

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МНОГОКРАТНО РАССЕЯННЫХ ИОНОВ

А.И. Кульментьев

Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская 58, Сумы, 44030, Украина
тел. (054-2) 63-90-18; E-Mail orikulm@mail.ru

В работе определены границы возможных значений энергии моноэнергетического пучка ионов после двух последовательных упругих рассеяний на атомах мишени. Рассматривается случай, когда положение детектора фиксировано, а промежуточные акты рассеяния произвольны. Получено выражение для обобщенного кинематического множителя и на основе решения оптимизационной задачи определены его экстремальные значения. Эти же значения измерены в независимом компьютерном эксперименте. Выполнено сравнение граничных значений энергии частицы после двух рассеяний с энергией однократно рассеянной частицы. Обсуждается возможность использования полученных результатов в методах анализа на пучках ионов.

Введение

Процесс прохождения иона через вещество можно представить в виде последовательности элементарных процессов: испускание иона источником, одно или несколько его взаимодействий со средой, в промежутках между которыми он движется свободно, и вылет из рассматриваемой системы без возвращения [1]. При таком подходе история отдельной частицы – это последовательность актов взаимодействия, часто имеющих вид неупругих или упругих столкновений.

Бинарные столкновения также широко используются в методах анализа на пучках ионов. Они лежат в основе резерфордского обратного рассеяния [2], рассеяния ионов на поверхности [3] и рассеяния вперед атомов отдачи [4]. При интерпретации экспериментальных данных обычно предполагается, что спектр формируется только однократно рассеянными частицами. Однако постоянно растущие требования к точности получаемых в эксперименте данных приводят к необходимости усовершенствования моделей методов, в частности, к учету в них процессов кратных столкновений.

Настоящая работа посвящена теоретическому описанию кинематики процесса двукратного рассеяния, а также определению в результате компьютерного эксперимента минимальной и максимальной энергии иона после последовательных столкновений с первоначально неподвижными атомами мишени.

Кинематика однократных и двукратных столкновений

В широкой энергетической области взаимодействие иона с атомом мишени имеет вид упругого столкновения, для которого справедливы следующие приближения:

- 1) длины волн де Бройля обеих частиц пренебрежимо малы по сравнению с типичным межатомным расстоянием, и, следовательно, такое взаимодействие можно адекватно описать в рамках классической механики;
- 2) время взаимодействия много меньше периода тепловых колебаний атома, и поэтому можно считать, что последний до столкновения покоился;
- 3) передаваемая при столкновении энергия много больше энергии связи атома в решетке, а, значит, процесс взаимодействия можно рассматривать как классическое столкновение двух свободных

тел, одно из которых до столкновения покоилось.

Пусть \mathbf{V}_0 – вектор скорости иона в пучке, а \mathbf{V}_1 и \mathbf{V}_a – векторы скоростей соответственно иона и атома после столкновения. В рамках приближений 1) – 3) движение частиц происходит в орбитальной плоскости. Поэтому кинематика парных упругих столкновений может быть описана уравнениями сохранения энергии и сохранения компонент импульса системы в направлениях параллельных и перпендикулярных \mathbf{V}_0 . Следовательно, имеется система из трех уравнений относительно четырех неизвестных: скоростей V_1 , V_a , углов рассеяния θ , и отдачи θ_a . Из этой системы можно исключить любые два из неизвестных. Так, исключив V_a и θ_a , получим формулу, выражающую зависимость энергии E_i рассеянного иона от угла рассеяния

$$E_i = K(\theta; \mu) E_0, \quad (1)$$

где

$$K(\theta; \mu) = \frac{E_i}{E_0} = \frac{v^2}{v_0^2} = \left[\frac{\cos \theta \pm \sqrt{\mu^2 - \sin^2 \theta}}{1 + \mu} \right]^2 \quad (2)$$

– кинематический множитель [2], а $\mu = m_2/m_1$.

При $m_1 > m_2$ ($\mu < 1$) угол рассеяния θ , изменяется от 0 до $\theta_{\max} = \arcsin \mu$, и в соотношении (2) действительны оба знака. При $m_1 < m_2$ ($\mu > 1$) угол рассеяния может принимать любое значение из интервала $[0, \pi]$, а соотношении (2) действителен только знак "+". На рис.1 показан график кинематического множителя как функции переменных θ , и μ для $\mu \geq 1$.

Однократное рассеяние имеет плоский характер, однако двукратное рассеяние в общем случае не является плоским. Действительно, если $\mathbf{R}_{i a 1}$ – вектор относительного положения иона и первого атома, а $\mathbf{R}_{a 1 a 2}$ – двух атомов мишени, на которых последовательно рассеивается налетающий ион, \mathbf{n}_{det} – орт оси детектора, то четыре вектора $\mathbf{R}_{i a 1}$, \mathbf{V}_0 , \mathbf{n}_{det} и $\mathbf{R}_{a 1 a 2}$ могут не принадлежать одной плоскости. Если для каждого из двух последовательных столкновений справедливы приближения 1) – 3), то для конкретной геометрии энергия рассеянного иона определяется однозначно. Однако для заданного направления падения пучка существует большое число возможных расположений первого и второго атомов мишени, таких, что после рассеяния на них ион попадет в фиксированный детектор. Поэтому рас-

пределение энергии двукратно рассеянных частиц будет отличным от нуля в пределах некоторого интервала.

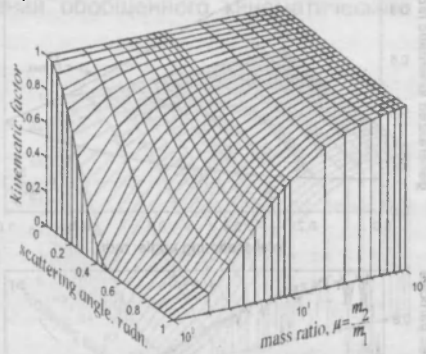


Рис. 1. Кинематический множитель $K(\theta, \mu)$ (2) для $\mu \geq 1$.

Рассмотрим вопрос о положении этого интервала. Подобный анализ некоторых частных случаев был выполнен ранее. Так, в [5] на основе простого графического представления зависимости энергии рассеянных ионов $E_i(\theta)$ (1) от угла рассеяния было показано, что для $\mu > 1$ частица, упруго рассеявшаяся вначале на угол θ_1 , а затем – на угол θ_2 , всегда будет обладать энергией, большей, чем частица, однократно рассеявшаяся на угол

$$\theta = \theta_1 + \theta_2. \quad (3)$$

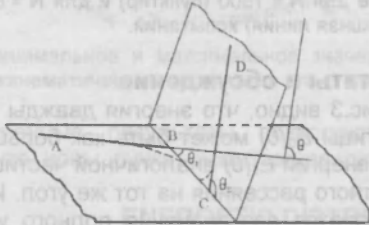


Рис. 2. Схематический вид траектории частицы, последовательно рассеиваемой на углы θ_1 и θ_2 на двух сферически симметричных центрах. θ – полный угол рассеяния. Пунктиром обозначена истинная траектория частицы.

Для фиксированного направления пучка и положения детектора (3) справедливо в случае, когда орбитальные плоскости первого и второго столкновений совпадают. В общем случае соотношение между углами θ_1 , θ_2 и θ будет более сложным (рис. 2).

Пусть E_1 – энергия налетающего иона после первого рассеяния на угол θ_1 , а E_2 – после второго рассеяния на угол θ_2 . Если для каждого из двух последовательных столкновений справедливы приближения 1) – 3), то

$$E_1 = K(\theta_1, \mu)E_0, \quad E_2 = K(\theta_2, \mu)E_1 \quad (4)$$

и, следовательно,

$$E_2 = K(\theta_1, \mu)K(\theta_2, \mu)E_0. \quad (5)$$

Переменные θ_1 и θ_2 не являются независимыми. В наиболее простом случае налагаемое на них условие связи имеет вид уравнения (3). Для определения вида подобного уравнения в общем случае определим единичные направляющие векторы \mathbf{q}_0 пучка ионов, \mathbf{q}_1 – *out*-асимптоты первого и одновременно *in*-асимптоты второго столкновения и \mathbf{q}_2 – *out*-асимптоты второго столкновения. Из динамических соображений ясно, что

$$\mathbf{q}_1 = f(\mathbf{q}_0; \theta_1, \mathbf{n}_1), \quad \mathbf{q}_2 = f(\mathbf{q}_1; \theta_2, \mathbf{n}_2), \quad (6)$$

где \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 – векторы нормали орбитальной плоскости первого и второго рассеяния соответственно, а f – функция, описывающая преобразование координат единичного вектора при повороте его в заданной орбитальной плоскости на заданный угол. Тогда искомое уравнение связи между углами θ_1 , θ_2 и θ является следствием уравнения

$$f[f(\mathbf{q}_0; \theta_1, \mathbf{n}_1); \theta_2, \mathbf{n}_2] = \mathbf{n}_{\text{det}}, \quad (7)$$

при условии, что

$$\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_{\text{det}} = \cos \theta. \quad (8)$$

В работе искомое преобразование представлено в параметрическом виде, где роль параметров играют соответствующим образом определенные углы Эйлера. Получено выражение для тригонометрических функций этих углов через угол рассеяния и характеристики орбитальной плоскости.

Затем найденное преобразование f применялось к двум последовательным рассеяниям иона на атомах мишени – первому на угол θ_1 в орбитальной плоскости, задаваемой углом φ_1 , и второму – на угол θ_2 в орбитальной плоскости, задаваемой углом φ_2 . Перемножая эти преобразования и приравнивая вектор \mathbf{q}_2 вектору \mathbf{n}_{det} , получим конкретную форму уравнения (7). Последнее будет представлять систему из трех нелинейных уравнений относительно четырех неизвестных θ_1 , φ_1 ; θ_2 , φ_2 , которая должна быть решена с учетом уравнения связи (8).

На основе физических соображений можно показать, что при любом определяемом из уравнения (8) параметре θ система уравнений (7) совместна, но не определена. Это обстоятельство и является причиной того, что для заданного полного угла рассеяния θ энергии (5) двукратно рассеянных частиц заполняют конечный интервал.

В данной работе показано, что θ_2 , φ_2 являются однозначными функциями θ_1 , φ_1 :

$$\begin{cases} \theta_2 = f_\theta(\theta_1, \varphi_1; \theta), \\ \varphi_2 = f_\varphi(\theta_1, \varphi_1; \theta), \end{cases} \quad (9)$$

в которые полный угол рассеяния входит как параметр. Из обратимости по времени классических уравнений движения следует, что отображение (9) биективно. Таким образом, в системе нелинейных уравнений (7) из четырех неизвестных θ_1 , φ_1 ; θ_2 , φ_2 независимыми являются лишь два, например, θ_1 , φ_1 . Следовательно, энергию (5) двукратно рассеянной частицы можно представить в виде

$$E_2 = K(\theta_1; \mu)K(f_\theta(\theta_1, \varphi_1; \theta); \mu)E_0 = \bar{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta)E_0, \quad (10)$$

и вопрос об определении ее наименьшего и наибольшего значений сводится к задаче поиска экстремумов функции $\bar{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta)$ – обобщенного кинематического множителя – для заданных параметров μ и θ .

Для решения этой оптимизационной задачи необходим явный вид функции f_θ , точнее говоря, достаточно установить вид этой функции в какой-то одной системе координат, поскольку величина экстремумов функции K от выбора подобной системы, конечно, не зависит. В работе найдена

такая система координат и для нее получена следующая конкретная форма системы (9):

$$\begin{cases} \cos \theta_2 = \cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos \varphi_1, \\ \sin \theta_2 = \frac{\sin \theta \sin \varphi_1}{\sqrt{1 - (\cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos \varphi_1)^2}}. \end{cases} \quad (11)$$

Подставив первое из уравнений системы (11) в левую часть уравнения (10), получим выражение для обобщенного кинематического множителя, из которого вытекает, что

$$0 \leq \bar{K}_{\min}(\mu, \theta) \leq \bar{K}(\theta, \omega; \mu, \theta) \leq \bar{K}_{\max}(\mu, \theta) \leq 1. \quad (12)$$

Для определения граничных значений обобщенного кинематического множителя необходимо для заданных значений параметров μ и θ решить задачу условной оптимизации функции $\bar{K}(\theta_1, \varphi_1, \mu, \theta)$ двух переменных θ_1, φ_1 при следующих ограничениях типа линейных неравенств:

$$0 < \theta_1 < \pi, \quad 0 \leq \varphi_1 < 2\pi$$

(простые ограничения на переменные). Существует множество численных методов решения таких задач. В рассматриваемом случае размерность пространства поиска невелика (она равна двум), область допустимых значений переменных имеет конечный объем и простую форму, а для целевой функции существует сравнительно простое аналитическое выражение. В этих условиях для отыскания экстремумов обобщенного кинематического множителя можно применить методы прямого поиска, в которых используются значения только целевой функции.

Был использован наиболее простой вариант прямого поиска – метод сплошного перебора, который автоматически учитывает ограничения рассматриваемой задачи и гарантирует, что найденное с его помощью решение будет глобальным. Полученные при этом результаты для $\mu = 4,0$ показаны на рис.3 а.

Компьютерные эксперименты

Для проверки корректности полученных результатов значения \bar{K}_{\min} и \bar{K}_{\max} были измерены в независимом компьютерном эксперименте. Для этого с помощью динамической компьютерной модели газа твердых сфер [6] измерялось энергетическое распределение частиц, которые после двух столкновений рассеиваются на угол θ .

В эксперименте весь интервал возможных значений угла θ разбивался на конечное число отрезков шириной $\Delta\theta$ и для каждого иона определялся тот интервал, в который он попадает после двух случайных столкновений. Среди всех частиц, зарегистрированных в данном интервале, выбирались те, которые характеризуются минимальным и максимальным значениями обобщенного кинематического множителя. На рис.3, b представлены графики функций \bar{K}_{\min} и \bar{K}_{\max} для разного полного числа испытаний N .

Из рисунка видно, что для двух столкновений частицы могут обладать любой энергией из некоторого интервала, причем границы этого интервала при увеличении числа испытаний сходятся к значениям, определенным выше из решения оптимизационной задачи, что является доказательством корректности последних.

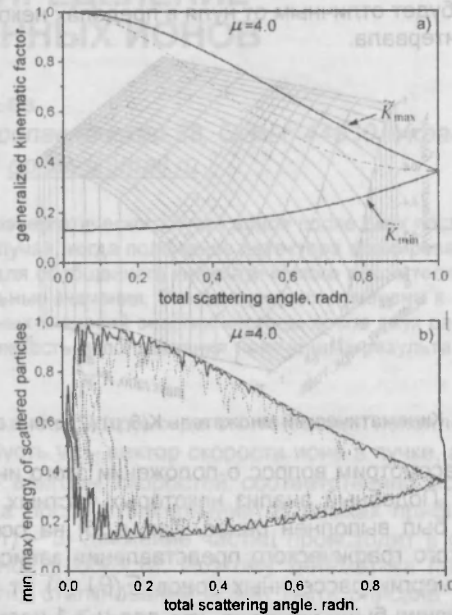


Рис.3 а) Граничные значения обобщенного кинематического множителя, найденные в результате решения оптимизационной задачи. Для сравнения пунктиром показан график обычного кинематического множителя (2). б) Минимальная и максимальная энергия двукратно рассеянной частицы, измеренная в компьютерном эксперименте для $N = 1500$ (пунктир) и для $N = 6000$ (толстая сплошная линия) испытаний.

Результаты и обсуждение

Из рис.3 видно, что энергия дважды рассеянной частицы $E_d(\theta)$ может быть как больше, так и меньше энергии $E_s(\theta)$ аналогичной частицы после однократного рассеяния на тот же угол. Исключением является два значения полного угла рассеяния: $\theta = 0$ и $\theta = \pi$. В первом случае $E_d(0) \leq E_s(0)$, а во втором $E_d(\pi) = E_s(\pi)$. Из (2) легко видеть, что при однократном рассеянии частицы на нулевой угол ее энергия (и импульс) остаются неизменными, что, по сути, означает отсутствие взаимодействия. Поэтому $K(0) \equiv 1$ для любого соотношения масс μ "сталкивающихся" частиц.

Формально это представление можно перенести и на случай двукратного рассеяния, а поскольку при $\theta_1 = \theta_2 = 0$ и полный угол рассеяния также равен нулю, то $\bar{K}_{\max}(0) \equiv 1$ для всех значений μ . Однако система (7) для $\theta = 0$ обладает множеством и нетривиальных решений, связанных условием $\cos \theta_2 = \cos \theta_1$, т.е. $\theta_2 = \pm \theta_1$. Легко видеть, что при выполнении этого условия полный угол рассеяния действительно может быть равен нулю, однако в отличие от однократного рассеяния, падающая частица продолжает движение в исходном направлении после двух реальных столкновений, в каждом из которых ее энергия уменьшается в $K(\theta_1)$ раз, так что $\bar{K}(0) = K^2(\theta_1)$. Из рис.1 можно видеть, что для любого μ функция $K(\theta)$ имеет минимальное значение при $\theta = \pi$, и поэтому $\bar{K}_{\min}(0) = K^2(\pi)$. С учетом этого можно следующим образом уточнить соотношение (12)

$$K^2(\pi; \mu) \leq \bar{K}(\theta, \varphi; \mu, \theta) \leq 1 \quad (13)$$

На рис.4 показаны поверхности граничных значений обобщенного кинематического множителя.

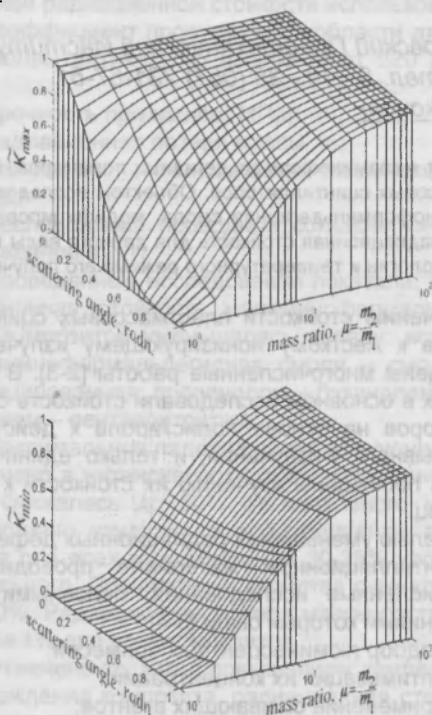


Рис.4. Минимальное и максимальное значения обобщенного кинематического множителя для $\mu \geq 1$.

Полученные результаты позволяют утверждать, что ионы пучка, испытавшие двукратное

рассеяние на атоме мишени данного типа, будут давать ненулевой вклад вблизи сигнала, формируемого в результате однократного рассеяния на атомах того же типа. При этом точная форма сигнала, формируемого двукратно рассеянными ионами, будет определяться сечением этого процесса, и можно ожидать, что в некоторых случаях вклад таких частиц в полный спектр рассеянных ионов может быть достаточно велик.

Подчеркнем, что в отличие от данных, например, рис.4, величина сечения зависит от конкретного потенциала взаимодействия иона с атомом поверхности. Более того, в [7] было показано, что такое сечение нельзя представить в виде произведения сечений последовательных одночастичных процессов и поэтому рассеяние на двух пространственно разделенных атомах мишени необходимо рассматривать как единое событие.

Список литературы

1. Учайкин В.В., Рыжов В.В. Стохастическая теория переноса частиц высоких энергий. – Н-ск: Наука. Сиб. отделение, 1988. – 201 с.
2. Chu W.-K., Mayer J., Nicolet M.-A. Backscattering Spectrometry. – N.-Y.: Academic Press. - 1981. - 364p.
3. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. – М.: Мир, 1989. – 564 с.
4. Eckstein W. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1987. – V.B27. – P. 78-93.
5. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. – М.: Мир, 1995. – 321с.
6. Кульментьев А.И., Кульментьева О.П. // Вісник СумДУ, 1997. – N1(7). – С.100-104.
7. Кульментьев А.И. // Вісник СумДУ. – 2006, № 9 (93). – С.108-119.

ENERGETIC DISTRIBUTION OF MULTIPLE SCATTERED IONS

A.I. Kul'ment'ev

Institute of Applied Physics NANU, 58 Petropavlovskaya str., Sumy, 40030, Ukraine; ph. (054-2) 63-90-18;
E-mail opkulm@mail.ru

In the paper the boundaries of possible energy of initially monoenergetic ion beam after two successive elastic scattering by target atoms are defined. The case where detector is fixed and intermediate scatterings are arbitrary is considered. The expression for generalized kinematic factor is derived and its extrema are found on the basis of optimization problem solution. The same values are measured in the independent computer simulation. The extremum values of double scattered particle energy are compared with energy of single scattered one. Possible applications of obtained results in the ion beam analysis are discussed.