

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 2

Исследование динамики процессов потерь энергии потока быстрых атомных частиц при транспортировке в твердотельных и газообразных мишенях

Цель работы: Изучение закономерностей многократного неупругого рассеяния атомных частиц в твердых телах и плотной плазме. Ознакомление с процессом деградации энергии пучка быстрых атомных частиц при его транспортировке в различных средах. Овладение методикой расчета энергетических спектров рассеянных частиц.

Теоретическое описание

Неупругое многократное рассеяние

В данной лабораторной работе будут рассматриваться только процессы неупругого рассеяния. По аналогии с лабораторной работой 1 настоящего сборника запишем уравнение переноса, для частиц движущихся «прямо-вперед»¹ и теряющих энергию по неупругому каналу:

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{dz} N(z, E_0, \Delta) + n_0 \sigma_{in}(E_0 - \Delta) N(z, E_0, \Delta) = \\ = n_0 \int_0^{\Delta} N(z, E_0, \varepsilon) \omega_{in}(E_0 - \varepsilon, \Delta - \varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (1)$$

Граничное условие для уравнения переноса (1) имеет вид:

$$N(0, E_0, \Delta) = N_0 \delta(\Delta) \quad (2)$$

где $\delta(\cdot)$ - δ -функция Дирака.

Основой традиционных моделей, приводящих к аналитическому решению, является приближение, в котором не учитывается изменение сечений рассеяний от энергии налетающей частицы (односкоростное приближение). Вид сечения как бы «замораживается» для всей толщи вещества и определяется первоначальной энергией частицы:

$$\sigma_{in}(E_0 - \varepsilon) \approx \sigma_{in}(E'), \quad \omega_{in}(E_0 - \varepsilon, \Delta) \approx \omega_{in}(E', \Delta), \quad (3)$$

¹ Индикатриса рассеяния - игольчатая

где E' – константа, близкая к начальной энергии частицы E_0 , ε – потеря энергии в предыдущих рассеяниях.

Параметры неупругого рассеяния

При помещении атома в твердое тело упругое рассеяние электронов, ионов и частиц атомного масштаба (атомные частицы) практически не изменяется по сравнению со свободным атомом. Напротив, описание неупругого взаимодействия претерпевает значительное изменение, так как появляются коллективные эффекты при прохождении атомных частиц через вещество.

Особую роль в теории рассеяния имеют первые моменты неупругого дифференциального сечения $\omega_m(E_0, \Delta)$, так как их численные значения можно получить из эксперимента. Это полное сечение неупругого рассеяния

$$\sigma_m(E_0) = \int_0^{E_0} \omega_m(E_0, \Delta) d\Delta,$$

средние потери энергии на единице длины

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{dE}{dz} = n_0 \int_0^{E_0} \Delta \omega_m(E_0, \Delta) d\Delta = n_0 \sigma_E,$$

где σ_E – сечение торможения, страглинг

$$\bar{\varepsilon}^2 = n_0 \int_0^{E_0} \Delta^2 \omega_m(E_0, \Delta) d\Delta.$$

Сделаем упрощающие предположения относительно дифференциального сечения неупругого рассеяния. Первое предположение общепринято. Дифференциальное сечение можно записать в мультипликативной форме относительно переменных E_0 и Δ

$$\omega_m(E_0, \Delta) = A(E_0)q(\Delta).$$

Второе связано с тем, что дифференциальное неупругое сечение при больших потерях энергии обратно пропорционально квадрату Δ . А если начальная энергия велика, то, вычисляя полное неупругое сечение, можно записать

$$\sigma_m(E_0) = A(E_0) \int_0^{E_0} q(\Delta) d\Delta \approx A(E_0).$$

Таким образом, введем

$$x_{in}(\Delta) = q(\Delta) = \omega_{in}(E_0, \Delta) / \sigma_{in}(E_0).$$

Функцию $x_{in}(\Delta)$ будем называть *нейтральной индикатрисой рассеяния*.

Общее решение Ландау

Если измерять путь, пройденный частицей в безразмерных величинах τ ($\tau = z/l_{in}$, $l_{in} = 1/n_0\sigma_{in}$ - есть средняя длина свободного пробега между столкновениями), то уравнение переноса (1) с учетом (3) можно записать в безразмерном виде

$$\mu \frac{d}{d\tau} N(\tau, \Delta) + N(\tau, \Delta) = \int_0^{\Delta} N(\tau, \varepsilon) x_{in}(\Delta - \varepsilon) d\varepsilon. \quad (4)$$

Наиболее прямой путь решения интегро-дифференциального уравнения (4) основан на использовании преобразования Лапласа, поскольку свертка в лаплас пространстве превратится в произведение, и интегро-дифференциальное уравнение (4) превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\mu \frac{d}{d\tau} N(\tau, p) + N(\tau, p) = N(\tau, p) x_{in}(p) \quad (5)$$

с граничным условием

$$N(0, p) = 1. \quad (6)$$

Здесь $x_{in}(p) = \int_0^{\infty} x_{in}(\Delta) \exp(p\Delta) d\Delta$.

Решение дифференциального уравнения (5) с условием (6) имеет вид:

$$N(\tau, p) = \exp\left[-(1 - x_{in}(p)) \frac{\tau}{\mu}\right], \quad (7)$$

В «пространстве» потерь энергии Δ , после обратного преобразования Лапласа, решение принимает окончательную форму:

$$N(\tau, \Delta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp\left[-(1 - x_{in}(p)) \frac{\tau}{\mu} - p\Delta\right] dp \quad (8)$$

Формулу (8) будем называть общим решением Ландау [10].

В настоящее время, вычисления на основе (8) представляют собой обычную, рутинную задачу, но в сороковые годы, когда писалась работа [10], информации о поведении дифференциального по потерям энергии

Δ сечения неупругого рассеяния $\omega_{in}(\Delta)$ в области малых потерь энергии отсутствовала, не было и современных возможностей выполнения численных расчетов. Поэтому в работе [10] была предпринята попытка описать энергетический спектр электронов, прошедших путь z/μ и имевших начальную энергию E_0 , с помощью однопараметрической функции $\varphi_L(\lambda_L)$:

$$N(\tau, \Delta) = \frac{1}{\pi\tau} \varphi_L(\lambda_L), \quad \varphi_L(\lambda_L) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{\pi}{2}u} \cos(u \ln u + \lambda_L u) du, \quad (9)$$

где $\lambda_L = \frac{\Delta}{j\tau} - (\ln \tau + 1 - \gamma)$ зависит от Δ и E_0 .

При выводе аналитического выражения для функции $\varphi_L(\lambda_L)$ был сделан ряд допущений, это привело к тому, что однопараметрическая функция $\varphi_L(\lambda_L)$ дает лишь качественное описание экспериментальной ситуации.

В работе [11], близким по идеологии методом, Вавиловым была получена формула для расчета энергетического спектра ионов прошедших слой твердого тела.

Для численных расчетов удобно представить общее решение Ландау (8) в виде ряда по кратности неупругого рассеяния, который получается, если разложить экспоненту в ряд Тейлора:

$$N(\tau, \Delta) = \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \cdot \left[\delta(\Delta) + \frac{\tau}{\mu} x_m(\Delta) + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\tau}{\mu}\right)^n y_n(\Delta) \right], \quad (10)$$

где $y_n(\Delta) = \int_0^{\Delta} y_{n-1}(\Delta - \varepsilon) x_m(\varepsilon) d\varepsilon$. Функции $y_n(\Delta)$ - в формуле (10) описывает спектр атомных частиц, которые потеряли энергию Δ , после n -кратного рассеяния. Множители $\exp\left(-\tau/\mu\right) \frac{1}{n!} \left(\tau/\mu\right)^n$ - представляют собой пуассоновские вероятности, того, что на отрезке τ/μ произойдет n независимых столкновений.

Формулы (8) и (10) удобно использовать как для расчета энергетических спектров атомных частиц прошедших слой, толщина которого мно-

го меньше длины транспортного пробега l_{tr} (длины изотропизации потока), так и для решения обратных задач по восстановлению сечений $\omega_m(\Delta)$ из спектров характеристических потерь энергии.

Основной проблемой при решении задачи в подходе Ландау (8) является выбор дифференциального неупругого сечения, которое в твердом теле неизбежно будет усредненной характеристикой взаимодействия с тонким слоем, сохраняющим все свойства твердого тела, а не с индивидуальным атомом. Конкретный выбор всегда является компромиссом между подробным описанием неупругих процессов в данной мишени и универсальностью расчетных соотношений.

Модельные неупругие индикатрисы рассеяния

Атомные частицы при движении в твердом теле не только теряют энергию на ионизацию, но и испытывают сильное неупругое рассеяние, связанное с рождением фононов, объемных, поверхностных плазмонов и т.д. Учет всех каналов неупругого взаимодействия приводит к непреодолимым математическим трудностям. Для упрощения употребляют различные модели с меньшей детализацией процесса неупругого рассеяния, применение которых требует более детального исследования.

Простая модель для неупругого рассеяния электронов в твердом теле – это модификация неупругого дифференциального сечения, применяемого для описания процесса ионизации в газообразных средах:

$$x_m(\Delta) = \begin{cases} 0, & \Delta < J \\ \frac{(1 + \alpha)J^{1+\alpha}}{\Delta^{2+\alpha}}, & \Delta \geq J \end{cases} \quad (11)$$

где J – эффективная величина, являющаяся подгоночным параметром и усредняющая пороги реальных неупругих процессов. Показатель степени равен 2 ($\alpha = 0$), если наибольший вклад в тормозную способность для электронов с энергией больше нескольких кэВ вносят ионизационные процессы. Значение J по порядку величины совпадает с энергией объемного плазмона, сечение которого имеет наибольшую величину среди других неупругих процессов. Величина средних потерь энергии на единице длины для (11) определяется выражением:

$$\bar{\varepsilon} = n_0 \sigma_m J \ln \frac{E_0}{J}, \quad \alpha = 0; \quad \bar{\varepsilon} = n_0 \sigma_m \frac{(1 + \alpha)}{\alpha J^\alpha}, \quad \alpha > 0. \quad (12)$$

Для общего решения Ландау необходимо найти лаплас-образ неупругой индикатрисы $x_m(\Delta)$. В случае пороговой функции (11) это можно сделать аналитически [8]

$$\begin{aligned} x_m(p) &= \int_J^\infty \frac{(1+\alpha)J^{1+\alpha}}{\Delta^{2+\alpha}} \exp(-p\Delta) d\Delta = \\ &= (1+\alpha)(pJ)^{1+\alpha} \Gamma(-(1+\alpha), pJ), \quad \alpha > 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $\Gamma(-m, pJ)$ – неполная гамма-функция, имеющее степенное представление [12]:

$$\Gamma(-m, a) = \Gamma(-m) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n a^{-m+n}}{n!(n-m)}. \quad (14)$$

В случае описания процесса неупругого рассеяния легких ионов необходимо учесть существование максимально возможной энергии, которую налетающий ион может передать электронной подсистеме мишени, через которую он движется:

$$x_m(\Delta) = \begin{cases} 0, & \Delta < J_{\min}, \\ \frac{m(J_{\min}^{-m} - J_{\max}^{-m})^{-1}}{\Delta^{1+m}}, & J_{\min} \leq \Delta \leq J_{\max}, \\ 0, & \Delta > J_{\max} \end{cases} \quad (15)$$

Параметр J_{\max} связан с законами сохранения энергии и импульса. При вычислениях мы будем учитывать, что $J_{\max} = kE_0$. Величину k часто называют кинематическим фактором, она является малой, поскольку определяется отношением масс налетающей и покоящейся частицы $A = m_1/m_2$ и зависит от угла рассеяния γ :

$$k = \frac{(A \cos \gamma \pm \sqrt{1 - A^2 \sin^2 \gamma})^2}{(1 + A)^2}. \quad (16)$$

Если $\omega_m(\Delta)$ определяется формулой (15), то

$$\sigma_m = \frac{\beta}{E_0^m}, \bar{\varepsilon} = \frac{\beta \left((kE_0)^{1-m} - J_{\min}^{1-m} \right)}{(1-m)E_0^m}, \bar{\varepsilon}^2 = \frac{\beta \left((kE_0)^{2-m} - J_{\min}^{2-m} \right)}{(2-m)E_0^m}. \quad (17)$$

Параметр m практически определен тем, что в интересующем нас интервале энергий средние потери энергии на единице длины $\bar{\varepsilon} \approx \sqrt{E_0}$ пропорциональны корню из начальной энергии, откуда следует, что $m = 0.25$. Восстановление параметров J_{\min} , β , k из экспериментальных данных является достаточно жестко детерминированной процедурой.

Для неупругой индикатрисы (15) можно получить выражение лаплас-образа используя неполную гамма-функцию

$$x_m(p) = m \frac{(J_{\min} k E_0)^m}{(k E_0)^m - J_{\min}^m} p^m \left(\Gamma(-m, p J_{\min}) - \Gamma(-m, p k E_0) \right). \quad (18)$$

Дальнейшая детализация описания «элементарного» акта неупругого рассеяния может строиться на представлении рассеяния с двумя системами: системе ионов, и газа квазисвободных электронов. В электронном газе нормальных металлов одночастичные (электрон-дырочные) и коллективные (плазмонные) возбуждения электронов хорошо разделяются. Расчеты сечений производятся в рамках формализма комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\vec{q}, \Delta)$ (\vec{q} и Δ — переданные системе импульс и энергия). Согласно [13] вероятность потери энергии Δ и импульса \vec{q} в единицу времени для бесконечной среды

$$P_m(\vec{q}, \Delta) = \frac{C}{v} \text{Im} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \Delta)} \right\} \frac{\delta(\Delta - \vec{q}v)}{q^2} \quad (19)$$

где C — константа, зависящая от материала среды, v — скорость падающей заряженной частицы.

Экспериментальных методов для измерения $\varepsilon(\vec{q}, \Delta)$ во всей области изменения \vec{q} и Δ не существует. Используя методы малоуглового рассеяния ($q \sim 0$) при изучении характеристических потерь, в принципе можно восстановить $\varepsilon(0, \Delta)$ для относительно небольшой области переданных энергий Δ . Это значение может быть сопоставлено с $\varepsilon(0, \Delta)$, извлеченной из оптических измерений. Как правило, оба значения хорошо совпадают в области больших передач энергии. При меньших передачах

энергии максимум сечения приходится на область, где имеют место межзонные переходы и экспериментальные данные практически отсутствуют.

Связь между вероятностью $P_{in}(\vec{q}, \Delta)$ и неупругой индикатрисой рассеяния $x_{in}(\Delta)$ задается формулой

$$x_{in}(\Delta) = \frac{\int P_{in}(q, \Delta) d\Omega}{\iint P_{in}(q, \Delta) d\Omega d\Delta} \quad (20)$$

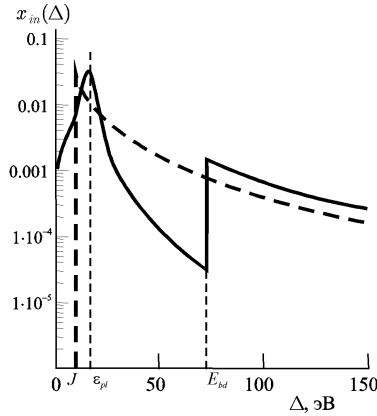


Рис. 2.1. Модельные неупругие индикатрисы рассеяния. Сплошной линией показан расчет по формуле (21), пунктиром - (11).

Для практических расчетов можно выделить потери энергии на возбуждение плазменных колебаний и потери энергии на ионизацию внутренних оболочек атомов

$$x_{in}(\Delta) = \lambda_p x_p(\Delta) + \sum_i \lambda_{ion}^{(i)} x_{ion}^{(i)}(\Delta), \quad (21)$$

где $\lambda_{ion}^{(i)} = \sigma_{ion}^{(i)} / \sigma_{in}$, $\lambda_p = \sigma_p / \sigma_{in}$, σ_p – плазмонное сечение, $\sigma_{ion}^{(i)}$ – ионизационное сечение i -той оболочки, σ_{in} – полное неупругое сечение. Необходимо отметить, что в этой модели термин «плазмонное возбуждение» используется в более широком смысле, в него включены все потери на возбуждение валентных электронов, в том числе и на возбуждение электрон-дырочной пары, так что $\sigma_p = \sigma_{pl} + \sigma_{eh}$, где σ_{pl} , σ_{eh} – полные сечения возбуждения плазмона и элект-

трон-дырочной пары соответственно. Для определения $x_p(\Delta)$ можно использовать аппроксимации (19) в виде:

$$x_p(\Delta) = \frac{\pi}{\sqrt{8(\varepsilon_{pl}^4 + \gamma^4)(\sqrt{\varepsilon_{pl}^4 + \gamma^4} - \varepsilon_{pl}^2)}(\Delta^2 - \varepsilon_{pl}^2)^2 + \gamma^4}, \quad (22)$$

где ε_{pl} – энергия возбуждения плазмона, γ – варьируемый параметр, зависящий от материала мишени и энергии электрона. А для определения $x_{ion}^{(i)}(\Delta)$ можно использовать формулу (11) при $\alpha = 0$ и пороге J равному порогу ионизации i -оболочки.

Если толщина мишени значительно превышает среднюю длину неупругого пробега $l_m = (n_0 \sigma_m)^{-1}$, то за счет многократных потерь особенности спектра плазменных потерь «затухиваются». Для описания спектра можно использовать индикатрису неупругого рассеяния в виде двух пороговой функции

$$x_m(\Delta) = \lambda_p \begin{cases} 0, & \Delta < J_p \\ \frac{m_p J_p^{m_p}}{\Delta^{1+m_p}}, & \Delta \geq J_p \end{cases} + \lambda_i \begin{cases} 0, & \Delta < J_i \\ \frac{m_i J_i^{m_i}}{\Delta^{1+m_i}}, & \Delta \geq J_i \end{cases} \quad (23)$$

где J_p – порог плазмонного возбуждения, $J_p \approx \varepsilon_{pl}$. Величины степенных показателей в формуле (23), которые дают наиболее качественное совпадение с экспериментом, имеют значения: $m_p = 3 + \alpha_p$, $m_i = 1 + \alpha_i$, где коэффициенты α_p , α_i заведомо меньше единицы, но никогда не равны нулю.

Для неупругой индикатрисы (23) можно получить выражение лаплас-образа через неполную гамма-функцию

$$x_m(p) = \lambda_p (3 + \alpha_p) (p J_p)^{3+\alpha_p} \Gamma(-(3 + \alpha_p), p J_p) + \lambda_i (1 + \alpha_i) (p J_i)^{1+\alpha_i} \Gamma(-(1 + \alpha_i), p J_i). \quad (24)$$

Численное интегрирование общего решения Ландау

Для численного интегрирования общего решения Ландау можно использовать метод дискретных ординат. В основе метода дискретных ординат (ДО) лежит применение квадратурной формулы:

$$\int_a^b f(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{i=1}^N s_i f(\xi_i) \quad (25)$$

где ξ_i и s_i узлы и веса квадратурной формулы. Для получения хорошей точности целесообразно выбирать квадратурные формулы высокого порядка точности. Обычно наилучшие результаты для достаточно гладких решений дают квадратурные формулы Гаусса или Гаусса-Кристоффеля. Можно также использовать простейшую формулу трапеций, последовательно сгущая сетки вдвое и уточняя решение. Это также дает результат с хорошей точностью, но требует использования существенно большего числа узлов, чем в формулах Гаусса.

Введем сетку $\{\xi_j\}$ по переменной Δ . Используя метод ДО, заменим интегралы в формуле (10) на квадратурную сумму:

$$\begin{aligned} y_n(\Delta) &= \int_0^\Delta y_{n-1}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon = \\ &= \int_0^\Delta x_{in}(\Delta - \varepsilon) y_{n-1}(\varepsilon) d\varepsilon = \sum_{j=0}^i a_i x_{in}(\xi_i - \xi_j) y_{n-1}(\xi_j) \end{aligned} \quad (26)$$

Определим на сетке $\{\xi_j\}$ вектор $\mathbf{N}(\tau)$, вектор n -кратной индикатрисы \mathbf{Y}_n и матрицу неупругой индикатрисы \mathbf{X}

$$N_i(\tau) = N(\tau, \xi_i), Y_{ni} = y_n(\xi_i), X_{i,j} = \begin{cases} 0, & i < j, \\ x_{in}(\xi_i - \xi_j), & i \geq j. \end{cases} \quad (27)$$

Запишем (26) в матричном виде

$$\mathbf{Y}_n = \mathbf{X} \mathbf{S} \mathbf{Y}_{n-1} = \mathbf{X} \mathbf{S} \mathbf{X} \mathbf{S} \mathbf{Y}_{n-2} = \dots = (\mathbf{X} \mathbf{S})^n \mathbf{Y}_0 \quad (28)$$

Здесь $\mathbf{S} = \text{diag}(s_i)$, $Y_{0i} = \delta(\xi_i) = S_{i,1}$.

Используя (28), запишем в матричном виде разложение по кратности неупругого рассеяния (10):

$$\mathbf{N}(\tau) = \exp\left(-\frac{\tau}{\mu}\right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\tau}{\mu}\right)^n (\mathbf{X} \mathbf{S})^n \right) \mathbf{Y}_0. \quad (29)$$

Формулу (8) можно представить в виде, удобном для численного интегрирования:

$$N(\tau, \Delta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \exp \left(-\operatorname{Re} [1 - x_m(-ip)] \frac{\tau}{\mu} \right) \times \cos \left(p\Delta - \operatorname{Im} [1 - x_m(-ip)] \frac{\tau}{\mu} \right) dp. \quad (30)$$

Явные выражения функций $\operatorname{Re} [1 - x_m(-ip)]$ и $\operatorname{Im} [1 - x_m(-ip)]$ можно получить для модельных пороговых неупругих индикатрис (11), (15), (23) используя формулы (13), (18), (24) и представление неполной гамма-функции через степенной ряд (14).

Если толщина мишени значительно превышает среднюю длину неупругого пробега $\tau/\mu > 1$ спектр прошедших частиц будет иметь купольный вид. В этом случае вычисления по формулам (13), (18) и (24) определяющие значение будет играть малые p при этом в (14) можно ограничиться $n \leq 2$.

Вначале рассмотрим формирование купольных спектров электронов. Найдем функции $\operatorname{Re} [1 - x_m(-ip)]$ и $\operatorname{Im} [1 - x_m(-ip)]$, ограничиваясь слагаемыми до p^2 , для неупругой индикатрисы (11)

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} [1 - x_m(-ip)] &= (1 + \alpha) \Gamma(-1 - \alpha) (pJ)^{1+\alpha} \sin \frac{\pi\alpha}{2}, \\ \operatorname{Im} [1 - x_m(-ip)] &= (1 + \alpha) \left[-\Gamma(-1 - \alpha) (pJ)^{1+\alpha} \cos \frac{\pi\alpha}{2} + \frac{pJ}{\alpha} \right], \end{aligned} \quad (31)$$

и неупругой индикатрисы (23)

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}[x_m(-ip)] &= \lambda_p(3 + \alpha_p) \left(\Gamma(-3 - \alpha_p) (pJ_p)^{3+\alpha_p} \times \right. \\
&\quad \left. \times \cos \frac{\pi}{2} \left(3 + \alpha_p - \frac{(pJ_p)^2}{2(1 + \alpha_p)} \right) + \lambda_i(1 + \alpha_i) \left(\Gamma(-1 - \alpha_i) \times \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times (pJ_i)^{1+\alpha_i} \cos \frac{\pi}{2} \left(1 + \alpha_i - \frac{(pJ_i)^2}{2(1 - \alpha_i)} \right) \right), \quad (32) \\
\operatorname{Im}[x_m(-ip)] &= \lambda_p(3 + \alpha_p) \left(\Gamma(-3 - \alpha_p) (pJ_p)^{3+\alpha_p} \times \right. \\
&\quad \left. \times \sin \frac{\pi}{2} \left(3 + \alpha_p - \frac{pJ_p}{2 + \alpha_p} \right) + \lambda_i(1 + \alpha_i) \left(\Gamma(-1 - \alpha_i) \times \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times (pJ_i)^{1+\alpha_i} \sin \frac{\pi}{2} \left(1 + \alpha_i - \frac{pJ_i}{\alpha_i} \right) \right).
\end{aligned}$$

В случае прохождения через вещество легких ионов с энергией в единицы и десятки килоэлектронВольт. Упругие потери энергии в процессе малоуглового движения легкого иона прямо вперед малы, до тех пор, пока пройденный путь не превышает длины транспортного пробега. Но, в отличие от процесса неупругого рассеяния электрона на электроне в необходимо учесть существование максимально возможной энергии, которую налетающий ион может передать электронной подсистеме мишени, через которую он движется. Для неупругой индикатрисы (15), ограничиваясь слагаемыми до p^2 , получим

$$x_m(p) = 1 - \bar{\varepsilon} l_m p + \frac{\bar{\varepsilon}^2 l_m}{2} p^2 \quad (33)$$

Причина столь радикального упрощения формулы (18) связана с наличием максимальной переданной энергии, равной kE_0 , что приводит к взаимному сокращению многозначных функций. Подставляя (33) в (30) получаем

$$\begin{aligned}
N(\tau, \Delta) &= \frac{1}{\pi k E_0} \int_0^\infty \exp\left[-\frac{\bar{\varepsilon}^2 l_m p^2 \tau}{2(k E_0)^2 \mu}\right] \times \\
&\quad \times \cos\left[-p \frac{\Delta - \bar{\varepsilon} l_m \tau / \mu}{k E_0}\right] dp = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{\varepsilon}^2 \tau / \mu}} \exp\left[-\frac{(\Delta - \bar{\varepsilon} l_m \tau / \mu)^2}{2\bar{\varepsilon}^2 l_m \tau / \mu}\right].
\end{aligned} \tag{34}$$

Формула (34) справедлива для описания спектра потерь энергии ионов до тех пор, пока $kE_0 > J$, и величины J и kE_0 соизмеримы. Как только $kE_0 \gg J$, что происходит с ростом энергии иона (начальная энергия больше нескольких МэВ), необходимо пользоваться формулами (30) и (31).

Типы энергетических спектров атомных частиц

Расчеты, выполненные на основе формул (8) и (10), показывают несколько характерных типов энергетических спектров атомных частиц, прошедших в мишени определенный путь. Появление этих типов зависит от относительной толщины мишени.

Спектр первого типа: $z/\mu < l_m$ или $\tau < 1$ (рис. 2.2). Отличительная особенность спектра в доминирующем пике, соответствующем энергии зондирующего пучка E_0 и сформированном частицами прошедшими слой не испытав никаких неупругих столкновений. Спектр, примыкающий к доминирующему пику, обладает тонкой структурой, за которую ответственны характеристические потери энергии на однократное и многократное возбуждение плазменных колебаний, на пороги потерь энергии на ионизацию и т.д. Для описания спектров первого типа необходимо использовать неупругую индикатрису, детально описывающую процесс неупругого рассеяния, (21). Спектр лучше рассчитывать по формуле (29), так как экспериментально спектр характеристических потерь энергии снимают в интервале порядка 200 эВ.

Спектр второго типа: $z/\mu \geq l_m$ или $\tau \geq 1$ (рис. 2.1). Еще угадывается тонкая структура, пик сформированный частицами прошедшими слой не испытав никаких неупругих столкновений не доминирует в спектре. Для

описания спектра достаточно использовать пороговые индикатрисы (11), (15), (23). Численный расчет спектра основан на формулах (13), (18), (24) (30).

Спектр третьего типа. $z/\mu \gg l_m$ или $\tau \gg 1$ (рис. 2.1). Спектр принимает гладкую, куполообразную форму, которая сдвинулась в область меньших, чем E_0 энергий, в спектре отсутствует вклад частиц прошедших слой без потерь энергии. Спектр можно рассчитывать по формулам (30), (31) - (34).

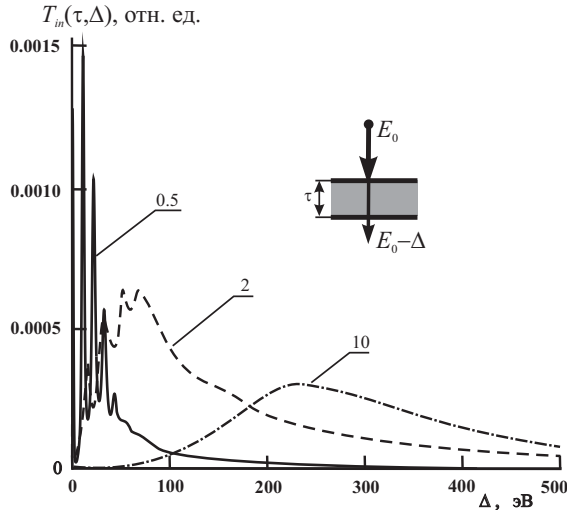


Рис. 2.2. Неупругая функция пропускания электронов для медной мишени $N(\tau, \Delta)$.

$E_0 = 8$ кэВ. Цифрами показаны безразмерные толщины τ

Перед экспериментатором наиболее ярко эти типы спектров разворачиваются в различных типах электронных спектроскопий. Наибольшую популярность приобретает в последнее время картина первая. Этому способствует тот факт, что выпускаемые фирмами «JEOL» и «Philips» просвечивающие электронные микроскопы, работающие на энергиях 100 – 400 кэВ снабжаются энергоанализаторами магнитного типа, обладающими абсолютным разрешением в несколько десятых электронВольта. Спектры первого типа анализирует просвечивающая спектроскопия характеристических потерь энергии (в английской записи TEELS или Transmission Electron Energy Loss Spectroscopy). Спектры второго типа неоднократно наблюдались, но не использовались в целях анализа свойств пленок, в силу трудностей, связанных с необходимостью учета процессов многократного неупругого рассеяния, проще было за счет уве-

личения энергии зондирования или уменьшения толщины мишени перейти к условию: $z/\mu < l_m$ или $\tau < 1$.

С исторической точки зрения впервые наблюдались энергетические спектры третьего типа. Если открыть физический справочник [14] в главе, посвященной прохождению частиц и излучений через вещество, то мы увидим только куполообразные спектры. В первой монографии посвященной прохождению атомных частиц через вещество, написанной великим Нильсом Бором [15] обсуждаются только куполообразные спектры.

В спектроскопии рассеяния ионов в тонких пленках, начиная с пионерских работ Э. Резерфорда и до сегодняшнего дня, удавалось наблюдать только спектры третьего типа. Даже в уникальных экспериментах В.А. Курнаева в МИФИ на углеродных пленках, толщина которых не превышала трех нанометров, не удавалось наблюдать пики характеристических потерь энергии. Это объясняется чрезвычайной малостью величины l_m в процессах ионного рассеяния.

Подготовка к лабораторной работе

1. Изучить теоретические основы лабораторной работы.
2. Изучить закономерности неупругого рассеяния при различных параметрах сечения неупругого рассеяния.
3. Подготовить, в соответствии с [16], исходные данные по расчету спектров атомных частиц прошедших слоев.
4. Подготовить и оцифровать экспериментальные спектры атомных частиц из [17].
5. Подготовить программу расчета параметров неупругого рассеяния по формулам (11) - (17) для модельных неупругих индикатрис рассеяния.
6. Подготовить программу расчета энергетических спектров атомных частиц по формулам (29) - (34).

Порядок выполнения лабораторной работы

1. Получить у преподавателя расчетное задание.
2. Ввести в программу исходные данные, рассчитать безразмерную толщину слоя, выбрать расчетную схему соответствующую полученного типу спектра: модельную неупругую индикатрису и приближение, по которым будет считаться энергетический спектр.
3. Выполнить расчет и графическое сопоставление с экспериментальными данными.

4. Проанализировать полученные данные, сделать заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемых параметров.
5. Оформить протокол лабораторной работы. Протокол должен содержать: описание расчетного задания, листинг результатов расчетов на ЭВМ, графики экспериментальных и расчетных зависимостей, заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемого параметра.

Контрольные вопросы к лабораторной работе

1. Дайте определение основным параметрам неупругого рассеяния: индикатрисы неупругого рассеяния, средние потери энергии на единице длины, страглинг, безразмерная толщина.
2. В чем суть односкоростного приближения.
3. Напишите формулу общего решения Ландау.
4. Напишите общее решение Ландау в виде ряда по кратности неупругого рассеяния.
5. В чем суть метода дискретных ординат.
6. Как зависит вид спектра от толщины слоя?