ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА И ИНЖИНИРИНГ, 2022, том 13, № 2, с. 132–139

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 537.534.74

МНОГОКРАТНОЕ РАССЕЯНИЕ ИОНОВ В ДЕЙТЕРИДЕ ТИТАНА

© 2022 г. А. А. Галюзов[a], *, М. В. Косов[a], **

[a] *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, 127055 Россия*

**E-mail: AAGalyuzov@vniia.ru*

***E-mail: Kosov@vniia.ru*

Поступила в редакцию 15.06.2021 г.
После доработки 22.07.2021 г.
Принята к публикации 15.08.2021 г.

Предложен метод расчета многократного рассеяния ионов при прохождении тонких слоев дейтерида титана в виде суммы трех гауссовых распределений, дисперсии которых сравниваются при увеличении толщины слоя, и найденная форма углового распределения многократного рассеяния сводится к одному распределению Гаусса. При расчете однократного резерфордовского рассеяния использовались только рассеяния без выбивания атома-мишени из кристаллической решетки. Рассеяния с выбиванием атома-мишени из решетки учитывались дискретным упругим рассеянием.

Ключевые слова: многократное рассеяние, резерфордовское рассеяние, электронное экранирование

DOI: 10.56304/S2079562922010134

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно при моделировании многократного рассеяния ионов в веществе предполагается, что оно имеет гауссово угловое распределение. Однако экспериментально известно, что у реального углового распределения имеются “хвосты” [1], которые не описываются распределением Гаусса и, чем меньше пробег ионов в веществе, то есть, чем меньше актов однократного рассеяния определяют многократное рассеяние, тем больше угловое распределение многократного рассеяния отличается от гауссова. Это понятно, поскольку при малых углах рассеяния резерфордовское дифференциальное сечение падает как четвертая степень угла рассеяния, в то время как гауссово распределение при малых углах меняется слабо, а при больших углах многократное рассеяние (не считая “хвостов”), падает значительно быстрее степенной функции. В связи с этим можно ожидать как дополнительного вклада в рассеяние при самых малых углах, условно называемого “нос” рассеяния, так и при самых больших углах, условно называемого “хвост” рассеяния – аналог части, которая в обычную модель многократного рассеяния не включается.

В процесс моделирования многократного рассеяния включались только те однократные рассеяния, при которых атомы-мишени не выбивались из узлов кристаллической решетки. Это ограничивает квадраты переданного импульса при однократном рассеянии величиной $2E_{de}M$, где E_{de} (displacement energy) – энергия, необходимая для выбивания атома-мишени с массой M из его равновесного положения в узле кристаллической решетки [2]. При этом сечение однократного рассеяния не бесконечно, как в случае полностью ионизованных ионов, а ограничено электронной экранировкой резерфордовского дифференциального сечения при самых малых переданных импульсах, то есть на самых больших расстояниях. Многократное рассеяние учитывает множество актов однократного рассеяния с очень большими сечениями, но с очень малыми углами рассеяния. Условие наличия минимальной энергии, необходимой для выбивания атома-мишени из узла решетки, значительно снижает сечение упругого рассеяния с выбиванием вторичного атома, поэтому его можно моделировать как дискретный процесс со значительно меньшим сечением, чем сечение однократного рассеяния, используемым при моделировании многократного рассеяния. Заметим, что при применении такого дискретного процесса именно он играет основную роль в формировании «хвостов» углового распределения, не описывающихся многократным рассеянием. С другой стороны, дискретный процесс рассеяния с выбиванием вторичных атомов необходим для моделирования радиационной стойкости, поэтому такое взаимодействие никак нельзя включать в многократное рассеяние, которое не производит вторичных атомов. Однако шаги моделирования, определяемые средней длиной свободного пробега дискретного упругого рассеяния, очень малы, и именно для таких ма-

лых шагов моделирования, на которых происходит порядка тысячи актов однократного рассеяния без выбивания атомов-мишеней из кристаллической решетки, и предназначена найденная зависимость углового распределения многократного рассеяния от длины шага моделирования.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ НА МАЛЫХ ШАГАХ

Моделирование было проведено для многократного рассеяния дейтронов в дейтериде титана, из которого изготавливается мишень нейтронного *dd*-генератора. Описание многократного рассеяния на малых шагах моделирования было необходимо и для уточнения процесса пыления атомов мишени с поверхности мишени нейтронного генератора. В кристаллической решетке дейтерида титана при моделировании полагалось: $E_{\text{de}}^{(\text{Ti})} = 25$ эВ для титана и $E_{\text{de}}^{(d)} = 10$ эВ для дейтерия. Эти значения E_{de} используются, например, в программе SRIM [2, 3], применяющейся для моделирования переноса ионов. Максимальный квадрат переданного импульса $|t_{\min}|$ ($|t| = 2p_{\text{CM}}^2(1-\cos\theta_{\text{CM}})$, где p_{CM} – импульс, а θ_{CM} – угол рассеяния в системе центра масс) определялся как

$$|t_{\min}| = 2E_{\text{de}}M. \tag{1}$$

В резерфордовском дифференциальном сечении необходимо учесть электронную экранировку на больших расстояниях (при малых $|t|$), поскольку в противном случае при $|t| \to 0$ сечение обратится в бесконечность. Экранировка связана с взаимопроникновением электронных оболочек атомов. Исходя из структуры электронных оболочек, Н. Бор предложил [4] экспоненциальную электронную экранировку потенциала взаимодействия ядер в форме

$$U(r) = \frac{e^{-\frac{r}{a_{\text{U}}}}}{r}, \tag{2}$$

где a_{U} – радиус экранирования, о котором будет сказано ниже, что по форме, если ввести обозначение $a_{\text{U}} = \hbar c/\left(\mu_{\text{S}}c^2\right)$, где μ_{S} – эффективная масса обменного фотона, очень похоже на потенциал Юкавы для однопионного обмена. Тогда дифференциальное сечение резерфордовского рассеяния запишется в виде:

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{4\pi\eta^2}{\left(|t| + \mu_{\text{S}}^2\right)^2}, \tag{3}$$

где $\eta = zZ\alpha\mu\hbar c/p_{\text{CM}}$ – параметр Зоммерфельда, $\hbar c \approx 200$ МэВ фм, α – постоянная тонкой структуры, $\mu = mM/(m+M)$ – приведенная масса, а m, M и z, Z – масса и заряд налетающей частицы и мишени соответственно. Таким образом, электронную экранировку можно описать возникновением эффективной массы фотона как квазичастицы при перекрытии электронных оболочек.

Другим способом описания электронной экранировки был потенциал вида $U(r) \sim r^{-m}$, где $m < 1$, что делает его интегрируемым при $r \to 0$. Для вычисления величины m использовались два подхода: модель Ленца–Дженсена [5, 6], согласно которой $m = 0.191$, и модель Томаса–Ферми [7] с $m = 0.311$. Развитие этого подхода к параметризации экранированного потенциала можно найти в [8], где на его основе была предложена эмпирическая модель многократного рассеяния.

Уже на следующий год после публикации Бора появилась идея о более детальных статистических квантово-механических расчетах проникновения двух атомов друг в друга [9]. На этой основе был предложен целый ряд потенциалов, которые позволили бы моделировать прохождение ионов через вещество. Пионерской работой в этом направлении было исследование [10]. Позже более обширные расчеты, охватывающие сотни веществ, были проведены в [11], где использовался метод Хартри-Фока [12], позже получивший название метода Хартри–Фока–Слатера, а для некоторых веществ – метод функционала электронной плотности [13]. В результате было найдено, что электронная экранировка с хорошей точностью зависит от безразмерной переменной $x = r/a_{\text{U}}$, где $a_{\text{U}} = C_{\text{TF}}a_0/\left(z^{0.23} + Z^{0.23}\right)$, боровский радиус $a_0 = 0.529$ Å и $C_{\text{TF}} = 0.88534$ – константа модели Томаса–Ферми.

В результате, вместо одной экспоненты в числителе (2) получался набор из нескольких экспонент:

$$\begin{aligned}\Phi(x) = {} & 0.5099e^{-0.9432x} + 0.2802e^{-0.4028x} + \\ & + 0.1818e^{-3.2x} + 0.02817e^{-0.2016x},\end{aligned} \tag{4}$$

т. е. доминировал все-таки боровский фактор вида $e^{-\frac{r}{a_{\text{U}}}}$.

В работе [14] экранировка была снова приведена к форме, предложенной Бором, и величина квадрата массы квазичастицы обменного фотона записывалась в виде $\mu_{\text{S}}^2 = |t_{\max}|A_{\text{S}}$, где $|t_{\max}| = 4p_{\text{CM}}^2$ – максимальный квадрат переданного импульса при упругом рассеянии, а коэффициент электронной экранировки A_{S} обратно пропорционален $|t_{\max}|$, причем использовалось $a_{\text{U}} = C_{\text{TF}}a_0/\sqrt{z^{2/3} + Z^{2/3}}$. Для рассеяния дейтрона на дейтроне в [14] получалось $\mu_{\text{S}}^2 = 4.01 \cdot 10^{-5}$ МэВ^2, а в случае рассеяния

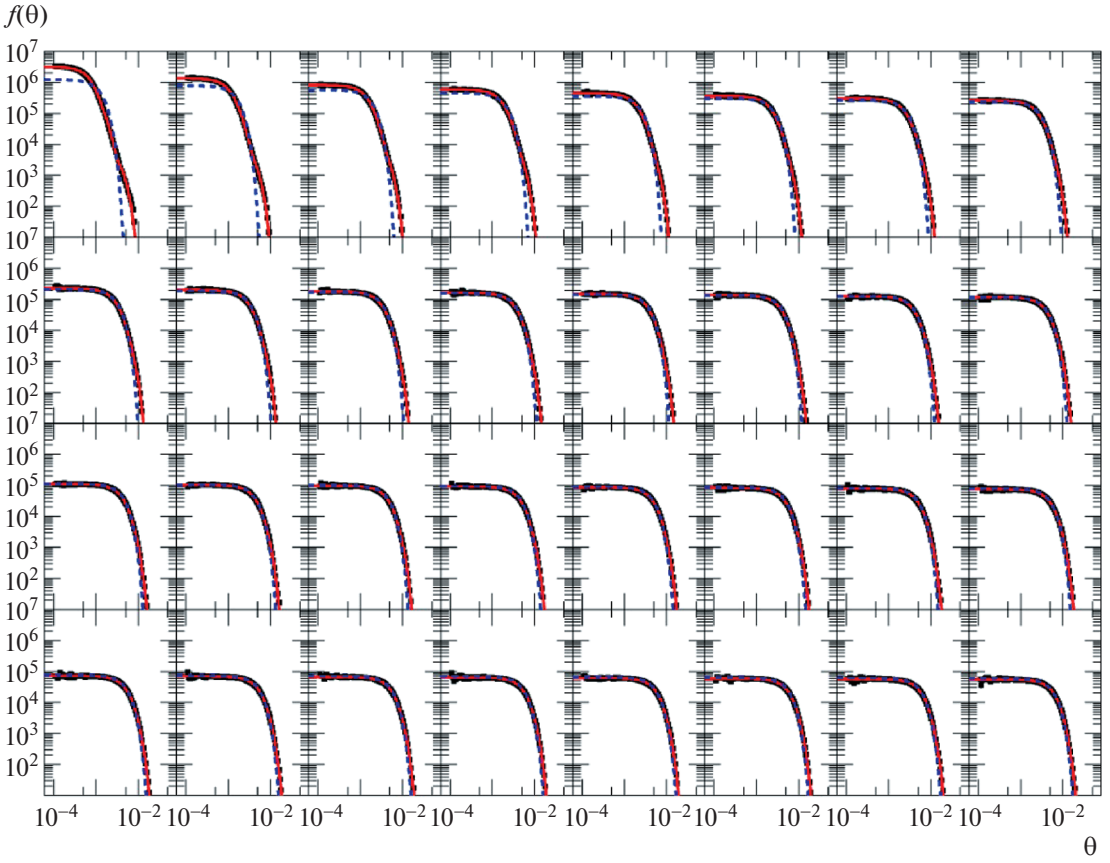

Рис. 1. Гистограммы плотности вероятности углового распределения многократного рассеяния в тонкой мишени.

дейтрона на ядре титана – $\mu_S^2 = 1.93 \cdot 10^{-4}$ МэВ^2. Эти величины использовались в настоящей работе при моделировании многократного рассеяния дейтронов в дейтериде титана.

Сечение однократного рассеяния, использовавшееся при моделировании многократного рассеяния, определялось как интеграл выражения (3) от 0 до $|t_{\min}|$:

$$\sigma_{ms} = \frac{4\pi\eta^2 |t_{\min}|}{\mu_S^2 \left(|t_{\min}| + \mu_S^2\right)}. \quad (5)$$

Эффект когерентного многократного рассеяния для молекулы D_2^+ [14] не учитывался, так как при облучении мишени рассматривались падающие пучки атомарного дейтерия.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ДЕЙТРОНОВ В ТОНКИХ СЛОЯХ ДЕЙТЕРИДА ТИТАНА

В ходе моделирования мишень из дейтерида титана перпендикулярно своему торцу бомбардировалась ядрами дейтерия с начальной кинетической энергией $T_{LS} = 10$ МэВ. Мишень толщиной 3.2 мкм была разделена на 32 слоя толщины 0.1 мкм (тонкая мишень), а затем следовало еще 32 слоя толщиной 3.2 мкм (толстая мишень), что позволяло при прохождении дейтронов через каждый слой строить гистограмму плотности вероятности углового распределения многократного рассеяния и следить за ее изменением от слоя к слою. Получившиеся гистограммы плотности вероятности углового распределения многократного рассеяния $f(\theta_i) = dN_i / \left(\theta_i^2 d\ln\theta_i\right)$, где dN_i – число событий в бине, для тонкой (шаг 0.1 мкм) и толстой (шаг 3.2 мкм) мишеней изображены на рис. 1, 2. Аппроксимация функции плотности вероятности углового распределения многократного рассеяния дейтронов на ионах кристаллической решетки дейтерида титана проводилась с помощью функции

$$f(\theta) = \sum_{i=1}^{3} \frac{2W_i}{D_i} e^{-\frac{\theta^2}{D_i}}. \quad (6)$$

Первый член суммы описывает “нос” распределения, второй – основной гауссиан, а третий – “хвост” распределения.

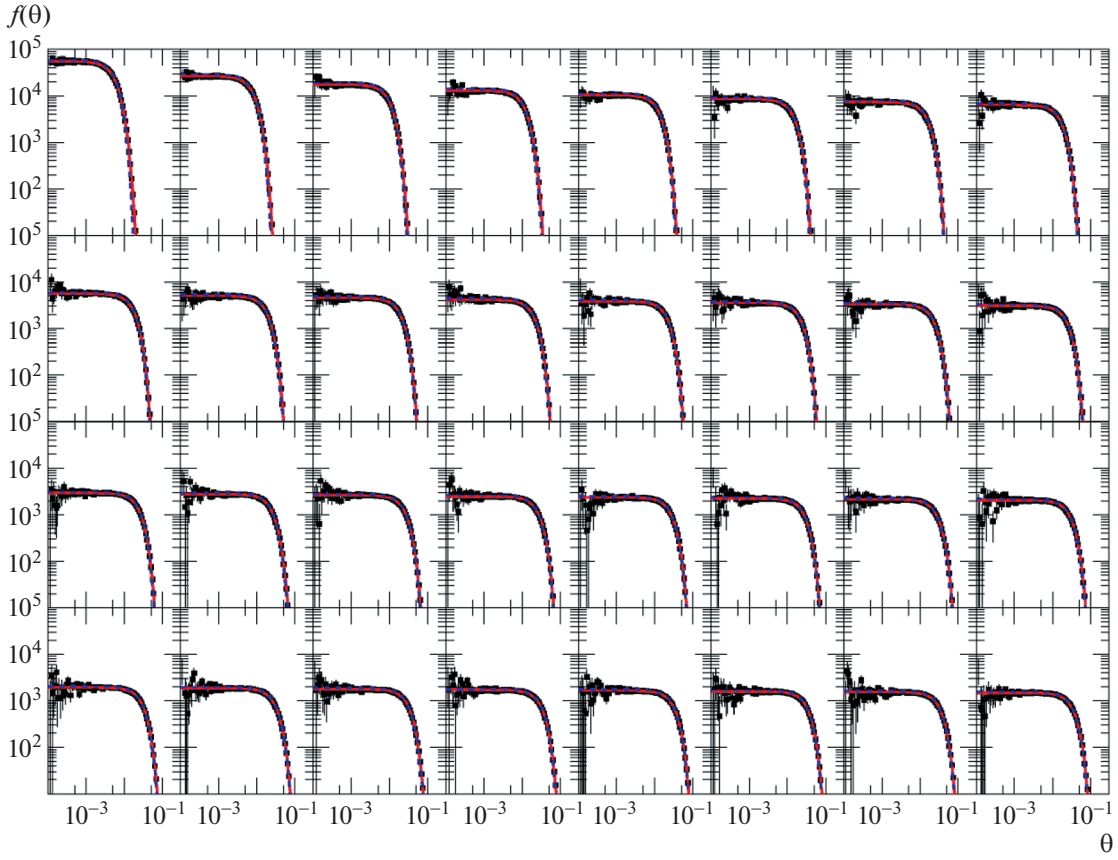

Рис. 2. Гистограммы плотности вероятности углового распределения многократного рассеяния в толстой мишени.

Штриховой кривой на рис. 1 показано основное гауссово распределение. Для самого тонкого слоя над основным гауссовым распределением при самых малых углах рассеяния возвышается более узкий “нос”, превосходящий основное распределение при самых малых углах рассеяния почти на порядок. В гистограмме первого слоя тонкой мишени видно также, что события “хвоста” тянутся по крайней мере до вдвое больших углов, чем для основного распределения. Как видно из рис. 1, полная “гауссизация” углов отклонения частиц от их первоначального направления в результате многократного рассеяния происходит только после прохождения потоком дейтронов тонкой мишени, т. е., 3.2 мкм в дейтериде титана, что примерно соответствует толщине слоя дейтерида титана в мишени нейтронного генератора.

Параметры формулы (6), зависящие от величины шага, аппроксимировались формулами:

$$W_1(x) = \frac{33390\left(1+\left(\frac{x}{17.1}\right)^{0.88}\right)}{x^{0.12}\left(1+\left(\frac{x}{0.636}\right)^{1.16}\right)\left(1+\left(\frac{x}{6.128}\right)^{2.05}\right)}, \quad (7)$$

$$W_2(x) = \frac{22979\left(1+\frac{0.0717}{x}\right)\left(1+\left(\frac{x}{9.628}\right)^{0.032}\right)}{1+\frac{0.27}{x}}, \quad (8)$$

$$W_3(x) = \frac{21859}{x^{0.09}\left(1+\left(\frac{0.8884}{x}\right)^{1.08}\right)}, \quad (9)$$

$$D_1(x) = \frac{0.59\times10^{-5}x}{1+\frac{0.029}{x}}, \quad (10)$$

$$D_2(x) = D_1(x) + 0.854\times10^{-6}\left(1+\left(\frac{x}{0.25}\right)^{1.108}\right), \quad (11)$$

$$D_3(x) = D_2(x) + 0.8\times10^{-5}\left(1+\left(\frac{x}{1.28}\right)^{0.77}\right)\times \times\left(1+\left(\frac{x}{132.37}\right)^{4.64}\right), \quad (12)$$

где x – длина шага в микрометрах. Полученные значения параметров и аппроксимирующие функции изображены на рис. 3: черным (1 – “нос”), крас-

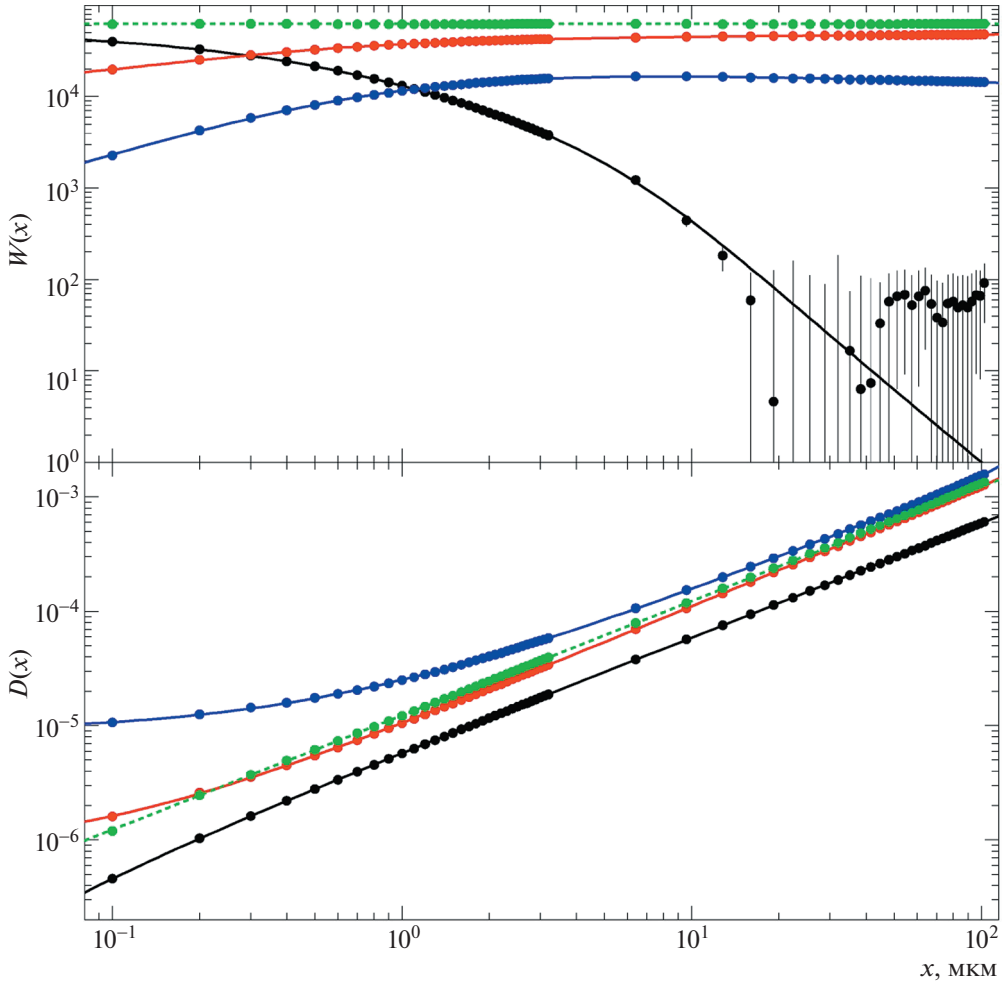

Рис. 3. Изменение относительных вероятностей и дисперсий трех гауссианов с увеличением толщины слоя.

ным (2 – основное распределение Гаусса) и синим (3 – "хвост") цветами. Зеленым цветом показаны суммарная вероятность $W = \sum_{i=1}^{3} W_i$ и усредненная дисперсия $D = \sum_{i=1}^{3} W_i D_i / W$. Величина W пропорциональна числу первичных частиц, поэтому не меняется от слоя к слою. Усредненная дисперсия D линейно зависит от x, то есть в пределе малых углов рассеяния результирующее отклонение рассеивающейся частицы не зависит от разбиения пройденного слоя на различные шаги моделирования. Видно, что при относительно больших шагах дисперсия основного распределения Гаусса близка к усредненной дисперсии D. Как и следовало ожидать, вероятность "носа" на малых толщинах наибольшая, хотя с ростом x она становится пренебрежимо малой. "Хвост" имеет самую низкую вероятность на самых малых толщинах и в то же время наибольшую дисперсию во всем диапазоне x. При больших x дисперсии «хвоста» и основного распределения Гаусса приближаются друг к другу, в то время как вероятность основного распределения остается примерно в три раза больше.

На рис. 4 полученная величина усредненной дисперсии D показана сплошной красной прямой. Эта зависимость сравнивается с дисперсией $D = 2\theta_0^2$ из PDG [15], где

$$\theta_0 = \frac{13.6\ \text{МэВ}\ z\sqrt{\frac{x\rho}{X_0}}}{\beta_{LS} p_{LS}}\left[1 + 0.038 \ln\left(\frac{x\rho}{X_0}\right)\right]. \qquad (13)$$

Здесь X_0 – радиационная длина [г/см^2], а ρ – плотность материала мишени, z, β_{LS} и p_{LS} – заряд, скорость и импульс налетающей частицы в лабораторной системе и x – толщина рассеивающего слоя материала, пройденная частицей. Видно, что на самых больших толщинах, рассчитанных методом Монте-Карло, получаются значения дисперсии углового распределения, близкие к PDG-аппроксимации (13). При малых толщинах из-за логарифмического члена PDG-аппроксимации в пределе малых углов рассеяния резуль-

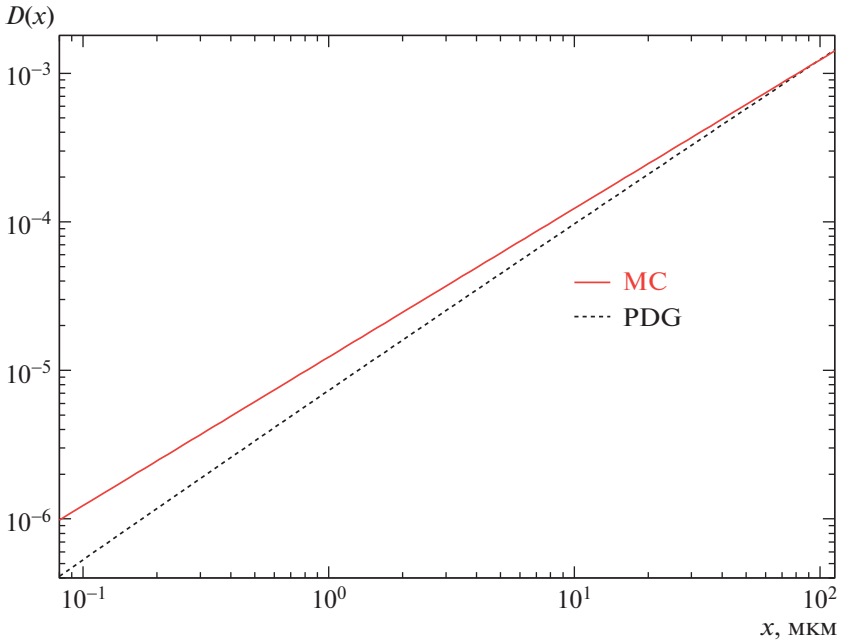

Рис. 4. Сравнение усредненной дисперсии распределения по углу рассеяния численного эксперимента с PDG-аппроксимацией (11).

тирующее отклонение рассеивающейся частицы становится зависимым от разбиения пройденного слоя на различные шаги моделирования, поскольку дисперсия перестает быть пропорциональной длине шага моделирования. Предложенный метод расчета угла многократного рассеяния, учитывающего только рассеяния без выбивания атомов мишени из узлов кристаллической решетки, свободен от этого недостатка.

Полученная аппроксимация, несмотря на свою сложность, позволяет легко разыгрывать угол многократного рассеяния, случайным образом выбирая одно из трех распределений Гаусса по их относительной вероятности W_i, а затем разыгрывать распределение Гаусса с соответствующей дисперсией D_i.

4. УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ИОНОВ С РАЗЛИЧНОЙ МАССОЙ И РАЗЛИЧНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Сечение упругого рассеяния без выбивания атома-мишени из кристаллической решетки, требующего передачи ядру отдачи кинетической энергии как минимум E_{de}, равно

$$\sigma_s \approx \frac{4\pi\eta^2}{\mu_S^2} \qquad (14)$$

и получается из (3) при условии $|t_{min}| \gg \mu_S^2$. Если же проинтегрировать (3) от $|t_{min}|$ до $|t_{max}|$, пренебрегая $\mu_S^2 \ll |t_{min}| \le |t|$, то, поскольку $|t_{max}| \gg |t_{min}|$, получим для полного сечения резерфордовского рассеяния с выбиванием атома-мишени величину

$$\sigma_d = 4\pi\eta^2 \frac{|t_{max}| - |t_{min}|}{|t_{max}||t_{min}|} \approx \frac{4\pi\eta^2}{|t_{min}|}. \qquad (15)$$

Оценим теперь сколько однократных взаимодействий с малыми передачами импульса и энергии (σ_s) произойдет на средней длине свободного пробега $\lambda_d = (n_0\sigma_d)^{-1}$, где n_0 – концентрация рассеивающих центров. Заметим, что большое дискретное сечение и, соответственно, малый шаг моделирования позволяет решить проблему накопленного при многократном рассеянии смещения. На малом шаге накопленным смещением можно пренебречь, и оно будет естественным образом набираться на большом количестве дискретных шагов. Использование накопленного смещения на больших шагах приводит к неправильному моделированию переноса частиц в магнитном поле, например, электроны не навиваются на магнитные линии, а начинают дрейфовать от оси в осесимметричных установках. Очевидно, что число однократных взаимодействий без выбивания ионов из кристаллической решетки мишени при прохождении средней длины свободного пробега дискретного рассеяния равно $N_s = \lambda_d\sigma_s n_0 = \sigma_s/\sigma_d \approx |t_{min}|/\mu_S^2$. Поскольку рассеяние на малые углы происходит практически по закону $d\sigma/d\cos\theta_{CM} \sim \sin^{-2}\theta_{CM}$ и

различие вблизи $|t_{min}|$ соответствует относительно малым сечениям, которые практически не влияют на гауссизацию многократного рассеяния, величину N_s можно считать скейлинговой переменной, определяющей и ширины, и относительные вклады трех гауссианов в угловое распределение многократного рассеяния. В (7)–(12) были получены параметризации $W_i(x_0)$ и $D_i(x_0)$, где x_0 имела смысл шага дейтрона с кинетической энергией $T_{LS} = 10$ МэВ в дейтериде титана, поэтому для получения универсальных зависимостей следует представить их в виде функций от величины $N_{s0} = x_0\sigma_{s0}n_0$, где n_0 – концентрация молекул дейтерида титана, а $\sigma_{s0} = 2\sigma_{sD} + \sigma_{sTi}$ – суммарное сечение (5) рассеяния дейтрона при $T_{LS} = 10$ МэВ на молекуле дейтерида титана без выбивания атомов из их равновесных положений в узлах кристаллической решетки мишени. Если возникает необходимость рассчитать величины $W_i(x)$ и $D_i(x)$ при другой энергии первичных дейтронов, то аргумент надо преобразовать к получающемуся из условия скейлинга $N_{s0} = l\sigma_s n_0$ выражению

$$x_0 = \frac{l\sigma_s}{\sigma_{s0}}, \qquad (16)$$

где l – длина пробега налетающей частицы. Представление о порядке величины N_{s0} проще всего получить при рассмотрении рассеяния ионов в моноэлементных средах. Так, если условно представить кристаллический дейтерий с потенциальной ямой в узлах кристаллической решетки 10 эВ, то независимо от его плотности на средней длине свободного пробега дискретного рассеяния будет происходить примерно 900 однократных рассеяний на малые углы, значения которых ограничены величиной $|t_{min}|$. Именно эта тысяча резерфордовских рассеяний и будет определять гауссизацию углового распределения многократного рассеяния, причем эта величина не зависит от энергии налетающих дейтронов. Аналогично, для дейтерия в чистом титане с $E_{de}^{(Ti)} = 25$ эВ получаем примерно 12600 – на порядок больше актов однократного рассеяния, то есть гауссизация должна происходить быстрее. Для ионов титана в титановой мишени среднее число актов однократного рассеяния 7100, а вот для ионов титана в дейтерии их число будет относительно невелико – примерно 210, что говорит о том, что структура функции плотности вероятности (6), состоящей из трех распределений Гаусса, будет ярко выраженной. Наконец, для дейтрона в мишени из дейтерида титана на длине его свободного пробега будет происходить примерно 10300 однократных рассеяний на малые углы, определяемых сечением (15).

При подстановке (16) в качестве аргумента в формулы (7)–(12) рассчитываются относительные вклады W_i и дисперсии D_i, соответствующие массе и энергии переносимого в веществе иона. Таким образом, можно более точно моделировать угол многократного рассеяния ионов дейтерия и титана в дейтериде титана на малых шагах при разных энергиях ионов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате моделирования многократного рассеяния дейтронов в тонких слоях мишени из дейтерида титана получена аппроксимация углового распределения многократного рассеяния дейтронов в зависимости от толщины рассеивающего слоя, которую предлагается применять для уточнения моделирования нейтронного *dd*-генератора. Сочетание многократного рассеяния на шаге моделирования с дискретным упругим рассеянием, определяющим величину шага, позволяет воспроизводить “хвосты” углового распределения ионов при прохождении тонких фольг, а также избежать двойного счета при моделировании электромагнитного и сильного дискретного рассеяния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Dixon D.R., Jensen G.L., Morrill S.M., Walter R.L., Gould C.R.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1983. V. 213. P. 525.
2. *Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. 2010. V. 268. P. 1818.
3. http://www.srim.org.
4. *Bohr N.* // Mat. Fis. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1948. V. 18. P. 142.
5. *Lenz W.* // Z. Phys. 1932. V. 77. P. 713.
6. *Jensen H.* // Z. Phys. 1932. V. 77. P. 722.
7. *Sommerfeld A.* // Z. Phys. 1932. V. 78. P. 283.
8. *Knudsen H., Besenbacher F., Heinemeier J., Hvelplund P.* // Phys. Rev. A. 1976. V. 13. P. 2095.
9. *Gombas P.* Die Statistische Theorie des Atoms und Ihre Anwendung. 1949. Wien: Springer.
10. *Wilson W.D., Hagmark L.G., Biersack J.P.* // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. P. 2458.
11. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. 1985. New York: Pergamon.
12. *Froese-Fischer C.* The Hartree-Fock Method for Atoms: a Numerical Approach. 1977. New York: Wiley.
13. *Mozuzzi V.L., Janak J.F., Williams A.R.* Calculated Electric Properties of Metals. 1978. Oxford: Pergamon.
14. *Boschini M., Consolandi C., Gervasi M., Giani S., Grandi D., Ivanchenko V., Pensotti S., Rancoita P.G., Tacconi M.* // Proc. 12th ICATPP Conf. 2010.
15. *Zyla P. et al.* (*Particle Data Group*) // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. V. 2020. P. 083C01.

Multiple Ion Scattering in Titanium Deuteride

A. A. Galyuzov[1], * and M. V. Kosov[1], **

[1]Dukhov All-Russian Research Institute of Automation, Moscow, 127055 Russia

**e-mail: AAGalyuzov@vniia.ru*

***e-mail: Kosov@vniia.ru*

Received June 15, 2021; revised July 22, 2021; accepted August 15, 2021

Abstract—In this paper, we propose a method for calculating multiple scattering of ions when passing through thin layers of titanium deuteride in the form of a sum of three Gaussian distributions, the dispersions of which are compared with increasing layer thickness and the found form of the angular distribution of multiple scattering is reduced to a single Gaussian distribution. When calculating single Rutherford scattering, we used only scattering without knocking out of the target atom from the crystal lattice. Scattering with the knocking out of the target atom from the lattice was taken into account by discrete elastic scattering.

Keywords: multiple scattering, Rutherford scattering, electron screening