

УДК 539.186

## ОЦЕНКА СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ ПРИ ИОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

© 2021 г. Н. В. Новиков<sup>а, \*</sup>, Я. А. Теплова<sup>а, \*\*</sup>

<sup>а</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына,  
Москва, 119991 Россия

\*e-mail: [nynovikov65@mail.ru](mailto:nynovikov65@mail.ru)

\*\*e-mail: [sonatina1929@mail.ru](mailto:sonatina1929@mail.ru)

Поступила в редакцию 17.06.2020 г.

После доработки 23.08.2020 г.

Принята к публикации 30.08.2020 г.

Для оценки сечений перезарядки предлагается метод, который основан на экспериментальных данных, теоретических моделях и эмпирической оценке экспериментальных параметров в равновесном зарядовом распределении ионов. Метод позволяет получить рекомендованные для проведения оценок сечения потери и захвата одного и нескольких электронов в газообразных и твердых мишенях с учетом влияния возбужденных состояний иона и атома мишени.

**Ключевые слова:** сечение перезарядки, зарядовые фракции, средний заряд, ширина зарядового распределения ионов.

**DOI:** 10.31857/S1028096021030109

### ВВЕДЕНИЕ

Процессы ион-атомных столкновений при прохождении ионов через вещество и связанное с этим изменение энергии и заряда ионов, а также свойств материала мишени интенсивно изучают в различных областях физики. Информация о распределениях ионов по заряду и энергии важна в ускорительной технике для достижения нужной интенсивности пучка ионов с заданным зарядом [1], в исследованиях потерь энергии [2], отражения ионов от поверхности [3], в радиационном материаловедении для уточнения концентраций дефектов по глубине [4], для решения проблем радиационной стойкости материалов в условиях облучения, для уточнения пробегов ионов в радиационной медицине. Из актуальности этих исследований следует необходимость совершенствовать методы расчета для уточнения распределений ионов по заряду и энергии.

Все упругие и неупругие сечения взаимодействия частиц с веществом можно разделить на три категории: измеренные с определенной точностью экспериментально, результаты расчетов с помощью различных теоретических моделей и оцененные или рекомендованные для проведения оценок данные. Диапазон имеющихся экспериментальных и теоретических данных ограничен точностью измерительной аппаратуры и прибли-

жениями используемых моделей и не охватывает всего разнообразия вариантов параметров налетающей частицы и мишени. Оцененные данные служат “надстройкой” на “фундаменте” из экспериментальных и теоретических результатов и применяются для определения наиболее надежного значения используемых величин. Роль оцененных значений состоит в том, чтобы согласовать между собой имеющиеся экспериментальные и теоретические результаты, интерполировать их в область параметров, где экспериментальных и теоретических данных недостаточно, расширить диапазон энергии и обобщить результаты на случай произвольной пары частица–мишень.

Оцененные данные для сечений взаимодействия нейтрона с ядром используются уже более 50 лет для моделирования различных процессов с участием нейтронов, регулярно уточняются и обновляются [5]. Другим примером оцененных данных являются потери энергии ионов. Основные приближения, необходимые для получения упругих и неупругих потерь энергии, на основе имеющихся экспериментальных и теоретических результатов, были сформулированы Зиглером и Андерсеном [6], а затем стали использоваться в программе SRIM [7]. Для сечений взаимодействия ионов с изменяющимся зарядом оцененных данных нет.

ХАРАКТЕРИСТИКИ ЗАРЯДОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ

Ионы при прохождении через вещество могут изменить свой заряд:

$$X(E, Z, q) + A(Z_t) \rightarrow X(E', Z, q'), \quad (1)$$

где  $E, E'$  – энергия,  $q$  и  $q'$  – заряд иона до и после столкновения,  $Z$  – заряд ядра иона,  $Z_t$  – заряд ядра атома мишени. Если считать мишень однородным материалом, свойства которого от взаимодействия с ионом не изменяются, то зарядовое распределение ионов не зависит от ориентации мишени относительно падающего пучка. В первом приближении мишень можно считать тонкой и изменение энергии иона не учитывать ( $E' = E$ ). Требуется описать зависимость относительного количества ионов  $\Phi_q(E, x)$  с зарядом  $q$  после прохождения мишени толщиной  $x$ . Основными характеристиками этого процесса являются сечения перезарядки  $\sigma_{q,q'}(E, Z, Z_t)$  ( $q' \neq q$ ), которые не зависят от толщины мишени, массы иона и массы ядра атома мишени, но зависят от скорости столкновения  $V$ . Поэтому в неупругих ион-атомных столкновениях энергию иона  $E$  обычно выражают в единицах кэВ/нуклон или МэВ/нуклон. Сечение  $\sigma_{q,q+k}(E, Z, Z_t)$  относится к процессу потери одного ( $k = 1$ ) или нескольких ( $k \geq 2$ ) электронов, а сечение  $\sigma_{q,q-k}(E, Z, Z_t)$  – к захвату одного ( $k = 1$ ) или нескольких ( $k \geq 2$ ) электронов.

Зарядовые фракции ионов  $\Phi_q(E, x)$  и сечения перезарядки связаны системой дифференциальных уравнений [8]:

$$\frac{d\Phi_q}{dx} = \sum_{q' \neq q} \Phi_{q'}(E, x) \sigma_{q',q}(E, Z, Z_t) - \Phi_q(E, x) \sum_{q' \neq q} \sigma_{q,q'}(E, Z, Z_t), \quad (2)$$

с условием нормировки

$$\sum_q \Phi_q(E, x) = 1 \quad (3)$$

и начальным условием

$$\Phi_{q_0}(E, 0) = 1, \quad (4)$$

где  $q_0$  – заряд налетающего на мишень иона. Каждое из уравнений в (2) является уравнением баланса и описывает, сколько ионов с зарядом  $q$  появилось и сколько изменило свой заряд на  $q' \neq q$  после прохождения ионным пучком слоя толщиной  $dx$ . В матричном представлении систему дифференциальных уравнений (2) можно записать в виде  $\frac{d\Phi}{dx} = A\Phi$ , где символ  $\Phi$  означает вектор зарядовых состояний  $\Phi_q(E, x)$ , а элементы квадратной матрицы  $A$  состоят из комбинаций сечений

перезарядки. Зная матрицу  $A$ , можно вычислить  $\Phi_q(E, x)$  для мишени любой толщины и моменты зарядового распределения. Распределение ионов по заряду характеризуется средним зарядом

$$\bar{Q}(E, x) = \sum_q q \Phi_q(E, x), \quad (5)$$

шириной зарядового распределения

$$[D(E, x)]^2 = \sum_q [q - \bar{Q}(E, x)]^2 \Phi_q(E, x) \quad (6)$$

и параметром асимметрии зарядового распределения

$$S(E, x) = \sum_q [q - \bar{Q}(E, x)]^3 \Phi_q(E, x) / D^3(E, x). \quad (7)$$

При увеличении толщины слоя  $x$  процессы захвата и потери электронов начинают постепенно компенсировать друг друга, и устанавливается равновесное зарядовое распределение, которое характеризуется равновесными зарядовыми фракциями  $F_q(E)$ , где  $\Phi_q(E, x) \rightarrow F_q(E)$  при  $x \rightarrow \infty$ . В этом случае система уравнений перезарядки становится однородной

$$\sum_{q' \neq q} F_{q'}(E) \sigma_{q',q}(E, Z) - F_q(E) \sum_{q' \neq q} \sigma_{q,q'}(E, Z) = 0, \quad (8)$$

а распределение ионов по заряду характеризуется равновесными параметрами, которые от толщины мишени не зависят:

$$\bar{q}(E) = \sum_q q F_q(E), \quad (9)$$

$$[d(E)]^2 = \sum_q (q - \bar{q}(E))^2 F_q(E), \quad (10)$$

$$s(E) = \sum_q [q - \bar{q}(E)]^3 F_q(E) / d^3(E). \quad (11)$$

Сложность описания зарядовых распределений ионов состоит в многообразии процессов, которые происходят в широком диапазоне энергии  $E$  и заряда иона  $q$  ( $0 \leq q \leq Z$ ). Зависимость сечений  $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$  и  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  от  $E$  качественно отличается из-за отсутствия соотношений подобия для этих сечений, и отношение  $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  зависит от  $q$  и  $E$ . Вследствие этого процессы потери и захвата одного электрона надо рассматривать отдельно. Другая сложность состоит в том, что столкновения ионов с атомами мишени (1) могут приводить к образованию возбужденных состояний иона и атома мишени. Если возбужденные частицы не успевают вернуться в основное состояние до следующего столкновения, то условия ион-атомного взаимодействия и все сечения  $\sigma_{q,q \pm k}(E, Z, Z_t)$  изменяются, что влияет на величины  $\Phi_q(E, x)$  и параметры зарядового распределения. Кроме того,

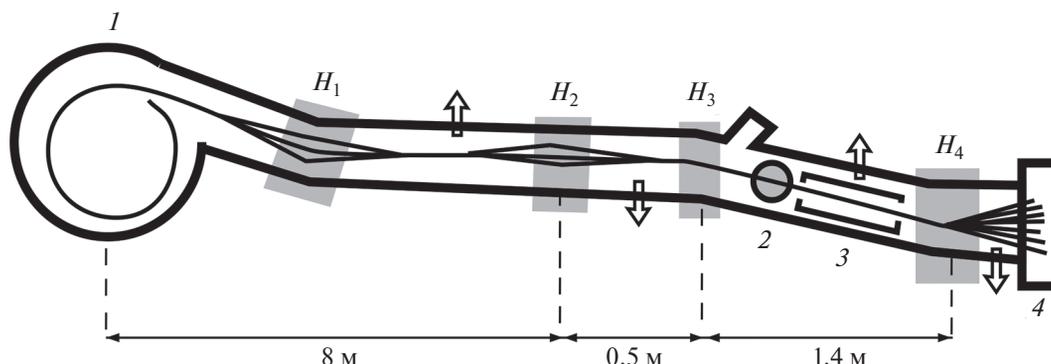


Рис. 1. Пример экспериментальной установки: 1 – циклотрон; 2 – электростатический анализатор; 3 – камера столкновений; 4 – блок пропорциональных счетчиков;  $H_1, H_2, H_3, H_4$  – магнитные анализаторы, стрелками обозначено расположение насосов.

в одном столкновении ион может потерять или захватить несколько электронов. Чтобы описать зарядовое распределение ионов в широком диапазоне энергии и определить все элементы матрицы  $A$ , требуются значения  $Z(Z + 1)$  сечений. Изменение даже на единицу одного из параметров  $Z, Z_i, q$  или  $k$  приводит, как правило, к заметному изменению величины сечения  $\sigma_{q,q \pm k}(E, Z, Z_i)$ . Следовательно, из-за многообразия комбинаций входных параметров и широкого диапазона их изменения задача описания зарядового распределения ионов в общем случае может быть решена только с учетом дополнительных приближений.

Цель настоящей работы – рассмотреть имеющиеся методы измерения и расчета сечений перезарядки ионов, и на основе экспериментальных и теоретических данных определить основные приближения для получения оценочных сечений, которые могут быть использованы для описания зарядовых распределений ионов.

### ИЗМЕРЕНИЯ ЗАРЯДОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ИОНОВ

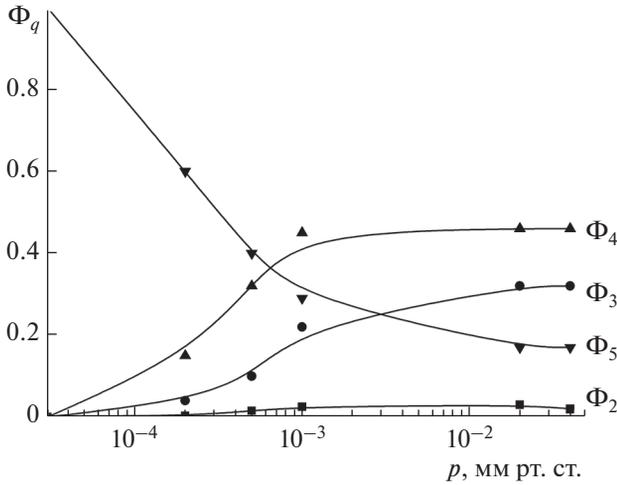
Экспериментальные работы по измерению сечений проводились на циклотроне (рис. 1), характеристики которого позволяли ускорять ионы от протонов до ионов криптона ( $Z = 36$ ) [9]. На основании этих данных удалось получить сечения потери и захвата электронов, их зависимость от энергии и зарядов различных атомов и ионов [10].

В дуговой ионный источник подавали газ (He, Ne, Ar, Kr, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, смесь углеводородов). Всего в измерениях было использовано более 50 ионов разных элементов с зарядами ионов  $q$  от  $-1$  до  $+8$  и зарядами ядра  $Z$  от 1 до 36 при энергии  $E$  от 50 до 750 кэВ/нуклон, а для  $\alpha$ -частиц – до 4 МэВ/нуклон. С помощью магнитного анализатора  $H_4$  пучок после камеры столкновений разделялся на

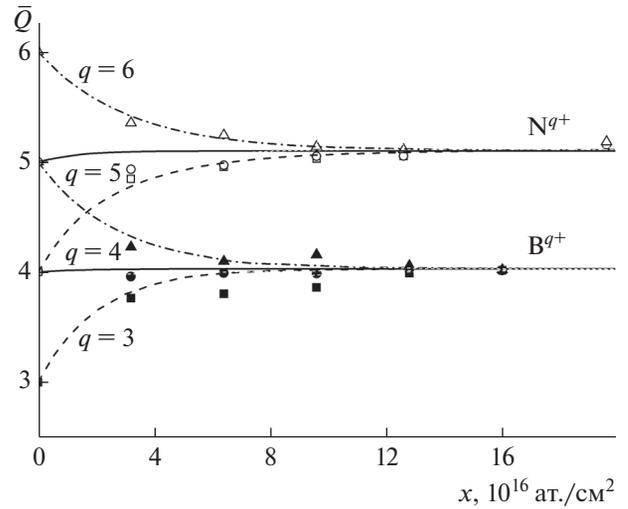
зарядовые компоненты. Регистрирующая система из восьми идентичных пропорциональных счетчиков измеряла относительное количество частиц с определенным зарядом  $\Phi_q(E, x)$ . Далее, используя измеренную зависимость неравновесных зарядовых фракций от толщины  $x$  и уравнения перезарядки (2), вычисляли сечения  $\sigma_{q,q \pm k}(E, Z, Z_i)$ . Для этого выполняли несколько измерений при разной толщине мишени, в газах – путем изменения давления в камере столкновений.

При увеличении толщины мишени неравновесные зарядовые фракции быстро изменяются (рис. 2), но с некоторой толщины  $x = T$ , при которой устанавливается баланс между процессами потери и захвата ионом электронов (8), зарядовые фракции ионов от  $x$  уже не зависят. Эта величина, которая получила название равновесной толщины мишени, зависит от  $Z, Z_i, E$  и начального заряда иона  $q_0$  [11]. Измерения зарядовых распределений при нескольких толщинах до 1 мкг/см<sup>2</sup> позволили получить сечения потери и захвата одного электрона в газах с точностью 7–15%, а сечений потери и захвата нескольких электронов – с точностью до 25–50%. Выполнить такие измерения в случае твердой мишени труднее из-за технологических сложностей при изготовлении тонких пленок. Зарядовые распределения ионов в твердой мишени обычно начинают измерять только от толщины  $\sim 1$  мкг/см<sup>2</sup>. В этой области толщин неравновесные зарядовые фракции  $\Phi_q(E, x)$  медленно изменяются в зависимости от  $x$ , что увеличивает погрешность измерения сечений  $\sigma_{q,q \pm 1}(E, Z, Z_i)$  в твердой мишени до 70–100%.

Экспериментальные данные для ионов бора и азота (рис. 3) показывают, что средний заряд ионов (5) изменяется при увеличении толщины мишени. Если  $q_0 > \bar{q}$ , то при небольшой толщине  $x$  ион преимущественно захватывает электроны, и количество ионов с зарядом  $q_0$  уменьшается



**Рис. 2.** Экспериментальная зависимость неравновесных зарядовых фракций  $\Phi_q$  ( $q = 2-4$ ) ионов азота с начальным зарядом  $q_0 = 5$  и энергией  $E = 0.33$  МэВ/нуклон в азоте  $N_2$  от давления газа в камере столкновений [9].



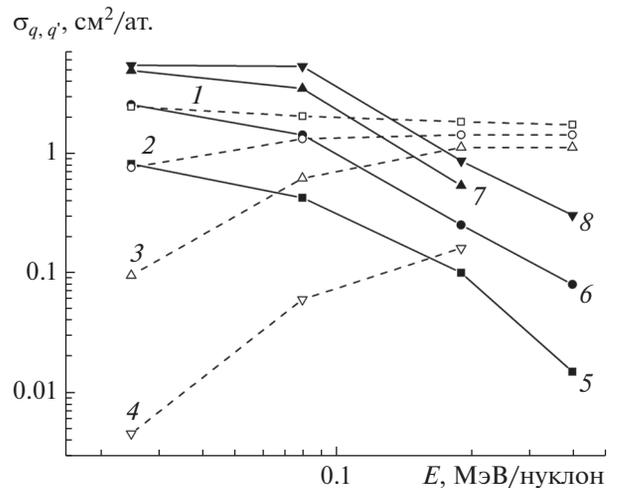
**Рис. 3.** Экспериментальная зависимость среднего заряда ионов азота  $N^{q+}$  и бора  $B^{q+}$  с энергией  $E = 0.75$  МэВ/нуклон от толщины мишени из целлюлоида ( $C_6H_8N_2O_9$ ) [9].

(рис. 2,  $\Phi_5(E, x)$ ). Это приводит к уменьшению среднего заряда  $dQ/dx < 0$  ионов  $B^{5+}$  и  $N^{6+}$ . В противоположном случае  $q_0 < \bar{q}$  ион преимущественно теряет электроны, и его средний заряд увеличивается  $dQ/dx > 0$ . При большой толщине мишени средний заряд стремится к константе, которая соответствует среднему заряду ионов в равновесном распределении  $\bar{q}$ . Равновесная толщина (рис. 3) составляет  $T \approx 0.015$  мкм.

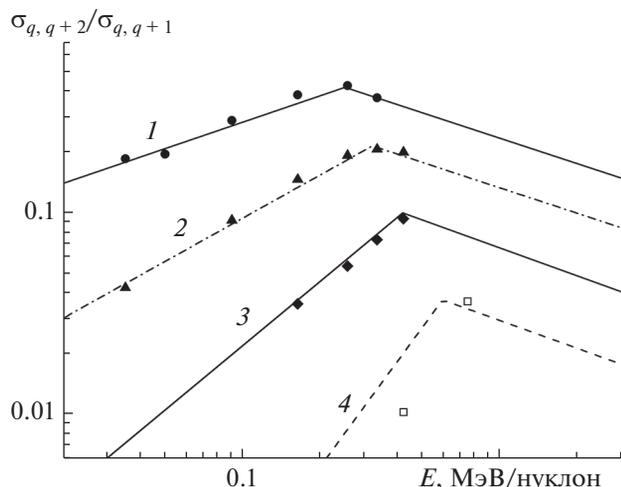
Сечения потери и захвата одного электрона по-разному зависят от энергии (рис. 4). Есть область энергии, где их значения совпадают  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \approx \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ . При этой энергии ион с зарядом  $q$  с равной вероятностью может захватить или потерять один из своих электронов, и  $\bar{q}(E) \approx q$ . Многоэлектронный ион ( $Z - q \geq 2$ ) в одном столкновении с атомом мишени может потерять несколько электронов. Вероятность такого процесса возрастает для ионов с небольшим зарядом  $q \ll \bar{q}$ . Эксперименты [10, 12, 13] показали, что в одном столкновении ион может потерять до пяти–семи электронов. Однако если заряд иона  $q$  заметно превышает равновесный  $q \gg \bar{q}$ , то возможен захват ионом в одном столкновении нескольких электронов [10]. С увеличением количества электронов  $k$ , участвующих в одном столкновении (т.е. кратности процесса), влияние сечения потери и захвата нескольких электронов  $\sigma_{q,q \pm k}(E, Z, Z_t)$  на зарядовое распределение ионов уменьшается. Наиболее подробно исследованы сечения потери и захвата ионом двух электронов ( $k = 2$ ).

Экспериментальные данные на рис. 5 и 6 показывают, что во всем исследуемом диапазоне энергии

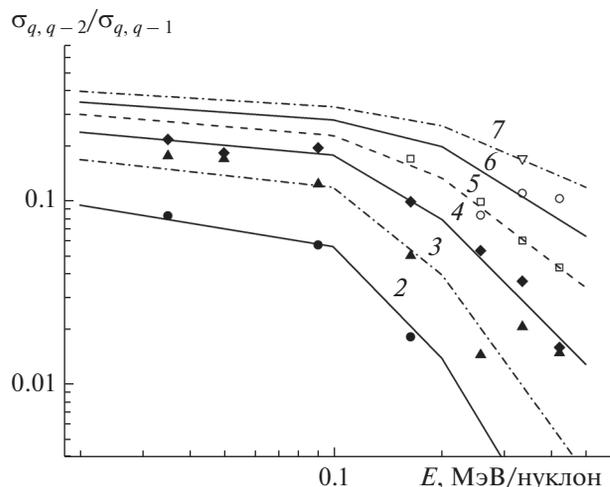
сечение  $\sigma_{q,q \pm 2}(E, Z, Z_t)$  не превышает  $\sigma_{q,q \pm 1}(E, Z, Z_t)$ . Отношение сечений  $\sigma_{q,q+2}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$  уменьшается при увеличении  $q$ . При фиксированном  $q$  оно достигает максимума при энергии, значение которой пропорционально  $q$ . Отношение сечений  $\sigma_{q,q-2}(E, Z, Z_t) / \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) < 1$  увеличивается с возрастанием заряда иона  $q$  и монотонно уменьшается при увеличении его энергии. В случае быстрых столкновений влия-



**Рис. 4.** Зависимость от энергии экспериментальных сечений потери и захвата одного электрона ионами углерода  $C^{q+}$  в водороде [10]. Сечения потери одного электрона ионами с зарядами  $q: 0$  (1); 1 (2); 2 (3); 3 (4). Сечения захвата одного электрона ионами с зарядами  $q: 1$  (5); 2 (6); 3 (7); 4 (8).



**Рис. 5.** Зависимость от энергии экспериментального отношения сечений потери двух  $\sigma_{q,q+2}(E, Z, Z_t)$  и одного  $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$  электронов ионами азота  $N^{q+}$  в азоте [10]. Цифры около кривых – заряд иона  $q$ .



**Рис. 6.** Зависимость от энергии экспериментального отношения сечений захвата двух  $\sigma_{q,q-2}(E, Z, Z_t)$  и одного  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  электронов ионами азота  $N^{q+}$  в азоте [10]. Цифры около кривых – заряд иона  $q$ .

ние процессов потери и захвата двух электронов на зарядовое распределение уменьшается ( $\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t)/\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t) \rightarrow 0$  при  $E \rightarrow \infty$ ).

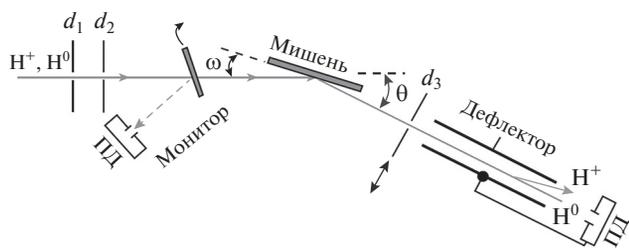
Имеющиеся экспериментальные данные [10, 12, 13] показывают, что величина сечений в матрице перезарядки  $A$  уменьшается при удалении матричного элемента от диагонали этой матрицы:

$$\begin{aligned} \sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t) &> \sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t) > \\ &> \dots > \sigma_{q,q\pm k}(E, Z, Z_t). \end{aligned} \quad (12)$$

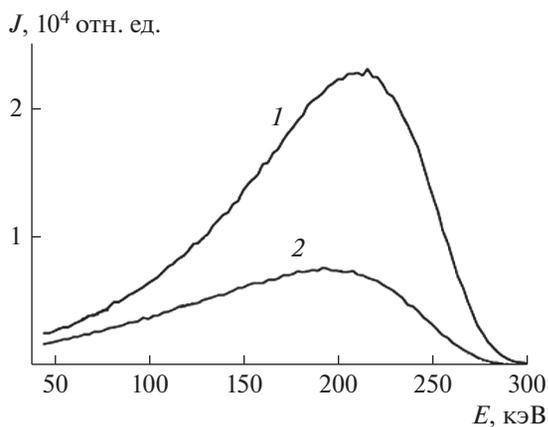
Основной вклад в зарядовое распределение ионов дают процессы потери и захвата одного электрона, а кратные процессы, которые описываются сечениями  $\sigma_{q,q\pm k}(E, Z, Z_t)$ ,  $k \geq 2$ , можно рассматривать как поправку. Следовательно, при решении системы уравнений перезарядки можно использовать метод последовательных уточнений, включая на каждом шаге в матрицу перезарядки  $A$  сечения  $\sigma_{q,q\pm k}(E, Z, Z_t)$  с более высокими значениями  $k$ . Уменьшение вероятности взаимодействия с увеличением количества участвующих в этом взаимодействии электронов (12) связано с приближением парных взаимодействий. Ион, пролетая через электронные оболочки атома мишени, взаимодействует с каждым из электронов в отдельности, а не с несколькими электронами одновременно. Эта модель основана на гипотезе о предравновесном зарядовом распределении ионов, в котором начальный заряд иона  $q_0$  не очень сильно отличается от равновесного значения  $\bar{q}(E)$  для этой скорости столкновения. Вопрос о существовании области энергии и зарядов ионов, где соотношение (12) может нарушаться,

остается открытым. В этом случае кратные процессы уже нельзя будет рассматривать в виде поправки, а метод решения системы уравнений перезарядки требует уточнения.

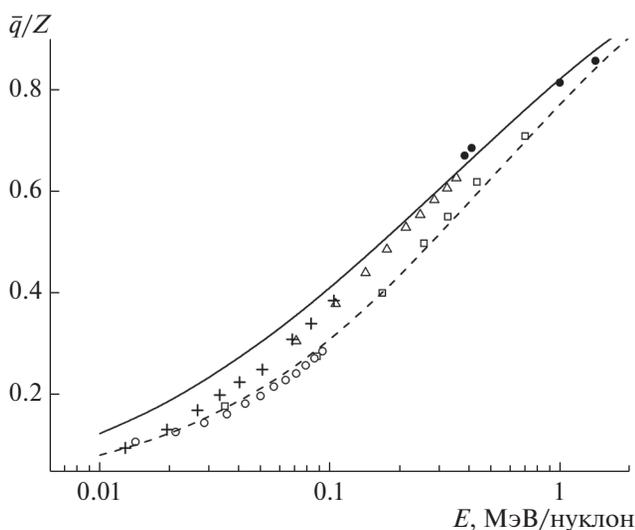
Так как точность измерений зарядовых фракций  $\Phi_q(E, x)$  увеличивается с уменьшением толщины мишени, для их измерения в твердой мишени был предложен метод на основе отражения ионов от поверхности при скользких углах падения [14, 15]. В отличие от традиционных методов измерения распределений отраженных от поверхности ионов по энергии и углам [16], в этих экспериментах с быстрыми однозарядными ионами и атомами регистрировали заряд отраженных ионов (рис. 7). Ионы ускорялись до энергии 250–300 кэВ, а пучок атомов образовывался в результате захвата электрона ионами в газе с последующим отклонением заряженной компоненты магнитным полем [9]. Медную поликристаллическую мишень крепили на многоосном гониометре, позволявшем устанавливать угол падения пучка ионов на мишень  $\omega$  и угол рассеяния  $\theta$  с точностью  $\pm 0.2^\circ$ . Энергию рассеянных частиц  $E$  измеряли полупроводниковым детектором в плоскости падающего пучка и нормали к поверхности мишени с разрешением  $\sim 10$  кэВ в диапазоне углов:  $\omega = 1^\circ - 5^\circ$ ,  $\theta = 1.5^\circ - 10^\circ$ . С помощью полупроводникового детектора измеряли энергетические спектры ионов и атомов, отраженных от поверхности. На электростатический дефлектор могли подавать напряжение, достаточное для отклонения заряженной компоненты отраженного от поверхности пучка.



**Рис. 7.** Схема установки для регистрации отраженных от поверхности частиц: ПД – полупроводниковый детектор,  $d_1, d_2, d_3$  – диафрагмы.



**Рис. 8.** Измеренные распределения по энергии отраженных от медной поверхности ионов и атомов гелия с энергией  $E_0 = 300$  кэВ при  $\omega = 1^\circ$  и  $\theta = 2^\circ$ . Регистрируемые частицы: 1 –  $\text{He}^+, \text{He}^0$ ; 2 –  $\text{He}^+$  [15].



**Рис. 9.** Зависимость среднего равновесного заряда ионов  $N^{q+}$  от энергии. Экспериментальные данные: (□); (○) – в азоте; (●); (+); (Δ) – в углероде.

Измерения показали, что быстрая налетающая частица, взаимодействуя с атомами мишени, испытывает достаточно большое количество столкновений и теряет большую часть своей энергии (рис. 8). Толщина мишени, соответствующая таким потерям энергии, превышает толщину  $T$ , необходимую для установления равновесного распределения по заряду для ионов с  $q \leq 1$ . Это было подтверждено тем, что отношение количества однозарядных ионов ( $q = 1$ ) и всех отраженных от поверхности частиц ( $q = 0, 1$ ) не меняется при разных углах скольжения  $\omega$  и больших углах отражения  $\theta$ . В экспериментах по отражению ионов от аморфной мишени при углах скольжения  $\omega \geq 1^\circ$  можно измерить равновесное распределение ионов по заряду  $F_q(E)$  и их средний заряд  $\bar{q}(E)$ , но не сечения перезарядки.

Для измерений равновесных зарядовых распределений чаще используют традиционную методику, основанную на регистрации зарядового распределения ионов, прошедших мишень известной толщины. В этом случае используют экспериментальные установки, аналогичные представленной на рис. 1, но измерения проводят для одной толщины мишени  $x \geq T$ . В отличие от экспериментов с отражением ионов от поверхности, разброс по энергии прошедших через тонкую мишень ионов  $E \pm \delta E$  небольшой.

В твердой мишени средний заряд ионов  $\bar{q}_{\text{sol}}(E)$  превышает значение в газах  $\bar{q}_{\text{gas}}(E)$  (рис. 9). Увеличение плотности мишени и уменьшение времени между столкновениями приводит к тому, что ион в твердой среде не успевает между столкновениями вернуться из возбужденного состояния в основное. Влияние возбужденных состояний иона приводит к увеличению вероятности потери электрона и уменьшению вероятности захвата электрона в следующем столкновении для твердой мишени по сравнению с газами и увеличению  $\bar{q}(E)$  [17].

Из отличий зарядовых распределений ионов внутри и за пределами твердой мишени следует возможность изменения среднего заряда ионов в момент их прохождения через поверхность [18]. При вылете с поверхности твердой мишени кулоновское поле иона увлекает за собой часть электронов, некоторые из них могут быть захвачены ионом. Поверхностные эффекты чувствительны к составу примесей и концентрации электронно-дырочных пар вблизи поверхности мишени и могут влиять на зарядовое распределение ионов, отраженных от поверхности при скользящих углах отражения [15].

### ЭМПИРИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПАРАМЕТРОВ РАВНОВЕСНОГО ЗАРЯДОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Эмпирический метод позволяет получить параметры равновесного зарядового распределения для произвольной пары ион—атом мишени в широком диапазоне энергии. Метод основан на предположении, что параметры (9)–(11) являются непрерывными и плавными функциями  $E$ ,  $Z$  и  $Z_i$ , вид которых определяется в результате усреднения экспериментальных данных. В этом приближении пренебрегают влиянием оболочечных эффектов, связанных с отличиями в энергии связи электронов разных оболочек в ионе и атоме мишени, которые могут привести к осцилляциям значений сечений в зависимости от  $Z$  и  $Z_i$ .

Первоначально эмпирические оценки параметров зарядового распределения ионов выполняли для всех газовых и твердых мишеней. Для описания равновесного среднего заряда ионов Н. Бор предложил модель [19], в которой быстрый ион при движении в среде сохраняет только электроны, орбитальная скорость которых больше скорости иона  $V$ :

$$\bar{q}/Z = Z^{-2/3}V/V_0, \quad (13)$$

где  $V_0 = 2.19 \times 10^8$  см/с. Это соотношение было уточнено на основе модели атома Томаса—Ферми:

$$\bar{q}/Z = [1 - \exp(-V/(V_0Z^{2/3}))]. \quad (14)$$

В приближениях (13) и (14) средний заряд ионов не зависит от  $Z_i$ , и отличиями в значениях для газовых и твердых мишеней пренебрегают.

Точность аппроксимации экспериментальных распределений улучшается, если учитывать отличия в параметрах газовых и твердых мишеней [17]. Наиболее точными выражениями для среднего заряда ионов в диапазоне  $0 \leq \bar{q}/Z \leq 1$  считают соотношения, полученные отдельно для газовых и твердых мишеней [20]. В этом подходе зависимость  $\bar{q}(Z, Z_i)$  описывается медленно изменяющимися аналитическими функциями от  $Z$  и  $Z_i$ , что приводит к усредненной зависимости без учета оболочечной структуры иона и атома мишени. Соотношения  $\bar{q}_{\text{gas}}(E, Z, Z_i)$  и  $\bar{q}_{\text{sol}}(E, Z, Z_i)$  в [20] от значения плотности мишени не зависят, и, следовательно, для величины среднего заряда ионов  $\bar{q}$  нет постепенного перехода от плотного газа к твердой мишени. Эта особенность аналогична зависимости неупругих потерь энергии в единицах [МэВ·см<sup>2</sup>/мг], которые зависят от агрегатного состояния мишени, но не от ее плотности [7].

На рис. 10 приводится разность величин среднего заряда ионов для твердой и газовой мишеней  $\Delta q_{g-s} = \bar{q}_{\text{sol}}(E) - \bar{q}_{\text{gas}}(E)$ . Максимум  $\Delta q_{g-s}(E)$  приходится на область энергии  $E = 0.07-1$  МэВ/нук-

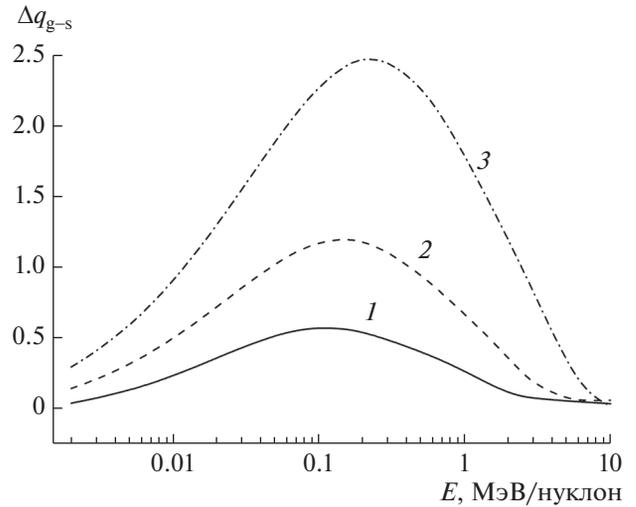


Рис. 10. Зависимость отличия равновесного среднего заряда ионов с зарядом ядра  $Z$  в твердой и газообразной мишенях ( $Z_i = 6$ ) в соответствии с эмпирическими соотношениями [20],  $Z$ : 1 – 6; 2 – 10; 3 – 18.

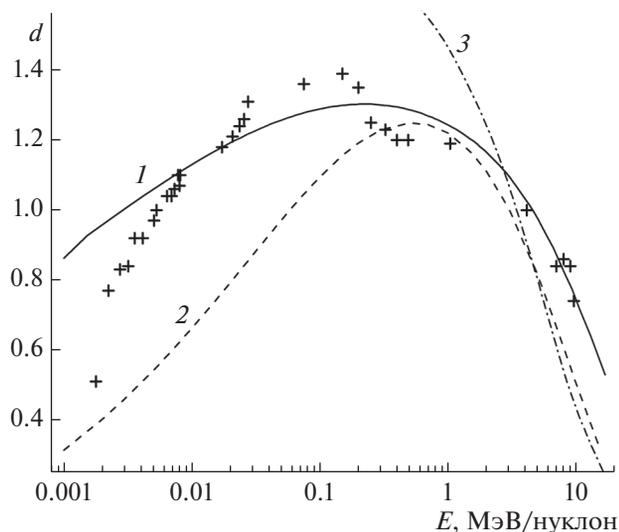
лон, что соответствует экспериментальным данным на рис. 9. Энергия ионов, при которой достигается максимальное отличие среднего заряда  $\Delta q_{g-s}$ , увеличивается при возрастании  $Z$ . Для ионов с энергией  $E > 10$  МэВ/нуклон средний заряд ионов в газах и твердой мишени совпадает ( $\Delta q_{g-s} \rightarrow 0$ ). Погрешность экспериментальных параметров  $d$  и  $s$  заметно больше, чем величины  $\bar{q}$ . Это обусловлено повышением роли зарядовых фракций малой интенсивности и увеличением их погрешности. Ширину зарядового распределения ионов для газовых и твердых мишеней сначала аппроксимировали соотношением [21]:

$$d^2 = \{1 - (\bar{q}/Z)^{5/3}\} \bar{q}/4, \quad (15)$$

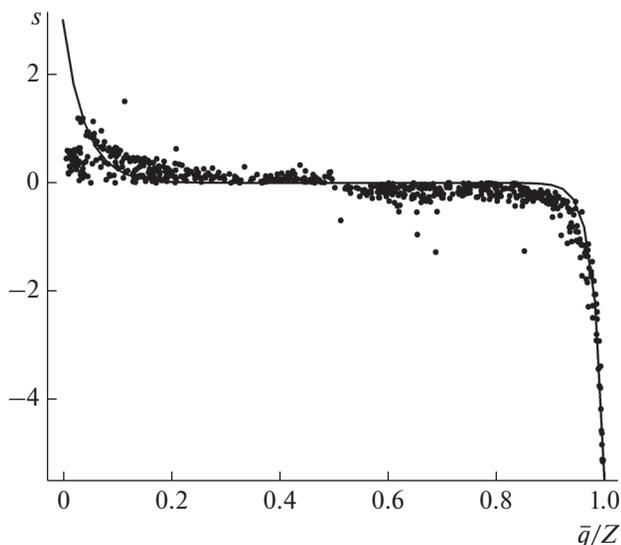
в котором  $d(E, Z)$  не зависит от  $Z_i$  и увеличивается как  $d^2 \sim \bar{q}$  в случае медленных столкновений.

Для эмпирического описания параметров ширины  $d$  и асимметрии  $s$  в газообразных и твердых мишенях было предложено использовать в качестве аргумента этих функций отношение  $\bar{q}/Z$  [22]. В этом случае область определения функций  $d(\bar{q}/Z)$  и  $s(\bar{q}/Z)$  ограничена ( $0 \leq \bar{q}/Z \leq 1$ ), что удобно для их аппроксимации. Соотношения для  $d(\bar{q}/Z)$  и  $s(\bar{q}/Z)$  [22] с параметрами на основе усреднения экспериментальных данных отдельно в газах и в твердой среде учитывают зависимость от  $Z_i$  и удовлетворительно описывают экспериментальные данные для  $d(\bar{q}/Z)$  (рис. 11) и  $s(\bar{q}/Z)$  (рис. 12) в широком диапазоне значений  $E$ .

Для оценки равновесных и неравновесных зарядовых фракций быстрых ионов могут быть использованы программы ETACHA [23, 24], CASP5



**Рис. 11.** Ширина равновесного зарядового распределения ускоренных ионов аргона в углероде. Экспериментальные данные – символы; теоретические оценки – кривые: 1 – [22]; 2 – [21]; 3 – [23].



**Рис. 12.** Зависимость параметра асимметрии равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в твердой среде: точки – экспериментальные данные для ионов ( $Z = 5-92$ ) в углероде, алюминии, никеле, серебре и золоте; линия – результат аппроксимации [22].

[25] и GLOBAL [26]. Применимость этих программ для описания зарядовых распределений ионов ограничена областью значений энергии  $E \geq 10$  МэВ/нуклон [23] и  $E \geq 30$  МэВ/нуклон [26]. Надо отметить, что результаты расчетов зарядовых распределений ускоренных ионов по программе ETASNA дают удовлетворительное согласие с экспериментальными данными и в более

широкой области значений энергии [27]. Расчет  $d(\bar{q}/Z)$  по программе ETASNA [23] согласуется с экспериментальными данными для быстрых столкновений ( $\bar{q}/Z \rightarrow 1$ ) (рис. 11).

Увеличение параметра асимметрии зарядового распределения  $s$  для ионов в области  $\bar{q}/Z < 0.2$  и  $\bar{q}/Z > 0.8$  (рис. 12) связано с влиянием кратных процессов. Из за ограничения области зарядов иона  $0 \leq q \pm k \leq Z$  водородоподобный ион может потерять только один электрон, а захватить несколько. Если для ионов с зарядом ядра  $Z$  существуют отрицательные ионы ( $q = -1$ ), то ион с  $q = 1$  может захватить не более двух электронов, а потерять до пяти–семи [13]. Эта асимметрия между процессами потери и захвата нескольких электронов является одной из причин асимметрии в распределении по заряду ионов с  $\bar{q}/Z < 0.2$  и  $\bar{q}/Z > 0.8$ .

Если считать зарядовое распределение симметричным ( $s \approx 0$ ), т.е. для ионов с зарядом  $0.2 < \bar{q}(E)/Z < 0.8$  (рис. 12), равновесные зарядовые фракции можно аппроксимировать распределением Гаусса:

$$F_q = \frac{1}{\sqrt{2\pi}d} \exp\left[-(q - \bar{q})^2 / (2d^2)\right]. \quad (16)$$

Недостатком эмпирического метода является отсутствие оценки неравновесных зарядовых распределений и сечений перезарядки, а также игнорирование оболочечной структуры иона и атома мишени. Диапазон изменения плотности некоторых материалов в нормальных условиях достаточно большой. Например, плотность графита в зависимости от его марки изменятся от 1.7 до 2.4 г/см<sup>3</sup>. Эти отличия не учитывают при эмпирической оценке параметров, поскольку плотность мишени в эмпирическую оценку параметров не входит, а при усреднении экспериментальных данных отличия в плотности мишеней не принимали во внимание. В результате эффект плотности при замене газообразной мишени на твердую в эмпирических оценках параметров  $\bar{q}$ ,  $d(\bar{q}/Z)$  и  $s(\bar{q}/Z)$  учитывается дискретно: мишень – либо газ, либо твердая среда.

### ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТОВ СЕЧЕНИЙ ПОТЕРИ И ЗАХВАТА ОДНОГО ЭЛЕКТРОНА

Описание сечений потери и захвата электрона ионами методами квантовой механики – сложная теоретическая задача, поскольку рассматривается столкновение двух многоэлектронных систем. Модели, которая могла бы описать сечения перезарядки во всем исследуемом диапазоне изменения энергии, нет, поэтому теоретические расчеты

в области медленных ( $V/V_0 \sim 1$ ) и быстрых ( $V/V_0 \gg 1$ ) столкновений проводятся отдельно.

Для области скоростей  $V/V_0 \sim 1$  используют метод сильной связи каналов. В этом методе волновую функцию электрона в поле двух центров представляют в виде суммы по базисным функциям, а коэффициенты разложения вычисляют из уравнения Шредингера. С увеличением заряда иона  $q$  и скорости столкновения возрастает количество возбужденных состояний. Если при расчетах  $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_i)$  для протонов в этом методе достаточно двух или трех базисных функций, то для ионов  $\text{Be}^{4+}$  необходима уже 21 функция, для ионов  $\text{C}^{6+}$  – 36, а для ионов  $\text{O}^{8+}$  – 46 [28]. Причем увеличение количества базисных функций не гарантирует улучшения согласия результатов расчета с экспериментальными данными [28].

Один из первых теоретических методов описания сечения потери электрона быстрым ионом был предложен Н. Бором [19]. В этой модели предполагалось, что в области скоростей  $V \gg V_0$  можно пренебречь связью электронов атома мишени с ядром и рассматривать взаимодействие активного электрона с атомом как взаимодействие со свободными электронами. Тогда сечение потери быстрым ионом одного из электронов описывается соотношением [19]:

$$\sigma_{q,q+1} = 4\pi a_0^2 \frac{Z_i^2 + Z_i \left(\frac{V_0}{V}\right)^2}{Z^2}, \quad (17)$$

из которого следует, что сечение потери электрона быстрым ионом убывает с увеличением скорости как  $\sigma_{q,q+1} \sim 1/E$  для любых  $q$ ,  $Z$  и  $Z_i$ . Модель Бора уточняли в первом порядке теории возмущений по параметру  $q/V$ , когда корреляции электронов в ионе и атоме мишени описывали методом Хартри–Фока, а вклад возбужденных состояний атома мишени в амплитуду учитывали в соответствии с правилом сумм [29].

Первоначально для квантово-механического описания сечения захвата электрона быстрыми ионами использовали методы, основанные на первом порядке теории возмущений. Особенность этой модели состоит в том, что захват электрона быстрым ионом происходит при небольших межъядерных расстояниях, на которых потенциал взаимодействия иона и атома мишени уже нельзя считать малым возмущением. Значительный вклад малых прицельных параметров приводит к большому переданному атому мишени импульсу и рассеянию иона на большие углы. К сложности расчета амплитуды захвата электрона относят также отсутствие ортогональности волновых функций начального и конечного состояний, которые являются собственными функциями разных гамильтонианов, и необходимость

численного суммирования по возбужденным состояниям рассеянного иона.

В приближении Оппенгеймера–Бринкмана–Крамерса (ОБК) [30, 31] захват электрона происходит только за счет его взаимодействия с ионом, а межъядерный потенциал взаимодействия и изменение кинематики разлета в конечном состоянии за счет кулоновского взаимодействия при  $q \neq 1$  не учитывают [32, 33]. В ОБК-приближении учитывают оболочечную структуру иона и атома мишени [34], но вычисленные значения сечений в разы могут превышать экспериментальные данные [35]. Попытки уточнить модель в ОБК-приближении столкнулись с рядом трудностей. Оказалось, что первое борновское приближение, в котором дополнительно учитывается межъядерное взаимодействие, порой еще хуже описывает экспериментальные сечения  $\sigma_{q,q-1}$  при быстрых столкновениях [36]. Изменение величины сечения при учете механизмов захвата электрона, описываемых амплитудами второго и более высоких порядков теории возмущения, соизмерим с погрешностью расчета, связанной с выбором пробных волновых функций многоэлектронной мишени. Трудности при использовании традиционной теории возмущения объясняют использование при описании процесса захвата электрона быстрыми ионами различных вариантов метода искаженных волн (CDW – Continuum Distorted Waves) [37, 38], которые в приближении прямолнейных траекторий (т.е. при больших прицельных параметрах и малых углах рассеяния) учитывают высокие порядки теории возмущений.

Другая особенность квантово-механического описания процесса перезарядки связана с необходимостью суммирования сечений по возбужденным состояниям иона и атома мишени. Если для оценки влияния возбужденных состояний на сечение потери электрона используют правило сумм [29], то в расчетах сечения захвата электрона быстрым ионом таких приближенных соотношений нет, и для получения достаточной точности результатов расчета  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_i)$  требуется оценка количества возбужденных состояний. Сложность в проведении таких расчетов заключается в отсутствии аналитических волновых функций возбужденных многоэлектронных ионов [39]. Влияние количества возбужденных состояний иона на величину  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_i)$  можно оценить для ионов с  $q = Z$ , когда образуется водородоподобный ион и известны волновые функции всех его возбужденных состояний. Из результатов расчетов  $\sigma_{Z,Z-1}(E, Z, Z_i)$  в ОБК-приближении следует, что для ионов с  $q = Z$  и  $E > 50$  МэВ/нуклон электрон захватывается преимущественно в основное состояние водородоподобного иона, но при уменьшении  $E$  количество возбужденных состояний

рассеянного иона и их влияние на сечение возрастает. Например, в расчетах  $\sigma_{1,0}(E, Z, Z_t)$  для ионов  $\text{Ne}^+$  с энергией  $E > 2$  МэВ/нуклон в газах необходимо учитывать все возбужденные состояния с главным квантовым числом  $n \leq 5$  для активного электрона [33]. При вычислении сечений с учетом эффекта плотности требуется оценка вероятностей радиационного распада и потери электрона возбужденными ионами. Эти дополнительные параметры зависят от энергии ионов, атомной структуры сталкивающихся частиц (волновых функций), плотности мишени и количества возбужденных состояний [40]. В расчетах  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  с водородоподобными волновыми функциями для многоэлектронных ионов  $q > Z - 1$  количеством возбужденных состояний увеличивается с возрастанием  $E$  и даже в газах на несколько порядков может превышать количество возбужденных состояний при столкновениях ионов с  $q = Z$  [41].

Таким образом, нет модели, которая могла бы описать сечения потери и захвата одного электрона в диапазоне энергии от нескольких кэВ/нуклон до десятков МэВ/нуклон. Наиболее сложным для теоретического описания процессов перезарядки в газах является диапазон энергии  $E = 0.1 - 1$  МэВ/нуклон, в котором нарушаются условия применимости метода сильной связи каналов и теории возмущения по параметру  $q/V$ . В этом диапазоне энергии на величину сечений перезарядки оказывают влияние процессы образования и распада возбужденных состояний атома мишени и иона, а также процессы потери и захвата ионом нескольких электронов в одном столкновении. На эту же область энергии приходится максимум неупругих потерь энергии [7].

## СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ ДЛЯ ИОНОВ ОТ БОРА ДО КСЕНОНА

Сечение захвата одного электрона медленными ионами слабо зависит от энергии  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \approx \text{const}$  при  $E < 0.1$  МэВ/нуклон. В области быстрых столкновений ( $E \geq 0.3$  МэВ/нуклон), наоборот, сечение захвата одного электрона  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  быстро уменьшается с увеличением  $E$ , и его можно представить в виде степенной функции  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \sim 1/E^\alpha$ , где  $\alpha > 0$  – безразмерный параметр, который вычисляется в ОБК-приближении. Для столкновений протона и атома водорода  $\alpha = 5.5$ . В случае многоэлектронного атома величина  $\alpha$  уменьшается из-за отличий в скорости электронов на разных оболочках атома мишени. При увеличении скорости иона возрастает вероятность захвата электрона из внутренних оболочек атома мишени, что может привести к осциллирующей зависимости  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  от  $Z_t$

[34]. Среднее значение параметра  $\alpha$  для столкновения быстрых протонов с многоэлектронными атомами составляет  $\alpha = 4.8$  [42]. Расчеты в ОБК-приближении для многозарядных ионов с  $Z \geq 5$  дают значения  $\alpha \approx 4.5$  для  $Z_t \leq 2$ ,  $\alpha \approx 3.5$  для  $Z_t = 7$ ,  $\alpha \approx 3.0$  для  $Z_t = 18$  и  $\alpha \approx 2.85$  для  $Z_t \geq 36$  [43].

Сечение потери одного электрона  $\sigma_{q,q+1}$  с ростом скорости иона сначала увеличивается из-за увеличения импульса, передаваемого активному электрону, а затем уменьшается как  $1/E$  из-за сокращения времени взаимодействия. Зависимость  $\sigma_{q,q+1} \sim 1/E$  для быстрых столкновений следует из первого порядка теории возмущений (17) и не зависит от  $q$ ,  $Z$  и  $Z_t$ . Когда скорость столкновения  $V$  и скорость валентных электронов в ионе с зарядом  $q$  совпадают, сечение  $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$  достигает максимального значения  $\sigma_{q,q+1}^{\max}(E_q, Z, Z_t)$ , где энергия  $E_q$  пропорциональна энергии связи валентного электрона в ионе  $\epsilon_q$ .

Теоретическая зависимость сечений  $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$  от энергии позволяет вычислить зарядовые фракции  $F_q(E)$  и средний заряд ионов  $\bar{q}(E)$  в равновесном зарядовом распределении. Величина  $\sigma_{q,q+1}^{\max}(E_q, Z, Z_t)$  вычисляется из нормировки  $\bar{q}(E)$  на эмпирическое значение среднего заряда ионов в равновесном зарядовом распределении в газах  $\bar{q}_{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$  [20]. При этом также используется нормировка  $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$  в области энергии  $E \approx 0.1$  МэВ/нуклон и  $\sigma_{q,q+1}^{\max}(E_q, Z, Z_t)$  на имеющиеся экспериментальные данные. Результаты расчетов  $\sigma_{q,q+1}^{\max}(E_q, Z, Z_t)$  с использованием данных  $\epsilon_q$ , вычисленных методом Хартри–Фока [44], показывают, что  $\sigma_{q,q+1}^{\max}(E_q, Z, Z_t)$  уменьшается с увеличением заряда ионов.

Для вычисления сечений потери и захвата одного электрона в твердых мишенях  $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  используют приближение, в котором отличие сечений перезарядки в газах и твердой мишени сводится к масштабному множителю [45, 46]:

$$\begin{aligned} \sigma_{q,q+1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) &= \sigma_{q,q+1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) C_{g-s}(E, Z, Z_t), \\ \sigma_{q,q-1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) &= \sigma_{q,q-1}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) / C_{g-s}(E, Z, Z_t). \end{aligned} \quad (18)$$

Считается, что коэффициент  $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ , учитывающий влиянием возбужденных состояний иона, не зависит от заряда иона  $q$ . Величина  $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$  определяется из нормировки вычисленного с сечениями  $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  среднего заряда  $\bar{q}(E)$  на эмпирическое значение в равновесном зарядовом распределении для твердых мишеней  $\bar{q}_{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  [20]. Из экспериментального

соотношения  $\bar{q}_{\text{sol}}(E, Z, Z_t) \geq \bar{q}_{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$  (рис. 9) следует дополнительное условие  $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \geq 1$ . Зависимость  $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$  от параметров качественно аналогична зависимости на рис. 10. Этот коэффициент увеличивается с возрастанием  $Z$ , а в случае быстрых столкновений, когда  $\bar{q}_{\text{sol}}(E, Z, Z_t) \approx \bar{q}_{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$  и влияние эффекта плотности на сечения перезарядки ионов уменьшается,  $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \rightarrow 1$ .

Эффект плотности для процессов потери и захвата электронов учитывают с помощью одного и того же коэффициента  $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ . Это упрощение, так как влияние возбужденных состояний на сечения потери и захвата в общем случае отличается. Однако использование, например, двух разных по величине коэффициентов для сечений потери и захвата электрона приводит к сильной корреляции между ними и нарушает однозначность вычисления сечений  $\sigma_{q,q\pm 1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ . Другая особенность состоит в том, что модель учета агрегатного состояния мишени связана с использованием в расчетах эмпирического среднего заряда [20], величина которого от плотности мишени не зависит.

На рис. 13 приведены сечения захвата и потери одного электрона ионами  $\text{Ar}^{5+}$  в углероде. Важной здесь оказывается точка пересечения сечений потери и захвата. При этой энергии ион с равной вероятностью может как захватить, так и потерять один из своих электронов, и  $\bar{q}(E) \approx 5$ . При переходе от газа к твердой мишени сечение  $\sigma_{q,q+1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  увеличивается, а сечение  $\sigma_{q,q-1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  уменьшается. Это приводит к уменьшению энергии, при которой  $\sigma_{q,q+1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) \approx \sigma_{q,q-1}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$ , и значение  $\bar{q}(E) \approx 5$  достигается при меньшей энергии. Сдвиг максимума сечения потери электрона в твердой мишени по сравнению с газами объясняется влиянием возбужденных состояний иона и уменьшением средней энергии связи валентного электрона.

Использование сечений  $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$  позволяет получить хорошее согласие теоретического значения  $\bar{Q}(E, x)$  с экспериментальными данными, но ширина зарядового распределения  $D(E, x)$  оказывается заниженной [47]. Для равновесного зарядового распределения это отличие может достигать 20–30% и объясняется необходимостью учета влияния кратных процессов на зарядовое распределение ионов.

Для описания сечений  $\sigma_{q,q\pm k}(E, Z, Z_t)$  ( $0 \leq q \pm k \leq Z$ ,  $k \geq 2$ ) в настоящей работе предлагается использовать приближение, в котором отношение сечений в процессах потери и захвата не-

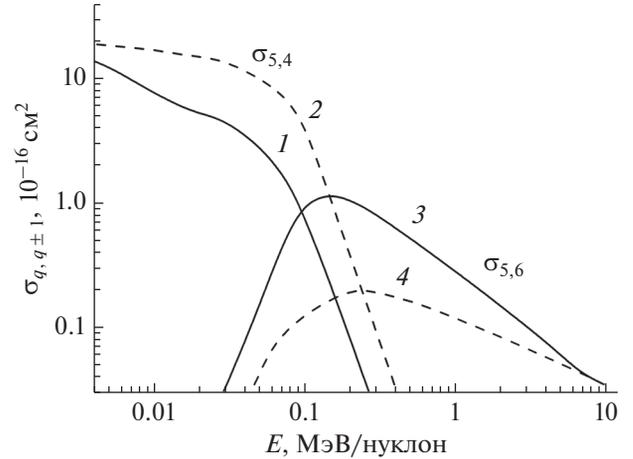


Рис. 13. Результаты расчета сечений потери и захвата одного электрона ионами  $\text{Ar}^{5+}$  в углероде: пунктирные линии – для газа; сплошные линии – для твердой мишени с учетом поправки на эффект плотности.

скольких электронов одинаковое и не зависит от заряда ионов  $q$  и количества активных электронов  $k$ :

$$W^{\text{gas}}(E, Z, Z_t) = \frac{\sigma_{q,q\pm(k+1)}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)}{\sigma_{q,q\pm k}^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)} < 1, \quad (19)$$

$$W^{\text{sol}}(E, Z, Z_t) = \frac{\sigma_{q,q\pm(k+1)}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)}{\sigma_{q,q\pm k}^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)} < 1. \quad (20)$$

Коэффициенты для газовой  $W^{\text{gas}}(E, Z, Z_t)$  и твердой  $W^{\text{sol}}(E, Z, Z_t)$  мишеней вычисляются из нормировки ширины равновесного распределения  $d(E)$ , рассчитанной с этими сечениями, на эмпирические значения  $d(\bar{q}/Z)$  в газах и твердых мишенях [22]. Использование одного общего для сечений всех кратных процессов коэффициента  $W(E, Z, Z_t)$ , который не зависит от параметров  $q$  и  $k$  в (19), (20), является упрощением, связанным с необходимостью получения однозначности результатов расчетов  $\sigma_{q,q\pm k}(E, Z, Z_t)$ .

Таким образом, для оценки сечений перезарядки предлагается метод, который основан на экспериментальных данных, теоретических моделях и эмпирической оценке экспериментальных параметров равновесного зарядового распределения ионов. Для этого сначала используют теоретические модели, чтобы описать зависимость сечений  $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$  в газах от энергии  $E$ . Далее проводится нормировка этих сечений на экспериментальные значения, что позволяет описать зависимость  $\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_t)$  от  $q$ ,  $Z$  и  $Z_t$  в газах. Затем используют эмпирические значения параметров равновесного зарядового распределения  $\bar{q}(E, Z, Z_t)$  и  $d(\bar{q}/Z)$ , из величины которых для

газовых и твердых мишеней вычисляют масштабные множители  $C_{g-s}(E, Z, Z_i)$ ,  $W(E, Z, Z_i)$ . Одинаковое количество входных и выходных параметров в таком подходе обеспечивает однозначность в результатах вычисления сечений перезарядки.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод, который позволяет получить сечения перезарядки ионов в газообразных и твердых мишенях в диапазоне параметров  $0 \leq q \leq Z$ ,  $5 \leq Z \leq 54$ ,  $1 \text{ кэВ/нуклон} \leq E \leq 50 \text{ МэВ/нуклон}$ . Границы этого диапазона объясняются несколькими причинами. Верхняя граница по энергии ионов ( $E = 50 \text{ МэВ/нуклон}$ ) обусловлена малостью величины зарядовой фракции  $F_{Z-1}$  для ионов с  $Z = 54$ . В случае медленных столкновений ( $E < 1 \text{ кэВ/нуклон}$ ) становятся заметными эффекты, связанные с тепловыми колебаниями и резонансами атомов мишени, которые в рассмотренной модели не учитываются. Для легких ионов ( $Z \leq 4$ ) ухудшается согласие эмпирических параметров  $\bar{q}(V, Z, Z_i)$  и  $d(\bar{q}/Z)$  с экспериментальными данными, и сечения перезарядки для этих ионов надо оценивать другими методами. Влияние кратных процессов на зарядовое распределение ионов усиливается с увеличением  $Z$ . Для ионов ксенона ( $Z = 54$ ) появляется область энергии, где  $W(E, Z, Z_i) \rightarrow 1$ , и процессы потери и захвата нескольких электронов в одном столкновении уже нельзя рассматривать как поправку к зарядовому распределению, которое описывается только сечениями  $\sigma_{q, q \pm 1}(E, Z, Z_i)$ . Видимо, в этой области зарядов и энергии ионов с  $Z > 54$  требуются уточнение приближения парных столкновений и учет взаимодействия иона одновременно с несколькими электронами атома мишени.

Значение предложенного метода объясняется новыми перспективами, которые открываются при использовании сечений перезарядки, вычисленных в широком диапазоне энергии и зарядов ионов. Эти сечения позволяют учесть особенности неравновесных процессов при установлении зарядового распределения в поверхностных слоях мишени, определить неупругие потери энергии в отдельных процессах и описать распределение ионов по заряду и энергии в рамках единой модели.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Николаев В.С. // УФН. 1965. Т. 85. С. 679.
2. Bimbot R., Geissel H., Paul H. et al. // J. Int. Comm. Rad Units Measur. (ICRU). 2005. V. 5. № 1. Rep. 73. Oxford University Press, 253 p.
3. Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. 192 с.
4. Комаров Ф.Ф. // УФН. 2003. Т. 173. С. 1287.
5. Evaluated Nuclear Data File (ENDF) <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>
6. Ziegler J.F. Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in all Elements. V. 5. Pergamon Press, 1980. 432 p.
7. Ziegler J.F. SRIM: Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
8. Allison S.K. // Rev. Mod. Phys. 1958. V. 30. P. 1137.
9. Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. Экспериментальные и теоретические исследования процессов взаимодействия ионов с веществом. М.: изд-во КДУ, 2019. 228 с.
10. Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A. et al. // At. Data Nucl. Data Tables. 2010. V. 96. P. 85.
11. Dmitriev I.S., Zaikov V.P., Kral'kina E.A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1986. V. 14. P. 515.
12. Lo H.H., Fite W.L. // Atomic Data. 1970. V. 1. P. 305.
13. Пивовар Л.И., Кривонос Г.А., Тубаев В.М. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 1872.
14. Файнберг Ю.А., Теплова Я.А., Новиков Н.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2010. № 6. С. 40.
15. Файнберг Ю.А., Теплова Я.А., Новиков Н.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2012. № 3. С. 5.
16. Рязанов М.И., Тилинин И.С. Исследование поверхности по обратному рассеянию. М.: Энергоатомиздат, 1985. 195 с.
17. Betz H.D., Hortig G., Leischner E. et al. // Phys. Lett. 1966. V. 22. P. 643.
18. Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. P. 465.
19. Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество М.: ИЛ, 1950. 158 с.
20. Schiwietz G., Grande P.L. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2001. V. 175–177. P. 125.
21. Nikolaev V.S., Dmitriev I.S. // Phys. Lett. A. 1968. V. 28. P. 277.
22. Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Phys. Lett. A. 2013. V. 377. P. 463.
23. Rozet J.P., Stephan C., Vernhet D. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1996. V. 107. P. 6770.
24. Lamour E., Fainstein P. D., Galassi M. et al. // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. P. 42703.
25. Grande P.L., Schiwietz G. // Adv. Quantum Chem. 2004. V. 45. P. 746.
26. Scheidenberger C., Stohlker Th., Meyerhof W.E. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1998. V. 142. P. 441.
27. Imai M., M. Sataka M., Matsuda M. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2015. V. 354. P. 172.
28. Fritch W., Lin C.D. // Phys. Rep. 1991. V. 202. P. 1.
29. Gillespie G.H. // Phys. Rev. A. 1978. V. 18. P. 1967.
30. Oppenheimer J.R. // Phys. Rev. 1928. V. 31. P. 349.
31. Brinkman H.G., Kramers H.A. // Proc. Acad. Sci. Amsterdam. 1930. V. 33. P. 973.
32. Novikov N.V., Teplova Ya.A. // Phys. Lett. A. 2011. V. 375. P. 4138.
33. Новиков Н.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2011. № 3. С. 80.

34. *Дмитриев И.С., Воробьев Н.Ф., Коновалова Ж.М. и др.* // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 1987.
35. *Janev R.K., Winter H.* // Phys. Rep. 1985. V. 117. P. 266.
36. *Omidvar K., Golden J.E., McGuire J.H., Weaver L.* // Phys. Rev. A. 1976. V. 13. P. 500.
37. *Belkić Dz.S., Gayet R., Salin A.* // Phys. Rep. 1979. V. 56. P. 279.
38. *Dewangan D.P., Eichler J.* // Phys. Rep. 1994. V. 247. P. 59.
39. *Novikov N.V.* // Int. J. Math. Comput. Sci. (Public Science Framework). 2015. V. 1. № 2. P. 55.
40. *Толстихина И.Ю., Шевелько В.П.* // УФН. 2013. Т. 183. С. 225.
41. *Розмей О., Толстихина И.Ю., Шевелько В.П.* // ЖТФ. 2003. Т. 3. № 9. С. 31.
42. *Schlachter A.S., Stearns J.W., Graham W.G. et al.* // Phys. Rev. A. 1983. V. 27. P. 3372.
43. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2015. № 3. С. 55.
44. *Froese Fischer C.* // Comp. Phys. Comm. 1991. V. 64. P. 369.
45. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Phys. Lett. A. 2014. V. 378. P. 1286.
46. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2015. V. 343. P. 110.
47. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2016. V. 373. P. 35.

## Evaluation of the Charge Changing Cross Sections in Ion-Atomic Collisions

N. V. Novikov<sup>1, \*</sup>, Ya. A. Teplova<sup>1, \*\*</sup>

<sup>1</sup>Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

\*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

\*\*e-mail: sonatina1929@mail.ru

To evaluate the charge changing cross sections, a method is proposed that is based on experimental data, theoretical models, and an empirical estimate of the experimental parameters in the equilibrium charge distribution of ions. The method makes it possible to obtain the cross sections for the loss and capture of one and several electrons in gaseous and solid targets recommended for estimating the cross section, taking into account the influence of the excited states of the ion and the target atom.

**Keywords:** charge changing cross sections, charge fractions, mean charge, width of the ion charge distribution.