

УДК 533.9

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОТРАЖЕНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА ТЕРМОЯДЕРНЫХ ЭНЕРГИЙ ОТ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

© 2024 г. В. П. Афанасьев*, Л. Г. Лобанова**

Национальный исследовательский университет “МЭИ”, Москва, Россия

* e-mail: v.af@mail.ru

** e-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru

Поступила в редакцию 15.05.2023 г.

После доработки 20.11.2023 г.

Принята к публикации 01.12.2023 г.

Представлено теоретическое описание процесса отражения изотопов водорода от твердого тела, выполненное на основе имеющихся в современной литературе данных по сечениям упругого и неупругого рассеяния ионов. Результаты аналитического расчета сравниваются с результатами компьютерного моделирования и экспериментальными данными. Рассмотрено взаимодействие изотопов водорода с энергией от 300 эВ до 25 кэВ с материалами в широком интервале атомных номеров, а именно Be, C, Ti, Ni, W, Au. Выполнен критический обзор существующих аналитических моделей многократного рассеяния легких ионов в твердых телах.

Ключевые слова: отражение легких ионов, метод инвариантного погружения, малоугловое приближение, средние потери энергии на единице длины, дифференциальные и интегральные характеристики рассеяния легких ионов

DOI: 10.31857/S0367292124020079, EDN: SBWFMG

1. ВВЕДЕНИЕ

Знание механизма взаимодействия потоков легких ионов (изотопы водорода и гелия) с твердыми телами необходимо для практической реализации целого ряда технологических процессов [1, 2]. Методы анализа твердого тела (Ion Scattering Spectroscopy — ISS, Low Energy Ion Spectroscopy — LEIS, Medium Energy Ion Spectroscopy — MEIS), основанные на зондировании образцов легкими ионами, широко применяются для исследования мишеней сложного состава [1–3]. Последовательное количественное описание процесса отражения и внедрения легких ионов в конструкционные материалы необходимо для решения проблем “первой стенки” установок для реализации управляемого термоядерного синтеза (УТС) [1, 4].

В настоящей работе представлено теоретическое описание процесса отражения легких ионов от твердого тела, выполненное на основе имеющихся в современной литературе данных по сечениям упругого и неупругого рассеяния ионов. Результаты аналитического расчета сравниваются с результатами компьютерного моделирования и экспериментальными данными. Рассмотрено взаимодействие легких ионов с энергией от сотен эВ до десятков кэВ с ма-

териалами в широком интервале атомных номеров. Выполнен критический обзор существующих аналитических моделей многократного рассеяния легких ионов в твердых телах [1–5].

Значительное внимание в работе уделено проблеме описания процесса потери энергии легких ионов в твердом теле. В настоящее время расчеты ведутся на основе модели Фоккера–Планка (МФП) [5]. Данная модель неприменима к описанию потерь энергии легких ионов с энергией от сотен эВ до нескольких кэВ. Методические ошибки, возникающие при использовании МФП, приводят к погрешностям в определении средних потерь энергии ионов на единице длины, достигающих сотни процентов [6], и к резкому отличию данных этой величины, полученных в задачах на отражение и прострел ионов через тонкие пленки [7].

В настоящей работе указано на проблему определения дифференциального сечения упругого рассеяния легких ионов в твердых телах.

Целью настоящей работы является построение аналитического решения задачи отражения легких ионов с энергиями от сотен эВ до десятков кэВ от твердых тел, справедливой для любой геометрии рассеяния.

2. ТЕОРИЯ ОТРАЖЕНИЯ ЛЕГКИХ ИОНОВ ОТ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Описание процесса рассеяния легких ионов в твердом теле базируется на гипотезе Ферми [5], согласно которой этот процесс представим в виде двух независимых процессов — упругого и неупругого рассеяния. Гипотеза Ферми позволяет представить дифференциальное сечение рассеяния $\omega(E, n_0, n)$ в виде суммы дифференциального сечения упругого $\omega_{el}(n_0, n)$ и неупругого $\omega_{in}(E)$ рассеяния

$$\omega(E, n_0, n) = \omega_{el}(n_0, n)\delta(E_0 - E) + \omega_{in}(E)\delta(n_0 - n), \quad (1)$$

где E — текущая энергия иона, $n_0 = (\theta_0, \varphi_0)$ — направление движения иона до элементарного акта рассеяния; $n = (\theta, \varphi)$ — направление движения иона после элементарного акта рассеяния; θ_0, θ — полярный угол влета и вылета иона из мишени соответственно (углы отсчитываются от нормали, направленной вглубь мишени); φ_0, φ — азимутальный угол влета и вылета иона из мишени соответственно; δ — дельта-функция; E_0 — начальная энергия иона при влете в мишень.

Формула (1) позволяет рассматривать движение заряженных частиц в твердом теле, происходящим по двум независимым каналам — упругому и неупругому [5]. Таким образом построение аналитической теории отражения легких ионов от твердых тел сводится к раздельному решению двух задач — задачи упругого рассеяния ионов в твердом теле и к описанию неупругих потерь энергии ионов в твердом теле. Искомые характеристики рассеяния, такие как энергетическое и угловое распределение, а также коэффициенты отражения, определяются с помощью свертки решения задачи упругого и неупругого рассеяния. Этот метод, называемый методом парциальных интенсивностей, эффективно используется для решения задач электронного рассеяния [8, 9]. В настоящей работе будет показана возможность его применения в теории ионного рассеяния.

Рассмотрим сперва решение задачи чисто упругого рассеяния. Аналитическое решение задачи упругого рассеяния легких ионов в твердом теле строится на основе решения граничных задач для уравнения переноса методом инвариантного погружения Амбарцумяна [10, 11]. Суть данного метода заключается в следующем: необходимо проанализировать процессы, приводящие к изменению функции отражения при добавлении к полубесконечному однородному материалу полоски толщиной dx , выполненной из того же материала, причем толщина dx удовлетворяет условию $dx \ll (\pi\sigma_{el})^{-1}$ (n — концентрация атомов мишени; σ_{el} — полное сечение упругого рассеяния

ионов), что означает, что в данном слое могут происходить только процессы однократного рассеяния. Запишем уравнение, удовлетворяющее этим процессам:

$$\left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right) \left[\frac{\partial}{\partial s} R(s, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + R(s, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \right] = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(s) + \int_0^{2\pi} \int_0^1 x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) R(s, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' + \int_0^{2\pi-1} \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(s, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' + \int_0^s ds' \int_0^{2\pi} \int_0^1 \int_0^{2\pi-1} R(s - s', \mu', \mu, \varphi', \varphi) x_{el}(\mu'', \mu', \varphi'', \varphi') \times R(s', \mu_0, \mu'', \varphi_0, \varphi'') \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' \frac{d\mu''}{\mu''} d\varphi'', \quad (2)$$

где μ_0, μ — косинус полярного угла влета θ_0 и вылета θ соответственно; s — пробег иона в мишени; $R(s, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ — функция отражения ионов; x_{el} — нормированное на единицу сечение упругого рассеяния ионов; $\delta(s)$ — дельта-функция.

Нелинейное интегро-дифференциальное уравнение (2) является уравнением Рикатти. Существуют численные методы решения данного уравнения, например, метод формулы обратного дифференцирования (The Backward Differential Formula — BDF) [12, 13].

Аналитическое решение уравнения (2) возможно определить, используя малоугловое приближение [13], которое базируется на существовании резкого максимума дифференциального сечения упругого рассеяния при малых углах рассеяния:

$$\frac{x_{el}(0^\circ)}{x_{el}(90^\circ)} \gg 1. \quad (3)$$

Условие (3) позволяет отбросить в правой части уравнения (2) последнее нелинейное слагаемое, которое, вследствие (3), много меньше первого, второго и третьего слагаемых правой части уравнения (2). Возможность линеаризации уравнения (2) доказана на основе сравнения решений уравнения (2) с учетом нелинейного слагаемого и без учета [13]. Аналитическое решение граничной задачи для линеаризованного уравнения упругого переноса, определяющее распределение отраженных атомных частиц по длине пробега в мишени, впервые получено для описания процесса отражения электронов методом ОКГ [13, 14]. Распределение отраженных

ионов по пробегам s или Path Length Distribution Function (PLDF) в соответствии с [13], имеет вид

$$R(s, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \frac{1}{s l_{el}} \times \\ \times P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \times \\ \times \left[e^{-s(1-x^l)} - e^{-s} \right], \quad (4)$$

где $s = z / l_{el}$; z — глубина в мишени; l_{el} — средняя длина свободного пробега иона между двумя актами упругого рассеяния; x^l — коэффициенты разложения нормированного на единицу дифференциального сечения упругого рассеяния в ряд по полиномам Лежандра; P_l — полиномы Лежандра.

Формула (4) позволяет определить основные дифференциальные и интегральные характеристики рассеяния легких ионов в твердом теле (энергетическое и угловое распределение отраженных ионов; коэффициенты отражения частиц и энергии). В данной работе сосредоточим внимание на дифференциальных характеристиках рассеяния легких ионов в твердом теле. Проинтегрируем формулу (4) по пробегу s в пределах от нуля до R_0 , где R_0 — остаточный пробег иона или тормозной путь иона в мишени. В результате процедуры интегрирования получим формулу для расчета углового распределения отраженных легких ионов

$$R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^{R_0} R(z / l_{el}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) dz = \\ = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} e^{-\frac{A}{|\mu|}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \times \\ \times P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) S_l, \quad (5)$$

где $S_l = Ei(-(1-x^l)\xi) - Ei(-\xi) - \ln(1-x^l)$ при $l > 0$; $S_0 = C - Ei(-\xi) + \ln \xi$; C — постоянная Эйлера; Ei — интегральная экспонента [15]; $\xi = R_0 / l_{el}$; функция $\exp(-A / |\mu|)$ учитывает перезарядку иона при отрыве от поверхности мишени; A — подгоночный параметр.

В [13] представлена методика вычисления энергетических спектров отраженных частиц, основанная на представлении парциальных интенсивностей, для реализации которого необходимо иметь данные по дифференциальному сечению неупругого рассеяния ионов ω_{in} . Однако в современной литературе имеются лишь данные по первым двум моментам сечения неупругого рассеяния ионов [6]: средним потерям энергии ионов на единице длины — $\bar{\varepsilon}$ и, значительно реже, среднему квадрату потерь энергии ионов на единице

длины — $\bar{\varepsilon}^2$. Метод вычисления энергетических спектров отраженных ионов, базирующийся на знании лишь $\bar{\varepsilon}$ и $\bar{\varepsilon}^2$, называется приближением Фоккера–Планка, которое справедливо при условии наличия резкого максимума в дифференциальном сечении неупругого рассеяния [5]. В соответствии с [16, 17] для описания энергетического распределения отраженных легких ионов получим следующую формулу:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{(1-x^l)}{\Delta E_0} e^{-\frac{A}{\sqrt{1-\Delta}}} \\ \times \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \times \right. \\ \left. \times \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \times \\ \times \left[e^{-\Delta(1-x^l)\xi / (1-\Delta)^{5/2}} - e^{-\Delta\xi / (1-\Delta)^{5/2}} \right], \quad (6)$$

где $\Delta = (E_0 - E) / E_0$ — безразмерные потери энергии иона; $\bar{\varepsilon}$ — средние потери энергии иона на единице длины; $e^{-A/\sqrt{1-\Delta}}$ — множитель, учитывающий перезарядку иона при отрыве от поверхности мишени; A — подгоночный параметр; множитель $(1-\Delta)^{5/2}$ учитывает зависимость параметров упругого и неупругого рассеяния ионов от энергии.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В [13, 14] расчеты на основе формулы (4), выполненные для случая электронного рассеяния, апробированы на основе сравнения с результатами моделирования методом Монте-Карло (МК), а также с результатами численного решения уравнения упругого переноса (2).

В настоящей работе проведено сравнение результатов расчета PLDF по формуле (4) для случая ионного рассеяния с МК моделированием [17]. Расчеты выполнены для случая отражения протонов с начальной энергией $E_0 = 10$ кэВ от мишеней из Be, C, Ti и W при угле падения 70° и угле рассеяния 30° . Результаты, представленные на рис. 1, демонстрируют возможность использования методики, созданной для описания электронного рассеяния, в решении задач отражения легких ионов.

Проведено сравнение угловых распределений отраженных ионов, рассчитанных по формуле (5), с экспериментальными данными [18]. Расчеты выполнены для случая отражения дейтонов с начальной энергией $E_0 = 1.5$ и 20 кэВ от вольфрамовой мишени для угла падения 75° . Рисунок 2 демонстрирует удовлетворительное соответствие результатов.

Расчеты энергетических распределений отраженных ионов, выполненные по формуле (6),

сравниваются с данными компьютерного моделирования [19] и с экспериментальными данными [20, 21]. Вычисления выполнены для случая отражения дейтонов с начальной энергией $E_0 = 300$ эВ от никелевой мишени при различных углах падения — 0, 45, 60, 75°. Стоит отметить, что на рис. 3 представлены энергетические спектры отраженных дейтонов, суммарные по углу детектирования. Рисунок 3 демонстрирует абсолютно верное качественное описание динамики энергетических спектров отраженных дейтонов с из-

менением угла детектирования, а именно смещение максимума распределения в сторону меньших потерь энергии, уменьшение полуширины спектра и увеличение высоты распределения при энергиях, близких к E_0 , при увеличении угла падения относительно нормали к поверхности. Обсуждение количественного совпадения результатов сравнения проблемно, поскольку в энергетических спектрах, полученных по формуле (6), все параметры изменяются монотонно, чего не наблюдается в МК-результатах.

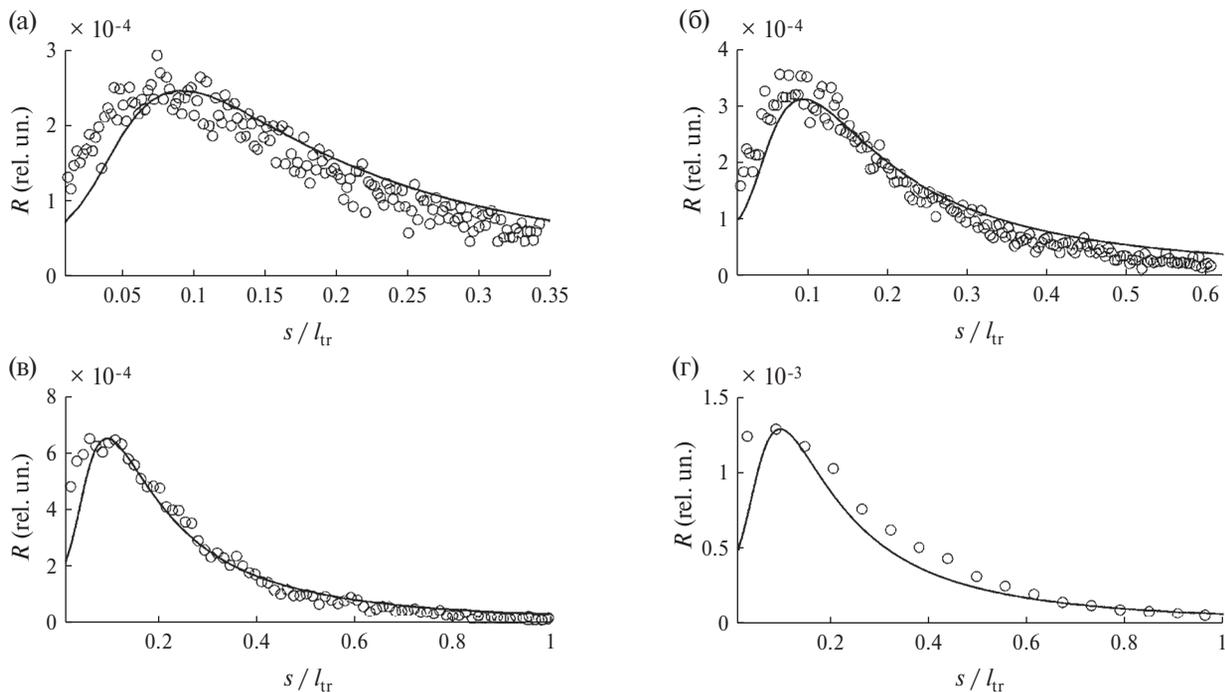


Рис. 1. Распределение отраженных протонов по длине пробега в мишени (Path Length Distribution Function) для Be (а); С (б); Ti (в); W (г). Пробег в мишени выражен в длинах транспортного пробега. Начальная энергия $E_0 = 10$ кэВ. Угол падения $\theta_0 = 80^\circ$. Угол рассеяния 30° . Линии — расчет по формуле (4); кружки — данные компьютерного моделирования.

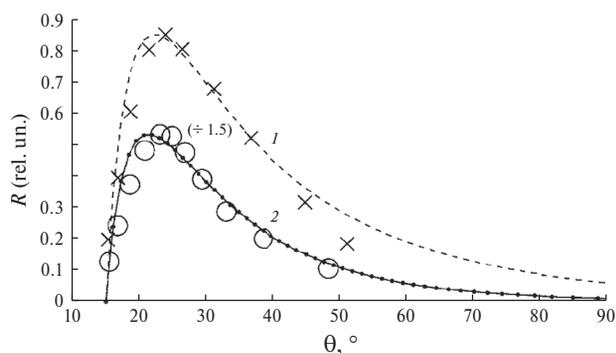


Рис. 2. Дифференциальные по углу отражения спектры дейтонов, отраженных от W. Начальная энергия: 1 — $E_0 = 1.5$ кэВ; 2 — 20 кэВ. Угол падения $\theta_0 = 75^\circ$. Линии — расчет по формуле (5); значки — эксперимент [18].

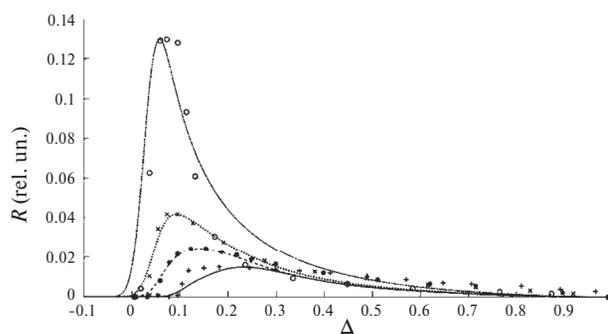


Рис. 3. Дифференциальные по энергии спектры дейтонов, отраженных от Ni. Начальная энергия $E_0 = 300$ эВ. Угол падения $\theta_0 = 0^\circ$ (сплошная линия; плюсики), 45° (штриховая линия; звездочки), 60° (пунктирная линия; крестики), 75° (штрихпунктирная линия; кружки). Линии — расчет по формуле (6); значки — данные компьютерного моделирования [19].

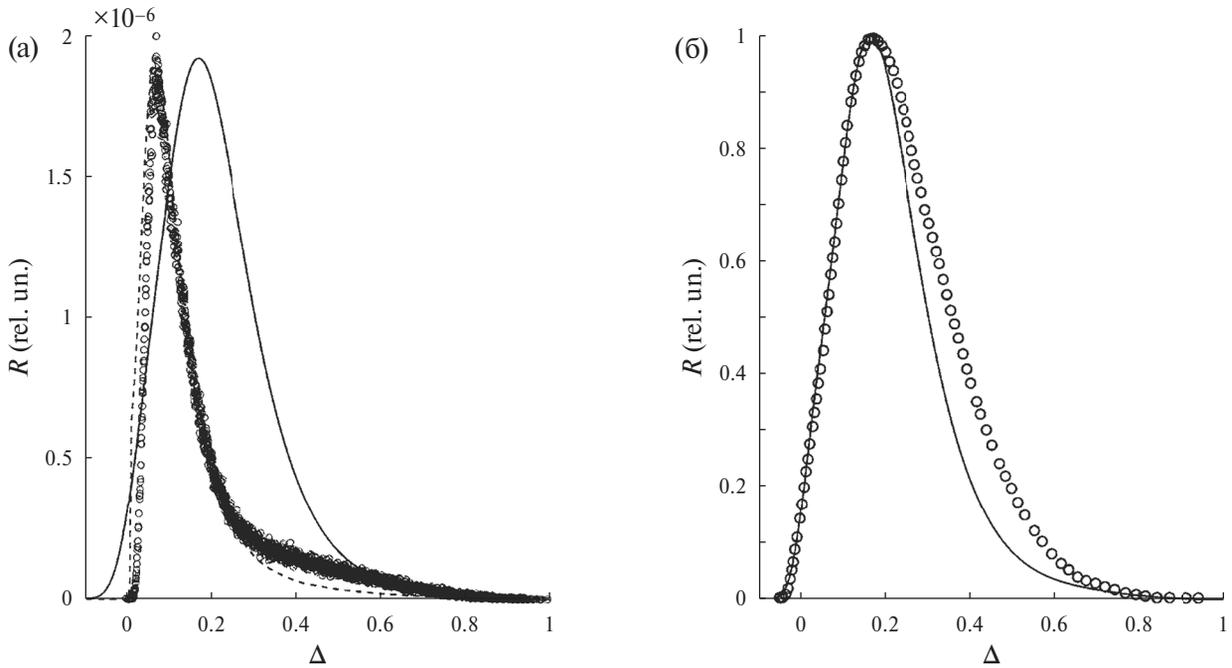


Рис. 4. Дифференциальные по энергии спектры протонов, отраженных от Au (а) и W (б). Начальная энергия $E_0 = 25$ кэВ. Угол падения $\theta_0 = 70^\circ$. Угол отражения $\theta = 110^\circ$: сплошная линия — расчет по формуле (6) на основе данных NIST [22]; штриховая линия — фитинг по формуле (6); кружки — эксперимент [20] (а); сплошная линия — расчет по формуле (6), параметры торможения определены на основе данных NIST; кружки — эксперимент [21] (б).

На рис. 4 представлены расчеты энергетических спектров протонов с начальной энергией $E_0 = 25$ кэВ, отраженных от золотой и вольфрамовой мишени при угле падения 70° и угле отражения 110° . Рисунок 4 демонстрирует удовлетворительное соответствие расчетов, выполненных по формуле (6), с экспериментальными данными для вольфрама. При выполнении расчетов использовались данные по средним потерям энергии протонов на единицу длины, взятые из данных NIST (National Institute of Standard and Technology) [22]. Для золота подобное соответствие не наблюдается, однако, удовлетворительное согласие данных получается, если величину $\bar{\epsilon}$ для золота уменьшить в 3.5 раза по сравнению с тем, что представлено в NIST.

Подобные результаты получены и в работе [23] при осуществлении МК моделирования энергетических спектров золота и вольфрама: близость величин зарядов Z_W и Z_{Au} приводит к слабой различимости энергетических спектров вольфрама и золота, однако экспериментально измеренные спектры различаются значительно [23]. Расходимость расчетных и экспериментальных данных по золоту связана с тем, что приближение Фоккера–Планка не справедливо для количественного описания спектров ионов с энергией ниже нескольких сотен кэВ на нуклон [5], здесь необходимо использовать метод парциальных интенсивностей.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Для решения задач отражения ионов в данной работе использован метод ОКГ [13, 14], применяемый для количественной расшифровки сигналов электронной спектроскопии.

Решение (4) подробно апробировано и выверено для задач электронного рассеяния [8, 9]. В настоящей работе апробация решения упругой задачи (формула (4)) для случая ионного рассеяния выполнена на основе сравнения с данными моделирования методом Монте-Карло. Вычисления с использованием формулы (4) обладают рядом особенностей, связанных с ограниченными литературными данными по дифференциальному сечению упругого рассеяния ионов — $\omega_e(\mu)$.

Для аналитического описания процессов электронного рассеяния имеются таблицы экспериментально выверенных сечений $\omega_e(\mu)$ [24, 25]. Приводятся данные по первым моментам упругого сечения: полному сечению σ_e и транспортному сечению упругого рассеяния σ_r [24, 25]. Верификация сечений $\omega_e(\mu)$ выполнена на основе измерения угловых распределений упруго отраженных от твердых тел электронов [26, 27].

Для экспериментальной проверки сечений упругого рассеяния ионов используются данные, полученные в экспериментах по рассеянию ионов на газовых мишенях [28], но не на твердотельных

образцах, несмотря на существование отработанной методики [26, 27]. В классической литературе по ионному рассеянию имеется множество данных по потенциалам взаимодействия ионов с атомами [1–3]. Наиболее популярным является потенциал Кг–С.

Для углов $\psi > \psi_{\min}$ (в первом борновском приближении $\psi_{\min} \approx \lambda_{DB} / a$; λ_{DB} — длина волны де Бройля налетающего иона; $a = 0.8853a_0(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ — радиус экранирования; a_0 — первый борковский радиус, Z_1 — заряд налетающего иона; Z_2 — заряд атома-мишени) процесс упругого рассеяния ионов допускает классическое описание [29, 30]. Для углов $0 < \psi < \psi_{\min}$ требуется последовательное квантово-механическое описание процесса упругого рассеяния.

В формуле (4) фигурируют два параметра, определяющие процесс упругого рассеяния ионов: средняя длина свободного пробега ионов между двумя актами упругого взаимодействия $l_{el} = (n\sigma_{el})^{-1}$, определяемая интегральным сечением упругого рассеяния $\sigma_{el} = 2\pi \int_{-1}^1 \omega_{el}(\mu) d\mu = \sigma_{tr} / (1 - x^1)$, и коэффициенты $(1 - x^1) = \frac{2\pi}{\sigma_{el}} \int_{-1}^1 \omega_{el}(\mu)(1 - P_l(\mu)) d\mu$, где μ — косинус угла рассеяния.

Данные о величинах σ_{el} и σ_{tr} при представлении дифференциальных сечений $\omega_{el}(\mu)$, как правило, не приводятся [31]. Численные данные по величине σ_{el} позволяют определить нормированное на единицу дифференциальное сечение упругого рассеяния $x_{el}(\mu) = \omega_{el}(\mu) / \sigma_{el}$, которое имеет физический смысл вероятности рассеяния иона на угол, косинус которого равен μ . Переход в уравнениях переноса к нормированному сечению $x_{el}(\mu)$ позволяет записать их через безразмерные переменные. Но для определения σ_{el} необходимо знать значения $\omega_{el}(\mu)$ на всем интервале углов рассеяния — от 0 до 180°.

Транспортное сечение $\sigma_{tr} = 2\pi \int_{-1}^1 \omega_{el}(\mu)(1 - P_l(\mu)) d\mu = \sigma_{el}(1 - x^1)$ определяет важный параметр — транспортную длину $l_{tr} = (n\sigma_{tr})^{-1}$ или расстояние, пройдя которое, моно направленный поток становится практически изотропным (средний квадрат угла рассеяния равен единице). Величина l_{tr} в свою очередь определяет величину $l_{el} = l_{tr}(1 - x^1)$. Величину σ_{tr} в данной работе определяли в соответствии с классической работой [30].

Коэффициенты $(1 - x^1)$ как в случае кулоновского потенциала, так и в случае обратно квадратичного потенциала, определяются параметром $\psi_{\min} \approx \lambda_{DB} / a$. Следуя работе Бете [32], в настоящей работе значение $\psi_{\min} \approx \lambda_{DB} / a$ выбрано в качестве первого приближе-

ния, уточнения выполняются, опираясь на формулу (21) работы [32].

Для описания неупругих потерь энергии ионов в твердом теле с энергией от сотни эВ до нескольких кэВ традиционно используется приближение Фоккера–Планка. В такой модели неупругие потери энергии ионов описываются распределением Гаусса

$$N(s, \Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{\varepsilon}^2 s}} e^{-\frac{(\Delta - \bar{\varepsilon}s)}{2\bar{\varepsilon}^2 s}}, \quad (7)$$

где $N(s, \Delta)$ — функция, описывающая неупругие потери энергии ионов; $\bar{\varepsilon} = \frac{1}{\sigma_{in}} \int_0^{E_0} \omega_{in}(\Delta) \Delta d\Delta$ — средние потери энергии ионов на единице длины; $\bar{\varepsilon}^2 = \frac{1}{\sigma_{in}} \int_0^{E_0} \omega_{in}(\Delta) \Delta^2 d\Delta$ — средний квадрат потерь энергии ионов на единице длины; σ_{in} — интегральное сечение неупругого рассеяния ионов в твердом теле; $s = z / l_{in}$; l_{in} — средняя длина свободного пробега ионов между двумя актами неупругого взаимодействия.

Значения величины $\bar{\varepsilon}$ для начальной энергии ионов, больших 1 кэВ, даны в таблицах [6]. Для энергий, находящихся в интервале от 1 кэВ до 10 кэВ, данные приведены с погрешностью, достигающей нескольких сотен процентов. Сведения по величине $\bar{\varepsilon}$ очень ограничены. В экспериментально наблюдаемом спектре фиксируется не $\bar{\varepsilon}^2$, а уширение $\bar{\varepsilon}^z = \bar{\varepsilon}^2 s + \bar{\varepsilon}^{Dop} + \bar{\varepsilon}^{Beam} + \bar{\varepsilon}^{App}$, где $\bar{\varepsilon}^{Dop}$ — уширение энергетического спектра в результате эффекта Доплера; $\bar{\varepsilon}^{Beam}$ — уширение зондирующего пучка частиц; $\bar{\varepsilon}^{App}$ — уширение, определяемое аппаратной функцией энергоанализатора. Выделить вклад величины $\bar{\varepsilon}^2$, которая усредняется по пробегам иона в мишени, невозможно.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе построена последовательная количественная теория, с единой точки зрения описывающая дифференциальные и интегральные характеристики отражения легких ионов от твердых тел. Представленная аналитическая теория основана на решении граничных задач для уравнения переноса методом инвариантного погружения в малоугловом приближении. Полученные аналитические решения (4)–(6) представлены в виде ряда по полиномам Лежандра и определяются двумя безразмерными параметрами — $\xi = R_0 / l_{el}$ и ψ_{\min} .

Полученные решения апробированы на основе сравнения с данными моделирования методом Монте-Карло и экспериментальными данными. Указано на основные параметры, в рамках данной

теории определяющие процессы упругого и неупругого рассеяния. Продемонстрировано существование проблемы в определении дифференциального сечения упругого и неупругого рассеяния ионов в твердом теле и связанные с этим ошибки в вычислении дифференциальных характеристик рассеяния легких ионов в твердом теле.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Исследование проведено в Национальном исследовательском университете МЭИ при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № FSWF-2023-0016.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985.
2. Mashkova E.S., Molchanov V.A. Medium energy ion reflection from solids. Amsterdam: North-Holland, 1985.
3. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М.: Атомиздат, 1980.
4. Готт Ю. В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978.
5. Калашиников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновение быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980.
6. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985.
7. Goebel D., Roth D., Bauer P. // Phys. Rev. A: Atomic Mol. Opt. Phys. 2013. V. 87. P. 062903. Doi: 10.1103/PhysRevA.87.062903.
8. Werner W.S.M. // Surface Interface Anal. 1995. V. 23. P. 737. DOI: 10.1002/sia.740231103.
9. Afanas'ev V.P., Fedorovich S. D., Lubenchenko A. V., Ryjov A. A., Esimov M. S. // Z. Phys. B. 1994. V. 96. P. 253. DOI: 10.1007/BF01313291.
10. Амбарцумян В.А., Мустель Э.Р., Северный А.Б., Соболев В.В. Теоретическая астрофизика. М.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1952.
11. Chandrasekhar S. Radiative transfer. New York: Dover Publications, 1960.
12. Petzold L. R. Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. Philadelphia: SIAM, 1998.
13. Afanas'ev V.P., Efremenko D. S., Kaplya P. S. // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 2016. V. 210. P. 16. DOI: 10.1016/j.elspec.2016.04.006.
14. Salvat-Pujol F., Werner W.S.M. // Phys. Rev. B: Condensed Matter. 2011. V. 83. P. 195416. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.195416.
15. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. М.: Наука, 1964.
16. Afanas'ev V.P., Lobanova L. G. // Russian Microelectronics. 2022. V. 51. P. 210. DOI: 10.1134/S1063739722040035.
17. Afanas'ev V.P., Lobanova L. G., Shulga V. I. // J. Surface Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2023. V. 17. P. 78. DOI: 10.1134/S1027451023010032.
18. Курнаев В.А., Тельковский В.Г. Экспериментальные данные по обратному рассеянию заряженных частиц: Тексты лекций. М.: МИФИ, 1982.
19. Langley R. A., Bohdansky J., Eckstein W., Mioduszewski P., Roth J., Taglauer E., Thomas E. W., Verbeek H., Wilson K. L. // Nuclear Fusion. 1984. V. 24. P. 9. DOI: 10.1088/0029-5515/24/S1/001.
20. Bulgadaryan D., Sinelnikov D., Kurnaev V., Efimov N., Borisyuk P., Lebedinskii Y. // Nuclear Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. 2019. V. 438. P. 54. DOI: 10.1016/j.nimb.2018.10.043.
21. Bulgadaryan D.G., Sinelnikov D. N., Efimov N. E., Kurnaev V. A. // Bull. Russian Academy Sci.: Phys. 2020. V. 84. P. 742. DOI: 10.3103/S1062873820060064.
22. Berger M.J., Coursey J.S., Zucker M.A., Chang J. NIST Standard Reference Database 124. Last Update to Data Content: July 2017. NISTIR4999. DOI: 10.18434/T4NC7P.
23. Bulgadaryan D., Kurnaev V., Sinelnikov D., Efimov N. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 941. P. 012022. DOI: 10.1088/1742-6596/941/1/012022.
24. Jablonski A., Salvat F., Powell C.J. Nist Electron Elastic Scattering Cross-Section Database e Version 3.2, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2010.
25. Salvat F., Jablonski A., Powell C. J. // Comput. Phys. Commun. 2005. V. 165. P. 157. DOI: 10.1016/j.cpc.2004.09.006.
26. Бронштейн И.М., Пронин В.П., Стожаров В.М. // Физика твердого тела. 1974. Т. 16. С. 2107.
27. Бронштейн И.М., Пронин В.П. // Физика твердого тела. 1975. Т. 17. С. 2086.
28. Gartker K., Hehl K. // Phys. Stat. Sol. B. 1979. V. 94. P. 231. DOI: 10.1002/pssb.2220940126.
29. Мотт Н., Мессу Г. Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969.
30. Firsov O.B. // Sov. Phys. JETP. 1958. V. 34. P. 308.
31. Zinoviev A.N., Babenko P. Yu., Nordlund K. // Nuclear Instr. Meth. B. 2021. V. 508. P. 10. DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001.
32. Bethe H.A. // Phys. Rev. 1953. V. 89. P. 1256. DOI: 10.1103/PhysRev.89.1256.

Analytical Theory of Reflection of Hydrogen Isotopes of Thermonuclear Energies from Construction Materials

© 2024 V. P. Afanas'ev^{a,*} and L. G. Lobanova^{a,**}

^a *Moscow Power Engineering Institute (National Research University), Moscow, 111250, Russia*

^{*} *e-mail: v.af@mail.ru*

^{**} *e-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru*

A theoretical description of reflection of hydrogen isotopes from a solid body based on data available in modern literature on the cross sections for elastic and inelastic scattering of ions is presented. The results of the analytical calculation are compared with the results of computer simulation and experimental data. The interaction of hydrogen isotopes with energies from 300 eV to 25 keV with materials in a wide range of atomic numbers, namely Be, C, Ti, Ni, W, Au, is considered. A critical review of existing analytical models of multiple scattering of light ions in solids is performed.

Keywords: reflection of light ions, invariant imbedding method, small-angle approximation, stopping power, differential and integral characteristics of light ion scattering