

УДК 539.186

## ОПИСАНИЕ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ В УГЛЕРОДЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ СКОРОСТИ

© 2019 г. Ю. А. Белкова<sup>1</sup>, \*, Я. А. Теплова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына,  
119991 Москва, Россия

\*E-mail: belkova-fiz@mail.ru

Поступила в редакцию 20.06.2018 г.

После доработки 04.07.2018 г.

Принята к публикации 04.07.2018 г.

Рассмотрена возможность аналитических расчетов потерь энергии ионов в области скоростей 1–10 ат. ед., в которой потери энергии достигают максимальной величины. В этой области процессы перезарядки (захват и потеря электрона ионом) приводят к тому, что средний эффективный заряд иона отличается от заряда ядра. Использование выражений для среднего заряда ионов, проходящих через углеродную мишень, в формуле Бете–Блоха позволило определить значения скоростей ионов, при которых потери энергии достигают максимума, а также величину максимальных потерь энергии ионов. Проведенные расчеты потерь энергии ионов с зарядами ядер  $Z = 4–10$  качественно согласуются с полуэмпирическими (SRIM) и теоретическими (PASS) результатами.

**Ключевые слова:** потери энергии ионов, процессы перезарядки, средний эффективный заряд иона.

**DOI:** 10.1134/S0207352819040048

### ВВЕДЕНИЕ

Ионы, проходящие через вещество, теряют энергию в результате различных процессов. Вклад каждого процесса в суммарные потери энергии определяется в основном энергией и атомными номерами налетающих ионов, а также свойствами среды, в которой происходит торможение. Считается, что в случае быстрых ионов основную роль играют потери энергии, обусловленные взаимодействием ионов с электронами атомов среды:  $S_e = (-dE/dx)_e$ . В области скоростей ионов  $V > V_0 Z^{2/3}$  ( $V_0 = e^2/\hbar$ ) этот процесс обычно описывается известной формулой Бете–Блоха [1] для потерь энергии протонов с учетом различных поправок.

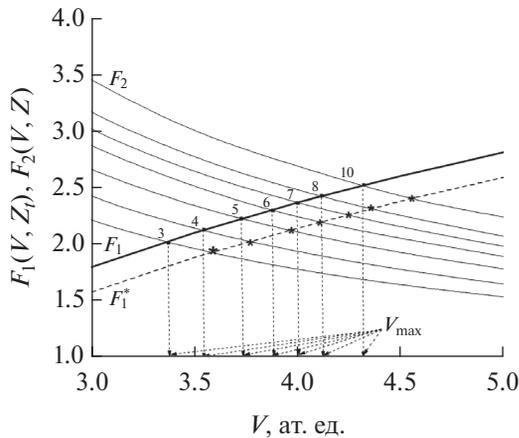
Наибольший интерес представляет область максимума потерь энергии ( $V \sim V_0 Z^{2/3}$ ). При рассмотрении торможения быстрых многоэлектронных ионов (атомный номер  $Z > 2$ ) в этой области скоростей необходимо учитывать то, что скорость ионов близка к скорости орбитальных электронов атомов мишени, с которыми происходит столкновение, что приводит к возрастанию вероятности потери и захвата электронов ионами. В результате процессов потери и захвата электронов средний заряд ионов становится меньше  $Z$  и изменяется по мере прохождения ионов через вещество; соответственно, меняются и потери

энергии  $S_e$ . Вклад процессов перезарядки в потери энергии можно учитывать в качестве отдельной составляющей [2–5] или с помощью учета отличия среднего эффективного заряда иона  $i_{\text{эф}}$  от  $Z$  в области скоростей ионов  $V \sim V_0 Z^{2/3}$ .

Использование средних эффективных зарядов ионов позволяет расширить области применимости приближения Бете–Блоха и получить ряд интегральных следствий для области максимума электронных потерь энергии. В настоящей работе проведены расчеты потерь энергии ионов с  $Z = 3–10$  в углероде в области скоростей ионов 1–10 ат. ед. Показано, что использование выражения для средних зарядов ионов в углеродной мишени позволяет определить положение и величину максимума потерь их энергии. Эта информация полезна для описания потерь энергии в широком диапазоне скоростей, например, с помощью аппроксимации набором степенных функций, что делает возможным описание пробега ионов в аналитическом виде [6].

### МЕТОД РАСЧЕТОВ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

При торможении ионов в области скоростей  $V > V_0 Z^{2/3}$  преобладают потери энергии за счет неупругого взаимодействия ионов с электронами мишени, которые успешно описываются форму-



**Рис. 1.** Зависимости  $F_1(V, Z_i)$  и  $F_2(V, Z)$  от скорости ионов  $V$ . Значения  $Z$  указаны рядом с кривыми:  $F_1$  соответствует углеродной мишени,  $F_1^*$  — воздуху. Точки пересечения определяют значения  $V_{\max}$  (указаны стрелками).

лой Бете—Блоха, если ион, пройдя тонкий слой вещества, полностью теряет электроны. При уменьшении энергии налетающие ионы не полностью ионизируются, поэтому для расчетов потерь энергии в формуле Бете—Блоха ядерный заряд иона заменяют эффективным зарядом  $i_{\text{эф}}$ , который зависит от скорости иона и может изменяться по мере прохождения иона через мишень. После установления зарядового равновесия потери энергии можно представить в виде:

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi e^4}{mV^2} i_{\text{эф}}^2 Z_t \ln\left(\frac{2mV^2}{I}\right), \quad (1)$$

где  $e$  и  $m$  — заряд и масса электрона,  $Z_t$  — заряд ядра атома среды,  $I$  — потенциал ионизации атома, который приближенно определяют как  $I = Z_t I_0$ , где  $I_0 = 13.6$  эВ. Поправки, связанные с оболочечной структурой и поляризацией среды в (1), в настоящей работе не рассматриваются, поскольку основной целью является качественный анализ особенностей поведения потерь энергии в зависимости от скорости иона.

Существуют различные полуэмпирические приближения для описания зависимости среднего эффективного заряда иона от его скорости, которые, например, приводят к постоянному значению  $S_e$  в области максимума [7], или сложные универсальные выражения с большим количеством параметров [8]. В настоящей работе используем более компактные и удобные для проведения расчетов выражения для среднего заряда ионов, полученные при описании торможения ионов в углеродной мишени:

$$\frac{\bar{i}}{Z} = 1 - \exp(-X), \quad (2)$$

где  $X = Y$ ;  $Y = V/(V'Z^{0.45})$ ,  $V' = 3.6 \times 10^8$  см/с [9] или  $X = -1.25 + 0.32Y - 0.11Y^2$  [10]. Подставляя выражение для эффективного заряда (2) в формулу (1), получим зависимость потерь энергии  $(-dE/dx)_e$  от скорости иона, максимум которой можно найти с помощью стандартных математических методов. Условие максимума удобно представить в виде:

$$F_1(V, Z_t) = F_2(V, Z), \quad F_1(V, Z_t) = \ln\left(\frac{4V^2}{Z_t}\right), \quad (3)$$

$$F_2(V, Z) = \frac{\ell^{kV} - 1}{\ell^{kV} - kV - 1},$$

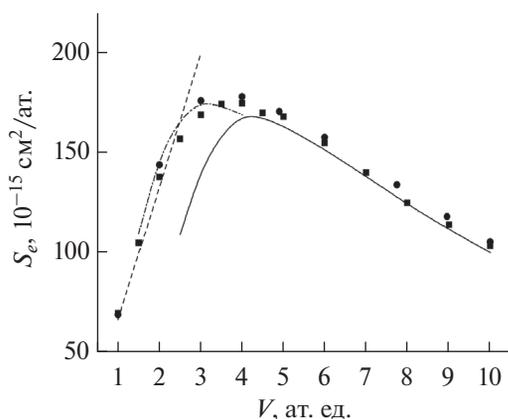
где  $k = (1.64Z^{0.45})^{-1}$ , скорость  $V$  выражена в атомных единицах.

На рис. 1 представлены результаты расчетов  $F_1(V, Z_t)$  и  $F_2$  для ионов с  $Z = 3-10$  в углеродной мишени ( $Z_t = 6$ ). Точки пересечения зависимостей  $F_1(V, Z_t)$  и  $F_2(V, Z)$  определяют значения скоростей  $V_{\max}$ , при которых потери энергии (1) достигают максимума. Из приведенных графиков видно, что значения  $V_{\max}$  возрастают с увеличением  $Z$ , что соответствует известной зависимости  $V_{\max} = V_0 Z^{2/3}$  и результатам расчетов по программам SRIM [11] и PASS [12]. Результаты расчетов  $V_{\max}$  приведены в табл. 1. Необходимо отметить, что увеличение атомного номера мишени (пунктирная кривая  $F_1^*$  на рис. 1) приводит к увеличению значения  $V_{\max}$  для данного  $Z$ . Таким образом, проведенное рассмотрение позволяет подтвердить полученное на основе анализа экспериментальных данных положение о том, что максимум  $S_{e \max}$  при увеличении заряда ядра налетающего иона и атомного номера мишени смещается в область больших скоростей [2].

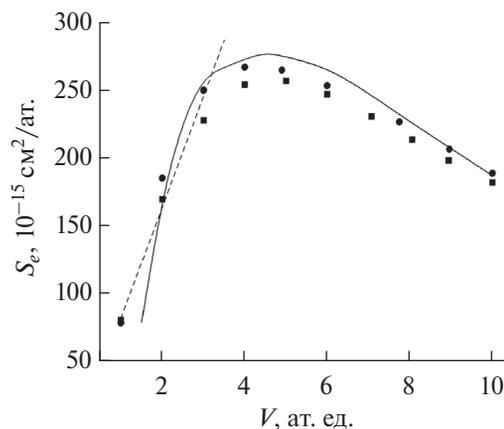
Подставляя выражение для среднего эффективного заряда (2) в формулу Бете—Блоха (1), с учетом соотношения (3) можно получить выражение для максимального значения потери энергии:

$$S_{e \max} = \frac{4\pi e^4}{mV_0^2} Z_t Z^2 \left(\frac{1 - \ell^{-kV_{\max}}}{V_{\max}}\right)^2 \times \left(1 + \frac{kV_{\max}}{\ell^{kV_{\max}} - 1 - kV_{\max}}\right), \quad (4)$$

где скорость иона  $V_{\max}$  выражена в ат. ед. Результаты расчетов максимальных значений потерь энергии ионов (табл. 1) согласуются с результатами расчетов SRIM и PASS в пределах 10% для ионов с  $Z \geq 4$ . Для ионов Li значение  $V_{\max}$ , определенное по рис. 1, является завышенным, а значение  $S_{e \max}$  — заниженным. Неудовлетворительный результат связан, вероятно, с небольшим количе-



**Рис. 2.** Потери энергии ионов азота в углероде в зависимости от их скорости. Расчеты настоящей работы: сплошная линия – по формуле Бете–Блоха, штрихпунктирная линия – с учетом эффективного уменьшения заряда ядра атома мишени; пунктирная кривая – по формуле (5). Символы: ■ – данные SRIM, ● – данные PASS.



**Рис. 3.** Потери энергии ионов неона в углероде в зависимости от их скорости. Расчеты настоящей работы: сплошная линия – по формуле Бете–Блоха, пунктирная кривая – по формуле (5). Символы: ■ – данные SRIM, ● – данные PASS.

ством электронов и особенностями электронной структуры атомов Li.

В области скоростей  $V < V_0 Z^{2/3}$  потери энергии линейно возрастают с увеличением скорости, что описывается, например, с помощью приближения Фирсова [13]:

$$S_e = 2.34 \times 10^{-15} (Z + Z_t) V, \quad (5)$$

где  $S_e$  выражается в единицах [эВ · см<sup>2</sup>/атом], скорость иона  $V$  – в единицах  $10^8$  см/с,  $1/4 \leq Z/Z_t \leq 4$ .

На рис. 2 представлены результаты расчетов потерь энергии ионов N в углеродной мишени в зависимости от их скорости, выполненных с помощью выражений (1), (2) и (5). Из рисунка видно, что использование среднего эффективного заряда (2) в формуле Бете–Блоха (1) позволяет описать максимум в зависимости потерь энергии от их скорости, однако значения  $S_e$  занижены относительно данных SRIM при  $V < V_{\max}$ . Получен-

ное расхождение можно объяснить отмечавшейся в [2] особенностью потерь энергии при уменьшении энергии ионов: электроны внутренней оболочки атома мишени не участвуют в процессах ионизации, в результате средний потенциал ионизации, входящий в (1), перестает быть постоянным и изменяется в зависимости от  $V$ . В [14] эффективное число электронов атомов среды, участвующих в процессе торможения, было определено как  $Z_t' \approx Z_t^{2/3}$ . Если при расчетах  $S_e$  по формуле (1) полагать, что заряд ядра атома мишени равномерно возрастает от  $Z_t^{2/3}$  при  $V = 1.5$  ат. ед. до  $Z_t$  при  $V = V_{\max}$ , то совпадение результатов расчетов в настоящей работе и расчетов по программам SRIM и PASS существенно улучшается.

Аналогичные расчеты для потерь энергии ионов Ne (рис. 3), выполненные с помощью (1), расходятся в пределах 10% с полуэмпирическими данными SRIM, но согласуются с теоретически-

**Таблица 1.** Результаты расчетов  $V_{\max}$  (ат. ед.) и  $S_{e\max}$  ( $10^{15}$  эВ · см<sup>2</sup>/ат.) для различных зарядов ядра ионов  $Z$  в углеродной мишени

$Z$	$V_{\max}$ Настоящая работа	$V_{\max}$ SRIM	$V_{\max}$ PASS	$Z^{2/3}$	$S_{e\max}$ Настоящая работа	$S_{e\max}$ SRIM	$S_{e\max}$ PASS
3	3.38	2.93	2.45	2.08	46	72	64.8
4	3.55	3.33	2.83	2.52	81	92	92.2
5	3.74	3.30	3	2.92	100	118	120
6	3.88	3.54	3.32	3.30	133	148	150
7	4.00	3.78	3.46	3.66	170	175	179.4
8	4.13	3.79	3.74	4.00	204	208	209
10	4.33	4.69	4.24	4.64	272	258	270

ми расчетами PASS. По-видимому, при теоретическом описании потерь энергии не учитывается особенность электронной структуры инертного газа, которая проявляется в экспериментальных результатах.

Применимость формулы (1) при уменьшении скорости иона ограничивается поведением логарифмической функции, что в соответствии с  $F_1(V, Z_p)$  в (3) дает  $V > 1.5$  ат. ед. В интервале скоростей 1–2.5 ат. ед. линейная зависимость потерь энергии от скорости успешно описывается приближением (5).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Использование эффективного среднего заряда иона при расчетах потерь энергии ионов с  $Z = 3–10$  в углероде позволило с помощью приближения Бете–Блоха определить скорости ионов  $V_{\max}$ , при которых потери энергии ионов достигают максимального значения, а также величину максимума потерь энергии  $S_{e \max}$ . Полученные результаты подтвердили полученный ранее на основе анализа экспериментальных данных вывод о том, что максимум потерь энергии  $S_{e \max}$  смещается в область больших скоростей при увеличении как заряда ядра налетающего иона, так и атомного номера мишени.

Расчеты, проведенные с помощью формулы Бете–Блоха в области максимума потерь энергии и при  $V > V_{\max}$ , позволяют описать потери энергии ионов с  $Z = 4–10$  при учете отличия эффективного среднего заряда от заряда ядра иона. При  $V < V_{\max}$  формулу Бете–Блоха можно использовать вплоть до скорости  $V = 2$  ат. ед., однако необходимо учитывать уменьшение эффективного числа электронов атомов среды, участвующих в процессе торможения. Принимая во внимание отмеченные особенности, и используя формулу Бете–Блоха совместно с формулой Фирсова для  $V < V_{\max}$ , можно

описать потери энергии рассмотренных ионов в диапазоне скоростей 1–10 ат. ед.

Полученные результаты могут быть использованы, если необходимы быстрые аналитические оценки потерь энергии ионов, а также для аппроксимации кривой потерь энергии с помощью степенных функций, удобных для расчетов пробегов ионов в веществе.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Далгарно А. Пробеги и потери энергии. // Атомные и молекулярные процессы. М.: Мир, 1964. С. 540.
2. Теплова Я.А., Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. Вып. 1. С. 44.
3. Теплова Я.А., Белкова Ю.А., Юминов О.А. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 230. P. 73.
4. Белкова Я.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2015. V. 343. P. 110.
5. Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2016. Т. 4. С. 56.
6. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Rad. Effects Defects in Solids. 2018. V. 173. № 3–4. P. 175. doi 10.1080/10420150.2018.1462365
7. Дмитриев И.С., Николаев В.С. // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 615.
8. Schiwietz G., Czerski K., Roth M. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2004. V. 225. P. 4.
9. Shima K., Ishihara T., Mikumo T. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1984. V. 2. P. 222.
10. To K.X., Drouin R. // Nucl. Instrum. Methods. 1979. V. 160. P. 461.
11. Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
12. Bimbot R., Geissel H., Paul H. et al. // J. Intern. Commission Rad. Units and Measurements (ICRU). V. 5. № 1. Rep. 73. Oxford University Press, 2005. 253 p.
13. Фирсов О.Б. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
14. Теплова Я.А., Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. Вып. 3. С. 559.

## Description of Energy Losses for Heavy Ions in Carbon Depending on Their Velocity

Yu. A. Belkova, Ya. A. Teplova

The possibility of analytical calculations of ion energy losses in a velocity region 1–10 a. u. where the energy losses reach a maximum value is considered. In this region, the processes of charge exchange (capture and loss of an electron by an ion) result in the difference between the average effective ion charge and the nuclear charge. In the Bethe–Bloch formula, the use of expressions for the average charge of ions passing through a carbon target makes it possible to determine the values of the ion velocities at which the energy losses reach a maximum and also the value of the maximum ion energy losses. The calculations of the energy losses for ions with charge  $Z = 4–10$  are in qualitative agreement with semiempirical (SRIM) and theoretical (PASS) data.

**Keywords:** ion energy losses, processes of charge exchange, average effective ion charge.