

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
«Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники»

Кафедра физики

**И.И. Ташлыкова-Бушкевич**

***МЕТОД РЕЗЕРФОРДОВСКОГО ОБРАТНОГО РАССЕЙЯНИЯ  
ПРИ АНАЛИЗЕ СОСТАВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ***

Учебно-методическое пособие  
к выполнению лабораторной работы по курсу «Физика»  
для студентов всех специальностей и форм обучения БГУИР

Минск 2003

УДК 546.621:620.183 (075.8)

ББК 34.2 я 73

Т 25

Рецензент:

ст. науч. сотр. НИИ ЯФ МГУ,  
канд. физ.-мат. наук В.С. Куликаускас

**Ташлыкова-Бушкевич И.И.**

Т 25

Метод резерфордовского обратного рассеяния при анализе состава твердых тел: Учебно-метод. пособие к выполнению лабораторной работы по курсу «Физика» для студ. всех спец. и форм обучения БГУИР / И.И. Ташлыкова-Бушкевич. – Мн: БГУИР, 2003. – 52 с.: ил.  
ISBN 985-444-579-8.

В учебно-методическом пособии метод резерфордовского обратного рассеяния адаптирован для элементного послойного анализа распределения компонентов в объеме твердых тел на примере алюминиевых сплавов. Описаны физические основы метода для анализа поверхности твердого тела. Изложены его область применения и методика анализа.

Предназначено для студентов всех специальностей и инженерно-технических работников, создающих и исследующих материалы для микро- и радиоэлектроники, а также изучающих поверхность изделий.

УДК 546.621:620.183 (075.8)

ББК 34.2 я 73

ISBN 985-444-579-8

© Ташлыкова-Бушкевич И.И., 2003  
© БГУИР, 2003

## Содержание

Введение .....	3
1. Историческая справка о методе резерфордовского обратного рассеяния .....	4
2. Физические основы метода РОР для анализа поверхности твердого тела .....	5
3. Типы энергетических спектров обратного рассеяния ускоренных ионов.....	9
4. Проведение количественного послойного элементного анализа состава фольг сплавов алюминия на примере сплава Al-Ge .....	10
5. Анализ экспериментальных спектров с помощью резерфордовского обратного рассеяния .....	16
6. Применение метода РОР для анализа модифицированных сплавов.....	21
7. Расчет погрешности вычисления относительной концентрации компонентов сплава методом РОР.....	22
8. Схема экспериментального оборудования .....	24
9. Исследование структуры и состава алюминиевых сплавов методом РОР с помощью компьютерного моделирования .....	25
10. Использование пакета Origin при проведении исследований методом РОР.....	28
10.1. Назначение и возможности пакета Origin. Система меню. Работа с файлами.....	29
10.2. Основные приемы работы в Origin при обработке спектров РОР	35
11. Задания к выполнению лабораторной работы.....	39
12. Контрольные вопросы.....	41
Литература.....	42
Приложение.....	43

## Введение

Необходимость в настоящее время практической подготовки молодых специалистов требует освоения выпускниками БГУИР современных методов исследования в рамках лабораторных практикумов как составной части учебного процесса. Актуальность применения в различных областях физики и техники ядерно-физического метода Резерфордовского обратного рассеяния (РОР) вызывает потребность изучения студентами физических основ данного метода, а также приобретения ими опыта и знаний, нужных для понимания, обработки и анализа результатов [1]. Данным методом можно проводить анализ состава, размеров и иных параметров тонких пленок, слоистых структур, фольг и поверхностных слоев массивных образцов.

В настоящем учебно-методическом пособии метод РОР, основанный на закономерностях взаимодействия ускоренных частиц с ядром атома, установленных Э. Резерфордом, адаптирован для элементного послойного анализа распределения компонентов в объеме твердых тел на примере алюминиевых сплавов в лабораторном практикуме «Элементы квантовой теории» по курсу «Физика» [2]. В качестве объекта исследования предлагаются фольги сплава Al-Ge толщиной 30–100 мкм, полученные методом сверхбыстрой закалки из расплава, при скорости охлаждения расплава  $10^6$  К/с.

В последние десятилетия методы сверхбыстрой закалки из расплава активно используются с целью получения новых перспективных материалов, в том числе алюминиевых сплавов, поскольку приводят из-за высоких степеней переохлаждения к таким желаемым изменениям, как расширение области растворимости элементов сплава в  $\alpha$ -Al твердой фазе, уменьшение размера зерен, уменьшение числа или размера, либо одновременно числа и размера выделений, образование новых неравновесных фаз в сплавах, получение аморфных структур. Применив впервые метод РОР для послойного анализа распределения легирующих элементов в быстрозатвердевших фольгах сплавов Al-X (X = Fe, Cu, Sb, Ge), получили оригинальные результаты о неравномерном распределении легирующих элементов, а также примесей по исследуемой глубине фольг [3–5].

Практические навыки студентов, приобретенные при использовании метода РОР в процессе выполнения данной лабораторной работы, являются универсальными. Они применимы для исследования состава и структуры любых твердых тел.

## Цели лабораторной работы

1. Освоение основ метода РОР.
2. Исследование композиционного состава приповерхностной области алюминиевых сплавов.
3. Изучение принципа действия и схемы экспериментального оборудования, применяемого при РОР.

Оборудование – энергетические спектры обратного рассеяния ионов гелия от фольг сплавов алюминия, представленные на бумаге или в цифровом виде.

### 1. Историческая справка о методе резерфордовского обратного рассеяния

Ядерно-физический метод РОР получил широкое применение на практике с середины 60-х годов XX века. Эффективность метода обусловлена его использованием при решении фундаментальных и прикладных задач физики конденсированного состояния, в том числе при определении элементного состава модифицированных твердых тел, изучении профилей распределения по глубине растворенных элементов, а также определении толщин слоев в многослойных образцах и процессов взаимодиффузии в этих слоях.

В методе РОР используется упругое рассеяние между налетающей частицей ( $^1\text{H}^+$ ,  $^2\text{d}^+$ ,  $^3\text{He}^+$ ,  $^4\text{He}^+$ ) и ядром мишени, вызываемое при низких энергиях ускоренных частиц кулоновским взаимодействием. Интерпретируя в 1911 г. опыты по рассеянию  $\alpha$ -частиц при прохождении их через вещество (тонкие металлические пластинки) на большие углы ( $\theta > 90^\circ$ ), английский физик Э. Резерфорд\* открыл формулу для эффективного поперечного рассеяния нерелятивистских заряженных точечных частиц, взаимодействующих по закону Кулона [6, 7]. Резерфорд пришел к выводу, что почти вся масса атома сконцентрирована в малом положительно заряженном ядре. Данное открытие определило современные представления о строении атома и легло в основу метода РОР, который позднее был разработан Пауэрсом и Бёгом.

В настоящее время развитие и освоение метода РОР обусловлены тем, что многие исследовательские материаловедческие центры имеют ускорители заряженных частиц, а также доступностью высококачественной регистрирую-

---

\* Эрнест Резерфорд (1871–1937) – английский физик. Все его основные работы посвящены вопросам атомного ядра. В 1908 г. ему была присуждена Нобелевская премия: он первым осуществил искусственное превращение атомов одних элементов в другие, объясняя явление радиоактивности как спонтанное разложение атомов вещества. На основе его планетарной модели атома (1911 г.) Н. Бор в 1913 г. создал теорию атома и спектров. С 1903 г. Резерфорд являлся членом Лондонского королевского общества. За научные заслуги в 1931 г. он получил титул лорда Нельсона. Резерфорд был избран членом большинства академий мира, в том числе почетным членом АН СССР. У него работали известные советские физики П.Л. Капица и Ю.Б. Харитон.

щей аппаратуры и современной электронной техники, включая быстродействующие персональные компьютеры (ПК). Количественная интерпретация данных об обратном рассеянии ионов достаточно проста, анализ образцов не требует их специальной обработки. Метод РОР особо чувствителен к тяжелым элементам, вследствие чего экспериментально можно изучать малые концентрации легирующих элементов в сплавах алюминия, масса которых выше массы атома матрицы-алюминия. В дополнении к этому данный метод является неразрушающим, поэтому на одном и том же образце возможно проведение исследований с применением других методов.

## 2. Физические основы метода РОР для анализа поверхности твердого тела

В основе метода РОР лежат физические законы взаимодействия налетающей частицы и атома мишени: передача энергии и закон сохранения импульса при процессах упругих взаимодействий двух тел. Когда энергия налетающей частицы  $E_0$  намного больше энергии связи атомов в твердых телах (около 10 эВ), то атом мишени можно считать изолированным. Условие отсутствия ядерных реакций и резонансов определяет верхний предел энергий ускоренных частиц в экспериментах. Поэтому для анализа применяются протоны и ионы гелия с энергией в области от нескольких сотен килоэлектронвольт до 2–3 МэВ. Энергия рассеянных частиц зависит от массы ядра, с которым произошло столкновение, благодаря чему метод позволяет проводить анализ элементного состава вещества. Из-за энергетических потерь, испытываемых обратно рассеянными анализирующими частицами при прохождении слоя изучаемого вещества до и после рассеяния, метод является чувствительным и к глубине, на которой находятся атомы того или иного элемента.

Глубиной анализа метода РОР называется максимальная глубина в образце, на которой возможно исследование его состава, определяемая пробегом ускоренных частиц. Глубина анализа при использовании быстрых протонов и ионов гелия составляет 1–10 мкм при разрешении не хуже 0,03–0,04 мкм. Она зависит от начальной энергии ионов, тормозной способности вещества, геометрии рассеяния и массы атомов определяемого элемента.

Рассмотрим модель упругого столкновения иона со свободным атомом. Ион массой  $M_1$ , имеющий скорость  $v$  и энергию  $E_0$  ( $E_0 = M_1 v^2 / 2$ ), налетает на покоящийся атом мишени массой  $M_2$  под углом влета  $\theta_1 = 0^\circ$  относительно нормали к ее поверхности (рис. 1). Заметим, что рассматриваемая геометрия, когда  $\theta_1 = 0$ , наиболее применима на практике при постановке экспериментов с помощью метода РОР и упрощает все математические расчеты.

Изображенные на рис. 1 углы  $\theta_2$  и  $\theta$  называются углами вылета и рассеяния иона. После столкновения скорость налетающего иона будет  $v_1$ , значение энергии  $E_1$  будет определяться углом рассеяния  $\theta$  ( $\theta = \pi - \theta_2$ ). Скорость атома мишени и его энергия будут соответственно равны  $v^2$  и  $E_2$ . Значение энергии

определяется углом отдачи  $\phi$ . Углы  $\theta$  и  $\phi$  отсчитываются от направления начального движения налетающей частицы и всегда положительны.  $M_1$  и  $M_2$  измеряются обычно в атомных единицах массы (а.е.м.).

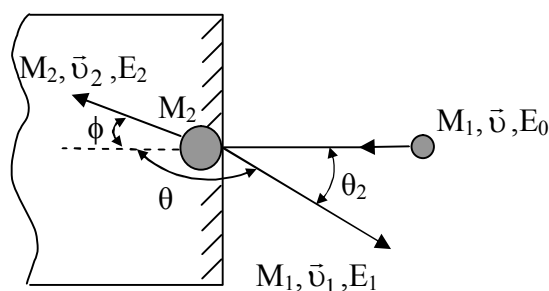


Рис. 1. Схема упругого соударения иона массой  $M_1$  с атомом на поверхности образца массой  $M_2$ :

$\theta$  – угол рассеяния;  $\theta_2$  – угол вылета;  $\phi$  – угол отдачи

Законы сохранения энергии и компонентов импульса, параллельных и перпендикулярных направлению движения налетающего иона, при упругом столкновении иона и атома мишени выражаются следующими уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} M_1 u^2 &= \frac{1}{2} M_1 u_1^2 + \frac{1}{2} M_2 u_2^2, \\ M_1 u &= M_1 u_1 \cos \theta + M_2 u_2 \cos \phi, \\ 0 &= M_1 u_1 \sin \theta - M_2 u_2 \sin \phi. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Отсюда отношение скоростей налетающего иона и атома мишени:

$$\frac{u_1}{u} = \frac{\left[ \pm (M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta \right]}{(M_2 + M_1)}.$$

Поэтому отношение энергий иона в случае  $M_1 < M_2$ , когда в правой части последнего уравнения имеет место знак плюс, определяется выражением [7–9]:

$$\frac{E_1}{E_0} = \left[ \frac{\left[ 1 - (M_1/M_2)^2 \sin^2 \theta \right]^{1/2} + (M_1/M_2) \cos \theta}{1 + M_1/M_2} \right]^2. \quad (2)$$

Здесь

$$E_1/E_0 = K_{M_2}, \quad (3)$$

где  $K_{M_2}$  – это кинематический фактор (К-фактор), определяющий долю энергии, переданной ионом атому твердого тела. Используя его, находят значение  $E_1 = K_{M_2} \cdot E_0$  и определяют элементный состав поверхности мишени. В соответствии с формулой (3) величина  $K_{M_2}$  зависит только от отношения масс иона и атома мишени  $M_1/M_2$  и от угла рассеяния  $\theta$ . Под углом  $\theta$  к направлению первоначального движения ионов детектор регистрирует число и энергию рассеянных частиц. Расчетные значения  $K_{M_i}$  для разных элементов  $i$  и условий представлены в соответствующих таблицах справочной литературы (табл. 2 [8]).

Так как на практике мишень может содержать атомы отличающихся по массам ( $M_2$  и  $M_3$ ) элементов, то избирательность метода характеризуется массовым разрешением  $\Delta M_2/M_2$ , где  $\Delta M_2$  – минимальная разница в массе атомов соседних элементов, которые еще можно различить по спектру. Поэтому для разрешения элементов важно получить наибольшую разницу между значениями энергии анализирующих частиц  $\Delta E_1$ , рассеявшихся на этих атомах [8]. Такое условие выполняется при максимальных углах  $\theta$ , когда  $\Delta E_1 = (K_{M_3} - K_{M_2}) \cdot E_0 = \Delta K_{M_i} \cdot E_0$ . Значения  $\theta$  ограничиваются конечным размером детектора рассеянных частиц и поэтому выбираются близкими к  $160^\circ$  или  $170^\circ$ . Величина  $\Delta K_{M_i}$  определяет разрешение по массе элементов мишени: чем больше  $\Delta K_{M_i}$ , тем больше энергетическая разница  $\Delta E_1$ . Значение  $\Delta E_1$ , как видно из приведенного выше выражения, зависит также от  $E_0$ . Поэтому для анализа близких по массам элементов целесообразно использовать ускоренные частицы с большей энергией  $E_0$ . Однако следует учитывать, что поскольку любая детектирующая система имеет конечное разрешение по энергии  $\Delta E_{\text{дет}}$ , то при  $\Delta E_1 < \Delta E_{\text{дет}}$  разница между энергиями частиц, рассеянных атомами двух масс, приборами не регистрируется.

Таким образом, чувствительность метода РОР зависит от массы, порядкового номера, как это обосновано ниже, и глубины залегания атомов элемента, определяемого в матрице. Различие в энергии ионов гелия и протонов, испытавших обратное рассеяние на атомах заданной массы, увеличивается с ростом их массы  $M_2$ . На рис. 2 графически изображены значения кинематического фактора атомов с массой до 200 а.е.м. при взаимодействии с ними ускоренных протонов (кривая 1) и ионов гелия (кривая 2). Использование этих графиков полезно уже на стадии планирования эксперимента при выборе типа ускоренных ионов для проведения анализа.

Обнаружение примеси, кроме разрешения по энергии, определяется количеством этой примеси и, следовательно, связано с величиной сигнала примеси на спектре обратного рассеяния (ОР), который непосредственно измеряется как выход обратно рассеянных ионов. Когда энергия падающих ионов фиксирована и детектор регистрирует ионы, рассеянные на угол  $\theta$  (рис. 3), то величина сигнала  $i$ -го элемента мишени определяется как интеграл площади  $A_i$  под пиком, например, заштрихованная область в районе энергии  $K_{M_i} \cdot E_0$  (рис. 4), и вычисляется так:

$$A_i = q\Omega\sigma_i(Nt)_i, \quad (4)$$

где  $A_i$  – полное число импульсов, образующих пик, соответствующее интегральному количеству рассеивающих атомов  $i$  в спектре;  $(Nt)_i$  – интегральное количество элемента  $i$  в анализируемом слое (слоевая концентрация атомов сорта  $i$ ), атом/см<sup>2</sup>;  $q$  – полное число анализирующих ионов, попавших на мишень за время снятия спектра;  $\sigma_i$  – среднее дифференциальное сечение рассеяния анализирующих частиц на атомах в детектор с телесным углом  $\Omega$ , см<sup>2</sup>·ср<sup>-1</sup>.



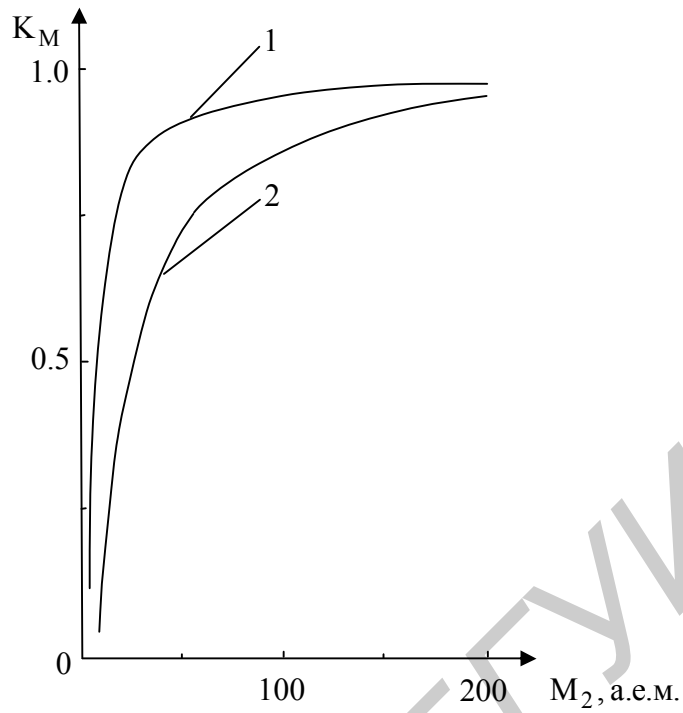


Рис. 2. Зависимость кинематического фактора от массы атомов мишени при использовании пучков протонов  ${}^1\text{H}^+$  (1), ионов гелия  ${}^4\text{He}^+$  (2). Угол рассеяния  $\theta = 160^\circ$

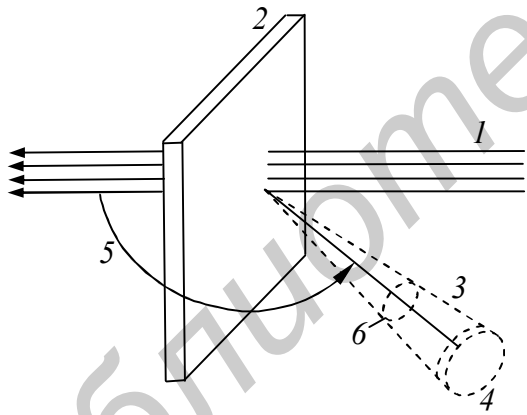
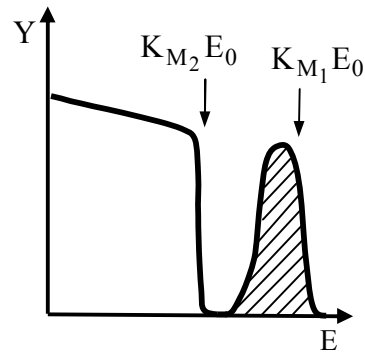


Рис. 3. Упрощенная схема эксперимента по рассеянию, иллюстрирующая понятие дифференциального сечения рассеяния  $d\sigma/d\Omega$ :  
 1 – узкий падающий пучок частиц; 2 – достаточно тонкая мишень; 3 – рассеянные частицы; 4 – детектор; 5 – угол рассеяния  $\theta$ ;



6 – телесный угол  $d\Omega$  захвата детектора

Рис. 4. Спектр ОР частиц от образца из толстой подложки, содержащей на поверхности пленку:  
 $K_{M_i}$  – кинематический фактор элемента  $i$  мишени ( $M_1 > M_2$ )

Среднее дифференциальное сечение  $\sigma$  определяется по формуле

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega,$$

где дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma/d\Omega$  – это отношение числа частиц, рассеянных в единичный телесный угол  $d\Omega$ , к числу частиц, налетающих на единицу поверхности мишени [7]. Детектор регистрирует только частицы, рассеянные в пределах телесного угла  $d\Omega$ , определяемого входным отверстием детектора (см. рис. 3).

Дифференциальное сечение рассеяния зависит от ряда факторов, в частности, оно пропорционально квадрату зарядового числа  $Z_1^2$  анализирующего иона и  $Z_2^2$  атома мишени. Поэтому при одинаковых экспериментальных условиях выход ОР для ионов гелия в четыре раза больше, чем для протонов. При использовании одинаковых ионов, например  $^3\text{He}^+$  и  $^4\text{He}^+$ , выход ОР для тяжелых ионов выше, чем для легких. Также  $\sigma_i$  сильно уменьшается с увеличением угла рассеяния ( $\sim \sin^{-4}\theta$ ) и увеличивается с уменьшением энергии пучка ( $\sim E^{-2}$ ). Дифференциальное сечение рассеяния ионов рассчитывается по формулам [9] или берется из соответствующей таблицы [11].

Возможность обнаружения небольших количеств атомов примеси на поверхности или в приповерхностных слоях образца зависит от тока первичного ионного пучка, телесного угла детектора, дифференциального сечения рассеяния ионов на заданный угол. Квадратичная зависимость дифференциального сечения рассеяния от порядкового номера рассеивающего атома приводит к тому, что метод РОР оказывается мало эффективным при анализе легких примесей в тяжелых матрицах. Так как выход обратного рассеяния ионов возрастает пропорционально  $Z_2^2$ , то наибольшая чувствительность метода достигается, когда масса атомов определяемого элемента намного больше, чем масса других элементов, входящих в состав мишени.

### **3. Типы энергетических спектров обратного рассеяния ускоренных ионов**

Форма энергетического спектра ОР зависит от элементного состава и структуры образца. Классифицировать анализируемые образцы и энергетические спектры, полученные от них, можно по четырем наиболее распространенным типам [12]:

1. *Тонкопленочные образцы* с равномерным распределением атомов по толщине. Образец может состоять из одиночной пленки или набора пленок различного состава. Соответственно аппаратурные спектры содержат одиночный сигнал или несколько сигналов, принадлежащих атомам различных химических элементов (рис. 5, а). Если массы атомов, входящих в состав пленок, различаются несущественно между собой, происходит наложение сигналов (рис. 5, б).

2. *Массивные образцы*, в состав которых входят атомы одного или нескольких химических элементов, равномерно распределенных по глубине. Соответствующий спектр содержит одну или несколько ступенек (рис. 5, в). Высота каждой ступеньки зависит от концентрации атомов элемента.

3. *Образцы из толстой подложки*, содержащей на поверхности пленки

различного состава с равномерным распределением атомов по толщине. Спектр от этих образцов состоит из сплошного спектра атомов подложки и отдельных пиков, принадлежащих атомам пленки. Если масса атомов пленки меньше, чем в подложке, пики, соответствующие атомам пленки, накладываются на спектр атомов подложки (рис. 5, г). Когда атомы пленки тяжелее атомов подложки, пики, соответствующие атомам пленки, отделены от спектра подложки и находятся в области больших энергий рассеянных ионов (см. рис. 4).

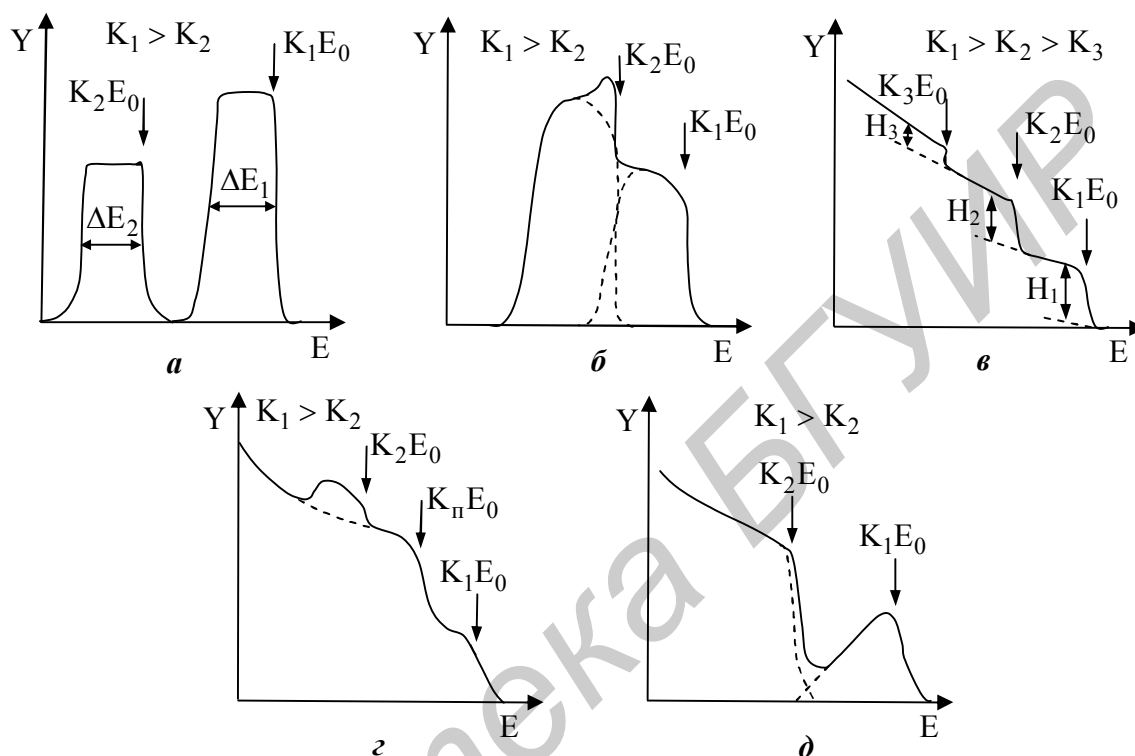


Рис. 5. Основные типы спектров ОР анализирующих ионов:  
 $K_n$  – кинематический фактор элементов подложки;  
 $\Delta E_i$  – ширина линии от элемента  $i$  на полувысоте сигнала

4. *Образцы, состав которых изменяется по глубине.* К таким образцам относятся массивные образцы с неоднородной концентрацией по глубине атомов примеси и тонкопленочные структуры, подвергнутые различным воздействиям: отжигу, электронному и ионному облучению. Характерный спектр таких образцов представлен на рис. 5, д. Анализ этой группы образцов наиболее сложен и требует использования специальных методов обработки экспериментальных спектров.

#### 4. Проведение количественного послойного элементного анализа состава фольг сплавов алюминия на примере сплава Al-Ge

Рассмотрим принципиальные моменты применения метода POP при ана-

лизе быстрозатвердевших фольг сплавов Al-Ge. Схема получения спектра ОР показана на рис. 6. Поскольку в фольгах определяются малые количества легирующих элементов, то в данном случае практичнее применять пучок ионов гелия, выход рассеяния которых в четыре раза выше, чем при использовании для анализа пучка протонов, поскольку  $(Z_{\text{He}}/Z_{\text{H}})^2 = 4$ .

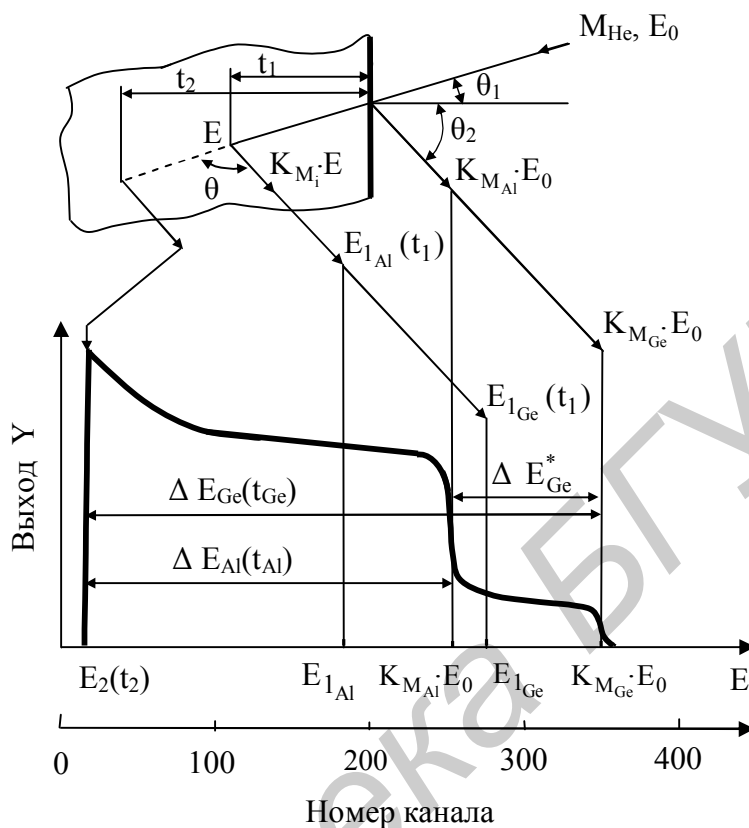


Рис. 6. Схема получения спектра ОР ионов гелия от фольги сплава Al-Ge

Итак, пучок ускоренных ионов гелия с массой  $M_{\text{He}}$  и энергией  $E_0$  направляется под углом влета  $\theta_1$  на поверхность фольги сплава Al-Ge, массы и порядковые номера компонентов которого  $M_i$  и  $Z_2^i$  ( $i = \text{Al}, \text{Ge}$ ). Часть ионов в пучке будет отражаться от атомов на поверхности с энергией  $K_{M_{\text{Al}}} \cdot E_0$  и  $K_{M_{\text{Ge}}} \cdot E_0$ , а часть пройдет на некоторую глубину, например  $t_1$ , рассеиваясь затем на атомах с энергией  $E_{1_{\text{Al}}}$  и  $E_{1_{\text{Ge}}}$ , как показано на схеме процесса рассеяния на рис. 6. Детектор измеряет энергетический спектр частиц, рассеянных на угол  $\theta$  на различной глубине мишени. Возрастание выхода рассеянных частиц с глубиной мишени в низкоэнергетической части спектра ОР в основном связано с ростом дифференциального сечения рассеяния ионов при уменьшении энергии рассеявшихся анализирующих частиц ( $\sigma_i \sim E^{-2}$ ) [10]. Граница сигнала от алюминия в левой части спектра свидетельствует не о том, что ионы «простреливают» всю фольгу, а о том, что при прохождении расстояния, равного глубине анализа метода на данном образце, потери энергии ионов становятся настолько велики, что рассеянные ионы не возвращаются в детектор, поглощаясь в образце.

Общая картина рассеянных ионов гелия от фольги сплава Al-Ge с равномерным распределением легирующей добавки по глубине представляет собой спектр ОР, изображенный схематически на рис. 6. В нашем случае по оси абсцисс спектра заданы номера каналов  $n_i$ , которые можно перевести в шкалу энергии, используя формулу

$$E_i = n_i \cdot \delta E + E^0, \quad (5)$$

где  $\delta E$  – энергетическая ширина одного канала;  $E^0$  – энергия в нулевом канале. Номер канала  $n_i$ , а также значение энергии  $E_i$  сигнала от  $i$ -го элемента определяются на полувысоте его выхода на поверхности (правый край соответствующего сигнала). Атомная масса элемента  $i$  образца устанавливается после определения с помощью формулы (3) экспериментального значения  $K_{M_i}$  сигнала из спектра ОР и сравнения полученного значения кинематического фактора  $K_{M_i}$  с табличным значением (прил., табл. 2), соответствующим тому или иному элементу.

Сигнал от алюминия, равномерно распределенного в образце, имеет вид ступеньки с началом в области энергии  $K_{M_{Al}} \cdot E_0$ , а от легирующего элемента германия – ступеньки с началом в области энергии  $K_{M_{Ge}} \cdot E_0$ , которые отмечены на шкале энергий. Ступенька сигнала от Ge располагается в высокоэнергетической области спектра потому, что  $M_{Ge} > M_{Al}$ .

Перевод энергетической шкалы на спектрах ОР (ось абсцисс) в шкалу глубин позволяет оценить толщины слоев, в которых детектируются атомы компонентов сплава (Al и Ge). В основе перевода лежит универсальное выражение

$$\Delta E_i = [\bar{S}]_i^{Al-Ge} \cdot t_i = [\bar{\varepsilon}]_i^{Al-Ge} \cdot N_i \cdot t_i, \quad (6)$$

где  $[\bar{S}]_i^{Al-Ge}$  – фактор энергетических потерь при ОР;  $[\bar{\varepsilon}]_i^{Al-Ge}$  – фактор тормозного сечения, с применением которого можно рассчитать условные потери энергии иона гелия на одном атоме вещества  $i$ ;  $N_i$  – атомная плотность вещества  $i$  (прил., табл. 1). Разность энергий ускоренных частиц, испытавших ОР на поверхности и на максимально доступной для анализа глубине  $t_2$  образца, определяет энергетическую ширину спектра и находится с помощью уравнения (6).

Разница в энергии ионов гелия, рассеянных от атомов  $M_i$  на поверхности ( $K_{M_i} \cdot E_0$ ) и на максимально детектируемой глубине  $t_2$  ( $E_2(t_2)$ ), вычисляется как  $\Delta E_i = K_{M_i} \cdot E_0 - E_2(t_2)$ . Значения  $\Delta E_{Al}$  и  $\Delta E_{Ge}$  берутся из спектра ОР на рис. 6, где в действительности  $\Delta E_{Ge}(t_{Ge}) = \Delta E_{Ge}^* + \Delta E_{Al}(t_{Al})$ . Сигнал от алюминия накладывается на сигнал от германия потому, что германий, как и алюминий, распределен по всему объему фольги.

Фактор тормозного сечения  $[\bar{\varepsilon}]_i^{Al-Ge}$  при рассеянии на атомах  $i$ -го компонента (Al или Ge) в сплаве Al-Ge при угле влета ионов гелия в образец  $\theta_1 = 0^\circ$  рассчитывается как

$$[\bar{\varepsilon}]_i^{\text{Al-Ge}} = K_{M_i} \cdot \varepsilon^{\text{Al-Ge}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^i) + \frac{1}{|\cos \theta|} \varepsilon^{\text{Al-Ge}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i), \quad (7)$$

$$\varepsilon^i = \frac{1}{N_i} \frac{dE}{dx},$$

где  $\varepsilon^i$  – тормозное сечение для ионов гелия на атомах чистого  $i$ -го вещества, измеряемое в эВ/(ат·см<sup>-2</sup>);  $\bar{E}_{\text{ВХ}}^i$  и  $\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i$  – средние значения энергии частиц при входе в поверхность образца и при выходе с глубины  $t$  мишени соответственно. В приближении средней энергии:

$$\bar{E}_{\text{ВХ}}^i \approx E_0 - \frac{\Delta E_1}{4} \quad \text{и} \quad \bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i \approx E_{1i} + \frac{\Delta E_1}{4}, \quad (8)$$

$$E_{1i} = K_{M_i} \cdot E_0 - \Delta E_1,$$

где  $\Delta E_1$  берется в первом приближении в интервале до ~100 кэВ.

Необходимо отметить, что при исследовании приповерхностного слоя образца толщиной до 0,5 мкм обычно используют приближение поверхностной энергии, когда в выражении (8) пренебрегают величиной  $\Delta E_1$ , и тогда

$$\bar{E}_{\text{ВХ}}^i \approx E_0; \quad \bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i \approx K_{M_i} \cdot E_0. \quad (9)$$

Тормозное сечение  $\varepsilon$  является в некотором смысле абстрактным понятием и вводится как потери энергии частицей на одном изолированном атоме, находящемся на 1 см<sup>2</sup> поверхности мишени. В свою очередь, тормозная способность  $S$  вещества характеризуется средними удельными потерями энергии ионов и определяется через сечение торможения  $\varepsilon(E)$ :

$$S(E) = \varepsilon(E) \cdot N = S_{\text{яд}}(E) + S_{\text{эл}}(E),$$

где  $S_{\text{яд}}(E)$  и  $S_{\text{эл}}(E)$  – энергетические потери иона при движении в твердом теле при ядерных (упругих) и электронных (неупругих) столкновениях соответственно.

Относительный вклад этих механизмов в общие энергетические потери зависит от энергии и атомного номера ускоренного иона: при малых энергиях и больших  $Z_1$  преобладает ядерное торможение, тогда как при больших  $E_0$  и малых  $Z_1$  – электронное. Например, при энергиях, обычно используемых в спектрометрии обратного рассеяния,  $S_{\text{яд}}(E) \ll S_{\text{эл}}(E)$ .

Тормозное сечение атома в сплаве смешанного состава  $\text{Al}_m\text{Ge}_n$ , где  $m$  и  $n$  – относительные концентрации компонентов сплава, выражается согласно принципу аддитивности (правило Брэгга):

$$\varepsilon^{\text{Al}_m\text{Ge}_n} = m\varepsilon^{\text{Al}} + n\varepsilon^{\text{Ge}}, \quad (10)$$

где  $\varepsilon^{\text{Al}}$  – тормозное сечение в чистом алюминии, а  $\varepsilon^{\text{Ge}}$  – в чистом германии.

Для нахождения тормозного сечения  $\varepsilon^i$  строится график зависимости  $\varepsilon^i(E)$  от энергии анализирующих частиц для данного элемента  $i$  по существующим таблицам (прил., табл. 3 [11]). График зависимости тормозного сечения  $\varepsilon^i$  в чистом веществе  $i$  от энергии ионов  $E$  имеет вид, показанный на рис. 7. Энергия иона, достигшего глубины  $t_1$  в приповерхностной области, определяется как  $E_{1i}$ . Потери энергии иона, проникающего на глубину  $t_1$ , составляют  $\Delta E_1$ . На

глубине  $t_1$  образца ион с энергией  $E_{1i}$  испытывает упругое рассеяние на атоме с массой  $M_i$ , рассеиваясь на угол  $\theta$ , в результате чего энергия иона становится равной  $K_{M_i} \cdot E_1$ . Энергетические потери иона при его движении с глубины  $t_1$  к поверхности образца составляют величину  $\Delta E_2$ , в общем случае не совпадающую с  $\Delta E_1$ . Поэтому детектор регистрирует частицу, рассеянную с глубины  $t_1$ , с энергией  $E_{2i}$ :

$$E_{2i} = K_{M_i} \cdot E_1 - \Delta E_2$$

Заметим, что здесь  $E_{2i}$  – это энергия ионов, попадающих в детектор после обратного рассеяния на глубине  $t_1$ . Она зависит от двух параметров – массы рассеивающего атома  $M_i$  и глубины  $t_1$ , на которой произошло рассеяние, а также от композиционного состава образца.

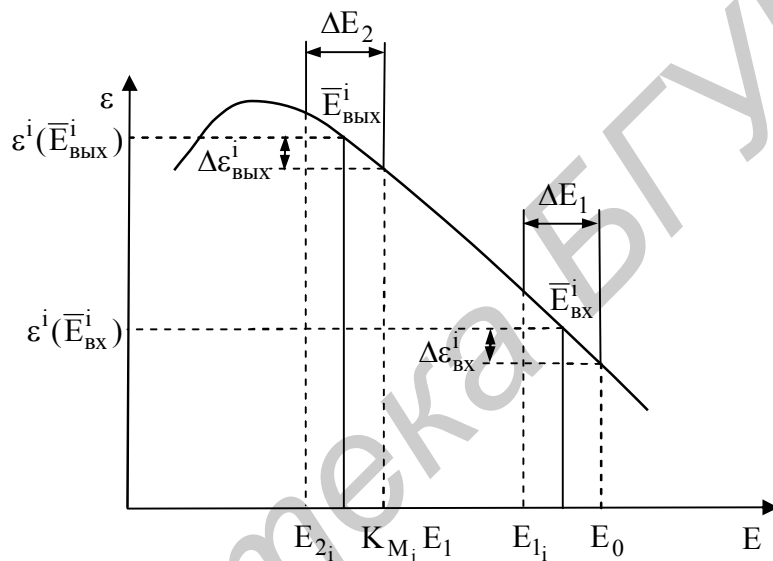


Рис. 7. Общий вид зависимости тормозного сечения  $\epsilon^i$  в чистом веществе  $i$  от энергии анализирующих частиц  $E$  [9]:  
 $\Delta E_1$  и  $\Delta E_2$  – энергетические потери частиц до столкновения и на выходе из мишени после рассеяния соответственно

В качестве примера на рис. 8 показаны зависимости тормозных сечений  $\epsilon^{Al}$  и  $\epsilon^{Ge}$  от энергии  $E$  анализирующих частиц ионов гелия. Как видно, тормозное сечение для ионов гелия в германии на ~40 % выше, чем при прохождении ионов гелия в алюминии.

Разрешение по глубине характеризует возможность использования метода РОР для послойного анализа. Если известно энергетическое разрешение детектирующей системы  $\Delta E_{дет}$ , которое при небольших глубинах анализа и в нетяжелых мишенях считается равным энергетическому разрешению детектора [9], то глубинное разрешение метода в материале  $i$  определяется из выражения

$$\Delta t_{дет} = \Delta E_{дет} / (N_i \cdot [\bar{\epsilon}]_i^{Al-Ge}), \quad (11)$$

где  $[\bar{\epsilon}]_i^{Al-Ge}$  вычисляется, используя уравнения (7) и (10). Из формулы (11) сле-

дует, что глубинное разрешение метода в мишенях с большей тормозной способностью лучше, то есть  $\Delta t_{\text{дет}}$  меньше. Поэтому, учитывая ход кривых на рис. 8, при поверхностном анализе мишени оптимально использовать ионы гелия или протоны с энергией в интервале 800 – 1000 кэВ. Для изучения максимально толстых слоев мишени необходимо использовать анализирующие ионы с максимально доступной (до 2400 кэВ) энергией.

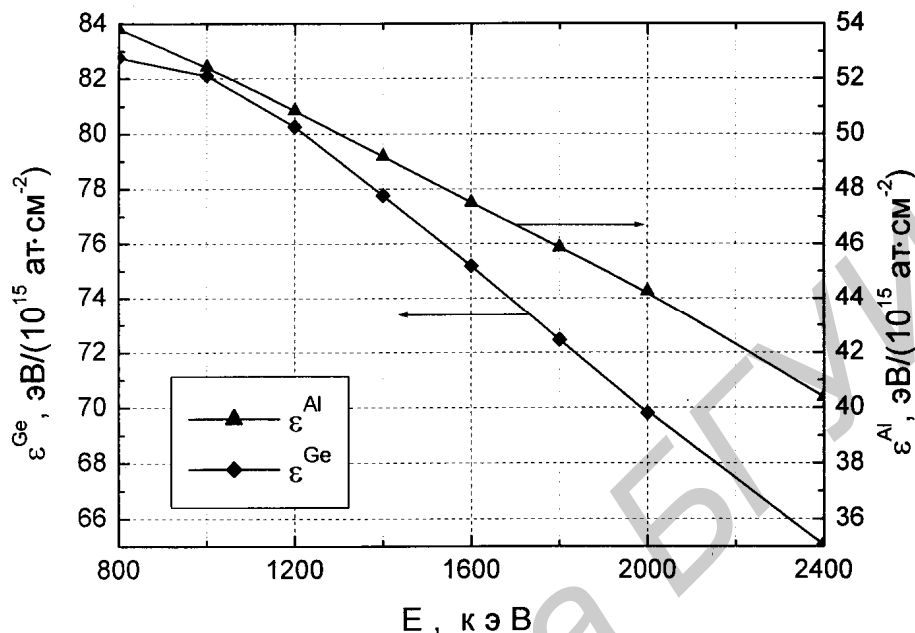


Рис. 8. Зависимость тормозных сечений  $\epsilon^{\text{Al}}$  и  $\epsilon^{\text{Ge}}$  от энергии ионов гелия E

Проведем **количественный анализ состава сплава** алюминия с германием, поскольку спектр ОР позволяет установить плотность атомов конкретного вида на глубине  $t$ , исходя из измерения высоты  $H$  спектра. При этом предполагается, что рассеяние ионов на атомах каждого компонента мишени происходит независимо друг от друга. Рис. 9 схематически иллюстрирует спектр ОР от фольги сплава Al-Ge. Плато в спектре вблизи ступеньки аппроксимируется прямой линией. Значения выходов ОР ионов от атомов Al и Ge обозначены соответственно  $H_{\text{Al}}$ ,  $H_{\text{Ge}}$  и  $H_{\text{Ge}}^{\text{max}}$ . При этом  $H_{\text{Ge}}$  соответствует выходу сигнала от Ge, распределенного в детектируемом слое, а  $H_{\text{Ge}}^{\text{max}}$  – выходу сигнала от Ge в тонком приповерхностном слое с повышенной концентрацией Ge. Наличие пика в начале ступеньки сигнала от Ge свидетельствует о неравномерном распределении германия в фольге, а именно, о его повышенной концентрации в тонком приповерхностном слое.

Относительная концентрация германия в сплавах Al-Ge определяется с использованием соотношения, выводимого с учетом формул (4), (6) и (7), где вместо  $A_i$  берется выход в канале  $H_i$ , выбранном на поверхности или на какой-то глубине мишени:



$$\frac{N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}} = \frac{H_{\text{Ge}} (Z_2^{\text{Al}})^2 [\bar{\epsilon}]_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{H_{\text{Al}} (Z_2^{\text{Ge}})^2 [\bar{\epsilon}]_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}}, \quad (12)$$

где  $N_i^{\text{Al-Ge}}$  – концентрация  $i$ -го элемента в сплаве Al-Ge.

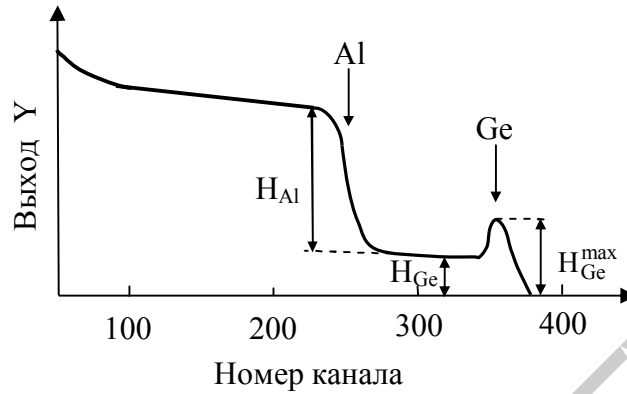


Рис. 9. Типичный спектр ОР для фольги сплава Al-Ge

При определении относительной концентрации элемента по формуле (12) имеется неопределенность в расчете значений  $[\bar{\epsilon}]_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}$  и  $[\bar{\epsilon}]_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}$ , так как на начальном этапе расчета точный состав фольги сплава  $\text{Al}_m\text{Ge}_n$ , необходимого для нахождения фактора тормозного сечения при рассеянии ионов на атомах алюминия и германия, неизвестен. В таких случаях используют метод итерации. При этом в первом приближении расчета для определения области, содержащей искомое значение концентрации легирующего элемента, можно условно считать, что  $[\bar{\epsilon}]_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}} \approx [\bar{\epsilon}]_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}$ .

Таким образом, достоинством метода РОР является возможность определения изменения состава образца по глубине, так как  $N_i$  в выражении (12) можно выбирать на любой глубине. Поэтому можно исследовать модифицированные материалы, в том числе и отклонение от стехиометрического состава мишени, с помощью сравнения со стандартным образцом. Из выражения (12) следует, что если примесь сконцентрирована в образце в тонком слое, то ее можно обнаружить даже при относительно малом содержании в анализируемом слое. Однако когда такое же количество примесных атомов равномерно распределено в объеме матрицы, определить наличие примеси затруднительно из-за распределения сигнала от частиц, рассеянных на примесных атомах, по всему энергетическому спектру.

## 5. Анализ экспериментальных спектров с помощью резерфордского обратного рассеяния

В качестве примера объекта исследования выберем фольги сплава Al – 2,4 ат. % Ge (рис. 10). В данном разделе мы рассмотрим возможности метода POP для анализа твердых тел на практике. Пучок использованных для анализа ускоренных ионов гелия имеет энергию  $E = 2,0$  МэВ, а геометрия эксперимента следующая:  $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 12^\circ$ ,  $\theta = 168^\circ$ . Энергетическая толщина одного канала  $\delta E$  в данном эксперименте составляет 5 кэВ.

Обработка энергетического спектра начинается с определения **элементного состава** мишени. Поэтому проиндексируем оба сигнала на спектре – ступеньку и пик. Как известно, основным по содержанию элементом сплава является алюминий, следовательно, используем ступеньку-сигнал алюминия для определения энергии в нулевом канале  $E^0$ . Значение энергии  $E_{Al}$  установим по формуле (5), определив соответствующий номер канала сигнала алюминия  $n_{Al}$  на спектре (см. рис. 10). Так как  $n_{Al} = 212,92$  канал, то

$$E_{Al} = 212,92 \cdot 5 + E^0 \text{ (кэВ)}.$$

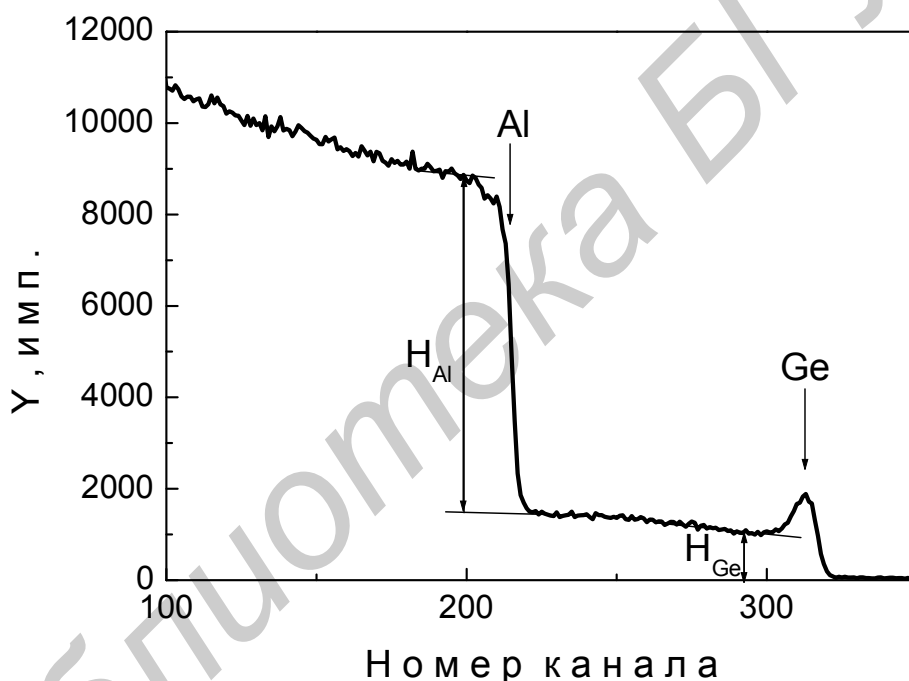


Рис. 10. Экспериментальный спектр ОР ионов гелия  ${}^4\text{He}^+$  с энергией  $E = 2,0$  МэВ от поверхности фольги сплава Al-Ge [3]

Для дальнейшего расчета определим величину кинематического фактора алюминия при использовании ионов гелия при угле рассеяния  $\theta = 168^\circ$ . Поэтому, используя табличные значения К-фактора (прил., табл. 2), построим график зависимости  $K_{M_{Al}}$ , а также необходимого в дальнейшем  $K_{M_{Ge}}$  от угла рассеяния ионов гелия (рис. 11).

Из рис. 11 находим, что при  $\theta = 168^\circ$   $K_{Ge} = 0,8038$  и  $K_{Al} = 0,8038$ . Из определения кинематического фактора (3) следует, что

$$K_{Al} = \frac{E_{Al}}{E_0} = \frac{1064,6 + E^0}{2000} = 0,5536.$$

Поэтому рассчитываем, что энергия, соответствующая нулевому каналу на спектре ОР:

$$E^0 = 2000 \cdot 0,5536 - 1064,6 = 42,6 \text{ кэВ.}$$

Теперь можно определить, какому элементу  $j$  (предположительно германию) соответствует на спектре ОР сигнал поверхностного пика элемента с номером  $n_j = 313$  канал. Используя известное выражение (5), составим уравнение

$$E_j = n_j \cdot 5 + E^0$$

и получим

$$E_j = 313 \cdot 5 + 42,6 = 1607,6 \text{ кэВ.}$$

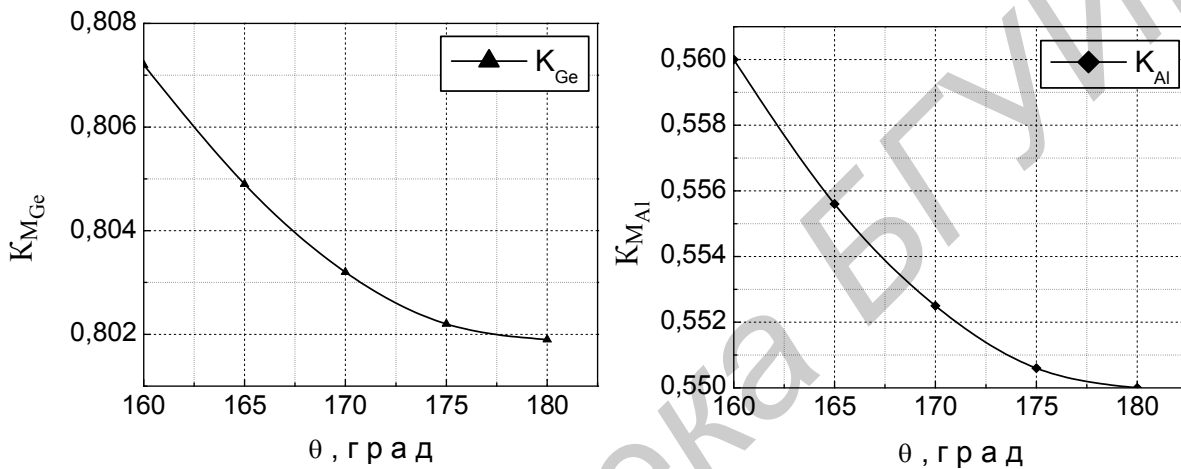


Рис. 11. Зависимость кинематических факторов алюминия и германия  $K_{M_{Al}}$  и  $K_{M_{Ge}}$  от угла рассеяния  $\theta$

Тогда вычислим К-фактор  $j$ -го элемента:

$$K_j = 1607,6/2000 = 0,8038.$$

Полученный результат при сравнении с данными табл. 2 приложения (см. рис. 11) указывает на то, что в сплаве легирующий элемент действительно германий. По виду спектра можно сделать вывод, что германий в алюминии распределен неравномерно: его концентрация на поверхности превышает содержание в массиве.

Теперь определим по экспериментальному спектру ОР **концентрацию легирующего элемента германия** в массиве фольги. В соответствии с расчетным составом сплава  $Al_{97,6}Ge_{2,4}$  мы должны иметь  $N_{Ge}^{Al-Ge} / N_{Al}^{Al-Ge} = 0,0246$ .

Из экспериментального спектра на рис. 10 получаем, что  $N_{Ge} = 1046$  имп.,  $N_{Al} = 6905$  имп. (значения выхода  $N_i$  взяты приблизительно на одинаковой глубине сплава). Следовательно, отношение значений выходов ОР ионов от алюминия и германия будет равно

$$\frac{H_{Ge}}{H_{Al}} = 0,151. \quad (13)$$

За  $\Delta E_1$  в уравнении (8) принимаем значение энергии, которую теряют ионы гелия при прохождении слоя, превышающего по толщине слой с повышенной концентрацией германия на поверхности фольги (см. рис. 7). Поэтому можем выбрать  $\Delta E_1 = 21$  канал, что с учетом энергетической толщины одного канала дает  $\Delta E_1 = 105$  кэВ.

Рассчитаем средние значения энергии ионов гелия при входе в поверхность фольги и на выходе из нее после рассеяния в приповерхностном слое, используя найденные выше значения кинематических факторов алюминия и германия при угле рассеяния  $\theta=168^\circ$ . Из выражения (8) получаем:

$$\bar{E}_{ВХ}^{Ge} \approx 2000 - 105/4 = 1974 \approx 1970 \text{ кэВ},$$

$$\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge} \approx 0,8038 \cdot 2000 - (3/4) \cdot 105 = 1608 - 79 = 1529 \approx 1530 \text{ кэВ}.$$

Для алюминия  $\bar{E}_{ВХ}^{Al}$  является равным  $\bar{E}_{ВХ}^{Ge}$ . А вот энергия выходящих из фольги ионов гелия, рассеянных на атомах алюминия, уже существенно отличается от  $\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge}$  из-за различия кинематических факторов  $K_{M_{Al}}$  и  $K_{M_{Ge}}$ :

$$\bar{E}_{ВЫХ}^{Al} \approx 0,5536 \cdot 2000 - (3/4) \cdot 105 = 1107 - 79 = 1028 \approx 1030 \text{ кэВ}.$$

Используя вычисленные значения  $\bar{E}_{ВХ}^i$  и  $\bar{E}_{ВЫХ}^i$ , из рис. 8 определяем значения тормозного сечения рассеяния  $\varepsilon^{Al}$  и  $\varepsilon^{Ge}$ :

$$\varepsilon^{Al}(\bar{E}_{ВХ}^{Al}) = \varepsilon^{Al}(\bar{E}_{ВХ}^{Ge}) = 44,43 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}); \quad \varepsilon^{Al}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Al}) = 52,16 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\varepsilon^{Al}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge}) = 48,14 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}) \text{ и}$$

$$\varepsilon^{Ge}(\bar{E}_{ВХ}^{Ge}) = \varepsilon^{Ge}(\bar{E}_{ВХ}^{Al}) = 70,19 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}); \quad \varepsilon^{Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge}) = 76,08 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\varepsilon^{Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Al}) = 81,76 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}).$$

По правилу Брэгга (10), обозначая через  $m$  концентрацию алюминия, предположив, что концентрация германия  $n = 0,024 (m + n + 1)$ , находим значения:

$$\varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВХ}^{Al}) = \varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВХ}^{Ge}) = m \cdot 44,43 + n \cdot 70,19 = 0,976 \cdot 44,43 + 0,024 \cdot 70,19 = 45,05 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Al}) = m \cdot 52,16 + n \cdot 81,76 = 52,87 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge}) = m \cdot 48,14 + n \cdot 76,08 = 48,81 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}).$$

Следовательно, по формуле (7) можно вычислить  $[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge}$  и  $[\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge}$ :

$$[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge} = 0,5536 \cdot 45,05 + (1/\cos 168^\circ) \cdot 52,87 = 78,99 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$[\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge} = 0,8038 \cdot 45,05 + 1,022 \cdot 48,81 = 86,10 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}).$$

Итак,  $[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge}/[\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge} \approx 0,92$ . Тогда для заданного  $n = 0,024$  вычислим, согласно выражению (12), отношение  $H_{Ge}/H_{Al}$ :

$$\frac{H_{Ge}}{H_{Al}} = \frac{(Z_2^{Ge})^2 [\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge} N_{Ge}^{Al-Ge}}{(Z_2^{Al})^2 [\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge} N_{Al}^{Al-Ge}}. \quad (14)$$

Но после подстановки значений всех определенных величин из уравнения (14) следует:

$$\frac{H_{Ge}}{H_{Al}} = 0,137.$$

Полученное значение  $H_{Ge}/H_{Al}$  не совпадает с расчетным значением (13). Поэтому очевидно, что значение  $n$  должно отличаться от предполагавшегося 0,024. На следующем шаге итерации принимается значение  $n$ , отличное от 0,024, например  $n = 0,026$ . Снова рассчитываем  $[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge}$  и  $[\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge}$ . В результате определяем, что отношение  $H_{Ge}/H_{Al}$  из формулы (14) составляет 0,149 и также не совпадает с экспериментально установленным значением, хотя и приближается к нему. Подбирая таким образом  $n$ , мы стремимся получить  $H_{Ge}/H_{Al} = 0,151$ . Действительно, при  $n = 0,0265$  имеем:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{BX}^{Al}) &= \varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{BX}^{Ge}) = 45,11 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}), \\ \varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Al}) &= 52,94 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}) \text{ и } \varepsilon^{Al-Ge}(\bar{E}_{ВЫХ}^{Ge}) = 48,88 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}), \\ [\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge} &= 79,08 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}) \text{ и } [\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge} = 86,21 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2}). \end{aligned}$$

Тогда отношение  $H_{Ge}/H_{Al} = 0,151$  и поэтому  $N_{Ge}^{Al-Ge}/N_{Al}^{Al-Ge} = 0,0272$ .

Таким образом, методом итерации, опираясь на экспериментальный спектр ОР, приведенный на рис. 10, мы установили, что состав анализируемой фольги в действительности таков:  $Al_{97,35\%}Ge_{2,65\%}$ .

Здесь надо обратить внимание на то, что в первом приближении расчета факторов тормозного сечения, когда считаем  $[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge} \approx [\bar{\varepsilon}]_{Ge}^{Al-Ge}$ , мы получаем значение относительной концентрации компонентов:

$$\frac{N_{Ge}^{Al-Ge}}{N_{Al}^{Al-Ge}} \approx \frac{H_{Ge}}{H_{Al}} \frac{(Z_2^{Al})^2}{(Z_2^{Ge})^2} = 0,0249,$$

отличающееся от действительного (0,0272) на 8,4 %. Следовательно, первое приближение в данных расчетах при достаточно низких концентрациях легирующего элемента германия дает вполне приемлемые оценочные результаты.

Определим **толщину слоя**, в котором по спектру ОР на рис. 10 можно исследовать **распределение германия по глубине** фольг сплава теперь уже  $Al - 2,65 \text{ ат. \% } Ge$ . На энергетическом спектре ширина сигнала от германия составляет 100 каналов. Потери энергии ионов гелия при прохождении соответствующей глубины будут  $\Delta E = 500 \text{ кэВ}$ . Учтем, что атомов германия очень мало и торможение ионов гелия происходит в основном на атомах алюминия. Поэтому в формулу (6) подставим атомную плотность алюминия  $N_{Al}$  (прил., табл. 1), а не  $N_{Ge}$  и получим:

$$t_{Ge} = \frac{500 \cdot 10^3}{6,02 \cdot 10^{22} \cdot 86,21 \cdot 10^{-15}} \approx 1,0 \text{ мкм}.$$

Отметим, что с помощью компьютерного моделирования, при котором допущенные выше приближения не используются, профили распределения германия по глубине фольг сплавов Al-Ge были исследованы в приповерхностном слое фольг толщиной до 1,1 мкм [3].

Рассчитаем разрешение по глубине метода РОР при изучении данного быстрозатвердевшего сплава. Необходимо заметить, что в первом приближении глубинное разрешение детектора в слаболегированных сплавах Al-Ge  $\Delta t_{\text{дет}}^{\text{Al}} \approx \Delta t_{\text{дет}}^{\text{Ge}}$ , поскольку при низкой концентрации атомов германия в сплавах торможение ионов происходит в основном на атомах алюминия. Энергетическое разрешение детектора в проведенных экспериментах составляет  $\Delta E_{\text{дет}} = 25$  кэВ. Так как наилучшее разрешение будет у поверхности фольг, то  $\Delta E_i = 105$  кэВ. Согласно формуле (11), найдя в табл. 1 (прил.) атомную плотность алюминия  $N$ , получим, что:

$$\Delta t_{\text{дет}}^{\text{Al}} \approx \Delta t_{\text{дет}}^{\text{Ge}} = \frac{25 \cdot 10^3}{6,02 \cdot 10^{22} \cdot 86,21 \cdot 10^{-15}} \approx 0,05 \cdot 10^{-6} \text{ м} = 0,05 \text{ мкм},$$

т. е. послойный анализ сплава осуществляется с точностью 0,05 мкм.

Необходимо отметить, что с увеличением концентрации германия в образцах значение выхода ОР ионов от атомов алюминия в одном канале  $N_{\text{Al}}$  уменьшается. Это связано с тем, что фактор тормозного сечения в сплаве Al-Ge растет с увеличением числа атомов германия в сплаве. В чистом алюминии энергетическая толщина одного канала 5 кэВ соответствует слою толщиной 0,011 мкм. В сплаве Al – 3,2 ат. % Ge один канал с энергетической толщиной в 5 кэВ соответствует слою толщиной 0,010 мкм. Естественно, что в более тонком слое атомов Al меньше, чем в более толстом слое. В результате этого эффекта  $N_{\text{Al}}^{\text{Al}_{100\%}\text{Ge}_{0\%}} < N_{\text{Al}}^{\text{Al}_{96,8\%}\text{Ge}_{3,2\%}}$ . Таким образом, одна и та же энергетическая ширина канала может соответствовать существенно разной толщине слоя в единицах длины в сплавах с различной концентрацией германия, что важно учитывать при интерпретации экспериментальных спектров РОР.

## 6. Применение метода РОР для анализа модифицированных сплавов

Химический состав поверхности сплавов, получаемых, в частности, сверхбыстрой закалкой, как известно, может отличаться от состава на глубине образцов. Применение метода РОР для изучения композиционного состава приповерхностных слоев материалов, полученных сверхбыстрой закалкой из расплава, а также зависимости распределения элементов по глубине фольг от температуры отжига иллюстрируются следующим примером (рис. 12). Настоящий метод позволяет исследовать диффузию атомов в поверхностных слоях сплавов при сопоставлении экспериментальных спектров ОР анализирующих ионов от исходной и отожженной фольги.

На рис. 12 представлены энергетические спектры ОР ионов гелия с энергией 2,0 МэВ и геометрией опыта  $\theta_1 = 0^\circ$ ,  $\theta_2 = 10^\circ$ ,  $\theta = 170^\circ$  от исходной фольги

сплава Al – 2,0 ат. % Fe (скорость охлаждения расплава не ниже  $10^6$  К/с) и изотермически отожженной при  $500^\circ\text{C}$  в течение 2 ч.

По виду спектра ОР от исходной фольги можно сделать вывод о том, что сплав действительно содержит алюминий и железо (спектр 1 на рис. 12). Наличие пика от железа свидетельствует о неравномерном по толщине анализируемого слоя (до 0,8 мкм) распределении железа в сплаве, а именно – повышенной концентрации железа на поверхности фольги. Расчеты показывают, что в тонком приповерхностном слое фольги ( $\sim 0,02$  мкм) содержится 2,0 ат. % железа.

После проведения отжига сплава на спектре появляется сильно выраженный пик, соответствующий рассеянию ионов гелия на сурьме (спектр 2 на рис. 12). Следовательно, при отжиге атомы неконтролируемой примеси сурьмы диффундируют на поверхность фольги. Наблюдается также понижение пика в области сигнала железа, характеризующее уменьшение содержания железа на поверхности фольги. Это указывает на диффузию атомов железа в объем фольги в изученном слое поверхности сплава Al-Fe при отжиге. После отжига в тонком приповерхностном слое фольг концентрация железа снижается приблизительно в 2 раза, а количество сурьмы достигает 0,2 ат. %.

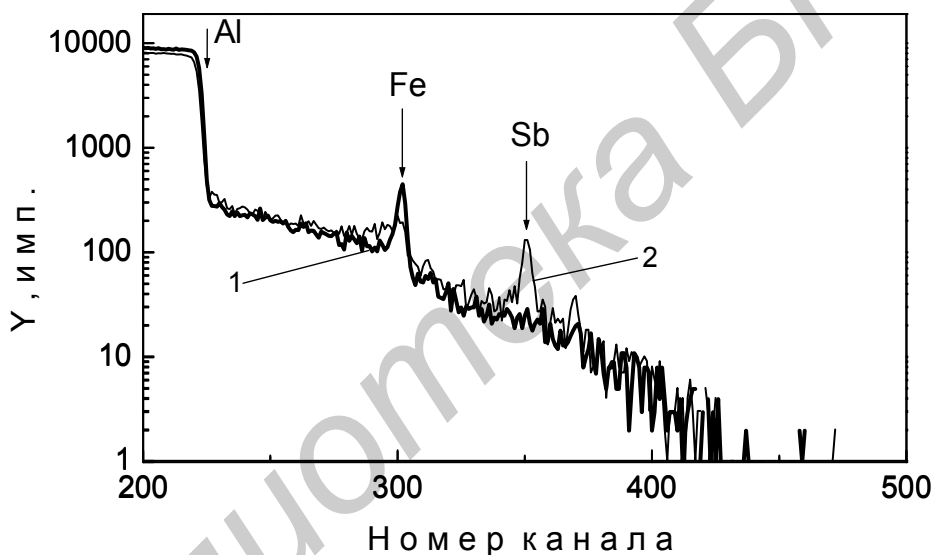


Рис. 12. Энергетические спектры ОР ионов гелия  $^4\text{He}^+$  от сплава Al – 2,0 ат. % Fe: 1 – исходная фольга; 2 – фольга, отожженная при  $500^\circ\text{C}$  [13]

## 7. Расчет погрешности вычисления относительной концентрации компонентов сплава методом РОР

При выполнении любых исследований необходимо уметь рассчитывать ошибки и погрешности в измерении тех или иных величин. Для расчета относительной концентрации компонентов сплава А-В в методе РОР используется следующая формула:

$$\frac{N_B^{A-B}}{N_A^{A-B}} = \frac{H_B}{H_A} \frac{(Z_2^A)^2}{(Z_2^B)^2} \frac{[\bar{\varepsilon}]_B^{A-B}}{[\bar{\varepsilon}]_A^{A-B}}. \quad (15)$$

Для вычисления относительной погрешности в определении относительной концентрации  $N_B^{A-B}/N_A^{A-B}$  следует применить метод косвенных измерений, в соответствии с которым

$$\varepsilon_{(N_B^{A-B}/N_A^{A-B})} = \sqrt{\left(\frac{\Delta H_A}{H_A}\right)^2 + \left(\frac{\Delta H_B}{H_B}\right)^2 + \left(\frac{\Delta[\bar{\varepsilon}]_B^{A-B}}{[\bar{\varepsilon}]_B^{A-B}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta[\bar{\varepsilon}]_A^{A-B}}{[\bar{\varepsilon}]_A^{A-B}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta(Z_2^A/Z_2^B)^2}{(Z_2^A/Z_2^B)^2}\right)^2}. \quad (16)$$

Так как атомный номер химического элемента является постоянной величиной, то в формуле (16) будем учитывать относительную погрешность не самих  $Z_2^A$  и  $Z_2^B$ , а квадрата их отношения  $(Z_2^A/Z_2^B)^2$ .

Элементный состав в методе РОР определяется с помощью анализа энергетических спектров ОР ионов, исходя из полученных данных о числе рассеянных частиц с определенной энергией, зарегистрированных детектором. Величина выхода импульсов  $H_i$  ( $i = A, B$ ) на спектрах ОР является набором случайных цифр (в зависимости от числа рассеянных частиц, попавших в детектор). Так как в данном случае не идет речь о систематической погрешности, поэтому для нахождения относительной погрешности  $\varepsilon_{H_i}$  можно использовать не формулу  $\varepsilon_{H_i} = \Delta H_i / H_i$ , а формулу для статистической погрешности:

$$\varepsilon_{H_i} = \sqrt{H_i} / H_i. \quad (17)$$

В выражении (7) фактор тормозного сечения  $i$ -го компонента рассчитывается по формуле

$$[\bar{\varepsilon}]_i^{A-B} = K_{M_i} \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i) + \frac{1}{|\cos \theta|} \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{ВЫХ}^i). \quad (18)$$

Следовательно:

$$\Delta[\bar{\varepsilon}]_i^{A-B} = \sqrt{\left(\frac{\Delta K_{M_i}}{K_{M_i}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i)}{\varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i)}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \cos \theta}{\cos \theta}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{ВЫХ}^i)}{\varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{ВЫХ}^i)}\right)^2}.$$

Поскольку погрешность в определении  $K_{M_i}$  и  $\cos \theta$  пренебрежимо мала по сравнению с  $\Delta \varepsilon^{A-B}$ , то при расчете  $\Delta[\bar{\varepsilon}]_i^{A-B}$  можно использовать приближенную формулу

$$\Delta[\bar{\varepsilon}]_A^{A-B} \approx \Delta[\bar{\varepsilon}]_B^{A-B} \approx \sqrt{\left(\frac{\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i)}{\varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i)}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{ВЫХ}^i)}{\varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{ВЫХ}^i)}\right)^2}. \quad (19)$$

Так как в формуле (18)  $\varepsilon^{A(1-n)Bn}(E) = (1-n)\varepsilon^A(E) + n\varepsilon^B(E)$ , то

$$\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{BX}^i) = \Delta \varepsilon^{A(1-n)Bn}(\bar{E}_{BX}^i) = (1-n)\Delta \varepsilon^A(\bar{E}_{BX}^i) + n\Delta \varepsilon^B(\bar{E}_{BX}^i),$$



$$\Delta \varepsilon^{A-B}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i) = \Delta \varepsilon^{A(1-n)Bn}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i) = (1-n)\Delta \varepsilon^A(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i) + n\Delta \varepsilon^B(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i),$$

где  $\Delta \varepsilon^i(\bar{E}_{\text{ВХ}}^i) = \varepsilon^i(\bar{E}_{\text{ВХ}}^i) - \varepsilon^i(E_0)$  и  $\Delta \varepsilon^i(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i) = \varepsilon^i(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^i) - \varepsilon^i(K_{M_i} E_0)$ .

Для наглядности изложенного алгоритма вычисления относительной погрешности в определении относительной концентрации рассчитаем  $\varepsilon_{(N_A^{A-B}/N_B^{A-B})}$  для фольг сплава с изначально предполагаемым составом Al – 2,4 ат. % Ge. Воспользуемся численными значениями, полученными в разделе 5. Будем учитывать, что экспериментально измеренная методом РОР концентрация германия в сплаве составляет 2,65 ат. %:

$$\varepsilon_{H_{\text{Al}}} = \sqrt{6905}/6905 \approx 0,012, \quad \varepsilon_{H_{\text{Ge}}} = \sqrt{1046}/1046 \approx 0,031;$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Al}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^{\text{Al}}) = \varepsilon^{\text{Al}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^{\text{Al}}) - \varepsilon^{\text{Al}}(E_0) = 44,43 - 44,25 = 0,18 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Ge}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^{\text{Al}}) = \varepsilon^{\text{Ge}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^{\text{Al}}) - \varepsilon^{\text{Ge}}(E_0) = 70,19 - 69,8 = 0,39 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Al}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^{\text{Al}}) = \varepsilon^{\text{Al}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^{\text{Al}}) - \varepsilon^{\text{Al}}(K_{M_{\text{Al}}} E_0) = 52,16 - 51,53 = 0,63 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Ge}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^{\text{Al}}) = \varepsilon^{\text{Ge}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^{\text{Al}}) - \varepsilon^{\text{Ge}}(K_{M_{\text{Ge}}} E_0) = 81,76 - 75,13 = 6,63 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Al-Ge}}(\bar{E}_{\text{ВХ}}^{\text{Al}}) = (1 - 0,0265) \cdot 0,18 + 0,0265 \cdot 0,39 \approx 0,186 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta \varepsilon^{\text{Al-Ge}}(\bar{E}_{\text{ВЫХ}}^{\text{Al}}) = (1 - 0,0265) \cdot 0,63 + 0,0265 \cdot 6,63 \approx 0,789 \text{ эВ}/(10^{15} \text{ ат}\cdot\text{см}^{-2});$$

$$\Delta[\bar{\varepsilon}]_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}} \approx \Delta[\bar{\varepsilon}]_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}} \approx \sqrt{\left(\frac{0,186}{45,11}\right)^2 + \left(\frac{0,789}{52,94}\right)^2} \approx 0,024.$$

$$\left(Z_2^{\text{Al}}/Z_2^{\text{Ge}}\right)^2 \approx 0,17. \text{ Следовательно, } \Delta\left(\left(Z_2^{\text{Al}}/Z_2^{\text{Ge}}\right)^2\right) = 0,005.$$

Окончательно получаем:

$$\varepsilon_{(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}})} = \sqrt{\left(\frac{0,012}{6905}\right)^2 + \left(\frac{0,031}{1046}\right)^2 + \left(\frac{0,024}{79,08}\right)^2 + \left(\frac{0,024}{86,21}\right)^2 + \left(\frac{0,005}{0,17}\right)^2} \approx 0,029,$$

т. е.  $\varepsilon_{(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}})} \approx 3\%$ .

Поэтому, поскольку

$$\varepsilon_{(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}})} = \frac{\Delta(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}})}{N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}}, \quad (20)$$

то абсолютная ошибка в определении относительной концентрации будет

$$\Delta(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}) = 0,03 \cdot \frac{2,65}{97,35} \approx 0,001.$$

По определению

$$\Delta(N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}/N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}) = \frac{\bar{N}_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{\bar{N}_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}} - \frac{N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}} = 0,027 - \frac{N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}}. \quad (21)$$

Следовательно,  $\frac{N_{\text{Ge}}^{\text{Al-Ge}}}{N_{\text{Al}}^{\text{Al-Ge}}} = 0,027 \pm 0,001$ .

В результате получаем, что при вычислении относительной концентрации германия с использованием экспериментального спектра РОР в массиве фольги сплава Al – 2,65 ат. % Ge доверительный интервал будет составлять

$(2,7 \pm 0,1) \%$ . Таким образом, абсолютная погрешность определения содержания германия равна  $\pm 0,1$  ат. %.

## 8. Схема экспериментального оборудования

Эксперименты по обратному рассеянию быстрых ионов проводятся на экспериментальных установках, предназначенных для исследования взаимодействия быстрых ионов с твердым телом. Эти установки должны удовлетворять следующим требованиям: первичный пучок состоит из ионов одного сорта с одинаковой заданной энергией; ионы направляются под одним и тем же углом к поверхности образца; контролируется полное число ионов, попадающих на образец в процессе эксперимента; известны углы  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  и  $\theta$  ионов, а также телесный угол  $\Omega$ , охватываемый детектором; спектр ОР измеряется с высоким энергетическим разрешением. Принципиальная схема экспериментальной установки для применения РОР приведена на рис. 13 [14].

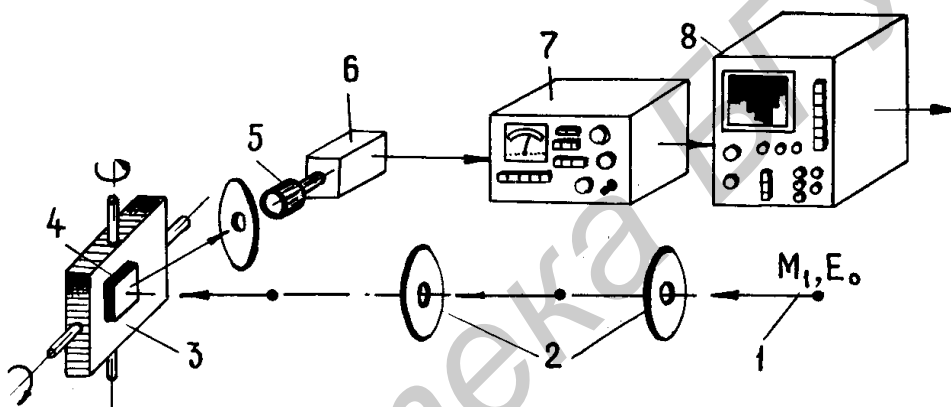


Рис. 13. Схема компонентов экспериментального оборудования, применяемого при РОР:

- 1 – падающий пучок первичных ионов; 2 – диафрагма; 3 – держатель образцов;
- 4 – исследуемый образец; 5 – детектор; 6 – предусилитель; 7 – усилитель;
- 8 – амплитудный анализатор импульсов [14]

Пучок ионов (1) из ускорителя, испытавших упругое рассеяние на большой угол атомами, входящими в состав образца (4), регистрируется полупроводниковым детектором (5). Исследуемые образцы устанавливаются в центре экспериментальной камеры под различными углами относительно направления падающего пучка на многопозиционный держатель кассетного типа, который позволяет перемещать их в горизонтальном направлении и устанавливать последовательно каждый образец под пучок ионов. Форма и размер падающего на образец пучка зависит от формы и размера диафрагм. Диафрагмы с круглым отверстием имеют диаметр отверстия от 0,1 до 1 мм, диафрагмы с прямоугольным отверстием имеют размеры  $\sim(0,2 - 0,5)(5 - 4) \text{ мм}^2$ . Последние диафрагмы удобно использовать в экспериментах со скользящими пучками, когда добиваются высокого глубинного разрешения при профилировании примеси и дефектов.

## 9. Исследование структуры и состава алюминиевых сплавов методом РОР с помощью компьютерного моделирования

До последнего времени фундаментальные представления в материаловедении развивались при проведении оригинальных экспериментов и последующем развитии соответствующих теорий. С появлением мощных вычислительных машин сформировалась новая технология проведения теоретических исследований – вычислительный эксперимент (компьютерное моделирование), теоретической основой которого является математическое моделирование. Основное требование, предъявляемое к компьютерному моделированию, заключается в согласии получаемых результатов с реальным экспериментом и существующими теориями.

Объем информации при проведении экспериментов по обратному рассеянию ускоренных частиц настолько велик, что обработка данных должна быть автоматизирована. Поэтому непосредственно при проведении физического эксперимента, а также при обработке результатов измерений необходимо использовать компьютеры, в том числе для моделирования экспериментальных спектров РОР. Обработка и интерпретация с помощью компьютерных моделирующих программ экспериментальных данных, полученных методом РОР, широко распространены около двадцати лет [15]. Существует ряд программ, созданных для анализа данных. Наиболее известная из них с большим спектром возможностей – **RUMP**.

Программа RUMP специально создана для обработки накопленных в анализаторе спектров обратно рассеянных частиц (см. рис. 13), позволяя моделировать экспериментальные спектры РОР, рассчитывать послойно элементный и композиционный состав образцов и строить профили распределения элементов в образце (рис. 14). Настоящая программа была разработана в университете Корнелла (США) исследовательской группой доктора Дж. Майера. В основе программы лежат алгоритмы, разработанные Л. Дулиттлом [16], и табличные данные [8, 11]. Существенным преимуществом программы RUMP является то, что при моделировании с ее помощью состава образцов можно учитывать наличие углерода, кислорода и водорода. Моделирование позволяет экспериментально с наибольшей точностью установить глубину детектируемого методом РОР слоя.

Метод РОР как метод профилирования состава сплава по глубине в совокупности с применением программы RUMP дает возможность изучать экспериментально малые концентрации легирующих элементов, начиная с 0,001 ат. %. Использование компьютерного моделирования в сравнении с предварительной обработкой спектров ОР, методика проведения которой изложена выше, позволяет, во-первых, уточнить содержание легирующих элементов на поверхности образцов и среднюю их концентрацию в приповерхностном слое; во-вторых, программа RUMP позволяет провести послойный анализ распределения содержания легирующих компонентов в детектируемом методом РОР

объеме сплавов с оптимальным шагом. Например, при изучении быстрозатвердевшего сплава Al – 2,65 ат. % Ge шаг моделирования следует выбирать не меньше рассчитанного ранее глубинного разрешения детектора, составляющего 0,05 мкм.

Необходимо отметить, что требуемые при компьютерном моделировании такие параметры, как энергия в нулевом канале  $E^0$ , энергетическая ширина одного канала  $\delta E$  и глубинное разрешение детектора  $\Delta t_{\text{дет}}$ , уточняются и определяются соответственно именно с помощью математических расчетов, изложенных выше.

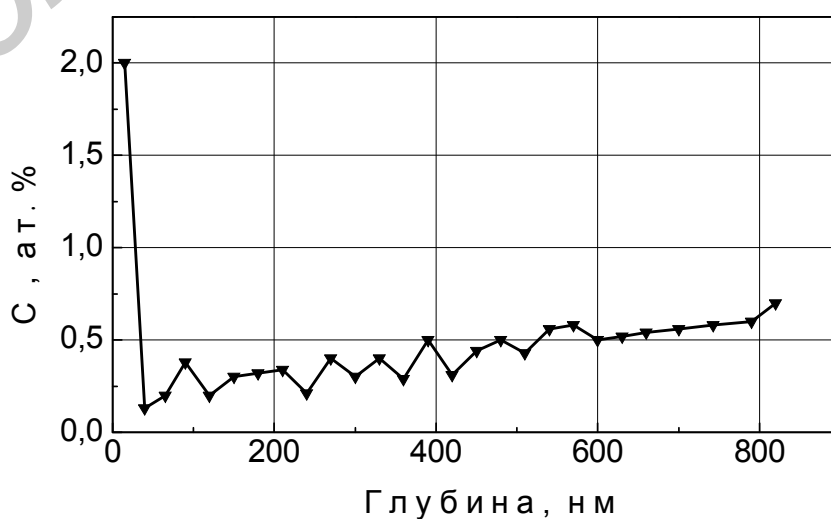
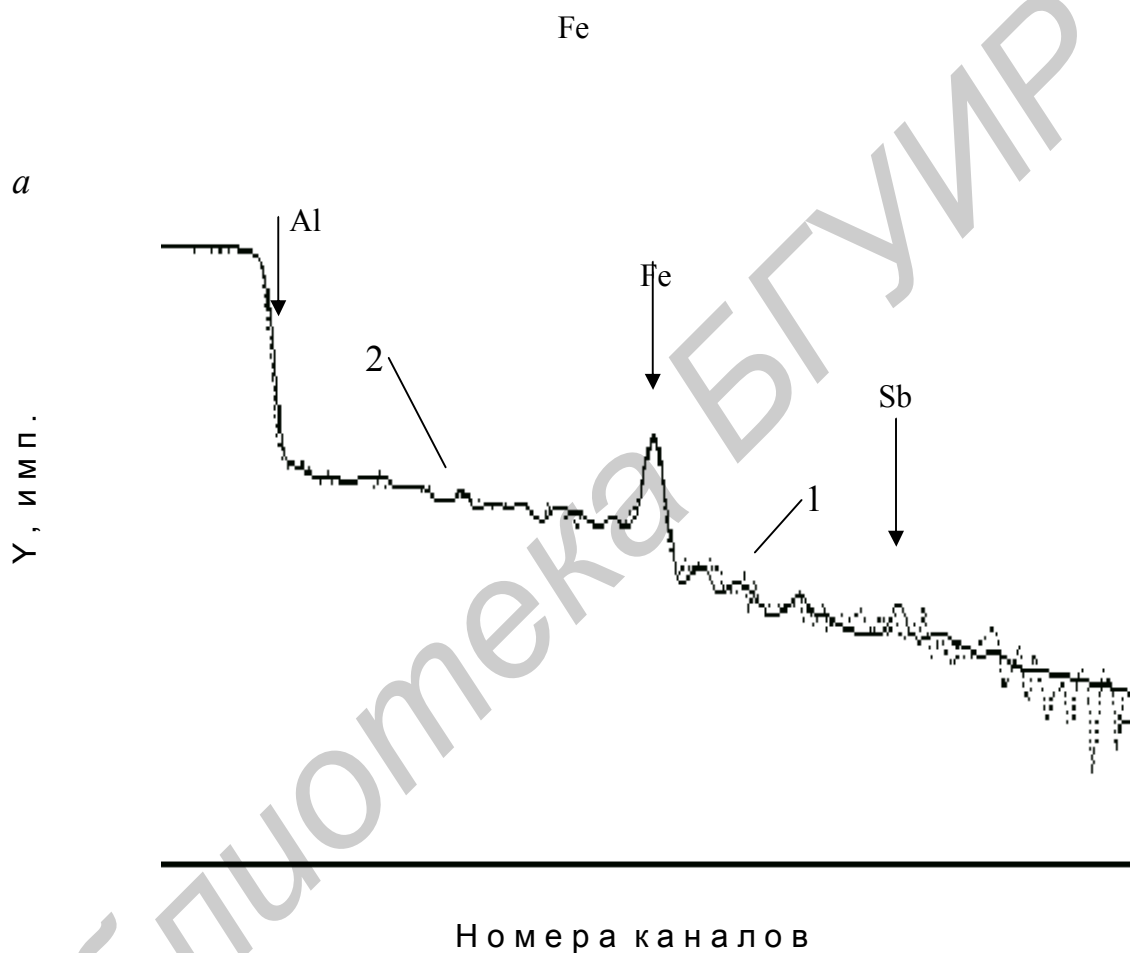


Рис. 14. Изучение быстрозатвердевшего сплава Al-Fe с применением программы RUMP: *a* – спектр обратного рассеяния ионов гелия  ${}^4\text{He}^+$  с энергией  $E = 2,0$  МэВ от исходной фольги сплава Al – 2,0 ат. % Fe: 1 – прерывистая линия – экспериментальный спектр ОР [13], 2 – сплошная линия – моделированный спектр, полученный с применением программы RUMP [16]; *б* – график глубинного распределения железа в фольге сплава Al – 2,0 ат. % Fe, построенный с помощью компьютерного моделирования

На рис. 14, а представлены экспериментальный спектр ОР ионов гелия от быстрозатвердевшего сплава Al – 2,0 ат. % Fe и моделированный спектр, полученный с помощью программы RUMP при анализе послойного состава образца. Как следует из рис. 14, а, применение компьютерной моделирующей программы RUMP позволяет достичь совпадения экспериментального и восстановленного спектров. Соответствующий график распределения легирующего элемента железа по глубине фольги, построенный с помощью компьютерного моделирования (шаг моделирования 0,03 мкм), показан на рис. 14, б. Благодаря использованию программы RUMP впервые были обнаружены осцилляции концентрации легирующего элемента железа по всей толщине исследуемых слоев фольг слаболегированных алюминиевых сплавов с железом (см. рис. 14, б) [17]. Относительная величина осцилляций рассчитывалась как  $(C_{\max} - C_{\min})/C_{\min}$ , где  $C_{\max}$  и  $C_{\min}$  – концентрации легирующего элемента в слое с максимумом и ближайшем к нему слое с минимумом концентраций на профиле его распределения в сплаве. Установлено, что относительная величина осцилляций железа уменьшается с глубиной (см. рис. 14, б). В частности, для сплава Al – 2,0 ат. % Fe определено, что среднее значение шага (расстояние между соседними максимумами) и величина осцилляций составляют 80 нм и 0,75 соответственно. Обнаруженный эффект осцилляции содержания легирующей примеси в сплавах Al-Fe, по-видимому, можно объяснить влиянием процесса рекалесценции на межфазной границе на продвижение фронта кристаллизации [4, 17].

Таким образом, расчет вручную и применение компьютерного моделирования при обработке спектров ОР взаимодополняют, а не исключают друг друга, позволяя повысить точность исследований. Чтобы приступить к моделированию с помощью компьютерных программ, в частности RUMP, первоначально необходимо ознакомиться с физическими основами метода POP и методикой анализа спектров ОР ускоренных частиц в первом приближении, выполняемого с применением основных принципов метода POP.

## **10. Использование пакета Origin при проведении исследований методом POP**

Практически во всех областях научной и учебной деятельности естественно-научного направления удобно представлять результаты работы в графическом виде. Это могут быть характеристики, полученные в ходе физического эксперимента, расчетные кривые и т.д. Вид графиков может быть различным – от двухмерных графиков в прямоугольных или полярных координатах, в линейном или логарифмическом масштабе, приближенных с помощью аналити-

ческих функций, до построения поверхностей и изолиний – также в различных координатах и с различными опциями. Можно представлять данные в виде плоских или объемных, столбчатых или секторных диаграмм, гистограмм и т.д. Простейшими возможностями графического отображения численных данных обладают многие программы общего назначения, например Excel. Однако существуют специализированные пакеты Microcal Origin, Grapher, Surfer, имеющие более адаптированный интерфейс и широкие возможности по статистическому анализу, преобразованию результатов, интерполяции, вводу данных с клавиатуры или из отдельного файла. Графики можно отображать на экране или создавать твердую копию. Все пакеты позволяют экспортировать полученные иллюстрации в другие программы.

При выборе программных продуктов для решения указанных задач основным критерием является простота в применении:

- легкость и быстрота доступа к данным;
- интерактивная и быстрая графика;
- упрощенные инструменты анализа, позволяющие управлять аспектами анализа с помощью интуитивного интерфейса;
- формирование выходных документов, пригодных для публикации;
- автоматизация рутинных задач.

Поэтому для численной обработки и визуализации экспериментальных данных, полученных методом РОР, наиболее удобно использовать графический математический пакет **Origin**, разработанный фирмой Microcal Software Inc. [18]. Данный пакет прост в применении и интуитивно понятен. Он характеризуется большим выбором средств для анализа и построения графиков, способностью работать с множеством типов данных и большими по объему наборами данных.

### ***10.1. Назначение и возможности пакета Origin. Система меню. Работа с файлами***

С функциональной точки зрения, возможности пакета Origin, включающие ряд наиболее важных функций обработки данных и построения графиков, могут быть представлены схемой на рис. 15, который иллюстрирует многообразие форм для графического оформления экспериментальных материалов с помощью программы Origin.

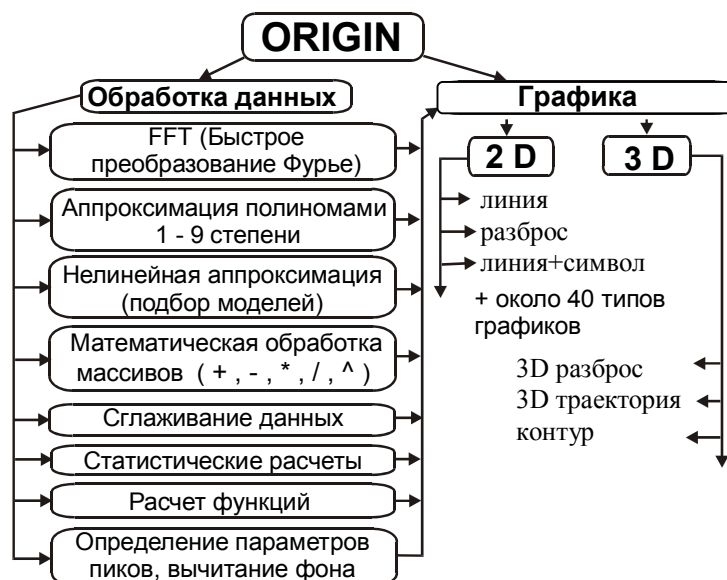


Рис. 15. Основные функциональные возможности математического пакета Origin

Можно строить гистограммы, круговые диаграммы, двух- и трехкоординатные графики. В поле графика можно рисовать простые геометрические фигуры, писать текстовые сообщения. Однако помимо оформительских функций программа предоставляет возможность проводить элементарный анализ и математическую обработку экспериментальных результатов. Во-первых, можно аппроксимировать результаты различными функциями; во-вторых, можно определить координаты любой точки в поле построенного графика; в-третьих, есть возможность производить элементарную статистическую обработку данных; в-четвертых, программа обладает средствами, которые помогают преобразовывать координаты потенциальных графиков.

После инсталляции в меню системы Windows вы обнаружите новую группу Microcal Origin 6.0 с пиктограммами пакета (рис. 16, а). Пиктограмма с надписью Origin 6.0 служит для запуска программы. Запустив Origin из Windows, вы на некоторое время увидите титульное окно (см. рис. 16, б), которое вскоре сменится основным окном пакета (см. рис. 16, в). При запуске системы в центре основного окна обычно появляется меньшее окно **Tip of the Day** (Советы дня) с различными советами по работе с пакетом Origin на английском языке. Для переключения тем служит кнопка **Next Tip** (Следующий совет), а для перехода к работе с Origin – кнопка **Close** (Заккрыть). Можно отключить появление этого окошка, удалив мышью птичку в прямоугольнике в нижнем левом углу окошка **Tip of the Day** (Советы дня). Когда все окна редактирования закрыты, то на экране программы ряд элементов интерфейса будет иметь серый цвет, поскольку в данном случае их функции недоступны.

Вверху окна на рис. 16, в видно несколько строк с типовыми элементами интерфейса. Верхняя строка – титульная (шапка окна). Она отображает назва-

ние загруженного или вводимого с клавиатуры документа. Уцепившись курсором мыши за титульную строку и удерживая нажатой левую клавишу мыши, можно с ее помощью передвигать окно (если оно не раскрыто на весь экран) по рабочему столу Windows. В левой части строки помещен стандартный пункт системного меню управления окном, а в правой части – три маленькие кнопки.

**Левая кнопка** сворачивает окно. При этом в строке задач Windows (внизу экрана) появляется кнопка с пиктограммой пакета и его названием. Как известно, Windows позволяет быстро переключаться между запущенными приложениями из строки задач (в частности, путем одновременного нажатия клавиш Alt и Tab (табуляция)). При этом работа каждого приложения временно прекращается в том состоянии, какое было перед переключением окон. С этого же состояния приложение начинает работать, как только его окно снова делается активным. Если загружены и другие приложения Windows, то и их кнопки будут видны в строке задач.

**Средняя кнопка** выполняет функции переключения размеров окна: она раскрывает окно на весь экран или задает окно в размере, определенном пользователем. При этом окно можно растягивать в разных направлениях, уцепившись за его ограничительные линии или углы курсором мыши. В этом случае курсор приобретает вид тонких двухсторонних стрелок, указывающих на направление, в котором можно растягивать или сужать окно.



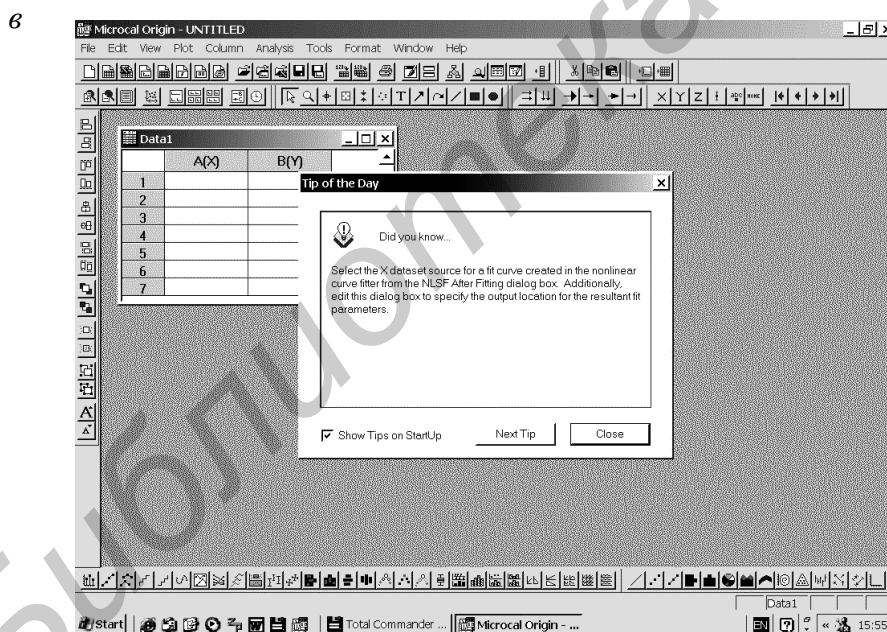
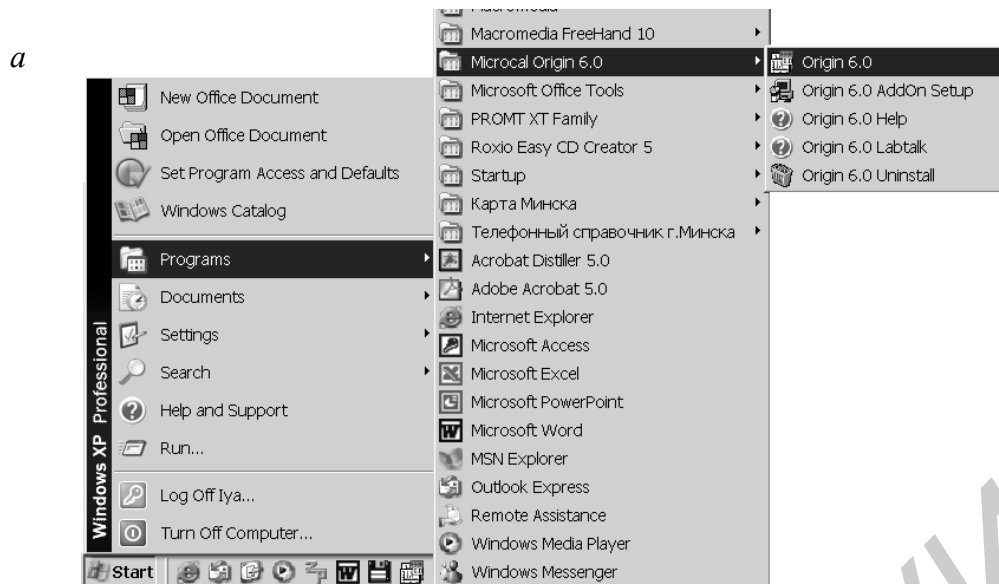


Рис. 16. Запуск пакета Origin:

*a* – группа значков Origin в рабочем меню операционной системы Windows XP;  
*б* – титульная заставка пакета Origin 6.0; *в* – рабочая область пакета Origin

**Третья кнопка** (с жирным наклонным крестиком) служит для закрытия окна. Если в приложение Origin был загружен файл и он модифицировался, то при закрытии появляется диалоговое окно с предложением сохранить файл.

Ниже строки с системным меню окна Origin располагаются пункты меню пакета (интерфейс пользователя). Под интерфейсом пользователя подразумевается совокупность средств графической оболочки Origin, обеспечивающих легкое управление пакетом как при помощи клавиатуры (используя кнопку F10, можно войти в меню), так и с помощью мыши. Пользовательский интерфейс системы создан так, что пользователь, имеющий элементарные навыки работы с Windows-приложениями, может сразу начать работу с Origin. Интерфейс системы подобен стандартному интерфейсу программ, разработанных под операционную систему Windows, например с текстовым процессором MS Word.

### **Окно редактирования**

Сразу после запуска основную часть экрана займет рабочая таблица **Worksheet** (Таблица), первоначально очищенная (рис. 16, в). Первая же кнопка панели инструментов (с изображением чистого листка бумаги) **New Project** (Новый проект) позволяет начать подготовку нового документа. Соответствующее ему окно редактирования получает название **Untitled** (Безымянный).

Полосы прокрутки на нижней и правой кромках текущего окна предназначены для перемещения изображения на экране по горизонтали и вертикали. Для плавного перемещения изображения в окне надо установить курсор-стрелку мыши на строке прокрутки (квадратик со стрелкой, указывающей направление перемещения) и нажать левую клавишу мыши. Можно перемещать изображение намного быстрее, установив курсор-стрелку в поле ползунка и также нажав клавишу мыши. При этом длина ползунка соответствует полной длине документа, так что курсором можно сразу приблизительно указать на часть документа, выводимую в окно.

Внизу экрана кроме полосы горизонтальной прокрутки расположена еще одна строка – строка состояния. В ней выводятся служебная информация, краткие комментарии и др. Эта информация полезна для оперативной оценки состояния системы в ходе работы с ней. Нажатие правой клавиши мыши вызывает появление контекстно-зависимого меню.

### **Главное меню**

Вторая строка окна системы – главное меню. Оно будет описано в дальнейшем, пока же отметим, что работа с документами Origin обычно не требует обязательного использования возможностей главного меню, так как основные из них дублируются кнопками быстрого управления из **Toolbars** (Панель инструментов), которые находятся под строкой главного меню. Для вывода на экран или устранения группы инструментов служат опции в **Toolbars** (Панель инструментов), находящемся в подменю пункта **View** (Вид) главного меню.

Обычно имеются два типа таких панелей: стандартная панель инструментов (дублирующая ряд наиболее распространенных команд и операций) и панель форматирования для упрощения работы с документами, включая выбор типа графиков, операции с объектами и т.д. Эти панели видны на рис. 16, в. Можно легко уяснить функции кнопок панели инструментов, поставив курсор мыши на любую из кнопок. Тогда в желтом окошечке, а также в строке состояния появится текст, объясняющий функции пиктограммы.

На рис. 17 представлены названия основных кнопок панели инструментов и их краткое назначение. Надо отметить, что панель инструментов можно превратить мышью в наборную панель и поместить в любое место экрана. Так интерфейс пакета модифицируется, и пользователь может подстроить его под свой вкус. Рассмотрим действие основных кнопок быстрого управления пакетом (см. рис. 17), использование которых необходимо при обработке спектров РОР.

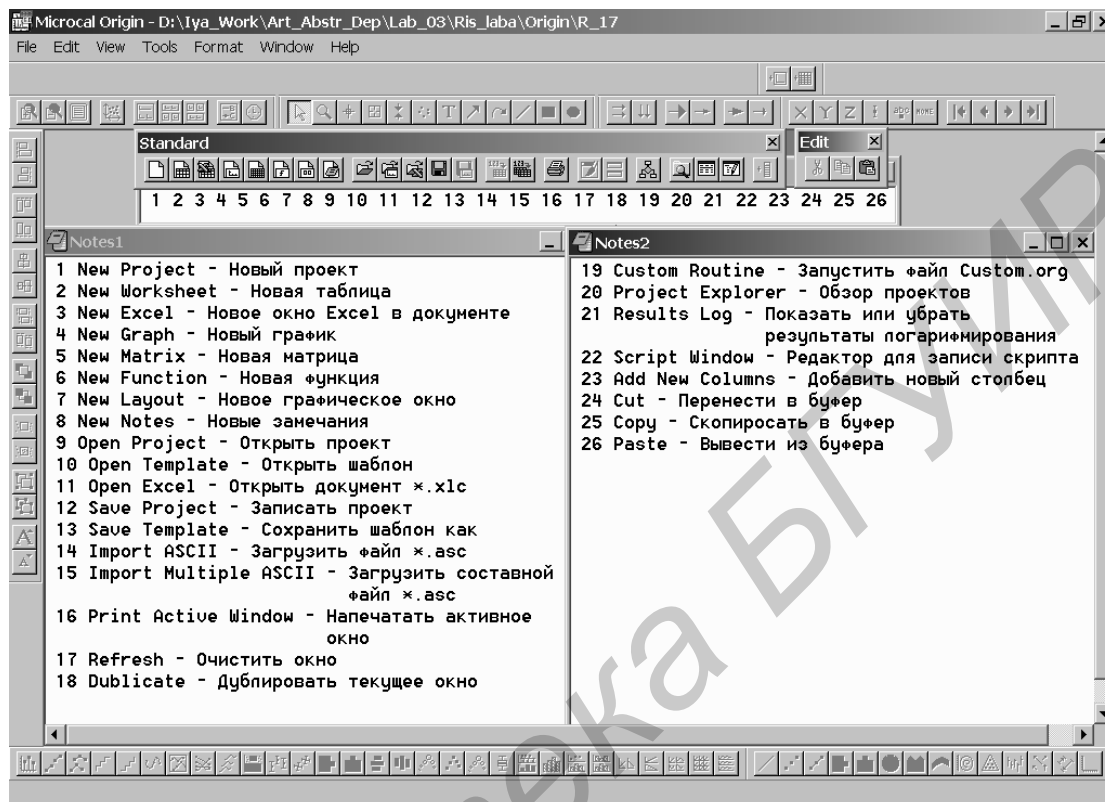


Рис. 17. Назначение кнопок панели инструментов

Документы пакета Origin являются файлам. Файлом называют имеющую имя упорядоченную совокупность данных или кодов программ, размещенную на том или ином носителе, обычно на жестком или гибком диске либо CD-ROM. Файлы документов в Origin имеют расширение orj, которое указывается сразу после имени файла. В панели инструментов представлены следующие возможные **операции с файлами** (см. рис. 17):

**New Project** (Новый проект) – создание нового документа с очисткой окна редактирования;

**New Worksheet** (Новая таблица) – создание новой таблицы в открытом документе;

**New Graph** (Новый график) – создание нового окна для построения графика в открытом документе;

**New Notes** (Новые замечания) – создание нового окна-описания, позволяющего задавать текстовые комментарии к документам. В это окно можно вводить текст. В текстовом блоке визир имеет вид вертикальной черточки и отмечает место ввода. Текст редактируется общепринятыми средствами: перемещением места ввода клавишами управления курсором, установкой режимов

вставки и замещения символов (клавиша Insert), стиранием (клавиши Del и Backspace), копированием в буфер обмена, вставкой из буфера и т.д.;

**Open Project** (Открыть проект) – загрузка ранее созданного документа из диалогового окна;

**Save Project** (Сохранить проект) – запись текущего документа с его именем;

**Import ASCII** (Импорт) – загрузка в окно Worksheet файла \*.asc;

**Print Active Window** (Печать активного окна) – распечатка активного окна на принтере.

#### **Кнопки операций редактирования документов:**

**Cut** (Вырезать) – перенос выделенной части документа в буфер обмена с очисткой этой части документа;

**Copy** (Копировать) – копирование выделенной части документа в буфер обмена с сохранением выделенной части документа;

**Paste** (Вставить) – перенос содержимого буфера обмена в окно редактирования на место, указанное (выделенное) курсором мыши.

Часть описанных кнопок и иных объектов пользовательского интерфейса находится в пассивном состоянии. Пиктограммы и переключатели становятся активными, как только появляется необходимость в их использовании.

#### **Работа с файлами**

Пункт **File** (Файл) главного меню служит для работы с файлами документов. Если сделать позицию **File** (Файл) главного меню активной, появится выпадающее подменю (рис. 18), большая часть которого дублируется пиктограммами, – описывается выше.

Операция закрытия документа **Close** (Закреть) закрывает окно с текущим документом, и программа переходит к работе с окном предшествующего документа (или к пустому первому окну, если другие документы не вводились). Если какой-либо из документов в закрываемых окнах подвергнется модификации, то программа спросит, надо ли записывать документ на диск. Для сохранения документа отвечают Y, иначе – N. Если документ не модифицировался, соответствующее окно просто закрывается.

Иногда для выхода из Origin вместо команды **Close** (Закреть) удобнее для окончания работы с системой использовать команду **Exit** (Выход) [Alt + F4]. Тогда все окна, содержащие документы, не подвергнутые модификации, закроются автоматически.

Команды сохранения на диске всех загруженных ранее документов, подвергавшихся редактированию и модификации:

**Save Project** (Сохранить проект) – сохранить текущий документ без переименования;

**Save Project As...** (Сохранить проект как) – сохранить текущий документ под новым именем.

Если пользователь забыл записать какой-либо документ на диск, система сообщит об этом, выдав запрос. Нужно ответить Y, если документ надо сохранить, и N – если сохранение не требуется.

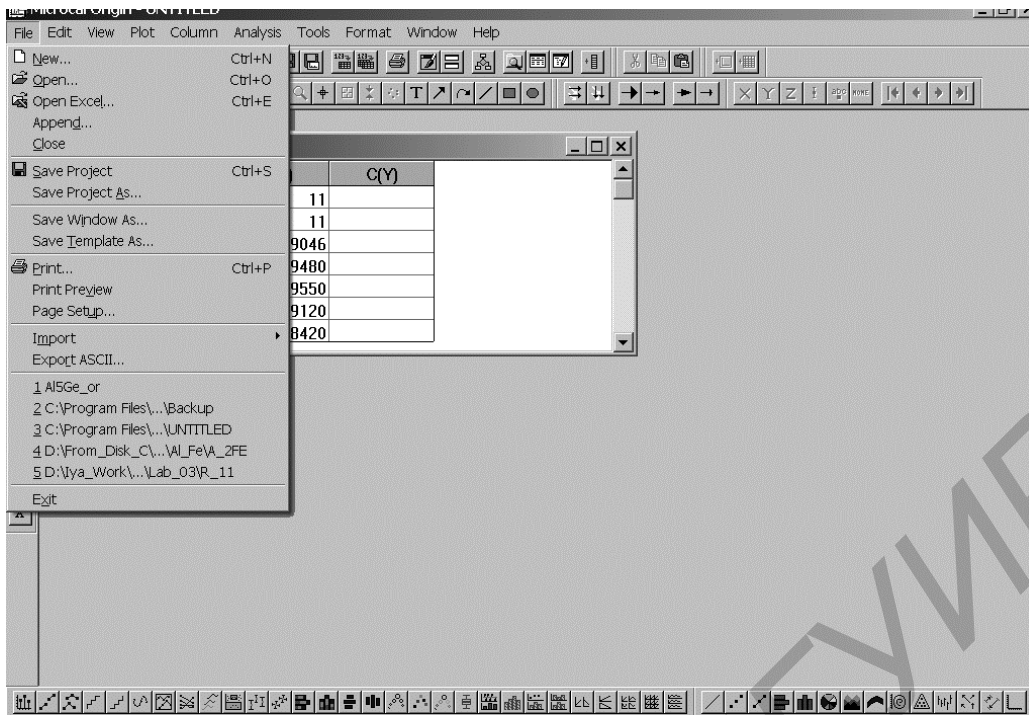


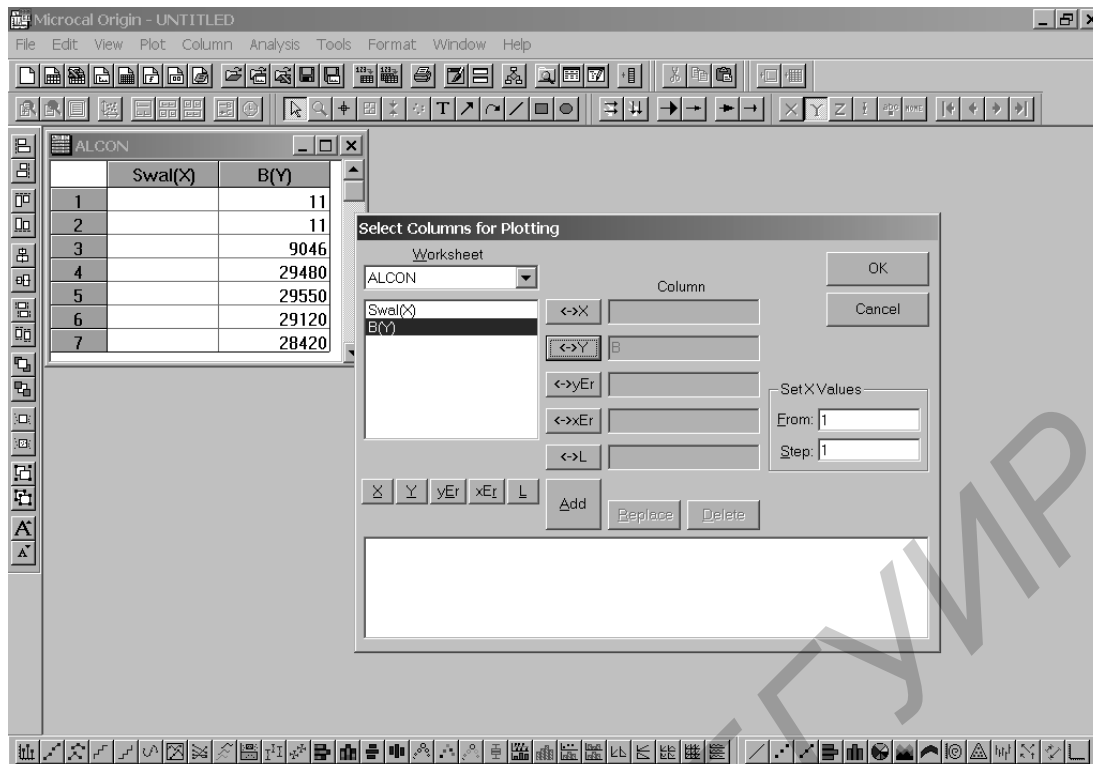
Рис. 18. Переднее панно пакета Origin с активной позицией File главного меню

## 10.2. Основные приемы работы в Origin при обработке спектров POP

Рассмотрим простейшие приемы работы с пакетом Origin и определим основные опции форматирования графиков. Обработывая спектр POP с помощью пакета Origin, первоначально необходимо импортировать данные спектра, имеющие тип ASCII, в **Worksheet** (Таблица). Для этого надо выбрать в меню команду **File | New | Worksheet** (Файл | Новый | Таблица). Когда появится таблица, будет доступна команда меню **File | Import | Single ASCII** (Файл | Импорт | Одиночный ASCII). В появившемся стандартном запросе имени файла задают нужный файл. В результате данные спектра будут загружены в столбец таблицы, соответствующий оси Y на графике (рис. 19, а).

Чтобы построить график, необходимо зайти в пункт основного меню **Plot** (График) и выбрать подпункт меню, определяющий тип графика. Будем использовать формат графиков 2D-типа – декартовы графики. Для построения спектра POP предпочтительно использовать позицию **Line** (Линия), тогда точки на графике будут соединены линией. При построении простых зависимостей  $x = f(y)$ , например таких, как на рис. 11 и 14, б, выбирают построение графика в виде **Line+Symbol** (Линия+Символ). После выбора позиции в подменю **Plot** (График) в центр текущего окна выводится диалоговое окно **Select Columns for Plotting** (Выбор столбцов для построения) (см. рис. 19, а). Слева в нем расположен список столбцов таблицы, выбранной в списке **Worksheet** (Таблица). Выбрав столбец, можно указать его роль кнопками **X**, **Y**, **yEr** (Ошибка по Y) и **xEr** (Ошибка по X). Столбцы переносятся в поля правее кнопками согласно их ролям. Например, в рассматриваемом случае B(Y) определяют как **Y** (см. рис. 19, а), затем нажимают кнопки **Add** (Добавить) и **OK**.

a



b

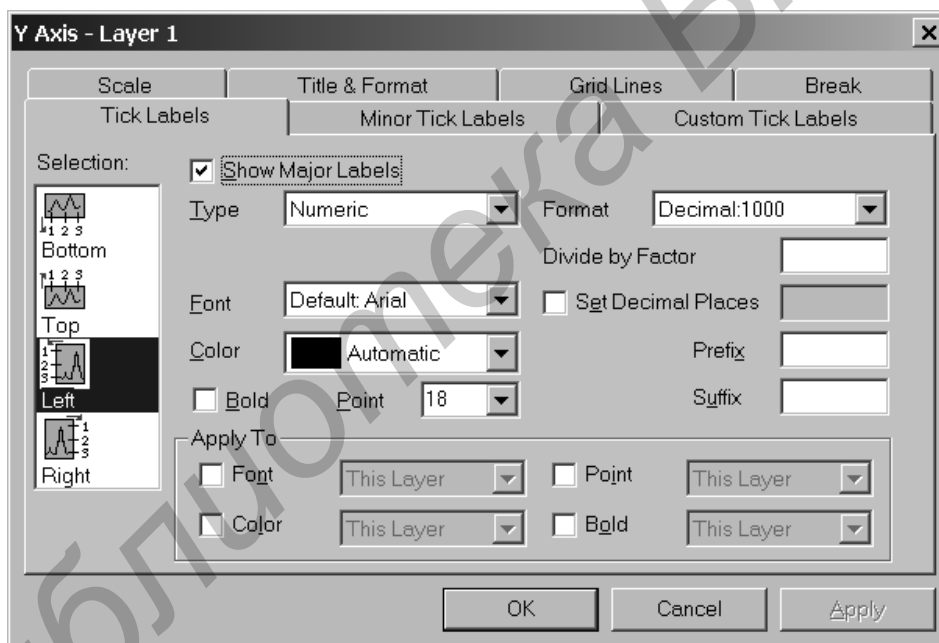


Рис. 19. Построение графика в пакете Origin:

a – окно построения графика кривой данных из окна таблицы. Пример построения графика РОР (импульсы спектра находятся в столбце B(Y)); б – окно с опциями задания формата 2D-графика

В результате появляется график, для определения формата которого необходимо дважды щелкнуть левой клавишей мыши на любой из объектов графика (кроме титульных подписей рисунка), например, на численные значения оси Y. В результате загружается диалоговое окно (см. рис. 19, б), имеющее семь закладок, в левой области которого с помощью мыши (левая клавиша) в окне

**Selection** (Выделение) можно переходить от вертикальной оси к горизонтальной:

**Tick Labels** (Подписи штрихов) – управление метками (подписями) у осей. Можно определять: **Type** (Тип) – тип подписей (числа, текст, время, дата, месяц и т.д.), **Font** (Шрифт) – набор шрифтов, **Size** (Размер) – размер шрифтов, **Colour** (Цвет) – цвет подписей, **Format** (Формат) – формат подписей и т.д.;

**Minor Tick Labels** (Подписи вспомогательных штрихов) – второстепенные подписи у осей. Они появятся на графике, когда основные подписи будут убраны, удалив левой клавишей мыши птичку рядом с **Show Major Labels** (Показывать основные подписи);

**Custom Tick Labels** (Настраиваемые подписи штрихов) – определение подписей у осей: **Rotation (degree)** (Поворот в градусах) – числовое значение угла поворота подписи к штрихам оси, **Tick To Label** (Подпись к штрихам) – расположение подписи относительно оси в нужном месте и т.д.;

**Scale** (Шкала) – управление опциями осей: **From** (От) и **To** (До) – указание начального и конечного значений отображаемой шкалы графика, **Type** (Тип) – установка масштаба (линейный масштаб **Linear**, логарифмический масштаб **Log10** и т.д.), **Increment** (Приращение) – величина шага построения, **Major** и **Minor Ticks** (Основные и вспомогательные штрихи) – количество штрихов между подписями у оси и т.д.;

**Grid Lines** (Линии сетки) – форматирование масштабной сетки на рисунке (см. рис. 8, 11, 14, б). Какие линии сетки будут видны, определяют с помощью выставления птички левой клавишей мыши у **Major Grids** (Главная сетка) и у **Minor Grids** (Вспомогательная сетка). **Line Type** (Тип линии) и **Thickness** (Толщина) задают тип линий и их толщину соответственно. **Line Color** (Цвет линии) устанавливает цвет линий. Если опция **Grid Lines** (Линии сетки) отключена, то масштабная сетка графика не строится;

**Title & Format** – титульная подпись и формат. Птичка у **Show Axis & Ticks** определяет наличие осей графика, **Color** (Цвет) устанавливает цвет оси. **Major** и **Minor Ticks** задают направление делений на оси (внутри, наружу, в обе стороны или их отсутствие).

В нижней части каждой закладки имеются следующие клавиши:

**OK** – закрытие окна;

**Cancel** (Отмена) – выход из установок;

**Apply** (Применить) – применение изменений опций к активному графику.

На некоторых закладках присутствует группа **Apply To** (Применить к) – распространение выбранного стиля форматирования на данный слой, на все слои на странице или на все окна в проекте (см. рис. 19, б).

Для форматирования титульных подписей к осям **X** и **Y Axis Title** (Заголовки осей X и Y) необходимо дважды щелкнуть левой клавишей мыши на соответствующую подпись. На экране появится окно **Text Control** (Управление текстом) (рис. 20). Для ввода терминов на русском языке, необходимо выбирать мышью шрифты с расширением CYR, например Arial CYR. При наборе текста (выделенная область в окне на рис. 20) в нижней части окна отображается вво-

димый текст. Стиль шрифтов может быть: **N** – отменяет дополнительное форматирование, **B** – полужирный шрифт, **I** – наклонный шрифт, **U** – подчеркнутый снизу шрифт. Также имеется возможность набирать верхние и нижние индексы ( $x^2$  и  $x_2$ ). Кнопка **Г** заменяет латинские буквы на соответствующие греческие. Как обычно, кнопка **OK** диалогового окна фиксирует выбор, а кнопка **Cancel** (Отмена) позволяет отказаться от модификации текстовых подписей. **Set Default** (Установить по умолчанию) возвращает установки по умолчанию.

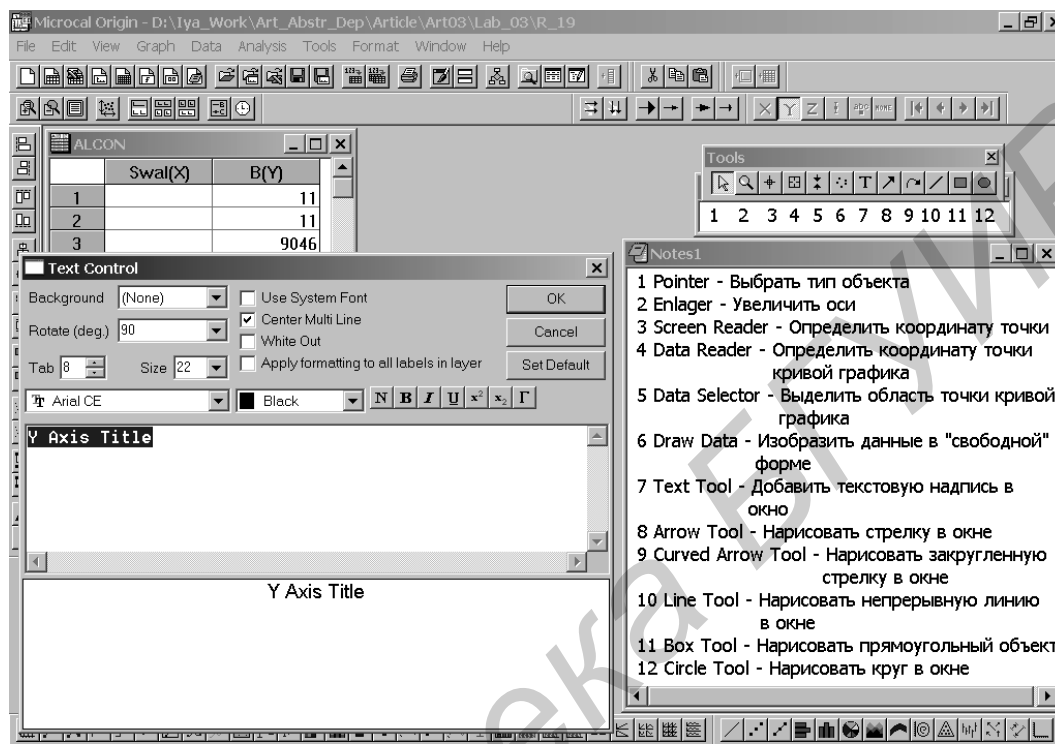


Рис. 20. Окно для редактирования текста титульных надписей Text Control, назначение кнопок панели инструментов Tools

Когда построен график, в его окне присутствует рамка (см. рис. 8, 11), содержащая информацию: наименование столбца, данные которого построены, и тип линии построения. Если по рамке один раз щелкнуть левой клавишей мыши, то она станет красной. Уцепившись курсором мыши за поле рамки и держа нажатой левую клавишу мыши, рамку можно передвигать по окну графика. Если щелкнуть второй раз левой клавишей мыши на выделенную рамку, то на экране появится окно **Text Control** (Управление текстом), в котором можно редактировать текст рамки, и т.д. Когда рамка выделена красным цветом, нажимая клавишу **Del** на клавиатуре или щелкнув правой клавишей мыши, выбирая команду **Delete**, рамку можно удалить. Если щелкнуть левой клавишей мыши на тип линии построения, то она будет выделена красной рамкой малого размера. Теперь, щелкнув на эту красную рамку линии второй раз левой клавишей мыши, в выведенном на экране окне **Plot Details** (Параметры графика), имеющем панельный переключатель, можно редактировать тип линии построения. На закладке **Symbol** (Символ) можно, например, изменять вид используемого символа в **Preview** (Предварительный просмотр), в поле **Size** (Размер) задается





## II

1. Провести элементный анализ фольги сплава алюминия по распечатке экспериментального спектра ОР ионов гелия по формулам (3) и (5) и данным табл. 2 прил. Энергия ионов, геометрия эксперимента и энергетическая толщина одного канала известны.

2. Разбить условно на спектре сигнал от легирующего элемента  $i$  на 4–6 слоев с постоянной концентрацией элемента. По формуле (5) перевести номера каналов  $n_j$ , соответствующих границам выделенных слоев, в шкалу энергии и определить  $\Delta E_j$ . По формуле (6) вычислить толщину данных слоев  $\Delta t_j$ .

3. Установить по спектру в приближении средней энергии (8) концентрацию легирующего элемента  $C_i$  на поверхности фольги, а также на ее глубине послойно методом итерации, применяя формулы (7), (10) и (12) и используя графики зависимости тормозных сечений алюминия  $\varepsilon^{Al}$  и легирующего элемента  $\varepsilon^i$  от энергии ионов гелия  $E$  (представлены на рабочем месте).

4. Построить график глубинного распределения легирующего элемента  $C_i = f(t)$ .

## III

1. Определить по экспериментальному спектру ОР ионов гелия от фольги сплава алюминия в цифровом виде на персональном компьютере в пакете Origin номера каналов  $n_i$ , присутствующих на спектре сигналов от компонентов мишени.

2. Установить состав мишени, используя формулы (3), (5) и табл. 2 прил. Энергия ионов, геометрия эксперимента и энергетическая толщина одного канала известны.

3. Вычислить в первом приближении расчета факторов тормозного сечения содержание легирующего элемента в сплаве по формуле (12). При расчетах исследовать область спектра с равномерным распределением элементов.

4. Построить графики зависимости тормозных сечений алюминия  $\varepsilon^{Al}$  и легирующего элемента  $\varepsilon^i$  от энергии ионов гелия  $E$  (рис. 7) по данным табл. 3 прил. с помощью программы Origin.

5. Определить фактор тормозного сечения  $[\bar{\varepsilon}]_{Al}^{Al-Ge}$  при рассеянии ионов гелия на атомах алюминия в сплаве по формулам (7), (8) и (10).

6. Рассчитать глубинное разрешение метода РОР в данном сплаве по формуле (11), используя данные табл. 1 прил.

7. Рассчитать погрешность вычисления относительной концентрации компонентов сплава методом РОР, применяя формулы (16)–(19), и абсолютную погрешность определения содержания легирующего элемента по формулам (20), (21).

8. Результаты измерений и вычислений занести в таблицу:

$n_{Al}$ , канал	$n_i$ , канал	$E^0$ , кэВ	$C_i$ , ат. %	$\left[ \frac{\bar{\epsilon}}{10^{15} \text{ ат} \cdot \text{см}^{-2}} \right]_{Al-Ge}^{Al}$ , эВ	$\Delta t_{дет.}$ , МКМ	$\epsilon_{(N_{Ge}^{Al-Ge}/N_{Al}^{Al-Ge})}$	$\Delta N_i^{Al-i}$ , ат. %

## 12. Контрольные вопросы

1. Сформулируйте физические законы, лежащие в основе метода РОР. Опишите модель упругого соударения иона со свободным атомом.
2. Какие существуют ограничения энергии ускоренных частиц в методе РОР?
3. Дайте определение глубины анализа метода РОР. От чего она зависит?
4. Запишите формулу-определение кинематического фактора. Постройте график зависимости кинематического фактора от массы атомов мишени.
5. Охарактеризуйте элементную избирательность метода РОР и факторы, определяющие возможность обнаружения примеси.
6. От чего зависит чувствительность метода РОР?
7. Как определяется величина сигнала компонента образца на спектре РОР?
8. Дайте определение дифференциального сечения рассеяния. От каких величин оно зависит?
9. Изобразите упрощенную схему эксперимента по РОР.
10. Перечислите и кратко охарактеризуйте основные типы энергетических спектров РОР.
11. Опишите схему получения энергетического спектра ОР.
12. Запишите формулу перевода шкалы глубин на спектрах ОР в шкалу энергий.
13. Объясните универсальное выражение перевода энергетической шкалы на спектрах ОР в шкалу глубин.
14. Запишите формулы для расчета фактора тормозного сечения.
15. Дайте определение тормозного сечения.
16. Чем характеризуется тормозная способность вещества?
17. Сформулируйте правило Брэгга.
18. Изобразите общий вид зависимости тормозного сечения от энергии анализирующих частиц.
19. Запишите и объясните формулу определения относительной концентрации компонентов сплава.
20. Изобразите спектр ОР и укажите, какую информацию можно получить из спектров ОР.
21. Объясните устройство и принцип работы спектрометра РОР.
22. Какие дополнительные возможности дает использование компьютерного моделирования при анализе спектров ОР?

## Литература

1. Ташлыкова-Бушкевич И.И., Шепелевич В.Г. Адаптация метода резерфордовского обратного рассеяния для анализа поверхности твердых тел в лабораторном практикуме // Междунар. науч.-практ. конф. «Современные технологии образования – фундамент будущего»: Материалы докл. – Мн., 2002. С. 330–332.
2. Ташлыкова-Бушкевич И.И. Анализ поверхности сплавов алюминия методом резерфордовского обратного рассеяния в лабораторном практикуме «Элементы квантовой теории» по курсу «Физика». – Мн., 2002. – 17 с. Деп. в БелИСА. 26.12.2002. № Д20032.
3. Шепелевич В.Г., Ташлыкова-Бушкевич И.И. Состав и структура сплавов на основе алюминия, полученных способом сверхбыстрой закалки из расплава // Перспективные материалы. – 1998. – № 5. – С. 31–33.
4. Tashlykova-Bushkevich I.I., Shepelevich V.G. Dope depth distribution in rapidly solidified Al-Ge and Al-Me (Me= Fe, Cu, Sb) alloys // J. Alloys and Compounds. – 2000. – V. 299. – № 1–2. – P. 205–207.
5. Ташлыкова-Бушкевич И.И. Распределение примеси в быстрозатвердевших сплавах Al-Cu // Физика и химия обработки материалов. – 2002. – № 5. – С. 76–80.
6. Савельев И.В. Курс физики: В 3 т. – М.: Наука, 1989. Т. 3.
7. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики. – М.: Высш. шк., 1989.
8. Chu W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A. Backscattering Spectroscopy. – N. Y.: Academic Press, 1978. – 384 p.
9. Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Ташлыков И.С. Неразрушающий анализ поверхностей твердых тел ионными пучками. – Мн.: Университетское, 1987. – 256 с.
10. Ключников А.А., Пучеров Н.Н., Чеснокова Т.Д., Щербин В.Н. Методы анализа на пучках заряженных частиц. – Киев: Наукова думка, 1987. – 152 с.
11. Ion beam handbook for material analysis / Ed. by J.W. Mayer, E. Rimini. – N. Y.: Academic Press, 1977. – 280 p.
12. Геринг Г.И., Полещенко К.Н., Вершинин Г.А. Физические основы методов анализа поверхностей: Учеб.-метод. пособие для студ. физ. фак-та. – Омск: ОмГУ, 1998. <http://www.omsu.omskreg.ru/~fiz/>.
13. Ташлыкова-Бушкевич И.И. Перераспределение сопутствующей примеси при отжиге быстрозатвердевших сплавов Al-Fe, изученное методом обратного рассеяния ионов гелия // IV Междунар. конф. «Взаимодействие излучений с твердым телом»: Труды. – Мн., 2001. С. 388–390.
14. Шипатов Э.Т. Обратное рассеяние быстрых ионов: Теория, эксперимент, практика. – Ростов: РГУ, 1988. – 160 с.
15. Barradas N.P., Jeynes C., Webb R.P. Simulated annealing analysis of Rutherford backscattering data // Appl. Phys. Lett. – 1997. – V. 71, № 2. – P. 291–293.
16. Doolittle L.N. Algorithms for the rapid simulation of Rutherford backscattering spectra // Nucl. Instrum. Meth. – 1985. – V. B9. – P. 344–348.
17. Ташлыкова-Бушкевич И.И., Шепелевич В.Г. Пространственное распределение железа в быстрозатвердевших сплавах Al-Fe // Физика и химия обработки материалов. – 1999. – № 6. – С. 73–76.
18. <http://www.microcal.com>.

## Приложение

Таблица 1

Параметры химических элементов [7]

Атом	Атомный номер $Z_2$	Атомная масса $M_2$ , а.е.м.	Атомная плотность $N$ , $10^{22}$ ат·см $^{-3}$	Атом	Атомный номер $Z_2$	Атомная масса $M_2$ , а.е.м.	Атомная плотность $N$ , $10^{22}$ ат·см $^{-3}$
H	1	1,008	–	Ga	31	69,717	5,10
He	2	4,003	–	Ge	32	72,638	4,42
Li	3	6,940	4,70	As	33	74,922	4,65
Be	4	9,012	12,1	Se	34	78,990	3,67
B	5	10,814	13,00	Br	35	79,904	2,36
C	6	12,011	11,50 (графит)	Kr	36	83,801	2,17
N	7	14,007	–	Rb	37	85,468	1,148
O	8	15,999	–	Sr	38	87,616	1,78
F	9	18,998	–	Y	39	88,906	3,02
Ne	10	20,171	4,36	Zr	40	91,224	4,29
Na	11	22,990	2,65	Nb	41	92,906	5,56
Mg	12	24,310	4,30	Mo	42	95,890	6,42
Al	13	26,982	6,02	Tc	43	99	7,04
Si	14	28,086	5,00	Ru	44	101,046	7,36
P	15	30,974	–	Rh	45	102,906	7,26
S	16	32,061	–	Pd	46	106,441	6,80
Cl	17	35,453	–	Ag	47	107,868	5,85
Ar	18	39,948	2,66	Cd	48	112,434	4,64
K	19	39,097	1,40	In	49	114,818	3,83
Ca	20	40,081	2,30	Sn	50	118,734	3,62
Sc	21	44,956	4,27	Sb	51	121,759	3,31
Ti	22	47,879	5,66	Te	52	127,628	2,94
V	23	50,942	7,22	I	53	126,904	2,36
Cr	24	51,996	8,33	Xe	54	131,305	1,64
Mn	25	54,938	8,18	Cs	55	132,905	9,05
Fe	26	55,847	8,50	Ba	56	137,327	1,60
Co	27	58,933	8,97	La	57	138,905	2,70
Ni	28	58,728	9,14	Ce	58	140,908	2,91
Cu	29	63,546	8,45	Pr	59	140,908	2,92
Zn	30	65,387	6,55	Nd	60	144,241	2,93

Атом	Атомный номер $Z_2$	Атомная масса $M_2$ , а.е.м.	Атомная плотность $N$ , $10^{22}$ ат·см $^{-3}$	Атом	Атомный номер $Z_2$	Атомная масса $M_2$ , а.е.м.	Атомная плотность $N$ , $10^{22}$ ат·см $^{-3}$
Pm	61	145	–	Ta	73	180,948	5,55
Sm	62	150,363	3,03	W	74	183,842	6,30
Eu	63	151,964	2,04	Re	75	186,213	6,80
Gd	64	157,256	3,02	Os	76	190,333	7,14
Tb	65	158,925	3,22	Ir	77	192,216	7,06
Dy	66	162,484	3,17	Pt	78	195,081	6,62
Ho	67	164,930	3,22	Au	79	196,967	5,90
Er	68	167,261	3,26	Hg	80	200,617	4,26
Tm	69	168,934	3,32	Tl	81	204,384	3,50
Yb	70	173,036	3,02	Pb	82	207,177	3,30
Lu	71	174,967	3,39	Bi	83	209,980	2,82
Hf	72	178,509	4,52				

Таблица 2

Кинематический фактор  $K_M$  ионов гелия  ${}^4\text{He}^+$  [7]

Атом	Атомный номер $Z_2$	Угол рассеяния $\theta^*$ , град				
		180	175	170	165	160
H	1	–	–	–	–	–
He	2	–	–	–	–	–
Li	3	0,07202	0,07234	0,0733	0,07493	0,07727
Be	4	0,1482	0,1487	0,1502	0,1527	0,1564
B	5	0,2112	0,2118	0,2136	0,2166	0,2209
C	6	0,2501	0,2507	0,2526	0,2559	0,2604
N	7	0,3086	0,3092	0,3113	0,3147	0,3194
O	8	0,3597	0,3604	0,3625	0,3659	0,3708
F	9	0,425	0,4257	0,4278	0,4312	0,436
Ne	10	0,4476	0,4483	0,4503	0,4537	0,4584
Na	11	0,4948	0,4955	0,4974	0,5007	0,5053
Mg	12	0,5145	0,5151	0,5171	0,5203	0,5248
Al	13	0,55	0,5506	0,5525	0,5556	0,56

Атом	Атомный номер $Z_2$	Угол рассеяния $\theta^*$ , град				
		180	175	170	165	160
Si	14	0,5633	0,5639	0,5657	0,5688	0,5731
P	15	0,5946	0,5952	0,597	0,5999	0,604
S	16	0,6054	0,6059	0,6077	0,6105	0,6145
Cl	17	0,6354	0,6359	0,6376	0,6403	0,6441
Ar	18	0,6689	0,6694	0,6409	0,6735	0,677
K	19	0,6631	0,6636	0,6651	0,6677	0,6713
Ca	20	0,6698	0,6703	0,6718	0,6744	0,6779
Sc	21	0,6997	0,7002	0,7016	0,704	0,7073
Ti	22	0,7153	0,7158	0,7171	0,7194	0,7226
V	23	0,7298	0,7303	0,7316	0,7338	0,7368
Cr	24	0,7345	0,735	0,7362	0,7384	0,7414
Mn	25	0,7468	0,7472	0,7485	0,7505	0,7534
Fe	26	0,7504	0,7508	0,752	0,7541	0,7569
Co	27	0,7618	0,7622	0,7634	0,7653	0,7681
Ni	28	0,761	0,7614	0,7626	0,7645	0,7673
Cu	29	0,777	0,7774	0,7785	0,7803	0,7829
Zn	30	0,7825	0,7829	0,784	0,7858	0,7883
Ga	31	0,7946	0,795	0,796	0,7977	0,8001
Ge	32	0,8019	0,8022	0,8032	0,8049	0,8072
As	33	0,8074	0,8078	0,8087	0,8104	0,8127
Se	34	0,8163	0,8166	0,8175	0,8192	0,8213
Br	35	0,8183	0,8186	0,8195	0,8211	0,8233
Kr	36	0,826	0,8263	0,8272	0,8287	0,8307
Rb	37	0,8281	0,8294	0,8302	0,8317	0,8338
Sr	38	0,8329	0,8332	0,834	0,8355	0,8375
Y	39	0,8351	0,8354	0,8362	0,8377	0,8396
Zr	40	0,8339	0,8392	0,8401	0,8414	0,8434
Nb	41	0,8416	0,8419	0,8427	0,8441	0,846
Mo	42	0,8462	0,8465	0,8473	0,8486	0,8505

Продолжение табл. 2

Атом	Атомный номер $Z_2$	Угол рассеяния $\theta^*$ , град				
		180	175	170	165	160
Tc	43	0,8506	0,8509	0,8516	0,853	0,8548
Ru	44	0,8534	0,8537	0,8545	0,8557	0,8575
Rh	45	0,8559	0,8561	0,8569	0,8581	0,8657
Pd	46	0,8602	0,8605	0,8612	0,8624	0,8642
Ag	47	0,762	0,8623	0,863	0,8642	0,8659
Cd	48	0,8672	0,8674	0,8681	0,8693	0,8709
In	49	0,8698	0,87	0,8707	0,8719	0,8735
Sn	50	0,8738	0,874	0,8747	0,8758	0,8773
Sb	51	0,8767	0,877	0,8776	0,8787	0,8702
Te	52	0,882	0,8823	0,8829	0,8839	0,8854
I	53	0,8814	0,8816	0,8823	0,8833	0,8848
Xe	54	0,8852	0,8854	0,886	0,887	0,8884
Cs	55	0,8865	0,8867	0,8873	0,8883	0,8897
Ba	56	0,8899	0,8901	0,8907	0,8917	0,8931
La	57	0,8911	0,8913	0,8919	0,8929	0,8942
Ce	58	0,892	0,8922	0,8928	0,8937	0,8951
Pr	59	0,8926	0,8928	0,8933	0,8943	0,8956
Nd	60	0,8949	0,8951	0,8957	0,8966	0,8979
Pm	61	0,8968	0,897	0,8975	0,8984	0,8997
Sm	62	0,899	0,8991	0,8997	0,9006	0,9019
Eu	63	0,9	0,9002	0,9007	0,9016	0,9028
Ob	64	0,9032	0,9034	0,9039	0,9047	0,906
Tb	65	0,9041	0,9043	0,9048	0,9057	0,9069
Dy	66	0,9062	0,9063	0,9068	0,9077	0,9089
Ho	67	0,9075	0,9076	0,9081	0,909	0,9101
Er	68	0,9087	0,9089	0,9094	0,9102	0,9113
Tm	69	0,9096	0,9097	0,9102	0,911	0,9122
Yb	70	0,9116	0,9118	0,9123	0,9131	0,9142
Lu	71	0,9125	0,9127	0,9132	0,914	0,9151



Атом	Атомный номер $Z_2$	Угол рассеяния $\theta^*$ , град				
		180	175	170	165	160
Hf	72	0,9142	0,9143	0,9148	0,9156	0,9167
Ta	73	0,9153	0,9155	0,9159	0,9167	0,9178
W	74	0,9166	0,9167	0,9172	0,9179	0,919
Re	75	0,9176	0,9177	0,9182	0,9189	0,92
Os	76	0,9193	0,9194	0,9198	0,9206	0,9216
Ir	77	0,9201	0,9202	0,9206	0,9214	0,9224
Pt	78	0,9212	0,9213	0,9218	0,9225	0,9235
Au	79	0,9219	0,9221	0,9225	0,9232	0,9242
Hg	80	0,9233	0,9234	0,9238	0,9245	0,9255
Tl	81	0,9246	0,9248	0,9252	0,9259	0,9268
Pb	82	0,9256	0,9258	0,9262	0,9268	0,9278
Bi	83	0,9262	0,9264	0,9268	0,9275	0,9284

\* Измеряется в лабораторной системе координат.

Таблица 3

Тормозное сечение  $\varepsilon$  различных химических элементов для ионов гелия  ${}^4\text{He}^+$  (эВ/( $10^{15}$  ат·см $^{-2}$ )) [9]

Атом	Ат. номер $Z_2$	Энергия E, кэВ								
		600	800	1000	1200	1400	1600	1800	2000	2400
H	1	14,11	13,5	12,49	11,34	10,19	9,154	8,289	7,606	6,75
He	2	17,88	18,03	17,52	16,63	15,56	14,46	13,44	12,52	11,12
Li	3	21,99	21,46	20,64	19,6	18,42	17,28	16,24	15,35	13,63
Be	4	26,76	25,89	24,71	23,4	22,06	20,8	19,65	18,64	16,55
B	5	33,49	32,67	31,27	29,48	27,59	25,74	24,1	22,7	20,09
C	6	36,58	37,21	36,19	34,27	31,99	29,72	27,68	25,97	23,1
N	7	48,45	48,12	46,24	43,54	40,58	37,71	35,15	32,98	29,39
O	8	47,72	48,39	47,34	45,29	42,81	40,27	37,91	35,84	32,39
F	9	43,99	45,66	45,73	44,76	43,15	41,24	39,24	37,31	34,44
Ne	10	43,59	45,54	45,86	45,1	43,68	41,92	40,06	38,24	35,79
Na	11	44,08	44,95	44,88	44,24	43,14	41,94	40,73	39,56	36,57

Атом	Ат. номер $Z_2$	Энергия E, кэВ								
		600	800	1000	1200	1400	1600	1800	2000	2400
Mg	12	57,26	56,78	55,26	53,21	50,99	48,82	46,85	45,11	41,57
Al	13	54,86	53,81	52,43	50,85	49,18	47,5	45,85	44,25	40,38
Si	14	71,09	69,44	66,3	62,5	58,62	55,02	51,88	49,26	44,71
P	15	68,45	67,57	65,13	62,06	58,88	55,87	53,08	50,67	45,88
S	16	68,61	69,72	67,75	64,72	61,48	58,37	55,41	52,89	47,81
Cl	17	86,5	84,96	80,68	75,18	69,52	64,36	60,04	56,65	51,15
Ar	18	88,7	87,82	83,47	77,52	71,27	65,56	60,81	57,13	51,75
K	19	89,08	90,61	88,88	85,56	80,68	75,61	70,84	66,64	60,13
Ca	20	97,3	97,14	94,47	90,5	85,61	80,58	75,64	71,19	64,19
Sc	21	96,27	96,3	93,86	90,42	85,73	81,12	76,65	72,53	65,71
Ti	22	95,41	95,76	93,54	89,87	85,55	81,14	77	73,31	67,61
V	23	90,13	90,55	88,7	85,58	81,89	78,13	74,6	71,45	66,28
Cr	24	84,81	86,62	85,97	83,76	80,68	77,24	73,78	70,51	66,16
Mn	25	82,69	84,4	83,6	81,35	78,41	75,3	72,36	69,72	65,29
Fe	26	86,9	89,26	88,64	86,13	82,59	78,65	74,71	71,05	66,57
Co	27	79,07	82,04	82,29	80,82	78,38	75,5	72,55	69,75	65,5
Ni	28	74,6	77,74	78,66	78,07	76,56	74,54	72,3	70,04	66
Cu	29	68,2	71,77	73,58	74,05	73,5	72,24	70,51	68,48	64,9
Zn	30	70,47	72,85	73,47	72,98	71,71	69,97	68,12	66,04	62,25
Ga	31	78,12	79,41	79,12	77,79	75,86	73,6	71,25	68,82	64,46
Ge	32	81,9	82,76	82,1	80,26	77,76	75,18	72,46	69,8	65,08
As	33	87,03	87,98	87,02	84,84	82,01	79,14	75,97	73,05	67,85
Se	34	89,4	89,8	87,8	84,9	81,6	78,4	75,3	72,4	67,06
Br	35	101,1	101,1	97,91	93,04	87,7	82,65	78,29	74,75	69,06
Kr	36	108,2	108	104,2	98,67	92,74	87,26	82,66	79,04	63,04
Rb	37	108,3	110,1	107,4	102,6	97,34	92,4	87,67	83,47	76,51
Sr	38	117	117,4	114,2	109	103,1	97,75	92,56	87,93	80,3
Y	39	120,4	121,1	117,3	111,6	105,5	99,6	93,9	88,8	84,35

Атом	Ат. номер $Z_2$	Энергия E, кэВ								
		600	800	1000	1200	1400	1600	1800	2000	2400
Zr	40	126	126,8	123,2	117,9	112	106,2	100,7	97,5	87,64
Nb	41	128,2	128,7	125,1	119,8	114	108,4	103	98,1	90,26
Mo	42	120,5	122,2	119,6	115,1	110	104,8	99,88	95,21	88,09
Tc	43	126,8	128,9	126,3	121,2	115,4	109,2	103,3	97,85	90,14
Ru	44	116,8	120,5	119,5	116	111,3	105,8	100,7	95,86	89,05
Rh	45	113,6	117,7	117,2	113,9	109,5	104,6	99,85	95,42	89,21
Pd	46	104,9	111,9	112,9	110,3	105,8	100,5	95,32	90,65	86,26
Ag	47	101,9	108,4	110,2	108,8	105,4	100,9	96,02	91,22	86,66
Cd	48	107	112	113	111,4	108,1	103,8	99,24	94,71	89,47
In	49	110,1	113,7	115,2	114,8	112,7	109,3	105	100	94,46
Sn	50	115,8	118,6	118,3	115,8	112,1	107,9	103,6	99,49	93,82
Sb	51	122,2	122,2	119,9	116,8	113,3	110	106,8	103,7	97,58
Te	52	127,2	126,5	123,4	119,4	115,3	111,2	107,4	103,9	97,5
I	53	141,7	141	135,8	128,5	120,6	113,2	106,7	101,5	95,02
Xe	54	149,7	148,2	143	136	128,7	122	116,2	111,5	104,1
Cs	55	141,5	143,1	139,7	134,4	128,7	123,2	117,9	113,1	105
Ba	56	150,7	151,4	147,4	141,3	134,9	128,7	122,9	117,6	108,7
La	57	156,5	156,9	152,3	145,7	138,6	131,7	125,1	119	109,9
Ce	58	146,1	147,7	144,5	139,1	133,2	127,4	121,8	116,7	108
Pr	59	143,8	145,7	142,9	137,8	132,2	126,5	121	116	107,5
Nd	60	141,6	143,5	141	136,5	131	125,5	120,2	115,3	106,9
Pm	61	139,4	141,4	139,2	135,1	129,8	124,4	119,2	114,5	106,2
Sm	62	137,7	139,4	137,4	133,2	128,4	123,3	118,3	113,6	105,5
Eu	63	135,6	137,4	135,6	131,7	127,1	122,1	117,3	112,7	104,7
Ob	64	139,9	141,7	139,9	135,8	131,1	125,8	120,8	116	107,7
Tb	65	131,7	133,6	132,2	128,7	124,5	119,7	115,2	110,8	103,1
Dy	66	123,9	128,1	127,9	125,4	121,8	117,7	113,5	109,8	102,3
Ho	67	118,4	122,4	122,3	120,1	117	113,2	109,5	105,7	98,56
Er	68	116,8	120,8	120,7	118,6	115,7	112	108,4	104,8	97,7
Tm	69	115,2	119,2	119,2	117,2	114,1	110,8	107,2	103,7	96,82
Yb	70	113,8	117,7	117,8	115,9	113	109,7	106,2	102,9	96,06

Атом	Ат. номер $Z_2$	Энергия E, кэВ								
		600	800	1000	1200	1400	1600	1800	2000	2400
Lu	71	116,9	120,4	120,2	118,1	115	111,6	108	104,5	97,42
Hf	72	120,8	124,5	124,3	122,2	118,9	115,4	111,6	108	100,6
Ta	73	117,5	121,7	121,8	119,8	116,7	113,1	109,4	105,6	98,96
W	74	114,2	118	118,2	116,5	113,9	110,9	107,6	104,4	97,87
Re	75	125,8	129,8	129,8	127,3	124,1	120,4	116,5	112,7	105,2
Os	76	124,5	129	129,5	127,3	124,3	120,7	117	113,3	106
Ir	77	123,2	128,2	129,3	127,3	124,5	121,1	117,7	114	106,8
Pt	78	117,6	124,2	126,2	125,6	123,7	121,2	118,2	115	108,4
Au	79	122,7	128	129,1	127,9	125,3	122,3	118,9	115,5	110
Hg	80	116,9	122,7	124,2	123,5	121,6	119,2	116,3	113,3	107,1
Tl	81	125	129,5	130	128,4	125,8	122,9	119,6	116,4	109,8
Pb	82	138,1	141,9	141,6	139,1	135,9	132,4	128,7	125	117,7
Bi	83	136	139,2	138,3	135,4	131,9	128,3	124,5	120,8	113,6

Учебное издание

**Ташлыкова-Бушкевич Ия Игоревна**

**Метод Резерфордского обратного рассеяния  
при анализе состава твердых тел**

Учебно-методическое пособие  
к выполнению лабораторной работы по курсу «Физика»  
для студентов всех специальностей и форм обучения БГУИР

Редактор Н.А. Бебель  
Корректор Е.Н. Батурчик

---

Подписано в печать 18.12.2003.  
Печать ризографическая.  
Уч.-изд. л. 2,8.

Формат 60×84 1/16.  
Гарнитура «Таймс».  
Тираж 100 экз.

Бумага офсетная.  
Усл. печ. л. 3,14.  
Заказ 543.

---

Издатель и полиграфическое исполнение:  
Учреждение образования  
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».  
Лицензия ЛП № 156 от 30.12.2002.  
Лицензия ЛВ № 509 от 03.08.2001.  
220013, Минск, П. Бровка, 6.