Э С и др. *Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела* (Ташкент: ФАН, 1987)
10. Курнаев В А, Машкова Е С, Молчанов В А *Отражение легких ионов от поверхности твердого тела* (М.: Энергоатомиздат, 1985)
11. Готт Ю В *Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях* (М.: Атомиздат, 1978)
12. Готт Ю В *Взаимодействие медленных частиц с веществом и диагностика плазмы* (М.: Атомиздат, 1973)
13. Ма В М *Nuclear Reactor Materials and Applications* (New York: Van Nostrand Reinhold Co., 1983); Пер. на русск. яз.: Ма В М *Материалы ядерных энергетических установок* (М.: Энергоатомиздат, 1987)
14. Höffelner W *Materials for Nuclear Plants* (London: Springer, 2013)
15. Клёнов Г И, Хорошков В С *УФН* **186** 891 (2016); Klenov G I, Khoroshkov V S *Phys. Usp.* **59** 807 (2016)
16. Sigmund P *Particle Penetration and Radiation Effects* (London: Springer, 2014)
17. Плешивцев Н В, Бажин А И *Физика воздействия ионных пучков на материалы* (М.: Вузовская книга, 1998)
18. Eckstein W *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions* (Berlin: Springer, 1991); Пер. на русск. яз.: Экштайн В *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела* (М.: Мир, 1995)
19. SRIM — *The Stopping and Range of Ions in Matter* — code, <http://srim.org/>
20. Lindhard J, Scharff M *Phys. Rev.* **124** 128 (1961)
21. Robinson M T, Oen O S *Phys. Rev.* **132** 2385 (1963)
22. Mutzke A et al., SDTrimSP Version 6.00. IPP 2019-02 (Garching: IPP, 2019)
23. Biersack J P, Steinbauer E, Bauer P *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **61** 77 (1991)
24. Бабенко П Ю, Зиновьев А Н, Шергин А П *Письма в ЖЭТФ* **101** 940 (2015); Babenko P Yu, Zinoviev A N, Shergin A P *JETP Lett.* **101** 840 (2015)
25. Бабенко П Ю и др. *ЖЭТФ* **155** 612 (2019); Babenko P Yu et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **128** 523 (2019)
26. Torrens I M *Interatomic Potentials* (New York: Academic Press, 1972)
27. Robinson M T, Torrens I M *Phys. Rev. B* **9** 5008 (1974)
28. Gaydaenko V I, Nikulin V K *Chem. Phys. Lett.* **7** 360 (1970)
29. Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U *The Stopping and Range of Ions in Solids* Vol. 1 (New York: Pergamon Press, 1983)
30. Connor D J O, Biersack J E *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **15** 14 (1986)
31. Lane G H, Everhart E *Phys. Rev.* **120** 2064 (1960)
32. Афросимов В В, Гордеев Ю С, Зиновьев А Н *ЖЭТФ* **66** 1933 (1974); Afrosimov V V, Gordeev Yu S, Zinoviev A N *Sov. Phys. JETP* **39** 950 (1974)
33. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **24** 279 (1953)
34. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **33** 696 (1957); Firsov O B *Sov. Phys. JETP* **6** 534 (1958)
35. Moliere G Z. *Naturforsch. A* **2** 133 (1949)
36. Jensen H Z. *Phys. B* **77** 722 (1932)
37. Wilson W D, Haggmark L G, Biersack J P *Phys. Rev. B* **15** 2458 (1977)
38. Zinoviev A N *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **406** 465 (2017)
39. Зиновьев А Н *Поверхность. Реценз. синхротр. и нейтрон. исслед.* **6** 43 (2018); Zinoviev A N *J. Surf. Invest. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* **12** 554 (2018)
40. Lu C C et al. *At. Data Nucl. Data Tables* **3** 1 (1971)
41. Зиновьев А Н *ЖТФ* **78** 15 (2008); Zinoviev A N *Tech. Phys.* **53** 13 (2008)

42. Norlund K, Runeberg N, Sundholm D *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **132** 45 (1997)
43. Zinoviev A N, Norlund K *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **406** 511 (2017)
44. Meluzova D S et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **460** 4 (2019)
45. Luo Y-R *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies* (Boca Raton, FL: CRC Press, 2007)
46. Zinoviev A N, Babenko P Yu, Nordlund K *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **508** 10 (2021)
47. Bjorkas C et al. *J. Phys. Condens. Matter* **21** 445002 (2009)
48. Прокофьев М В, Светухин В В, Тихончев М Ю *Изв. Самарского ИЦ РАН* **15** 1024 (2013)
49. Granberg F, Byggmästar J, Nordlund K *J. Nucl. Mater.* **556** 153158 (2021)
50. Bjorkas C, Nordlund K *J. Nucl. Mater.* **439** 174 (2013)
51. Lyashenko A et al. *J. Nucl. Mater.* **542** 152465 (2020)
52. Tersoff J *Phys. Rev. B* **37** 6991 (1988)
53. Rapaport D C *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004)
54. Lindhard J, Nielsen V, Scharff M *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **36** (10) 1 (1968)
55. Winterbon K B *Rad. Eff.* **13** 215 (1972)
56. Littmark U, Ziegler J F *Phys. Rev. A* **23** 64 (1981)
57. Бабенко П Ю, Зиновьев А Н *ЖТФ* **93** 1272 (2023)
58. Hartung H et al. *Phys. Lett. A* **119** 457 (1987)
59. Hartung H et al. *J. Phys. B* **18** L433 (1985)
60. Gartker K, Hehl K *Phys. Status Solidi B* **94** 231 (1979)
61. Loftager P et al. *Phys. Rev. A* **20** 1443 (1979)
62. Loftager P, Claussen G, in *ICPEAC VI* (Cambridge, USA, 1969) p. 518
63. Bruckner B et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **470** 21 (2020)
64. Shulga V I *Rad. Eff.* **100** 71 (1986)
65. Бабенко П Ю и др. *Письма в ЖТФ* **48** 10 (2022); Babenko P Yu et al. *Tech. Phys. Lett.* **48** 50 (2022)
66. Verbeek H, Eckstein W, Bhattacharya R S *J. Appl. Phys.* **51** 1783 (1980)
67. Бабенко П Ю, Зиновьев А Н, Тенсин Д С *ЖТФ* **92** 1643 (2022); Babenko P Yu, Zinoviev A N, Tensin D S *Tech. Phys.* **67** 1416 (2022)
68. Fama M et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **164** 241 (2000)
69. Archubi C et al. *Phys. Status Solidi B* **241** 2389 (2004)
70. Бабенко П Ю, Михайлов В С, Зиновьев А Н *Письма в ЖЭТФ* **117** 723 (2023); Babenko P Yu, Mikhailov V S, Zinoviev A N *JETP Lett.* **117** 725 (2023)
71. Дедков Г В *УФН* **165** 919 (1995); Dedkov G V *Phys. Usp.* **38** 877 (1995)
72. Saitoh K *Rad. Eff.* **82** 205 (1984)
73. Kittel C *Introduction to Solid State Physics* 8th ed. (New York: John Wiley and Sons, 2005)
74. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (М.: Физматлит, 2004); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press, 1977)
75. Mott N F, Massey H S W *Theory of Atomic Collisions* (Oxford: Oxford Univ. Press, 1965); Пер. на русск. яз.: Мотт Н, Мессис Г *Теория атомных столкновений* (М.: Мир, 1969)
76. Bethe H A *Ann. Physik* **5** 325 (1930)
77. Bloch F *Ann. Physik* **16** 285 (1933)
78. Fermi E, Teller E *Phys. Rev.* **72** 399 (1947)
79. Andersen H H, Ziegler J F *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements. The Stopping and Range of Ions in Matter* Vol. 3 (New York: Pergamon Press, 1977)
80. Fink D et al. *Nucl. Instrum. Meth.* **218** 171 (1983)
81. Fink D *Nucl. Instrum. Meth.* **218** 817 (1983)
82. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **36** 1517 (1959); Firsov O B *Sov. Phys. JETP* **9** 1076 (1959)
83. Oen O S, Robinson M T *Nucl. Instrum. Meth.* **132** 647 (1976)
84. Ахиезер И А, Давыдов Л Н *УФН* **129** 239 (1979); Akhiezer I A, Davydov L N *Sov. Phys. Usp.* **22** 804 (1979)
85. Sigmund P *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **406** 391 (2017)
86. Montanari C S, Miraglia J E *Phys. Rev. A* **96** 012707 (2017)
87. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю, Мелузова Д С, Шергин А П *Письма в ЖЭТФ* **108** 666 (2018); Zinoviev A N, Babenko P Yu, Meluzova D S, Shergin A P *JETP Lett.* **108** 633 (2018)
88. Zinoviev A N, Babenko P Yu, Meluzova D S, Shergin A P *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **467** 140 (2020)
89. Duvenbeck A et al. *Phys. Rev. B* **77** 245444 (2008)
90. Fuls E N et al. *Phys. Rev.* **107** 704 (1957)
91. Kessel Q C, Everhart E *Phys. Rev.* **146** 16 (1966)
92. Bierman D J, Turkenburg W C *Physica* **67** 533 (1973)
93. Morgan G H, Everhart E *Phys. Rev.* **128** 667 (1962)
94. Kessel Q C, Rose P H, Grodzins L *Phys. Rev. Lett.* **22** 1031 (1969)
95. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю, Шергин А П *ЖЭТФ* **163** 744 (2023); Zinoviev A N, Babenko P Yu, Shergin A P *J. Exp. Theor. Phys.* **163** 662 (2023)
96. Amme R C, Haugsjaa P O *Phys. Rev.* **177** 230 (1969)
97. Gilbody H B, Hasted J B *Proc. R. Soc. London A* **238** 334 (1957)
98. Sacak R K, Kessel Q C, Rudd M E *Phys. Rev. A* **2** 1327 (1970)
99. Месхи Г Г "Особенности радиационного и Оже-распада внутренних вакансий, образующихся в атомных столкновениях", Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (Ленинград: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1983)
100. Echenique P M, Flores F, Ritchie R H *Solid State Phys.* **43** 229 (1990)
101. Brinmann G, Kalbitzer S *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **132** 119 (1976)
102. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю, Шергин А П *Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед.* (12) 64 (2020); Zonoviev A N, Babenko P Yu, Shergin A P *J. Surf. Invest. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* **14** 1304 (2020)
103. Babenko P Yu, Zinoviev A N, Shergin A P *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **354** 142 (2015)
104. Briggs J S, Macek J J *Phys. B* **5** 579 (1972)
105. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю, Шергин А П *Письма в ЖЭТФ* **114** 13 (2021); Zinoviev A N, Babenko P Yu, Shergin A P *JETP Lett.* **114** 18 (2021)
106. Meyerhof W E, Taulbjerg K *Annu. Rev. Nucl. Sci.* **27** 279 (1977)
107. Lennard W N, Mitchell I V, Forster J S *Phys. Rev. A* **18** 1949 (1978)
108. Foster C et al. *J. Phys. B* **9** 1943 (1976)
109. Зиновьев А Н, Овчинников С Ю, Гордеев Ю С *Письма в ЖТФ* **7** 139 (1981); Zinoviev A N, Ovchinnikov S Yu, Gordeev Yu S *Sov. Tech. Phys. Lett.* **7** 139 (1981)
110. Овчинников С Ю, Соловьев Е А *Письма в ЖЭТФ* **91** 477 (1986); Ovchinnikov S Yu, Solov'ev E A *JETP Lett.* **64** 280 (1986)
111. Ogurtsov G N et al. *Phys. Rev. A* **53** 2391 (1996)
112. Pieksma M, Ovchinnikov S Yu *J. Phys. B* **24** 2699 (1991)
113. Stolterfoht N *Phys. Rev. A* **12** 1313 (1975)
114. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю *Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед.* (6) 94 (2021); Zinoviev A N, Babenko P Yu *J. Surf. Invest. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.* **15** 623 (2021)
115. Zinoviev A N, Babenko P Yu *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **536** 82 (2023)
116. ALADDIN database, <https://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/>
117. NDS database, <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
118. Cabrera-Trujillo R et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 5300 (2000)
119. Kirchner T, Horbatsch M, Ludde H J *Phys. Rev. A* **66** 052719 (2002)
120. Schiwietz G, Grande P L *Phys. Rev. A* **84** 052703 (2011)
121. Chowdhury M R et al. *Phys. Rev. A* **102** 012819 (2020)
122. Commisso M et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **256** 474 (2007)
123. Gassert H et al. *Phys. Rev. Lett.* **116** 073201 (2016)
124. Gravielle M S, Miraglia J E *Phys. Rev. A* **65** 022901 (2002)
125. Hasan A et al. *Phys. Rev. A* **74** 032703 (2006)
126. Kim H-K et al. *Phys. Rev. A* **85** 022707 (2012)
127. McSherry D M et al. *AIP Conf. Proc.* **576** 168 (2001)
128. Schultz D R et al. *Phys. Rev. A* **65** 052722 (2002)
129. Sigmund P, Glazov L G *Eur. Phys. J. D* **23** 211 (2003)
130. Rudd M E, Toburen L H, Stolterfoht N *At. Data Nucl. Data Tables* **18** 413 (1976)
131. Rudd M E, Toburen L H, Stolterfoht N *At. Data Nucl. Data Tables* **23** 405 (1979)
132. Moro M V et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **498** 1 (2021)
133. Mery M et al. *Rad. Eff. Def. Solids* **176** 73 (2021)
134. Fama M et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **193** 91 (2002)
135. Tran T T et al. *Phys. Rev. A* **100** 032705 (2019)
136. Konac G et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **136** 159 (1998)
137. Moller S P et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 193201 (2002)
138. Andersen H H *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **194** 217 (2002)

139. Bruckner B *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **423** 82 (2018)
140. Cantero E D et al. *Phys. Rev. A* **80** 032904 (2009)
141. Valdes J E et al. *Phys. Rev. A* **49** 1083 (1994)
142. Markin S N et al. *Phys. Rev. B* **80** 205105 (2009)
143. Martínez-Tamayo G et al. *Phys. Rev. A* **51** 2285 (1995)
144. Goebel D et al. *Phys. Rev. A* **90** 042706 (2014)
145. Valdés J E et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **73** 313 (1993)
146. Goebel D, Roth D, Bauer P *Phys. Rev. A* **87** 062903 (2013)
147. Valdés J E et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **164** 268 (2000)
148. Blume R, Eckstein W, Verbeek H *Nucl. Instrum. Meth.* **168** 57 (1980)
149. Markin S N et al. *Phys. Rev. B* **78** 195122 (2008)
150. Paul H, Schinner A *Phys. Scripta* **69** C41 (2004)
151. Sigmund P, Schinner A *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **410** 78 (2017)
152. Goebel D et al. *Phys. Rev. A* **88** 032901 (2013)
153. Зиновьев А Н, Бабенко П Ю *Письма в ЖЭТФ* **115** 603 (2022); *Zinoviev A N, Babenko P Yu JETP Lett.* **115** 560 (2022)
154. Zeb M A et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 225504 (2012)
155. Бабенко П Ю, Михайлов В С, Шергин А П, Зиновьев А Н *ЖТФ* **93** 709 (2023); *Babenko P Yu, Mikhailov V S, Shergin A P, Zinoviev A N Tech. Phys.* **68** 662 (2023)
156. Михайлов В С, Бабенко П Ю, Шергин А П, Зиновьев А Н *ЖЭТФ* **164** 478 (2023); *Mikhailov V S, Babenko P Yu, Shergin A P, Zinoviev A N J. Exp. Theor. Phys.* **137** 413 (2023)
157. Clark R E H *Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion* Vol. 7, Pt. B (Vienna: IAEA, 2001)
158. Falcone G, Gullo F *Phys. Lett. A* **125** 432 (1987)
159. Фальконе Д УФН **162** 71 (1992); *Falcone G Rivista Nuovo Cimento* **13** 1 (1990)
160. Eckstein W, Preuss R *J. Nucl. Mater.* **320** 209 (2003)
161. Машкова Е С, Молчанов В А *Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел* (М.: Энергоатомиздат, 1995)
162. Михайлов В С, Бабенко П Ю, Шергин А П, Зиновьев А Н *ЖТФ* **93** 1533 (2023)
163. Eckstein W "Calculated sputtering, reflection and range values", IPP-9-132 (Garching: IPP, 2002)
164. Eckstein W "Reflection (Backscattering)", IPP-17-12 (Garching: IPP, 2009)
165. Мелузова Д С, Бабенко П Ю, Шергин А П, Зиновьев А Н *Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед.* (7) 98 (2020); *Meluzova D S, Babenko P Yu, Shergin A P, Zinoviev A N J. Surf. Investig.* **14** 738 (2020)
166. van Gorkum A A, Kornelsen E V *Rad. Eff.* **52** 25 (1980)
167. Borovikov V, Voter A F, Tang X-Z *J. Nucl. Mater.* **447** 254 (2014)
168. Robinson M T *J. Nucl. Mater.* **103** 525 (1981)
169. Yamamura Y *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **33** 429 (1988)
170. Robinson M T, Oen O S *Appl. Phys. Lett.* **2** 30 (1963)
171. Lindhard J *Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **34** 1 (1965)
172. Тулинов А Ф УФН **87** 585 (1965); *Tulinov A F Sov. Phys. Usp.* **8** 864 (1966)
173. Vantomme A *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **371** 12 (2016)
174. Tensin D S et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **540** 33 (2023)
175. Ohtsuki Y-H *Charged Beam Interaction with Solids* (London: Taylor and Francis, 1983); Пер. на русск. яз.: Оцуки Ё-Х *Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами* (М.: Мир, 1985)
176. Мелузова ДС, Бабенко П Ю, Шергин А П, Зиновьев А Н *Письма в ЖТФ* **46** (5) 34 (2020); *Meluzova D S, Babenko P Yu, Shergin A P, Zinoviev A N Tech. Phys. Lett.* **46** 235 (2020)

Stopping and scattering of keV-range atoms in matter

P.Yu. Babenko^(a), A.N. Zinoviev^(b), A.P. Shergin^(c)

Ioffe Institute, Russian Academy of Sciences, ul. Politekhnicheskaya 26, 194021 St. Petersburg, Russian Federation

E-mail: ^(a) babenko@npd.ioffe.ru, ^(b) Zinoviev@inprof.ioffe.ru, ^(c) A.Shergin@mail.ioffe.ru

Significant progress in understanding the stopping and scattering of atomic particles with energies less than 100 keV in matter is discussed. Stemming from a comparison of experimental data with the results of computer modeling, it refers to the selection of the potential employed to describe the scattering of particles and refinement of the concepts of nuclear and electronic stopping power. Considered is the dominant role in the formation of electronic losses of the mechanism related to the excitation of autoionization states during the rearrangement of molecular shells in collisions. The contribution of fast electron emission to the electron loss cross section is found to be significant. The influence of collision parameters on scattering, sputtering, and channeling is analyzed.

Keywords: atomic collisions, atomic interaction potential, nuclear and electronic stopping losses, excitation of autoionization states, ionization of atoms, electron emission, scattering, sputtering, channeling

PACS numbers: 32.80.Zb, **34.20. – b**, **34.35. + a**, **34.50. – s**, 34.50.Bw, 34.80.Dp, 52.20.Hv, **61.85. + p**, 68.49.Sf

Bibliography — 176 references

Received 15 November 2023, revised 7 March 2024

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **194** (10) 1059–1081 (2024)

Physics – Uspekhi **67** (10) (2024)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.03.039666>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2024.03.039666>