

## СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 538.9

DOI: <https://doi.org/10.17721/1812-5409.2025/1.24>Ярослав ЧОЛІЙ, начальник сектору  
e-mail: [redox.sparrowhawk@gmail.com](mailto:redox.sparrowhawk@gmail.com)

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

Микола МАКАРЕЦЬ, д-р фіз.-мат. наук, проф.  
ORCID ID: 0009-0005-8329-4079  
e-mail: [mmv\\_phys@knu.ua](mailto:mmv_phys@knu.ua)

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

## ВПЛИВ МОДЕЛІ ПРУЖНИХ ІОН-АТОМНИХ ЗІТКНЕНЬ НА КУМУЛЯНТИ ПРОСТОРОВОГО РОЗПОДІЛУ ІМПЛАНТОВАНИХ ІОНІВ

Розраховано кумулянти функції просторового розподілу іонів, імплантованих у тверде тіло, у моделі, де парні пружні іон-атомні зіткнення відбуваються на відстані, не меншій за міжатомну. Їхні значення знайдено для кумулянтів від першого по шостий порядок для кількох сотень пар іон – мішень і встановлено, що така розділеність пружних зіткнень змінює їхню величину порівняно зі значеннями, отриманими в моделі неперервних зіткнень. Відхилення можуть досягати десятків відсотків залежно від порядку кумулянта та відношення мас іона і атома мішені. Вони максимальні за енергії іонів порядку кількох кеВ, монотонно спадають з її зростанням приблизно до 100–300 кеВ, а за вищої енергії – перебувають у межах 1–2 %. Це зумовлено малим шляхом іона між послідовними пружними зіткненнями порівняно зі страгглінгами (розкид розподілу навколо максимуму) у поздовжньому і поперечному напрямі, що зростають зі збільшенням енергії іона.

**Ключові слова:** швидкі іони, тверде тіло, модель зіткнень, кумулянти розподілу.

**Класифікація відповідно до AMS 2020:** 81V45.

**Вступ**

Рівняння для функції просторового розподілу швидких іонів, імплантованих в аморфну мішень, було вперше отримано в межах теорії Ліндхарда – Шарфа – Шіотта (ЛШШ) (Lindhard, Scharf, & Schiott, 1963). Автори вважали, що іон втрачає енергію неперервно на збудження електронної підсистеми, та у парних пружних зіткненнях з екранованими атомними ядрами, які відбуваються також неперервно. Останнє припущення неможливо реалізувати в разі чисельного моделювання траєкторій швидких іонів у твердому тілі (напр., Ziegler, Biersack, & Littmark, 1985; Ziegler, 2024), тому тут парні пружні іон-атомні зіткнення відділяють одне від іншого, розігруючи випадкову довжину пробігу іонів між зіткненнями.

Щоб позбутися припущення про неперервні пружні зіткнення у теоретичному описі, автори (Bowyer, Ashworth, & Oven, 1992; Oven, Bowyer, & Ashworth, 1993; Ashworth, Bowyer, & Oven, 1995) розвинули модель, у якій пробіг іона між зіткненнями скінченний, випадковий і залежить від атомної структури мішені. Отримані інтегральні рівняння для моментів розподілу автори звели до диференціальних рівнянь першого порядку і розв'язали їх чисельно, ураховуючи на кожній ітерації невідомі похідні моментів за початкової енергії іона. Моменти просторового розподілу вдалося дослідити у такий спосіб до енергії іонів меншої 1 МеВ, доки запропонований метод залишався стійким. Встановлено, що атомна будова мішені (газо-, рідиноподібна) може змінювати значення вищих моментів розподілу у кілька разів в області енергії до 100 кеВ. У роботі (Макарець, & Чолій, 2013) показано, що згадані інтегральні рівняння переходять у рівняння ЛШШ, якщо довжину вільного пробігу іона між двома послідовними пружними зіткненнями спрямувати до нуля.

У дослідженнях (Макарець, & Сторчака, 2001; Ілюна, & Макарець, 2004; 2010), у межах теорії ЛШШ, отримали інтегральні рівняння для кумулянтів функції просторового розподілу імплантованих іонів і втрат енергії, зв'язок яких із моментами розподілу відомий. Інтегральні рівняння розв'язувались чисельно у широкому діапазоні нерелятивістських енергій іонів. Зауважимо, що в (Макарець, & Сторчака, 2001; Ілюна, & Макарець, 2004; 2010) замість кумулянтів третього і вищих порядків, які швидко зростають і є енергією іонів, проаналізовано безрозмірні величини – так звані скісності, ексцеси першого, другого і вищих порядків. Вони задають відхилення розподілу від нормального і є відношеннями кумулянтів вищого порядку до кумулянтів другого порядку у відповідному степені. У роботі (Макарець, & Чолій, 2013) у межах моделі (Bowyer, Ashworth, & Oven, 1992; Oven, Bowyer, & Ashworth, 1993; Ashworth, Bowyer, & Oven, 1995) були отримані рівняння для кумулянтів функції просторового розподілу імплантованих іонів.

**Метою** пропонованої роботи є розрахунок кумулянтів просторового розподілу іонів, імплантованих у тверде тіло, у рамках моделі, де парні пружні іон-атомні зіткнення відокремлені одне від одного. Друга мета – дослідити зміну кумулянтів, викликану цим наближенням, порівняно з результатами теорії ЛШШ.

**1. Рівняння і чисельний метод**

Нехай іон з енергією  $E$  стартує з початку координат уздовж осі  $OZ$  усередині ізотропного твердого тіла. Імовірність його зупинки в околі  $d\vec{r}$  навколо точки  $\vec{r}$  позначимо як  $\Pi(\vec{r}, E)$ . У роботах (Bowyer, Ashworth, & Oven, 1992; Макарець, & Чолій, 2013) показано, що ця функція задовольняє рівняння:

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{r}, E) = & \int_0^{T_{\max}} \int_0^{2\pi} \int_0^{T_{\min}} \Pi(\vec{r}', E') \Theta(E' - E_s) f(l) \frac{d\varphi d\sigma_n(E - T_e, T)}{2\pi \sigma_{tot}} dl + \\ & + \int_0^{T_{\max}} \int_0^{T_{\min}} \delta(\vec{r}' - \vec{k}l) \Theta(E_s - E') f(l) \frac{d\sigma_n(E - T_e, T)}{\sigma_{tot}} dl, \end{aligned} \quad (1)$$

де  $\vec{r}' = A(\vec{r} - \vec{k}l)$  – точка зупинки іона в новій системі координат, що зміщена вздовж старої осі  $OZ$  на випадковий шлях вільного пробігу  $l$  до пружного зіткнення і повернута на випадковій кути  $\varphi$  навколо  $OZ$  та пружного розсіяння

© Чолій Ярослав, Макарець Микола, 2025

$\theta$  навколо нової осі  $OY'$ ,  $A = A(\varphi, \theta)$  – матриця цих поворотів,  $E' = E - T_e - T_n$  – енергія іона після пружного зіткнення із втратою енергії  $T_n$ ,  $T_e \equiv T_e(l)$  – втрата енергії на неперервне збудження електронної підсистеми вздовж  $l$ ,  $\Theta(x)$ , – функція Хевісайда,  $E_s$  – найменша енергія іона, нижче якої іон вважається нерухомим (у роботах (Bowyer, Ashworth, & Oven, 1992; Oven, Bowyer, & Ashworth, 1993; Ashworth, Bowyer, & Oven, 1995) вона дорівнювала 5 eV),  $f(l)dl$  – імовірність пружного розсіяння іона на атомі мішені в околі  $dl$  після вільного пробігу довжиною  $l$ ,  $d\sigma_n = d\sigma_n(E - T_e, T_n)$  – диференціальний переріз пружного розсіяння іона з енергією  $E - T_e$  на атомі мішені у разі втрати енергії  $dT_n$  навколо  $T_n$ ,  $\sigma_{tot}$  – так званий повний переріз пружного розсіяння в моделі парних пружних зіткнень у мішені з концентрацією атомів  $n_0$ ,  $T_{min}$  – мінімальна енергія, яку може втратити іон у парному пружному зіткненні з атомом мішені (саме її існування робить "повний" переріз скінченим),  $T_{max} = \gamma(E - T_e)$  – максимальна енергія, яку може втратити іон у парному пружному лобовому зіткненні з атомом мішені,  $\gamma = 4\mu/(1 + \mu)^2$ ,  $\mu = M_1/M_2$  – відношення атомних мас іона  $M_1$  й атома мішені  $M_2$ ,  $\delta(x)$  – дельта-функція Дірака.

В (1) уведено функцію розподілу довжини вільного пробігу іона  $f(l)$ , що визначається атомною структурою мішені. Наприклад, згідно з роботами (Bowyer, Ashworth, & Oven, 1992; Oven, Bowyer, & Ashworth, 1993; Ashworth, Bowyer, & Oven, 1995), у моделях рідиноподібного  $f(l) = \delta(l - \Lambda)$  і газоподібного середовищ  $f(l) = \exp(-l/\Lambda)/\Lambda$ , де  $\Lambda$  – точна, або середня відстань між пружними зіткненнями, відповідно. Її моменти  $k$ -го порядку (середнє значення –  $k = 1$ , квадратичне відхилення –  $k = 2$  і т. д.) пропорційні  $\Lambda^k$ .

У наступних перетвореннях (1) буде використано так званий сумарний переріз усіх пружних розсіянь іона із енергією  $E - T_e$ , у яких він втратив енергію від якоїсь заданої нами  $T_m$  до максимальної  $T_{max}$ . Цей переріз був уведений у роботі (Макарець, & Сторчака, 2001) як

$$\sigma_n(E - T_e, T_m) = - \int_{T_m}^{\gamma(E - T_e)} d\sigma_n(E - T_e, T'), \tag{2}$$

де враховано, що  $d\sigma_n(E - T_e, T')$  спадає зі зростанням  $T'$ . Із (2) випливає, що сумарний переріз усіх пружних розсіянь іона спадає до нуля, якщо мінімальна втрачена енергія  $T_m \rightarrow T_{max} = \gamma(E - T_e)$ , а коли  $T_m \rightarrow 0$ , то він стає повним і прямує до нескінченності. Модель парних пружних зіткнень у мішені з концентрацією атомів  $n_0$  справедлива, коли прицільна відстань зіткнення менша половини міжатомної відстані  $p_{max} \leq a/2 \equiv 1/2n_0^{1/3}$ , що дає верхню межу для сумарного перерізу парних пружних зіткнень  $\sigma_n(E, T_m) \approx a^2$ .

У моделі рідиноподібної мішені з концентрацією  $n_0$  довжина вільного пробігу  $\Lambda$  визначається з умови  $\Lambda\sigma_{tot} = 1/n_0$ , де  $\sigma_{tot}$  – повний переріз пружного розсіяння кульок. Вільний пробіг можливий, якщо він більший міжатомної відстані, тобто якщо  $\Lambda \geq a = 1/n_0^{1/3}$ , звідси випливає, що  $\sigma_{tot} \leq a^2$ . Ми використали сумарний переріз  $\sigma_n(E - T_e, T_m)$ , щоб з умови

$$\Lambda\sigma_n(E - T_e, T_m) = 1/n_0 \tag{3}$$

знайти  $T_m(\Lambda)$ . Переріз розсіяння спадає зі збільшенням енергії іона, тому із (3) можна знайти найменшу енергію іонів у кожному зіткненні, вище якої вони будуть парними і рівняння (1) не матиме внутрішньої суперечності. Її знаходили при чисельному розв'язку рівнянь (6), які отримані далі, і вона виявилася значно більшою за уведену вище енергію зупинки іона  $T_s$ . Звідси випливає, що за малих енергій іонів наближення парних зіткнень вимагає корекції. Для цього ми використали так звану muffin tin модель.

Рівняння (2, 3) враховують вільний пробіг  $\Lambda$  між пружними зіткненнями, тому енергія наступного пружного зіткнення зменшується на роботу  $\Lambda S_e(E)$ , де  $S_e(E)$  – енергія, втрачена іоном на збудження електронної підсистеми мішені на одиниці шляху, так зване електронне гальмування. Цим вони відрізняються від рівнянь моделі неперервних пружних зіткнень, але граничний перехід  $\Lambda \rightarrow 0$  переводить їх у рівняння ЛШШ (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010). Зважаючи на це, зміна кумулянтів розподілу в цій моделі розділених пружних зіткнень порівняно з моделлю ЛШШ буде зумовлена внеском вільного пробігу  $\Lambda$  й електронного гальмуванням  $S_e(E)$ .

Перший доданок у правій частині (1) відмінний від нуля для всіх іонів з енергією  $E - T_e > E_s$ , тобто для тих, що мають більш ніж одне пружне зіткнення. А другий – у разі опромінення іонами низької енергії, коли  $E - T_e \leq E_s$  і вони зупиняються не далі, ніж після першого зіткнення. Тоді їх просторовий розподіл буде дельта-функцією Дірака із пробігом  $l$ . Проте вже за  $E > E_s + T_e(l) + T_n$  другий доданок в (1) дорівнюватиме нулю. Рівняння для кумулянтів розподілу іонів з енергією, що значно перевищують цю межу, отримані в (Макарець, & Чолій, 2013).

Розподіл  $\Pi(\vec{r}, E)$  має осьову симетрію відносно  $OZ$ , тому його можна подати такими виразами:

$$\Pi(\vec{r}, E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{r} + \Phi(\vec{\omega}, E)) d\vec{\omega}, \quad (4)$$

де  $\Phi(\vec{\omega}, E)$  – друга характеристична функція розподілу, що виражається через кумулянти  $\kappa_{i,j}(E)$ :

$$\Phi(\vec{\omega}, E) = \sum_{N=1, n=0}^{\infty, [N/2]} i^N \kappa_{2n, N-2n}(E) \frac{(u^2 + v^2)^n \omega^{N-2n}}{(2n)!(N-2n)!}, \quad (5)$$

де  $\vec{\omega} = (u, v, \omega)$  – вектор Фур'є-простору,  $N = i + j$  – порядок кумулянта  $\kappa_{i,j}$ , а  $[x]$  – ціла частина  $x$ .

Ці вирази підставили в (1), розклали обидві частини в ряди Тейлора за  $(u^2 + v^2)$  та за  $\omega$ , проінтегрували їх за кутом  $\varphi$  і прирівняли відповідні коефіцієнти рядів. Унаслідок цього отримали системи лінійних інтегральних неоднорідних рівнянь для кумулянтів  $\kappa_{i,j}(E)$  однакового порядку  $N$ . У їхні праві частини входять кумулянти порядку  $N-1, N-2, \dots, 1$ , які потрібно знайти, починаючи з  $N = 1$ . Кумулянт  $\kappa_{0,0}(E) \equiv 1$ , тому що це є нормуванням функції розподілу.

Отже, у випадку осьової симетрії функція розподілу іонів, імплантованих у тверде тіло, зветься до системи лінійних неоднорідних інтегральних рівнянь. Ураховуючи лінійність рівнянь, ми замінили кумулянти на їхні лінійні комбінації, які назвали ерзацкумулянтами і позначили як  $\chi_{i,j}(E)$  (Макарець, & Чолій, 2013). Це діагоналізує ліві частини рівнянь і надає для ерзацкумулянтів незв'язані між собою лінійні неоднорідні інтегральні рівняння.

У цих рівняннях, окрім інтегралу за  $d\sigma_n(E - T_e, T_n)$ , є інтеграл за  $dl$ , який легко обчислити в моделі рідиноподібної мішені. Після переходу до безрозмірних довжин  $z = Z/R^*$ ,  $\rho = R/R^*$ ,  $\lambda = \Lambda/R^*$  та енергій  $\varepsilon = E/E^*$ ,  $\tau_e = T_e/E^*$ ,  $\tau = T_n/E^*$ ,  $\tau_{\min} = T_{\min}/E^*$ , де  $R^*$  і  $E^*$  – масштаби довжини і енергії (Ілюїна, & Makarets, 2004; 2010) та громіздких викладок, було отримано ланцюжок лінійних неоднорідних інтегральних рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{\chi_{01} - \chi'_{01}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{01} P_1\} d\tau &= 1, \\ \frac{\chi_{02} - \chi'_{02}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{02} P_2\} d\tau &= \frac{\tilde{\chi}'_{01}{}^2 - \chi_{01}^2}{\lambda} + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{01}{}^2 P_2 + 2\chi''_{01} \lambda P_1\} d\tau, \\ \frac{\chi_{20} - \chi'_{20}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{20} P_0\} d\tau &= \frac{\tilde{\chi}'_{01}{}^2 - \chi_{01}^2}{\lambda} + \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{01}{}^2 P_0 + 2\chi''_{01} \lambda P_1\} d\tau, \\ \frac{\chi_{03} - \chi'_{03}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{03} P_3\} d\tau &= \frac{\tilde{\chi}'_{01}{}^3 - \chi_{01}^3 + 3\tilde{\chi}'_{01} \chi'_{02} - 3\chi_{02} \chi_{01}}{\lambda} + \\ &+ \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{01} (\chi_{01}'' + 3\chi_{02}'') P_3 + 3(\chi_{01}'' + \chi_{02}'') \lambda P_2 + 3\chi_{01}'' \lambda^2 P_1\} d\tau, \\ \frac{\chi_{21} - \chi'_{21}}{\lambda} - \frac{1}{\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{\chi''_{21} P_1\} d\tau &= \frac{3(\tilde{\chi}'_{01}{}^3 - \chi_{01}^3) + 4(\tilde{\chi}'_{01} \chi'_{02} - \chi_{01} \chi_{02}) + 5(\tilde{\chi}'_{01} \chi'_{20} - \chi_{01} \chi_{20})}{3\lambda} + \\ &+ \frac{1}{3\gamma} \int_0^{\gamma\varepsilon'} \tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \{(3\chi_{01}''^3 + 9\chi_{01}'' \lambda^2 + 4\chi_{01}'' \chi_{02}'' + 5\chi_{01}'' \chi_{20}'') P_1 + 4(\chi_{01}'' + \chi_{02}'') \lambda P_2 + 5(\chi_{20}'' + \chi_{01}''^2) \lambda\} d\tau, \end{aligned} \quad (6)$$

де  $\chi'_{i,j} = \chi_{i,j}(\varepsilon - \tau_e)$ ,  $\chi''_{i,j} = \chi_{i,j}(\varepsilon - \tau_e - \tau)$ ,  $\tilde{\chi}'_{0,1} = \chi_{0,1}(\varepsilon - \tau_e) - \lambda$ ,  $P_j \equiv P_j(\cos(\theta))$  – поліном Лежандра  $j$ -го порядку, а кут розсіяння  $\theta \equiv \theta(\tau)$  залежить від енергії  $\tau$ , втраченої у пружному зіткненні,  $\tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau)$  – сумарний переріз пружного розсіяння іона виражений в одиницях квадрата радіуса екранування у потенціалі Бірсака – Циглера (див. Ziegler, Biersack, & Littmark, 1985; Ziegler, 2024).

Рівняння для кумулянтів з  $N > 3$  занадто громіздкі і не наведені, але чисельні розв'язки були знайдені для ланцюжка із 15-ти рівнянь для кумулянтів до шостого порядку включно. Важливо те, що праві частини рівнянь для ерзацкумулянтів порядку  $N \geq 1$  залежать від ерзацкумулянтів лише меншого порядку. Ці рівняння потрібно розв'язувати послідовно: спочатку для 1-го порядку, потім – 2-го і т. д.

Зауважимо, що у рівняннях (6), якщо  $\tau \rightarrow 0$ , усі підінтегральні функції спадають до нуля швидше, ніж сумарний переріз  $\tilde{\sigma}_n(\varepsilon - \tau_e, \tau)$  зростає до нескінченності, тому нижню межу в інтегралах за  $\tau$  покладено рівною нулю замість  $\tau_{\min}$ , як в (1). Повний переріз  $\tilde{\sigma}_{tot}$ , що входить в (1) і залишається в (6), шукали згідно з рівнянням (3).

Втрати енергії іона на збудження електронного газу на шляху  $\Lambda$  знаходили в лінійному наближенні  $T_e = \Lambda S_e(E)$ , де  $S_e(E)$  – електронне гальмування. Граничний перехід  $\lambda \rightarrow 0$  у (6), у нульовому порядку за  $\lambda$ , переводить їх у

рівняння, отримані у роботах (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010). Точніші розрахунки  $T_e$  з виразу  $T_e(E) = \Lambda S_e(E - T_e(E))$  надають малу поправку до цього результату. Тому розв'язки (6) відрізняються від отриманих у роботах (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010) у першому порядку за степенями електронного гальмування за  $T_e \ll E$ . Ця умова виконується, коли довжина вільного пробігу іона  $\Lambda$  мала, порівняно зі страгглінгом проєктивного пробігу, існування якого зумовлено пружними зіткненнями і який задає розкид розподілу зупинених іонів навколо максимуму.

Для розв'язку (6) було використано чисельний метод, розвинений у роботах (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010), у якому інтервал енергії іонів від  $T_{min}$  до 1 GeV ділили на частини, а кожне інтегральне рівняння зводили до системи неоднорідних лінійних алгебраїчних рівнянь для восьми невідомих коефіцієнтів розкладу  $\chi_{i,j}(\epsilon)$  за степенями  $\epsilon$ .

## 2. Результати й обговорення

Чисельні розрахунки ерзакумулянтів  $\chi_{i,j}(E)$  були проведені для кількох сотень пар іон-мішень із відношенням маси іона до маси атома мішені  $\mu \in (0.04 \div 25)$ , які зустрічаються під час імплантації в метали та напівпровідники. Для коректного порівняння результатів відділених пружних зіткнень, отриманих у цій моделі, із результатами, одержаними в моделі неперервних зіткнень (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010), використали потенціал Бірсака – Циглера для іон-атомної взаємодії та електронне гальмування із (Ziegler, Biersack, & Littmark, 1985; Ziegler, 2024). Знайдені залежності  $\chi_{i,j}(E)$  в діапазоні енергії іонів від 1 кеВ до 1 GeВ, виявилися близькими до знайдених у роботі (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010) у межах теорії ЛШШ, а їхні відхилення – залежними від енергії та відношення маси іона до маси атома мішені. Потім знайшли кумулянти  $\kappa_{i,j}(E)$ , через які виражається функція просторового розподілу імплантованих іонів

$$\Pi(\vec{r}, E) = \frac{1}{2\Delta R_p (\pi\Delta R_\perp)^2} \int_0^\infty \int_0^\infty s \exp \left[ -\frac{s^2 + t^2}{2!} + \frac{1}{4!} (t^4 Ex_\parallel + 6s^2 t^2 \beta_{2,2} + s^4 Ex_\perp) - \dots \right] \times \cos [tZ - \frac{1}{3!} (t^3 Sk + t s^2 \beta_{2,1}) + \dots] J_0(sR_\perp) dt ds, \quad (7)$$

де  $R_p \equiv \kappa_{0,1}$ ,  $\Delta R_p \equiv \sqrt{\kappa_{0,2}}$ ,  $\Delta R_\perp \equiv \sqrt{\kappa_{2,0}}$  – проєктивний пробіг, проєктивний і поперечний страгглінги іона – величини розмірності довжини, та безрозмірні  $Z = (R_p - z)/\Delta R_p$  і  $R_\perp = \sqrt{x^2 + y^2}/\Delta R_\perp$  – поздовжня, центрована на проєктивний пробіг, і поперечна радіальна координати точки зупинки іона, нормовані на відповідні страгглінги,  $Sk \equiv \kappa_{0,3}/(\Delta R_p)^3$  – поздовжня скісність,  $Ex_\parallel \equiv \kappa_{0,4}/(\Delta R_p)^4$  і  $Ex_\perp \equiv \kappa_{4,0}/(\Delta R_\perp)^4$  – поздовжній і поперечний ексцеси,  $\beta_{2,1} \equiv \kappa_{2,1}/(\Delta R_\perp)^2 \Delta R_p$ ,  $\beta_{2,2} \equiv \kappa_{2,2}/(\Delta R_p \Delta R_\perp)^2$  – характеристики кореляції розподілу у поздовжньому і поперечному напрямках,  $J_0(x)$  – функція Бесселя 1-го порядку нуля.

Якщо в (7) продовжити ряди в косинусі й експоненті, то з'являться доданки з кумулянтами вищого порядку:  $Sk_n \equiv \kappa_{0,(2n+1)}/(\Delta R_p)^{2n+1}$ ,  $Ex_{\parallel,n} \equiv \kappa_{0,(2n+2)}/(\Delta R_p)^{2n+2}$ ,  $Ex_{\perp,n} \equiv \kappa_{(2n+2),0}/(\Delta R_\perp)^{2n+2}$  – поздовжні скісності, поздовжній і поперечний ексцеси порядку  $n = 2, 3, \dots$ , та з коефіцієнтами  $\beta_{i,j} \equiv \kappa_{i,j}/(\Delta R_\perp)^i (\Delta R_p)^j$ , де  $i, j \neq 0$ , що описують кореляцію розподілу у поперечному і поздовжньому напрямках. Вплив кожного з кумулянтів на форму розподілу було досліджено в роботі (Ilyina, & Makarets, 2004).

Розрахунки показали, якщо енергія іона становить 1 кеВ, то відношення вільного пробігу іона до страгглінгу проєктивного пробігу  $\Lambda/\Delta R_p$  змінюється від 0.5 до 0.05 для зазначених вище відношень мас іона й атома мішені  $\mu$ . Зі збільшенням енергії воно спадає і за  $E > 1$  MeВ стає меншим на порядок. Відношення  $T_e/E$  приблизно на порядок менше за  $\Lambda/\Delta R_p$  і має аналогічну поведінку. Тому вплив вільного пробігу іона  $\Lambda$  й електронного гальмування  $S_e(T_e)$  на цьому шляху на кумулянти розподілу проявляється за енергії іонів, меншій від кількох сотень кеВ і залежить від  $\mu$ .

Перше рівняння в (6) описує проєктивний пробіг іона  $R_p(E)$ , його права частина стала, тому його розв'язок показує вплив лише  $\Lambda$  і  $S_e(T_e)$  на ліву частину рівняння. Оскільки ліві частини (6) відрізняються лише порядком полінома Лежандра, то це показує оцінку впливу  $\Lambda$  і  $S_e(T_e)$  на ліві частини всіх рівнянь ланцюжка. Розрахунки виявили, що за енергій іонів від кількох сотень кеВ до 1 GeВ проєктивні пробіги перевищують результати роботи (Ilyina, & Makarets, 2004) менше ніж на 1 % для всіх комбінацій іон-мішень. Ця величина зберігається і за зменшення енергії іонів до 1 кеВ, якщо  $\mu \gg 1$ , або  $\mu \ll 1$ , а для  $\mu \sim 1$ , наприклад, для пари іон-мішень  $Ni^+ \rightarrow Fe$ , де  $\mu \approx 1$ , відхилення досягає 5 %. Отже, зміна лівих частин ланцюжка рівнянь (6) мала.

Розв'язки ланцюжка рівнянь (6) для страгглінгів  $\Delta R_p(E)$  і  $\Delta R_\perp(E)$  поведуться аналогічно до проєктивного пробігу, але відхилення зростають. Із рис. 1 видно, що поздовжній страгглінг у межах  $\approx 1$  % збігається з результатами (Ilyina, & Makarets, 2004) для комбінацій іон-мішень з  $\mu < 1$ , але для іонів, важчих за атом мішені, як у комбінаціях  $Nb^+ \rightarrow Fe$  із  $\mu \approx 1.7$  та  $Er^+ \rightarrow Si$  із  $\mu \approx 6$  він стає меншим приблизно на 4 % і на 9 % за енергії в кілька кеВ. Розрахунки показали, що відхилення поперечних страгглінгів мають різний знак, не перевищують 4 % і можуть змінювати свій знак з енергією іона.

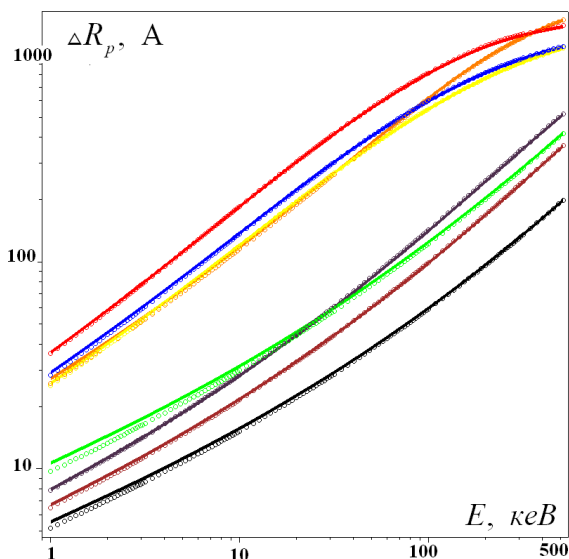


Рис. 1. Поздовжній страгглінг  $\Delta R_p(E)$ . Лінії – розрахунок згідно з роботами (Ilyina, & Makarets, 2004; 2010), кружечки – розрахунок із цих робіт у моделі відокремлених парних зіткнень.

Лінії та кружечки для різних комбінацій іон-мішень мають такий колір і відношення мас іона й атома мішені  $\mu$  :

B to Si – червоний, 0.38; Er to Si – зелений, 5.96; C to Ti – синій, 0.25; N to Ti – помаранчевий, 0.29; Nb to Fe – коричневий, 1.66; Ni to Fe – фіолетовий, 1.05; C to W – жовтий, 0.065; W to Cu – чорний, 2.89

У роботі (Ilyina, & Makarets, 2004) було встановлено, що скісності, ексцеси та коефіцієнти  $\beta_{i,j}(E)$  знакозмінні, а їхні значення малі порівняно з одиницею за енергії іонів меншій від кількох сотень кеВ. З огляду на це вільний пробіг іона  $\Lambda$  може вплинути на поведінку цих кумулянтів за низької енергії, зокрема на положення їхніх нулів.

На рис. 2 наведено графіки поперечного ексцесу, розраховані згідно з теорією ЛШШ (Ilyina, & Makarets, 2004), та для рідноподібної моделі (6) для тих самих комбінацій іон-мішень що і на рис. 1. Видно, що для низьких енергій результати в моделі відокремлених пружних зіткнень на десятки відсотків менші, ніж у теорії ЛШШ для всіх комбінацій іон-мішень, а зі збільшенням енергії їхня різниця зменшується для всіх  $\mu$ . Причиною їхнього зменшення за низьких енергій іонів є вплив довжини вільного пробігу  $\Lambda$  і втрат енергії на електронне гальмування  $T_e$ , що роблять функцію розподілу більш пологою біля максимуму. Зі зростанням енергії іонів цей вплив зменшується, оскільки вони стають малими порівняно зі страгглінгом та енергією іона.

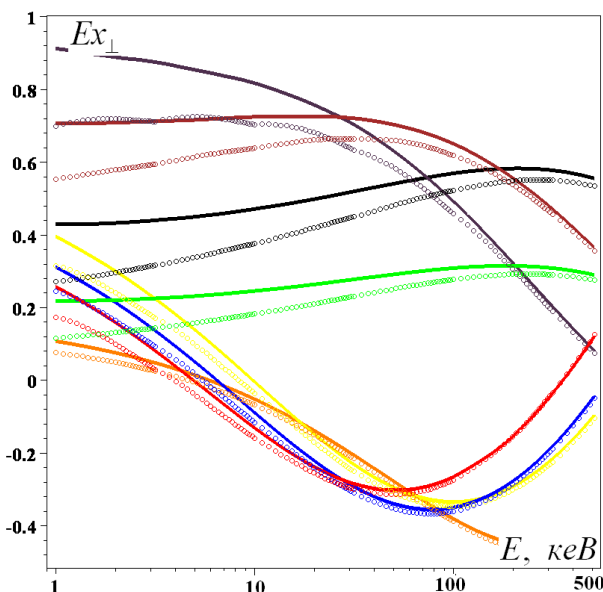


Рис. 2. Поперечний ексцес для тих самих комбінацій іон-мішень, що і на рис. 1. Лінії та кружечки для різних комбінацій іон-мішень мають такий колір і відношення мас іона й атома мішені  $\mu$  :

B to Si – червоний, 0.38; Er to Si – зелений, 5.96; C to Ti – синій, 0.25; N to Ti – помаранчевий, 0.29; Nb to Fe – коричневий, 1.66; Ni to Fe – фіолетовий, 1.05; C to W – жовтий, 0.065; W to Cu – чорний, 2.89

Інші кумулянти четвертого порядку – поздовжній ексцеси та коефіцієнт  $\beta_{2,2}(E)$  мають аналогічну поведінку для тих самих комбінацій іон-мішень. А кумулянти п'ятого і шостого порядку відхиляються від результатів роботи (Ilyina, & Makarets, 2004) в обидві сторони до 100 % за енергії до кількох сотень кеВ. Розрахунки показали, що зі збільшенням порядку кумулянтів зазначені відхилення за низьких енергій зростають.

Аналіз результатів розрахунку п'ятнадцяти кумулянтів розподілу до шостого порядку включно для кількох сотень комбінацій іон-мішень показав: якщо енергія вища приблизно за 500 кеВ, то вони збігаються з результатами роботи (Ilyina, & Makarets, 2004), де не враховано довжини вільного пробігу  $\Lambda$ . Причиною такої поведінки кумулянтів є малі значення врахованих поправок у механізмі гальмування іонів: скінченний шлях між пружними зіткненнями  $\Lambda \ll \Delta R_p(E)$ , втрати енергії  $T_e(\Lambda) \ll E$ . З огляду на це вони впливають на кумулянти розподілу лише в області низьких енергій, причому зі зростанням порядку кумулянта верхня межа цієї області теж зростає. Це викликано тим, що довжина вільного пробігу  $\Lambda > a$  у цій моделі зменшує середні втрати енергії на шляху, що веде до збільшення проєктивного пробігу іона.

#### Дискусія і висновки

Розрахунки кумулянтів просторового розподілу іонів, імплантованих в ізотропну мішень, показали, що скінчений шлях іона між двома послідовними пружними зіткненнями з атомами мішені  $\Lambda$  змінює їхні значення порівняно з моделлю неперервного гальмування. Зокрема, для енергії іонів до кількох сотень кеВ кумулянти просторового розподілу в межах рідиноподібної моделі можуть відхилитися від результатів теорії ЛШШ в обидві сторони, залежно від відношення мас іона й атома мішені  $\mu$ .

Для проєктивного пробігу і страгглінгів поздовжнього та поперечного пробігу (кумулянти 1-, 2-го порядків) ці зміни можуть досягати 5 % за енергій іонів у кілька кеВ і спадають до величини меншої 1 % зі зростанням енергії до кількох сотень кеВ. Вони залежать від відношення мас іона й атома мішені.

Кумулянти вищого порядку (скісності, ексцеси, коефіцієнти  $\beta_{i,j}$ ) для цих енергій не перевищують одиниці і мало впливають на форму розподілу. Оскільки поздовжній і поперечний страгглінг вимірюються в експерименті, то їхне порівняння з розрахунками дає змогу виявити вплив на них довжини вільного пробігу іона між пружними зіткненнями.

Якщо енергія іонів більша за кілька сотень кеВ, то всі кумулянти розподілу збігаються з результатами розрахунків у межах теорії ЛШШ, у якій довжина вільного пробігу нескінченно мала. Причиною цього є мале значення відношення  $\Lambda$  до страгглінгів пробігу іонів і це відношення спадає зі зростанням їхньої енергії.

Досліджений вплив довжини вільного пробігу іона між пружними зіткненнями на кумулянти розподілу імплантованих іонів притаманний всім ізотропним мішеням з випадково розміщеними атомами, де швидкі іони втрачають енергію в бінарних пружних зіткненнях з атомами та у неперервному електронному гальмуванні між ними.

У роботі використано рідинну модель мішені, у якій усі відстані між атомами однакові і дорівнюють  $a$ , а ймовірність пружного розсіяння іона на атомі мішені після вільного пробігу  $l$  задається дельта-функцією Дірака  $f(l) = \delta(x - \Lambda)$  і має лише один параметр  $\Lambda$ . Для складнішої моделі середовища  $f(l)$  залежатиме від кількох параметрів розподілу атомів у мішені, які матимуть порядок міжатомної відстані. Тоді рівняння аналогічні (6) будуть залежати від них. А тому їхній внесок у кумулянти розподілу буде близьким за величиною до внеску величини  $\Lambda$ . Звідси випливає, що встановлена вище поведінка кумулянтів просторового розподілу іонів, імплантованих у рідиноподібне середовище, характерна для всіх моделей середовища з випадково розміщеними атомами, з якими іон під час руху взаємодіє парно.

**Внесок авторів:** Ярослав Чолій – налагодження чисельного методу, розрахунки, обговорення, висновки; Микола Макарець – постановка задачі, огляд літературних джерел, аналітичні викладки, обговорення, формулювання висновків.

**Подяки, джерела фінансування.** Дослідження виконано за підтримки гранту Міністерства освіти і науки України для перспективного розвитку наукового напрямку "Математичні науки та природничі науки" в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка.

#### Список використаних джерел

- Макарець, М. В., & Сторчака, С. Н. (2001). Новий метод розрахунку розподілу імплантованих іонів. 1. Алгоритм та семінваріанти. *Український фізичний журнал*, 46(4), 486–494.
- Макарець, М. В., & Чолій, Я. В. (2013). Рівняння для кумулянтів просторового розподілу імплантованих іонів. *Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки*, 4, 255–259.
- Ashworth, D. G., Bowyer, M. D. J., & Oven, R. (1995). The derivation and moments solution of approximate transport equations for the implantation of ions into amorphous targets. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 100B(4), 471–482. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(95\)00347-9](https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)00347-9)
- Bowyer, M. D. J., Ashworth, D. G., & Oven, R. (1992). Central moments of ion implantation distributions derived by the backward Boltzmann transport equation compared with Monte Carlo simulations. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 25(11), 1619. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/25/11/009>
- Ilyina, V. V., & Makarets, M. V. (2004). The cumulants analysis of the implanted ions distribution. *Ukrainian journal of Physics*, 49(8), 815–823.
- Ilyina, V. V., & Makarets, M. V. (2010). Distribution of energy losses by fast ions along their propagation paths in solids. *Ukrainian journal of Physics*, 55(2), 235–242.
- Lindhard, J., Scharf M., & Schiott H. E. (1963). Range concepts and heavy ion ranges. *Matematisk-fysiske Meddelelser udgivet af Det Kongelige Danske Videnskaberne Selskab*, 33(14), 1–43.
- Oven, R., Bowyer, M. D. J., & Ashworth, D. G. (1993). A transport equation model that is consistent with Monte Carlo simulations of ion implantation into infinite targets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5(14), 2157. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/5/14/013>
- Ziegler, J. (2024). *Interactions of ions with matter*. [www.srim.org](http://www.srim.org).
- Ziegler, J. F., Biersack, J. P., & Littmark, U. (1985). *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*. Pergamon Press.

#### References

- Ashworth, D. G., Bowyer, M. D. J., & Oven, R. (1995). The derivation and moments solution of approximate transport equations for the implantation of ions into amorphous targets. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 100B(4), 471–482. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(95\)00347-9](https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)00347-9)

- Bowyer, M. D. J., Ashworth, D. G., & Oven, R. (1992). Central moments of ion implantation distributions derived by the backward Boltzmann transport equation compared with Monte Carlo simulations. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 25(11), 1619. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/25/11/009>
- Ilyina, V. V., & Makarets, M. V. (2004). The cumulants analysis of the implanted ions distribution. *Ukrainian journal of Physics*, 49(8), 815–823.
- Ilyina, V. V., & Makarets, M. V. (2010). Distribution of energy losses by fast ions along their propagation paths in solids. *Ukrainian journal of Physics*, 55(2), 235–242.
- Lindhard, J., Scharf M., & Schiott H. E. (1963). Range concepts and heavy ion ranges. *Matematisk-fysiske Meddelelser udgivet af Det Kongelige Danske Videnskaberne Selskab*, 33(14), 1–43.
- Makarets, M. V., & Storchaka, S. N. (2001). A new method for calculating the distribution of implanted ions. 1. Algorithm and semi-invariants. *Ukrainian journal of Physics*, 46(4), 486–494 [in Ukrainian].
- Makarets, M. V., & Choliy, Y. V. (2013). *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics and Mathematics*, 4, 255–259 [in Ukrainian].
- Oven, R., Bowyer, M. D. J., & Ashworth, D. G. (1993). A transport equation model that is consistent with Monte Carlo simulations of ion implantation into infinite targets. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 5(14), 2157. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/5/14/013>
- Ziegler, J. (2024). *Interactions of ions with matter*. [www.srim.org](http://www.srim.org).
- Ziegler, J. F., Biersack, J. P., & Littmark, U. (1985). *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*. Pergamon Press.

Отримано редакцією журналу / Received: 28.01.25

Прорецензовано / Revised: 25.02.25

Схвалено до друку / Accepted: 12.03.25

Yaroslav CHOLIY, Head of Sector  
e-mail: [redox.sparrowhawk@gmail.com](mailto:redox.sparrowhawk@gmail.com)  
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

Mykola MAKARETS, DSc (Phys. & Math.), Prof.  
ORCID ID: 0009-0005-8329-4079  
e-mail: [mmv\\_phys@knu.ua](mailto:mmv_phys@knu.ua)  
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

### INFLUENCE OF THE MODEL OF ELASTIC ION-ATOMIC COLLISIONS ON THE CUMULANTS OF THE SPATIAL DISTRIBUTION OF IMPLANTED IONS

*Cumulants of the spatial distribution function of ions implanted in solid have been calculated. Equation for distribution function takes into account a finite ion path between of elastic collisions with the target atoms. Comparison with results of Lindhard-Scharff-Schiott theory shown that cumulants of these distributions are differ each from other for ions energies lower than a few hundred keV, and at higher energies they are coincide. This is due to the small length of ion path between collisions in compared with its longitudinal and lateral stragglings.*

**Keywords:** fast ions, solid, collision model, distribution cumulants.

Автори заявляють про відсутність конфлікту інтересів. Спонсори не брали участі в розробленні дослідження; у зборі, аналізі чи інтерпретації даних; у написанні рукопису; в рішенні про публікацію результатів.

The authors declare no conflicts of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses or interpretation of data; in the writing of the manuscript; in the decision to publish the results.