

УДК 539.186

ИЗМЕНЕНИЕ СРЕДНЕГО ЗАРЯДА ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ ПРИ ТОРМОЖЕНИИ В ВЕЩЕСТВЕ

© 2021 г. Ю. А. Белкова^а, *, Я. А. Теплова^а

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына,
Москва, 119991 Россия

*e-mail: belkova-fiz@mail.ru

Поступила в редакцию 10.06.2020 г.

После доработки 26.08.2020 г.

Принята к публикации 30.08.2020 г.

Торможение быстрых тяжелых ионов в веществе до полной остановки сопровождается изменением их равновесного среднего заряда, который зависит от скорости, уменьшающейся по мере увеличения пройденного пути. Предлагается метод расчета зависимости среднего заряда ионов от толщины пройденного слоя вещества, основанный на предложенной ранее степенной аппроксимации в случае неупругих потерь энергии. Важную роль для успешного описания потерь энергии ионов играет определение максимального значения потерь энергии различных ионов в различных средах. Рассматривается зависимость максимума потерь энергии и скорости ионов, при которой этот максимум наблюдается, от зарядов ядер налетающих ионов и атомов мишени. Получены аналитические выражения для расчета потерь энергии и средних зарядов ионов от бора до неона в зависимости от толщины пройденного слоя вещества в углероде и в кремнии.

Ключевые слова: торможение ионов, потери энергии ионов, выделение энергии, равновесный средний заряд ионов.

DOI: 10.31857/S1028096021030043

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании неупругих потерь энергии, $S_e = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$, в нерелятивистской области скоростей ионов с зарядами ядер Z принято условно выделять три области, различные по величине и динамике изменения S_e и отличающиеся основными механизмами, приводящими к энергетическим потерям [1]. В области малых скоростей ионов, $V < V_0 Z^{2/3}$ (V_0 — первая боровская скорость, соответствующая энергии ионов $E = 25$ кэВ/нуклон), потери энергии возрастают пропорционально увеличению скорости ионов. В области максимума потерь энергии, $V \sim V_0 Z^{2/3}$, скорость ионов близка к скорости орбитальных электронов атомов, с которыми происходит столкновение, и велика вероятность потери и захвата электронов ионами, что приводит к изменению ионного заряда. Расчеты потерь энергии требуют учета целого ряда процессов и осуществляются главным образом полуэмпирическими методами с использованием экспериментальных данных. При дальнейшем увеличении скорости ионов неупругие потери энергии определяются в основном процессами ионизации атомов мишени и убывают с увеличением скорости ионов.

В настоящей работе рассматривается область, соответствующая максимуму потерь энергии ионов с $Z = 2-18$, в которой моделирование торможения ионов представляет собой сложную проблему, так как оно требует учета процессов захвата и потери электронов этими ионами. Сечения потери и захвата электрона зависят от скорости и заряда ионов, а также от атомного номера мишени, в общем случае эта зависимость немонотонна [2]. В результате процессов перезарядки средний заряд ионов становится меньше заряда их ядер Z и изменяется вдоль траектории частиц, вследствие чего изменяются и средние потери энергии. Поэтому для описания торможения быстрых многозарядных частиц в указанной области скоростей необходимо изучение изменения потерь энергии и среднего равновесного заряда ионов в зависимости от толщины слоя, пройденного ионами в веществе.

МЕТОД РАСЧЕТОВ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Скорости ионов, при которых потери энергии принимают максимальное значение, можно приближенно определить с помощью известного соотношения $V_{\max} \sim V_0 Z^{2/3}$. На рис. 1 приведены зна-

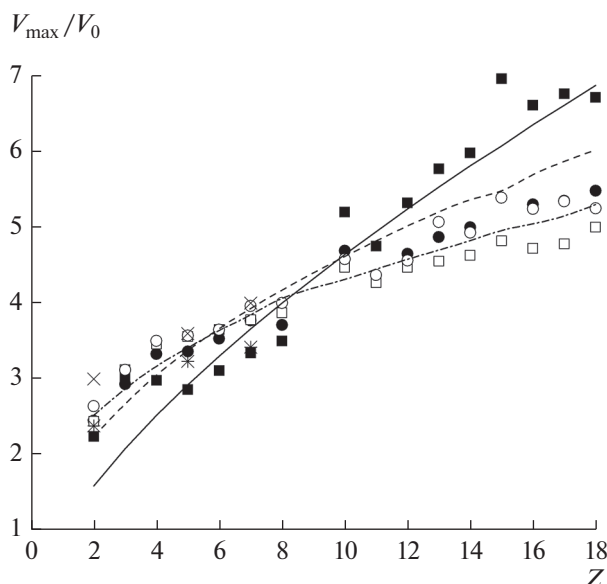


Рис. 1. Скорость ионов, при которой неупругие потери энергии имеют максимальное значение (ат. ед.), в зависимости от заряда ядра ионов. Данные SRIM: ■ – в кремнии; ● – в углероде; □ – в аргоне; ○ – в воздухе. Символы × и * – экспериментальные данные [4] в аргоне и воздухе. Результаты расчетов: сплошная линия – $V_{\max}/V_0 = Z^{2/3}$; пунктирная линия – $V_{\max}/V_0 = 1.64Z^{0.45}$; штрихпунктирная линия – $V_{\max}/V_0 = 2Z^{1/3}$.

чения $V_{\max}$, вычисленные на основе SRIM [3] для ионов с $Z = 2-18$ в различных средах, как твердых, так и газообразных, и экспериментальные данные [4]. Из рисунка видно, что данные для $V_{\max}$ в зависимости от Z в углероде заметно отличаются от данных для кремниевой мишени, но хорошо согласуются с $V_{\max}$ в газах. Приведенное выше выражение для $V_{\max}$ справедливо для ионов с $Z \geq 5$ в кремнии. Для углеродной мишени на основе описания эмпирических данных для среднего заряда ионов [5] можно записать $V_{\max} = 1.64V_0Z^{0.45}$ (рис. 1, пунктирная кривая). Необходимо отметить, что совокупность данных SRIM для $V_{\max}$ в углероде и в газах хорошо описывается выражением $V_{\max} = 2V_0Z^{1/3}$ (рис. 1, штрихпунктирная кривая). Таким образом, в общем случае можно представить $V_{\max}$ в виде:

$$V_{\max} = aV_0Z^b, \quad (1)$$

где коэффициенты a и b зависят от вещества, в котором происходит торможение иона. Из рисунка видно, что значение $V_{\max}$ существенно зависит от зарядов ядер налетающих ионов во всех рассмотренных мишенях. Так, например, в кремнии $V_{\max}$ для бора и аргона различаются в 2.3 раза, углероде – в 1.5 раза. Это позволяет проводить

идентификацию ионов по положению максимума потерь энергии. Ярко выраженной зависимости $V_{\max}$ от вещества мишени не наблюдается. Видимо, это связано с тем, что основной вклад в неупругие потери энергии вносят процессы ионизации внешних оболочек атомов мишени, когда значения энергии связи электронов сравнимы по величине.

Известно, что средний равновесный заряд ионов $\bar{i}$ зависит от их скорости. При больших скоростях ион теряет электроны, и его средний заряд приближается к заряду ядра Z . При уменьшении скорости иона преобладает процесс захвата электрона, и средний заряд уменьшается. Подобная зависимость может быть описана, например, выражением:

$$\frac{\bar{i}}{Z} = 1 - \exp\left(-\frac{V}{V_{\max}}\right). \quad (2)$$

Таким образом, в области средних скоростей за счет процессов перезарядки формируется средний эффективный заряд иона, отличающийся от Z . Использование эффективных зарядов ионов при описании потерь энергии позволяет расширить области применимости приближения Бете–Блоха, сформулированного для области высоких скоростей ионов [6]. С учетом выражений (1) и (2) максимальные неупругие потери энергии можно определить в виде:

$$S_{e\max} = \frac{4\pi e^4}{mV_{\max}^2} \bar{i}^2 Z_i \ln\left(\frac{2mV_{\max}^2}{Z_i I_0}\right) = 0.23\rho \frac{Z_i Z^{2-2b}}{Ma^2} \ln\left(\frac{4a^2 Z^{2b}}{Z_i}\right) \left[\frac{\text{МэВ}}{\text{мкм}}\right], \quad (3)$$

где e и m – заряд и масса электрона, I_0 – потенциал ионизации атома водорода, Z_i и M – заряд ядра и массовое число атомов мишени, ρ – плотность мишени.

Результаты расчетов $S_{e\max}$ для ионов с $Z = 5-18$ в углероде и кремнии приведены на рис. 2 совместно с данными SRIM. При проведении расчетов в кремнии использованы значения: $a = 1$, $b = 2/3$, $\rho = 2.321$ г/см³; в углероде: $a = 1.64$, $b = 0.45$, $\rho = 2.253$ г/см³. Тогда выражение (3) приводится к виду:

$$\begin{aligned} \text{в углероде } S_{e\max} &= \\ &= 0.095Z^{1.1}(0.9 \ln(Z) + 0.58) \left[\frac{\text{МэВ}}{\text{мкм}}\right], \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \text{в кремнии } S_{e\max} &= \\ &= 0.26Z^{2/3} \left(\frac{4}{3} \ln(Z) - 1.25\right) \left[\frac{\text{МэВ}}{\text{мкм}}\right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Расчеты показывают, что величина $S_{e\max}$ возрастает с увеличением Z ионов и убывает с увеличением Z_i атомов мишени, что качественно согласу-

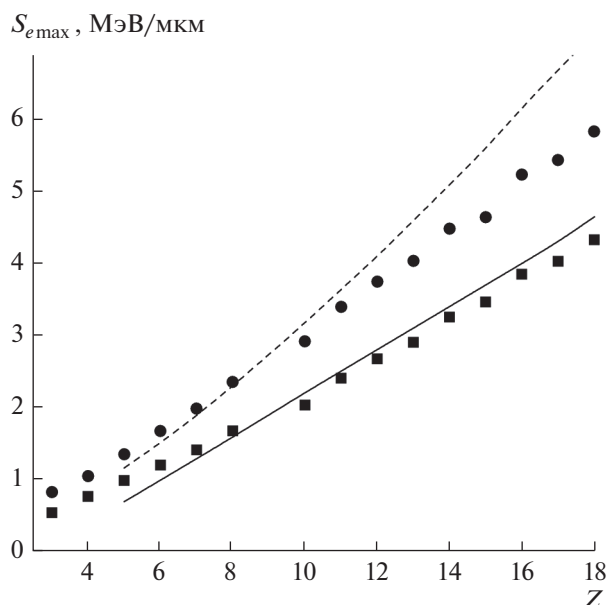


Рис. 2. Максимальные неупругие потери энергии в зависимости от заряда ядра ионов. Данные SRIM: ■ — в кремнии; ● — в углероде. Результаты расчетов: сплошная линия — расчеты по формуле (5) в кремнии; пунктирная линия — расчеты по формуле (4) в углероде.

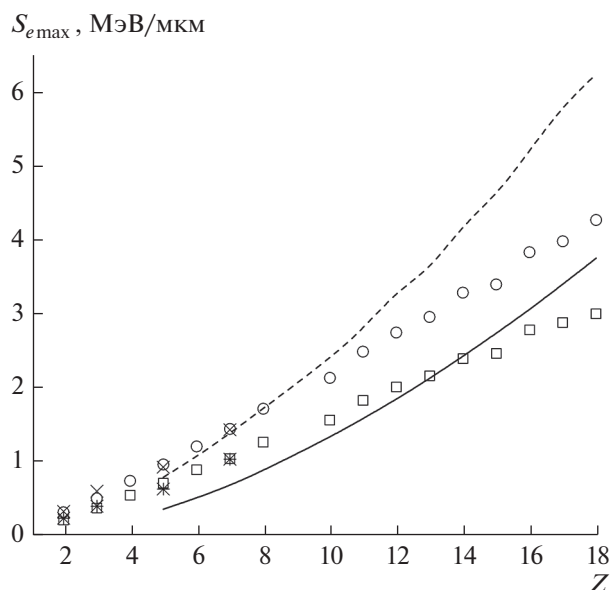


Рис. 3. Максимальные неупругие потери энергии в зависимости от заряда ядра ионов. Данные SRIM: □ — в аргоне; ○ — в воздухе. Символы × и * — экспериментальные данные [4] в аргоне и воздухе. Результаты расчетов: сплошная линия — расчеты в аргоне; пунктирная линия — расчеты в воздухе.

ется с данными SRIM. Аналогичное поведение показывают результаты расчетов $S_{e\max}$ в газовых мишенях, представленные на рис. 3 совместно с данными SRIM и экспериментальными данными [4], в расчетах использованы значения $a = 2$, $b = 1/3$, полученные в настоящей работе.

Информация о значениях $V_{\max}$ и $S_{e\max}$ является важной для описания зависимости потерь энергии от скорости ионов. Ранее была предложена степенная аппроксимация $S_e(V)$, которая успешно использовалась для определения пробегов ионов с различной начальной энергией E_0 [7, 8]. Предложенный подход позволил описать убывание энергии иона в зависимости от толщины пройденного слоя вещества x при торможении ионов [9]. Так, например, если начальная скорость иона меньше, чем $V_{\max}$,

$$S_e = \frac{V}{V_{\max}} S_{e\max}, \quad E^{1/2} = E_0^{1/2} - \frac{S_{e\max}}{2E_{\max}^{1/2}} x, \quad (6)$$

$$x \leq \frac{2E_0^{1/2} E_{\max}^{1/2}}{S_{e\max}}.$$

Полученное выражение для зависимости $E(x)$ совместно с (2) позволяет описать изменение среднего заряда ионов по мере прохождения через вещество:

$$\frac{V}{V_{\max}} = \sqrt{\frac{E_0}{E_{\max}}} - \frac{S_{e\max}}{2E_{\max}} x, \quad (7)$$

$$\frac{\bar{i}}{Z} = 1 - \exp\left(-\sqrt{\frac{E_0}{E_{\max}}} + \frac{S_{e\max}}{2E_{\max}} x\right).$$

Результаты расчетов изменения равновесного среднего заряда ионов N в зависимости от толщины пройденного слоя в углероде и в кремнии приведены на рис. 4 для начальной энергии ионов $E_0 = 300$ кэВ/нуклон, что соответствует $V_0 < V_{\max}$ в обеих мишенях. Использование значений $E_{\max}$ и $S_{e\max}$, рассчитанных в настоящей работе по формулам (1), (4) и (5), позволяет получить выражения для среднего заряда ионов в виде:

$$\text{в углероде } \bar{i} = 7(1 - 0.41 \exp(0.18x)), \quad (8)$$

$$\text{в кремнии } \bar{i} = 7(1 - 0.38 \exp(0.14x)). \quad (9)$$

Средние заряды ионов N после установления зарядового равновесия при малых (по сравнению с пробегом ионов) значениях x близки по величине. По мере прохождения через вещество средний заряд ионов N в углероде спадает быстрее, чем в кремнии. Полученная зависимость $\bar{i}(x)$ качественно соответствует результатам [10–12]. При некоторых значениях x средние заряды становятся близкими к нулю. Соответствующие значения, полученные из (8) и (9), превосходят пробеги ионов, рассчитанные с помощью SRIM. Как от-

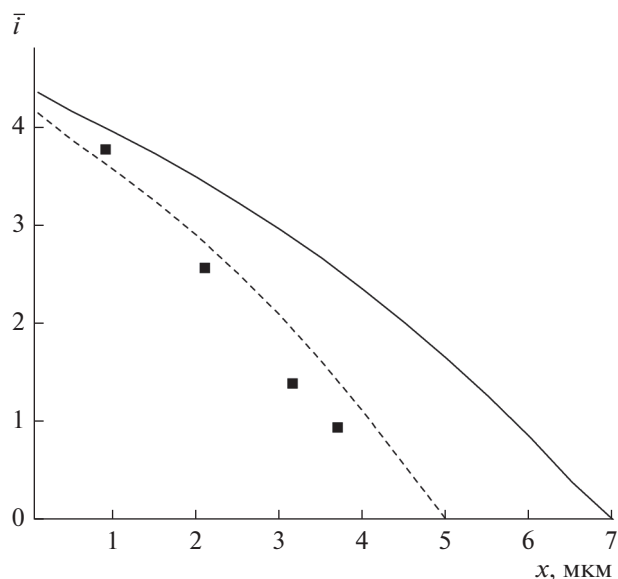


Рис. 4. Равновесный средний заряд ионов N в зависимости от толщины пройденного слоя вещества. Результаты расчетов: сплошная линия – расчеты по формуле (9) в кремнии; пунктирная линия – расчеты по формуле (8) в углероде; ■ – результаты [10] для ионов в углероде.

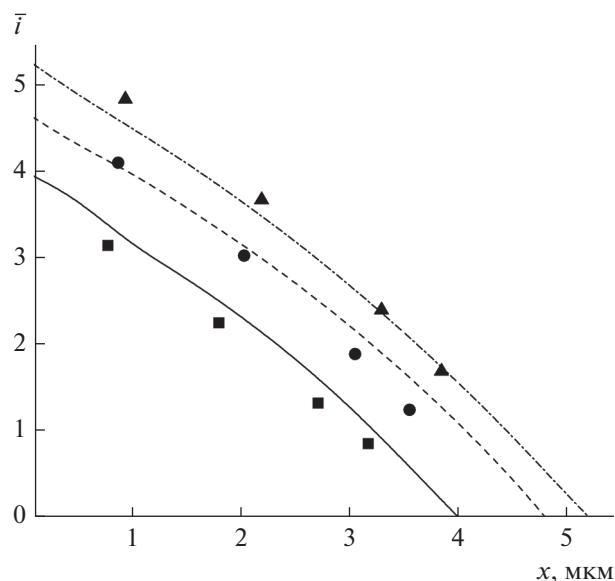


Рис. 5. Равновесный средний заряд ионов C (сплошная линия), O (пунктирная линия) и Ne (штрихпунктирная линия) в углероде в зависимости от толщины пройденного слоя вещества. Символы – результаты [10] для ионов: ■ – C; ● – O; ▲ – Ne.

мечалось ранее [9], это связано с рассмотрением неупругих потерь энергии, в то время как при малых скоростях упругие потери энергии становятся сравнимыми по величине, что усиливает убывание энергии ионов и, соответственно, уменьшает пройденный путь в веществе.

На рис. 5 представлены результаты расчетов $\bar{i}(x)$ для различных ионов (C, O, Ne) в углероде при их начальной энергии $E_0 = 300$ кэВ/нуклон. Для ионов O и Ne, так же, как и для рассмотренных ранее ионов N, при расчетах используются формулы, аналогичные (8), полученные из (7) для конкретных значений $E_{\max}$ и $S_{e\max}$, рассчитанных в настоящей работе. Отметим, что для ионов C $E_0 > E_{\max}$, поэтому согласно предложенной ранее степенной аппроксимации для $S_e(V)$ [7, 8] на начальном этапе торможения при $x \leq \frac{E_0 - E_{\max}}{S_{e\max}}$ неупругие потери энергии считаются равными $S_{e\max}$. Тогда

$$E = E_0 - S_{e\max}x, \quad V = \sqrt{E_0 - S_{e\max}x},$$

$$\bar{i} = Z \left(1 - \exp \left(- \sqrt{\frac{E_0 - S_{e\max}x}{E_{\max}}} \right) \right). \quad (10)$$

После уменьшения энергии ионов C до значения $E = E_{\max}$ дальнейшее уменьшение среднего заряда описывается выражением (7).

Приведенные на рис. 5 расчеты иллюстрируют убывание средних равновесных зарядов по мере прохождения через углеродную мишень. Величи-

на $\bar{i}(x)$ больше для ионов с большим Z на всем пути ионов. Полученная зависимость $\bar{i}(x)$ для рассмотренных ионов качественно соответствует результатам [10–12].

ВЫВОДЫ

Представлен полуэмпирический метод расчета изменения среднего равновесного заряда ионов по мере убывания энергии ионов при торможении в веществе. Получены аналитические выражения для зависимости среднего заряда ионов от толщины пройденного слоя вещества x . Проведены расчеты зависимости $\bar{i}(x)$ для ионов с $Z = 6–10$ в углероде и кремнии. Показано, что $\bar{i}(x)$ в углероде убывает быстрее, чем в кремнии. Значение $\bar{i}(x)$ ионов с большим Z превосходит $\bar{i}(x)$ ионов с меньшим Z на всем их пути.

Для успешного использования предложенной ранее степенной аппроксимации неупругих потерь энергии при торможении ионов проведен анализ зависимости максимума потерь энергии $S_{e\max}$ и скорости ионов $V_{\max}$, при которой этот максимум наблюдается, от зарядов ядер налетающих ионов Z и атомов мишени Z_t . Получены аналитические выражения, описывающие монотонное возрастание $S_{e\max}(Z)$ и $V_{\max}(Z)$ по мере увеличения Z в углероде и кремнии.

Полученные результаты могут быть использованы для описания торможения ионов в веществе до полной остановки, так как позволяют в анали-

тическом виде описать изменение характеристик по мере замедления ионов и увеличения пройденного слоя вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. Экспериментальные и теоретические исследования процессов взаимодействия ионов с веществом. М.: КДУ, 2019. 238 с.
2. Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A., Novikov N.V., Fainberg Yu.A. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 2010. V. 96. P. 85.
3. Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
4. Теплова Я.А., Николаев В.Н., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 974.
5. Shima K., Ishihara T., Mikumo T. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1984. V. 2. P. 222.
6. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019. № 4. С. 34.
7. Belkova Yu.A., Teplova Ya.A. // Rad. Effects and Defects in Solids. 2018. V. 173. Iss. 3–4. P. 175. <https://doi.org/10.1080/10420150.2018.1462365>
8. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 8. С. 43.
9. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2020. № 3. С. 27.
10. Shima K., Ishihara T., Mikumo T. // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. № 7. P. 3557.
11. Shima K., Mikumo T. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1986. V. 34. P. 357.
12. Shima K. // Atomic Data Nucl. Data Tables. 1992. V. 51. P. 173.

Mean Charge Changing during Heavy Ions Deceleration in Matter

Yu. A. Belkova^{1, *}, Ya. A. Teplova¹

¹Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: belkova-fiz@mail.ru

The deceleration of fast heavy ions in a matter to a complete stop is accompanied by a change in their equilibrium mean charge, which depends on the velocity that decreases as the distance passed increases. A method is proposed for calculating the dependence of the mean ion charge on the thickness of the passed layer of matter, based on the previously proposed power-law approximation for inelastic energy losses. An important role for the successful description of ion energy losses is played by determining the maximum value of energy losses for different ions in various matters. The dependence of the maximum energy loss and ion velocity, at which this maximum is observed, on the nuclear charges of the incident ions and target atoms is considered. Analytical expressions are obtained for calculating the energy losses and mean charges for ions from boron to neon depending on the thickness of the passed layer of substance in carbon and silicon.

Keywords: ion deceleration, ion energy loss, energy release, equilibrium ion mean charge.