

บทที่ 4

การจำลอง RBS ด้วยคอมพิวเตอร์

กล่าวกันว่าเทคนิค RBS เป็นเทคนิควิเคราะห์ธาตุที่ไม่จำเป็นต้องอาศัยสารมาตรฐาน ทั้งนี้ เพราะสามารถใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ช่วยได้ สำหรับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการจำลอง Rutherford Backscattering Spectrum อย่างเหมือนจริง มีอยู่หลายโปรแกรม ดังจะเห็นได้จากตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 ตารางแสดงตัวอย่างโปรแกรมที่ใช้สำหรับการจำลองสเปกตรัมของ

Rutherford Backscattering Spectrometry [Vizkelethy, 1994]

Author	Year	Program name	Computer or op. system	Comment
Ziegler	1976	-	Mainframe	RBS
Eridan	1985	BASF	Apollo DN320	RBS
Simpson	1984	-	VMS	NRA
Kido	1985	-	-	RBS, Channeling
Doolittle	1985	RUMP	VSM/UNIX/DOS	RBS, ERDA, Non-Rutherford, fitting
Butler	1986	ION-SCATT	HP9000 Series 200 or 300	RBS
Vickridge	1989	SPACES	DOS	Very narrow resonance
Vizkelethy	1989	SENRAS	DOS	NRA
Guo	1989	-	-	2D RBS
Steinbauer	1989	TRBS	DOS/(Fortran source)	multiple scattering
Tirira	1989	GABY	DOS	ERDA
Marwick	1991	-	DOS	(p, γ) resonance
Saarihtti	1991	GISA	DOS	RBS, ERDA, Non-Rutherford, Channeling, fitting
Johnston	1992	ANALRA	DOS	NRA, fitting
Wuest	1992	ISOS	-	Rough surface
Kotai	1993	RBX	DOS	RBS, ERDA, Non-Rutherford, Channeling

4.1 โปรแกรม SIMNRA

ต่อมาในปี ค.ศ.1997 ได้เกิดมีโปรแกรม SIMNRA [Mayer, 1997] ซึ่งได้รับความนิยมไม่น้อยหน้าโปรแกรมอื่นๆ ที่ปรากฏอยู่ในตารางที่ 4.1 เพราะมีข้อดีตรงที่ใช้ง่าย, สะดวกในการขออนุญาตใช้ เพราะสามารถลงทะเบียนผ่านทางอินเทอร์เน็ต ด้วยค่าสมัครเพียง US \$ 150 พร้อมมีคู่มือการใช้ที่สมบูรณ์ นอกจากนี้ โปรแกรมนี้ยังเป็นโปรแกรมที่เล่นกราฟฟิก สำหรับการจำลองสเปกตรัมไม่แต่เพียงของ RBS แต่ยังรวมถึง Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA หรือ ERA) และ Nuclear Reaction Analysis (NRA) อีกด้วย

ในโปรแกรม SIMNRA นี้ ได้ใช้การประมาณแบบ single scattering ในการคำนวณแนวทางการเคลื่อนของกระสุน (อนุภาคหรือไอออน) ภายในวัสดุตัวอย่าง และการหาค่า differential scattering cross-section ที่มุม θ ใดๆ ที่พลังงาน E ใน LAB system คำนวณได้จากสมการ 2.41 ซึ่งก็คือ Rutherford scattering cross-section $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$ แต่ที่พลังงานต่ำ ๆ นั้นค่า differential scattering cross-section $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ จะแตกต่างจาก $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$ ด้วย correction factor (F) เนื่องจากผลของ screening ต่อค่าประจุที่แท้จริง nuclear charge ที่เกิดจากอิเล็กตรอนที่อยู่ล้อมรอบนิวเคลียสเป้าและอนุภาคกระสุน(กรณีกระสุนที่เป็นไอออน)โดย

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = F \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R \quad (4.1)$$

ซึ่งค่า F จะเป็นไปตามทฤษฎีของ L' Ecuyer et al. และ Andersen [Mayer, 1997]

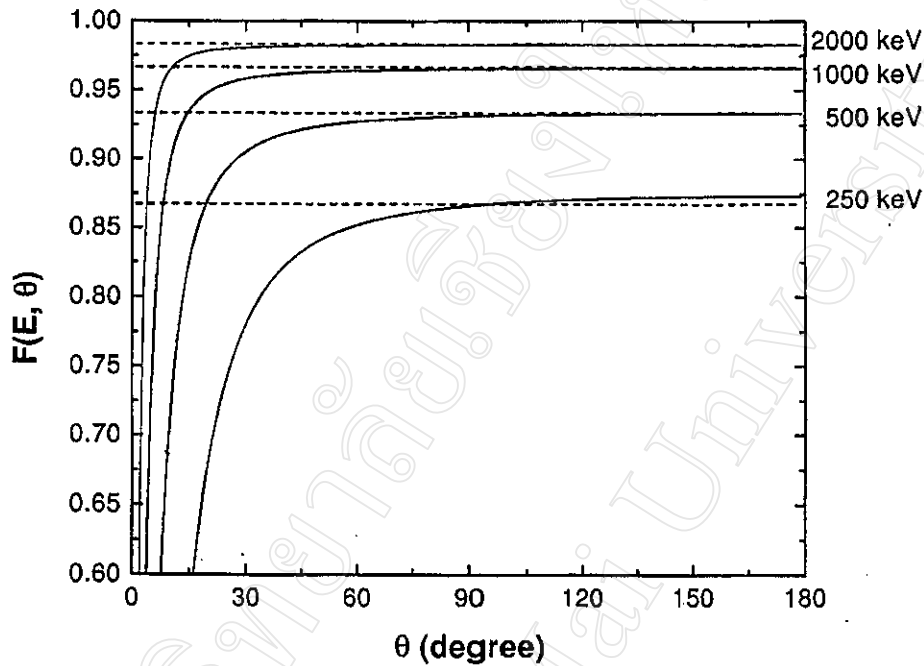
$$\text{เมื่อ} \quad F_{L'Ecuyer} = 1 - \frac{0.049Z_o Z^{4/3}}{E_{CM}} \quad (4.2)$$

$$F_{Anderson} = \frac{\left(1 + \frac{E_i}{2E_{CM}}\right)^2}{\left\{1 + \frac{E_i}{E_{CM}} + \left[\frac{E_i}{2E_{CM} \sin^2 \theta_{CM}/2}\right]^2\right\}} \quad (4.3)$$

โดยที่ E_{CM} คือ พลังงานของอนุภาคกระสุนใน CM system

$$E_1(\text{keV}) = 0.04873 Z_0 Z (Z_0^{2/3} + Z^{2/3})^{1/2}$$

ถ้าพล็อตกราฟแสดงความสัมพันธ์ของ correction factor (F) จากสมการ 4.2 และ 4.3 ที่มุมกระเจิง θ และพลังงานของกระสุนค่าต่าง ๆ จะเป็นดังรูปที่ 4.1



รูปที่ 4.1 แสดงค่า correction factor (F) สำหรับการคำนวณ differential scattering cross-section ที่มุม θ ค่าต่างๆ ที่เป็นไปตามทฤษฎีของ L' Ecuyer (สมการ 4.2, เส้นประ) และจากทฤษฎีของ Anderson (สมการ 4.3, เส้นทึบ) เมื่อกระสุนเป็นอนุภาคอัลฟา เคลื่อนไปชนกับนิวเคลียสของธาตุทองด้วยพลังงานค่าต่าง ๆ [Mayer, 1997]

จากรูปที่ 4.1 พบว่าที่มุม $\theta > 90$ องศา และที่พลังงานสูงๆ (≥ 250 keV) นั้นค่า correction factor (F) ที่ได้จากทฤษฎีของ L' Ecuyer และจากทฤษฎีของ Anderson มีค่าเข้าใกล้ 1 และมีค่าเท่า ๆ กัน ซึ่งนั่นหมายความว่า ที่มุมกระเจิงและพลังงานสูง ๆ นั้นค่า $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ มีค่าเบี่ยงเบนไปจาก $\frac{d\sigma}{d\Omega}|_R$ น้อยมาก แต่กรณีที่มุม $\theta < 90$ องศา และที่พลังงานต่ำ ๆ นั้นจะมีค่าแตกต่างกัน โดย F ที่ได้จากทฤษฎีของ Anderson จะมีค่าน้อยกว่าที่ได้จากทฤษฎีของ L' Ecuyer และส่งผลให้ค่า $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ มีค่าเบี่ยง

เบนไปจาก $\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_R$ มากกว่าด้วย ดังนั้น การคำนวณค่า correction factor (F) จึงนิยมใช้ทฤษฎีของ Anderson มากกว่าทฤษฎีของ L' Ecuyer เนื่องจากให้ผลที่สอดคล้องกับทฤษฎีและการทดลองที่มุม θ และพลังงานค่าต่าง ๆ

ส่วนการคำนวณเกี่ยวกับ electronic stopping power $\left(= \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \right)$ นั้นจะแบ่งแยกพิจารณาออกเป็น 2 กรณีคือ กรณีของอนุภาคกระสุนเป็นอนุภาคโปรตอน, นิวตรอน, ไรตรอน และอัลฟา นั้นจะคิดจากทฤษฎีของ Anderson และ Ziegler และกรณีที่เป็นไอออนมวลหนักจะคิดจากทฤษฎีของ Ziegler, Biersack และ Littmark [Mayer, 1997]

4.2 การใช้โปรแกรม SIMNRA

สำหรับการใช้โปรแกรม SIMNRA จะแบ่งเป็น 2 ส่วน คือ ส่วนของการคำนวณสเปกตรัมพลังงาน และการตรวจสอบความเหมือนของผลการจำลองเมื่อเทียบกับผลการทดลองจริง

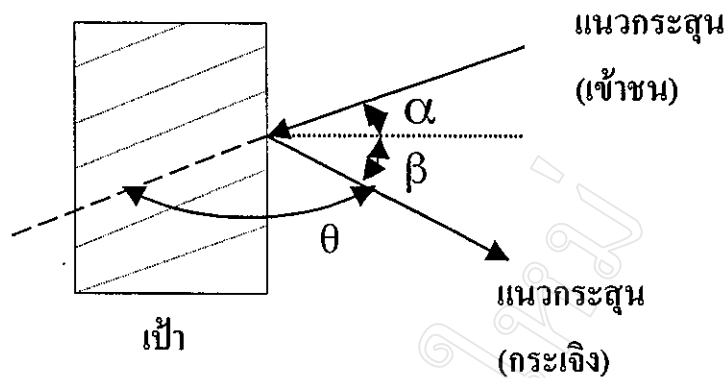
4.2.1 การคำนวณสเปกตรัมพลังงาน

มีลำดับขั้นตอนดังนี้

ขั้นตอนที่ 1) ไปที่ File menu เพื่อจะนำข้อมูลของสเปกตรัมที่ต้องการจำลองที่เป็น ASCII file เข้ามา โดยเลือกไปที่ Read data ซึ่งมีรูปแบบของ input data ดังแสดงไว้ในภาคผนวก จ

ขั้นตอนที่ 2) ไปที่ Setup menu แล้วเลือกไปที่ Experiment

- กำหนดชนิดและพลังงานของกระสุนอนุภาคที่ใช้ และสำหรับกระสุนมวลหนักให้เลือกที่ other เพื่อทำการกำหนดชนิดและมวลของกระสุนเอง
- กำหนดค่า Geometry ของการทดลอง เช่น มุมที่กระสุนตกกระทบบ (incident angle, α) และสะท้อน (exit angle, β) จากผิวเป้าและมุมกระเจิง (θ) ดังรูปที่ 4.2



รูปที่ 4.2 แสดงมุมที่อนุภาคกระสุนตกกระทบ α และสะท้อนด้วยมุม β จากผิวเป้า และกระเจิง θ จากแนวที่อนุภาคกระสุนตกกระทบ โดยที่ $0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$ และ $0^\circ \leq \beta \leq 180^\circ$

- กำหนดค่า Detector geometry เช่น ขนาดและรูปร่างของลำอนุภาคกระสุน, ขนาดและรูปร่างของ detector aperture และระยะจากผิวของเป้าไปยัง detector aperture ซึ่งการกำหนดค่าต่างๆ เหล่านี้จะจำเป็นก็ต่อเมื่อต้องการคำนวณเกี่ยวกับ geometrical straggling เท่านั้น เช่นใน ERDA แต่สำหรับ RBS นั้น มี geometrical straggling น้อยมากจึงละทิ้งไปได้
- Calibration ; เพื่อทำการเปลี่ยนสเปกตรัมนี้จาก channel number ไปเป็นพลังงานในแนวแกน x จากความสัมพันธ์แบบ non-linear energy calibration

$$E \text{ (keV)} = A + B \times \text{channel} + C \times \text{channel}^2$$

โดยที่ E คือพลังงานของกระสุนที่ได้จากการเปลี่ยนสเปกตรัม, A คือ calibration offset ในหน่วย keV, B คือพลังงานต่อหนึ่ง channel ในหน่วย (keV/channel) และ C คือเทอมกำลังสองของ channel ในหน่วยของ keV/channel² แต่สำหรับ linear energy calibration นั้น เทอม quadratic (C) จะมีค่าเป็นศูนย์

- Particle * sr คือจำนวนอนุภาคกระสุนคูณกับ solid angle ที่รองรับหัววัดโดย solid angle นี้ อยู่ในหน่วยของ steradians

- Detector resolution เพื่อกำหนดค่า energy resolution ของหัววัดในหน่วย keV ซึ่ง energy resolution ของหัววัดนี้ จะขึ้นอยู่กับชนิดของหัววัดและอนุภาคกระสุนที่ใช้ (ดูตารางที่ 2.2 หน้า 35)
- Energy spread ของลำกระสุน ; ในบางกรณี ลำอนุภาคกระสุนที่วิ่งมาชนเป้าหมาย อาจไม่ได้มีพลังงานค่าเดียว แต่มีการกระจายของค่าพลังงาน ซึ่งในโปรแกรม SIMNRA นั้นใช้การกระจายของค่าพลังงานเป็นแบบ gaussian ด้วยค่า FWHM ที่กำหนดได้ใน energy spread แต่ถ้าสมมติว่า พลังงานของกระสุนมีพลังงานค่าเดียวแล้ว energy spread จะมีค่าเป็น 0.0

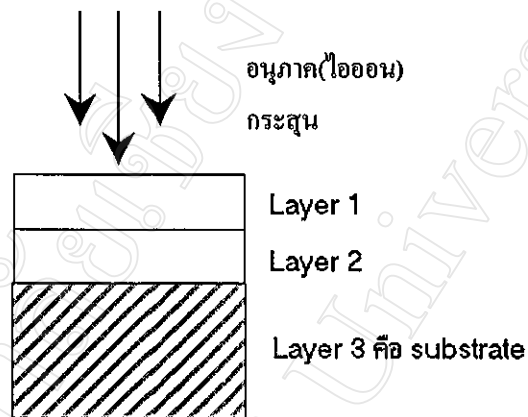
ตัวอย่างของค่าต่างๆ ในหมวด Experiment ที่อยู่ใน set up menu ดังที่กล่าวมาสำหรับกรณี อนุภาคอัลฟาพลังงาน 2 MeV เคลื่อนไปชนเป้า Cu-Au/Si แล้วมีอนุภาคอัลฟากระเจิงย้อนกลับมายังหัววัด SSB ที่มีค่า energy resolution เท่ากับ 15 keV ตั้งไว้ ณ มุม 166.10 องศาจากแนวการเคลื่อนที่เดิม ดังรูปที่ 4.3

Setup: Experiment	
Incident ion	
☐ H ☐ D ☐ T ☐ 3He ☐ 4He ☐ Other	Other ion Element: He Mass: 4 Energy (keV): 2000.00
Geometry	
α Incident Angle (Deg)	0.00
β Exit Angle (Deg)	13.90
θ Scattering Angle (Deg)	166.10
Detector Geometry	
Calibration	
Calibration Offset (keV)	2.500
Energy per Channel (keV/ch)	1.5390
Quadratic Term (keV/ch ²)	0.000E+0
More energy calibration options	
Particles * sr	3.250E+11
Energy resolution	
Detector Resolution (keV)	15.000
Energy spread of incident beam (keV)	0.000
<input checked="" type="button"/> OK Cancel	

รูปที่ 4.3 แสดงส่วนของ Setup menu : Experiment

ขั้นตอนที่ 3) ไปที่ Target menu เพื่อสร้างเป้าที่กระสุนวิ่งไปชน โดยเป้าจะประกอบด้วยชั้น (layer) เดียวหรือหลายชั้นก็ได้ ซึ่งแต่ละชั้นก็จะมีธาตุต่างๆ อยู่ได้หลายชนิดในปริมาณ concentration ที่แตกต่างกัน แต่อย่างไรก็ตาม concentration รวมของทุกๆ ธาตุในแต่ละชั้นจะมีค่าเท่ากับ 1 เสมอ ดังนั้นเป้าจะถูกสร้างจากการกำหนดค่า

- จำนวนชั้นรวม substrate โดยชั้นที่ 1 คือ ชั้นที่อยู่หน้าสุด ส่วน substrate จะเป็นชั้นที่อยู่สุดท้ายเสมอ ดังรูปที่ 4.4



รูปที่ 4.4 แสดงลักษณะของเป้าที่ถูกสร้างใน input data ของโปรแกรม SIMNRA

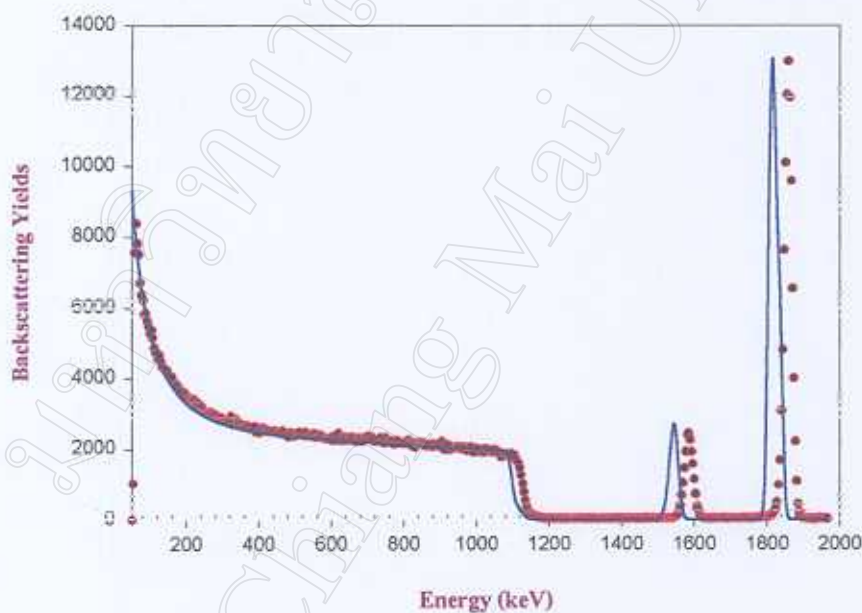
เช่นสมมุติเป็นตัวอย่างว่า เป้าที่จะได้นำมาศึกษาทำมาจากการหลอมทองคำบริสุทธิ์ในเบ้าทั้งสแตน ให้ระเหยขึ้น ไปเกาะที่ผิวหน้าของแผ่นซิลิกอนเวเฟอร์ต่อจากนั้นหลอมทองคำบริสุทธิ์ด้วยวิธีการเดียวกัน ฟิล์มบางของทองคำก็จะไปเคลือบทับบนทองคำ ในลักษณะนี้ก็จะถือว่า Layer ที่ 1 เป็นชั้นของทองคำ Layer ที่ 2 เป็นชั้นของทองคำ และ Layer ที่ 3 เป็น Si

- ความหนาของแต่ละชั้นในหน่วย $10^{15} \text{ atom/cm}^2$
- จำนวนของธาตุชนิดต่างๆ ในแต่ละชั้น โดยถึงแม้ชั้นนั้นจะสร้างจากการระเหยธาตุบริสุทธิ์ชนิดเดียวมาเคลือบ แต่สามารถมีธาตุจากชั้นข้างบนหรือข้างล่างมาปะปนได้
- บอกชนิดของธาตุแต่ละค่า concentration ของธาตุแต่ละชนิด โดยมักให้ธาตุที่เป็นหลัก มีสัดส่วนสูงที่สุด และค่า concentration รวมของทุก ๆ ธาตุในแต่ละชั้นจะมีค่าเท่ากับ 1 เสมอ ดังรูปที่ 4.5



รูปที่ 4.5 แสดงการสร้างเป้า

ขั้นตอนที่ 4) ทำการคำนวณสเปกตรัม โดยไปที่ calculate menu แล้วเลือก calculate spectrum โปรแกรมจะแสดงผล ดังแสดงในรูปที่ 4.6



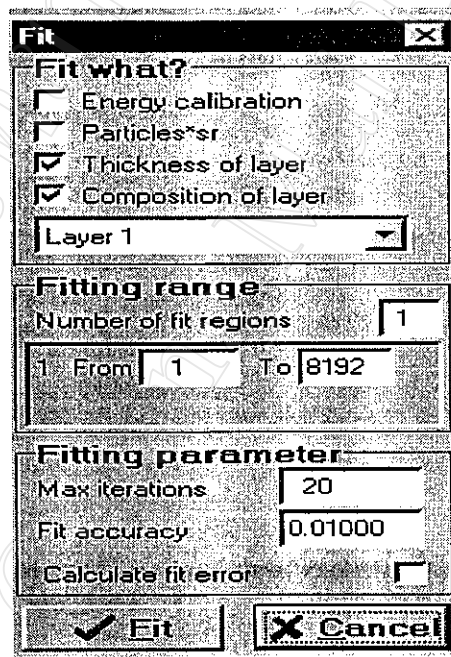
รูปที่ 4.6 แสดงการคำนวณสเปกตรัม จาก calculate menu

ซึ่งจากรูปที่ 4.6 พบว่าสเปกตรัมที่ได้จากการคำนวณไม่ซ้อนทับสเปกตรัมจากผลการทดลองของ Conventional RBS ที่ทำการวัดไว้ ณ Tandem Laboratory ของ Uppsala University ประเทศสวีเดน

ซึ่งใช้อนุภาคอัลฟาเป็นกระสุน ถูกเร่งด้วยเครื่องเร่ง EN-tandem Van de Graaff ให้มีพลังงาน 2 MeV เคลื่อนไปชนวัสดุตัวอย่าง ประมาณ 5 นาที ด้วยขนาด เส้นผ่าศูนย์กลาง 2 มิลลิเมตร และ กระแส 15 นาโนแอมแปร์ หลังจากเกิดอันตรกิริยากับวัสดุตัวอย่างแล้ว จะมีอนุภาคอัลฟาบางส่วน กระเจิงมายังหัววัด SSB ที่มุม 166.10 องศา และห่างจากวัสดุตัวอย่างเป็นระยะ 6 ซม.

4.2.2 การจำลองสเปกตรัม

ขั้นตอนที่ 1) ไปที่ calculate menu แล้วเลือกไปที่ Fit spectrum ซึ่งสเปกตรัมจากการคำนวณด้วย โปรแกรม SIMNRA และจากผลการทดลองจะถูก fit ด้วยกันอย่างอัตโนมัติ โดยการ fit นี้จะเป็นไปตาม parameter ที่ถูกเลือกให้เป็นตัวแปรค่าที่ละชั้น (layer) โดย parameter เหล่านี้จะอยู่ในส่วนของ Fit what ดังรูปที่ 4.7 ซึ่งประกอบไปด้วย Energy calibration, Particle *sr ความหนาของชั้น (Thickness of a layer) และชนิดของธาตุองค์ประกอบกับค่า concentration ในแต่ละชั้น (composition of layer)



รูปที่ 4.7 แสดงส่วนของ Calculate menu; Fit spectrum

ซึ่งในการเลือก parameter ให้เป็นตัวแปรค่านี้ สามารถทำได้โดยทำเครื่องหมายถูก $\checkmark$ หน้า parameter เหล่านี้ เช่น ถ้าทำเครื่องหมายถูก $\checkmark$ หน้า parameter ทั้ง 4 นี้ แล้วกดปุ่ม Fit โปรแกรม SINMRA นี้ก็จะทำการ fit สเปกตรัมจากการคำนวณและจากการทดลองด้วยการแปรค่า parameter ทั้ง 4 เพื่อพยายามให้ได้ผลการคำนวณใกล้เคียงกับผลการทดลองมากที่สุด

ขั้นตอนที่ 2) กำหนดช่วงบริเวณที่ต้องการ Fit โดยแต่ละช่วงต้องไม่ซ้อนทับกัน ซึ่งจำนวนของช่วงบริเวณที่กำหนดนี้มีค่าตั้งแต่ 1-10 บริเวณ เช่น จำนวนบริเวณที่ต้องการ fit คือ 2

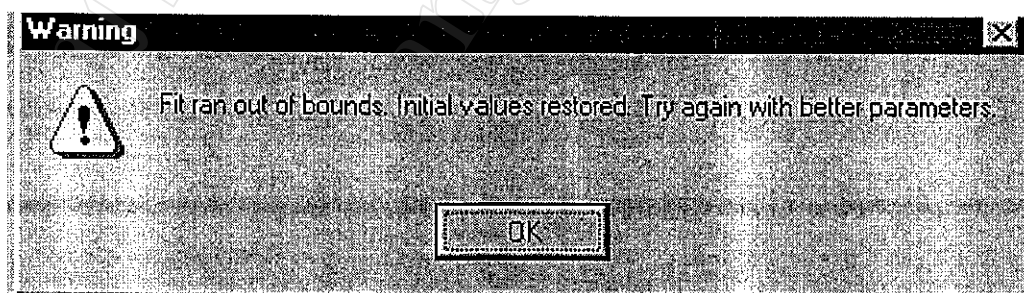
โดยบริเวณที่ 1 เริ่มจาก channel 100 ถึง 210

และบริเวณที่ 2 เริ่มจาก channel 211 ถึง 415

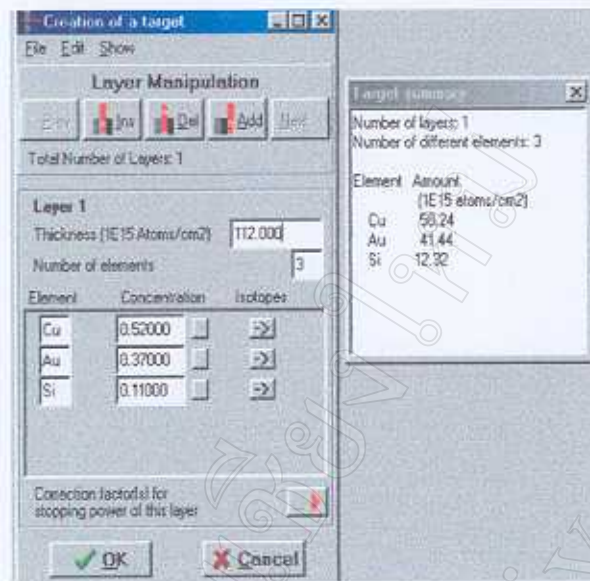
ขั้นตอนที่ 3) กำหนดขอบเขตล่างและขอบเขตบนของแต่ละบริเวณที่ต้องการ fit ดังขั้นตอนที่ 2

ขั้นตอนที่ 4) กำหนด Maximum Iteration ซึ่งคือจำนวนรอบของการ fit ด้วย parameter ข้างต้น จนกระทั่งถึงค่า accuracy ที่ต้องการหรือจนกระทั่งถึงจำนวนรอบของการ fit

ขั้นตอนที่ 5) กำหนดค่า accuracy ของการ fit ตามที่ต้องการ ซึ่งจะสัมพันธ์กับค่า Maximum Iteration โดย default ของค่า accuracy มีค่าเท่ากับ 0.01 และ Maximum iteration มีค่าเท่ากับ 20 และถ้าการ fit สเปกตรัมโดยกำหนดค่า accuracy และ Iteration นั้นไม่สำเร็จ โปรแกรมนี้จะขึ้นคำเตือน เช่น

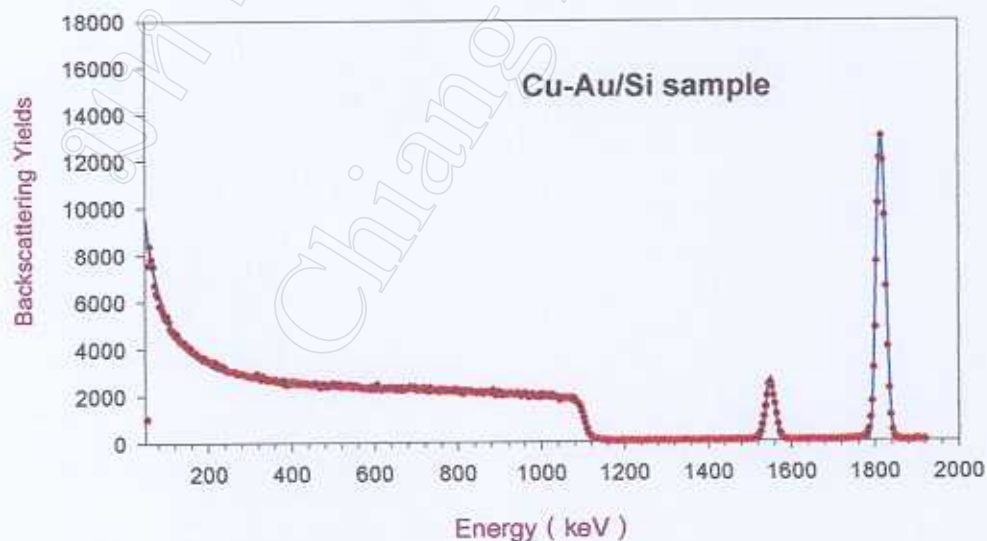


ขั้นตอนที่ 6) เมื่อการ fit สเปกตรัมที่ได้จากการคำนวณและผลการทดลองโดยผ่านทุก parameter ข้างต้นแล้วนั้น จะได้ค่า areal density ของธาตุต่างๆ บนเป้า โดยเลือกไปที่ Target menu แล้วไปที่ Target summary ดังรูปที่ 4.8



รูปที่ 4.8 แสดงส่วนของ Target summary ใน Target menu

ตัวอย่างของการคำนวณสเปกตรัมที่ได้จากการใช้อนุภาคอัลฟาพลังงาน 2 MeV เคลื่อนไปชนเป้า Cu-Au/Si แล้วมีอนุภาคอัลฟากระเจิงย้อนกลับไปยังหัววัด SSB ที่มุม 166.10 องศา ดังรูปที่ 4.9



รูปที่ 4.9 แสดงสเปกตรัมที่ได้จากการคำนวณ (เส้นสีน้ำเงิน) และจากผลการทดลอง (จุดสีแดง)

จากผลการ simulate สเปกตรัมที่ได้จากการคำนวณและผลการทดลอง [Singkarat et al., 2001] ให้ fit กันพอดี โดยแปรค่า parameter ทั้ง 4 จนถึง accuracy ที่ต้องการ จะได้

areal density ของ Cu เท่ากับ $88.2 \times 10^{15} \text{ atom/cm}^2$

areal density ของ Au เท่ากับ $61.5 \times 10^{15} \text{ atom/cm}^2$

ผลการคำนวณนี้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับการกระทำในทำนองเดียวกันกับเป้าที่เป็นฟิล์มบางชั้นเดียวของทองคำและทองแดง ที่ผลิตขึ้นมาพร้อมๆ กับการสร้างฟิล์มบางแต่ละชั้นของเป้า Cu-Au/Si อันแรก