

УДК 539.186

ОПИСАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОГО РАЗБРОСА ЭНЕРГИИ ИОНОВ ПОСЛЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ТОНКОЙ МИШЕНИ

© 2020 г. Н. В. Новиков^а, *, Я. А. Теплова^а, **

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

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

**e-mail: sonatina1929@mail.ru

Поступила в редакцию 16.07.2019 г.

После доработки 18.08.2019 г.

Принята к публикации 20.08.2019 г.

Статистический разброс потери энергии быстрых ионов моделируется методом Монте-Карло в случае больших и малых переданных импульсов. Область применимости приближения Бора определена для часто используемых твердых мишеней. Асимметрия в распределении потери энергии ионов связана с влиянием больших переданных импульсов и наблюдается в широком диапазоне значений энергии ионов и толщины мишени.

Ключевые слова: потери энергии, средняя энергия ионов, статистический разброс потери энергии, распределение Ландау–Вавилова, метод Монте-Карло.

DOI: 10.31857/S1028096020030140

ВВЕДЕНИЕ

Потери энергии ионов при прохождении через вещество и отражении от поверхности изучают теоретически и экспериментально в широком диапазоне значений энергии ионов E_0 [1]. Распределение по энергии ионов после прохождения мишени толщиной x можно описать функцией Гаусса с параметрами: средняя энергия E и стандартное отклонение Ω . Разброс в значениях энергии иона $E \pm \Omega$ объясняется статистическим характером столкновения для разных прицельных параметров, оболочечной структурой атомов среды, изменением эффективного заряда иона и неоднородностью плотности материала твердой мишени. Значение Ω важно при исследовании распределений ионов по глубине мишени, в методе резерфордовского обратного рассеяния и при оценке воздействия иона на материал мишени.

Первую теоретическую модель для описания статистического разброса потери энергии предложил Бор [2] на основе сечения рассеяния Резерфорда. Статистический разброс потери энергии ионов в этой модели обусловлен большим количеством столкновений иона со свободными электронами. При больших прицельных параметрах в каждом из столкновений ион теряет малую часть своей энергии. В этом случае распределение по энергии $f(E')$ ионов, прошедших через мишень, нормировано:

$$\int_0^{E_0} dE' f(E') = 1 \quad (1)$$

и описывается функцией Гаусса $f_G(E')$ со средней величиной потери энергии

$$E = \int_0^{E_0} dE' E' f_G(E') \quad (2)$$

и квадратом стандартного отклонения:

$$\Omega_B^2 = 4\pi Z^2 Z_I \rho x, \quad (3)$$

где Z – заряд ядра иона, Z_I – заряд ядра атома мишени, ρ – плотность мишени.

Модель Бора использует несколько приближений: до взаимодействия с мишенью разброса в распределении по энергии иона нет ($\Omega \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$); разброс потери энергии иона в одном столкновении со свободным электроном связан с небольшой величиной переданного импульса (малые углы рассеяния) и описывается нормальным распределением; при прохождении через тонкий слой мишени толщиной $x \ll R(E_0)$, где $R(E_0)$ – пробег иона с энергией E_0 , ионы теряют небольшую часть своей энергии – $E \ll E_0$; скорость иона V значительно превышает скорости электронов в газе свободных электронов $V \gg V_0 Z^{2/3}$, и параметр Ω_B^2 не зависит от E_0 ; при прохождении че-

рез мишень толщиной x заряд ионов $q \leq Z$ не меняется, а параметр Ω_B^2 не зависит от q ; мишень бесструктурная (аморфная или поликристаллическая) и однородная.

Уточнение модели проведено на основе принципов квантовой механики рядом авторов. Линдхард и Шарф [3], используя формализм функции диэлектрической проницаемости, расширили диапазон использования модели Бора на область промежуточных и медленных столкновений и ввели параметр приведенного разброса потерь энергии Ω^2/Ω_B^2 , величина которого зависит от E_0 . Эта поправка важна для ионов в диапазоне значений энергии, в котором неупругие потери энергии достигают максимума. Далее были учтены вклады разных оболочек атома мишени в распределение электронной плотности [4, 5] и использовано приближение эффективного заряда иона [6] для описания потери энергии ионов с зарядами $q < Z$ [7]. Результаты расчетов в такой модели согласуются с экспериментальными данными с точностью до ~5% [8], а в пределе быстрых столкновений совпадают с оценкой для газа свободных электронов ($\Omega^2/\Omega_B^2 \rightarrow 1$). Уточнение электронной плотности и заряда иона в области промежуточных и медленных столкновений позволило получить эмпирическое соотношение, которое описывает изменение Ω^2/Ω_B^2 при уменьшении энергии иона [8]. Так как мишень однородная, а сечение ионизации и эффективный заряд иона не зависят от x , стандартное отклонение в разбросе потери энергии Ω^2 , как и в модели Бора, линейно возрастает с увеличением толщины мишени ($\Omega^2 \sim x$).

Из-за статистической природы потери энергии в одном столкновении могут возникать флуктуации, когда при малых прицельных параметрах один из электронов атома (δ -электрон) получает большой переданный импульс. Это приводит к тому, что распределение по потерям энергии в тонкой мишени ($x \leq 1$ мкм) представляется в виде нескольких максимумов разной амплитуды [9], которые для мишени толщиной $x \geq 1$ мкм объединяются в один несимметричный максимум. Распределение по энергии ионов с учетом больших переданных импульсов в одном столкновении $f_{LV}(E')$ получило название распределения Ландау–Вавилова [10, 11]. Эта модель качественно описывает экспериментальные распределения потери энергии быстрых ионов после прохождения мишени толщиной $x \geq 10$ мкм. Погрешность аппроксимации асимметричного распределения $f_{LV}(E')$ функцией Гаусса $f_G(E')$ зависит от заряда ядра иона Z , энергии E_0 и толщины мишени x .

Цель работы – выяснить границы применимости приближения Бора для описания статистиче-

ского разброса потери энергии быстрых ионов в часто используемых твердых мишенях (графит, кремний, медь и серебро) и исследовать соотношение между результатами аппроксимации распределения по энергии быстрых ионов с помощью функций Гаусса и Ландау–Вавилова.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты распределения ионов, прошедших через твердую мишень, были выполнены методом Монте-Карло с помощью нескольких программ. Моделирование статистического разброса потери энергии в программе SRIM [12] основано на уточненной модели Бора, в которой распределение по энергии ионов описывается функцией Гаусса $f_G(E')$ в широком диапазоне толщины мишени $1 \text{ нм} \leq x \leq R(E_0)$ и значений энергии иона $1 \text{ кэВ} \leq E_0 \leq 10 \text{ ГэВ}$.

В соответствии с моделью Бора (3) статистический разброс потери энергии быстрых ионов ($E_0 \geq 0.5 \text{ МэВ/нуклон}$) в тонкой мишени ($x \leq 1 \text{ мкм}$) не зависит от E_0 и возрастает с увеличением тол-

щины мишени как $\Omega \sim \sqrt{x}$ (рис. 1а). В случае толщины мишени, близкой к пробегу иона, статистический разброс потери энергии уменьшается с увеличением x (рис. 1б), а модель Бора требует уточнения. Эта особенность связана с нарушением приближения тонкой мишени и уменьшением средней потери энергии иона при $x \sim R(E_0)$. Диапазон толщины мишени $x \leq x_{\max}(E_0)$, когда выполняется соотношение (3), зависит от энергии иона E_0 . В углеродной мишени $x_{\max} = 2.5 \text{ мкм}$ для $E_0 = 0.5 \text{ МэВ/нуклон}$, $x_{\max} = 5 \text{ мкм}$ для $E_0 = 1 \text{ МэВ/нуклон}$, $x_{\max} = 1 \text{ мкм}$ для $E_0 = 2 \text{ МэВ/нуклон}$. В области значений энергии $E_0 < 0.5 \text{ МэВ/нуклон}$ для оценки статистического разброса потери энергии ионов можно использовать приведенный параметр Ω^2/Ω_B^2 [8].

Линейная аппроксимация зависимости статистического разброса потери энергии от Z для ионов в диапазоне $E_0 \geq 0.5 \text{ МэВ/нуклон}$ (рис. 2) позволяет вычислить параметр $A(Z_i)$:

$$\Omega_B = A(Z_i)Z\sqrt{x}, \quad (4)$$

который равен статистическому разбросу потери энергии быстрых ионов после прохождения мишени толщиной $x \leq 1 \text{ мкм}$. Результаты расчетов этого параметра для часто используемых твердых мишеней приводятся в табл. 1. В соответствии с приближением Бора $A(Z_i)$ возрастает с увеличением Z_i .

Распределение Ландау–Вавилова, которое используется при моделировании потери энергии быстрых ионов с помощью программ GEANT4 [13] и FLUKA [14], качественно описывает экспе-

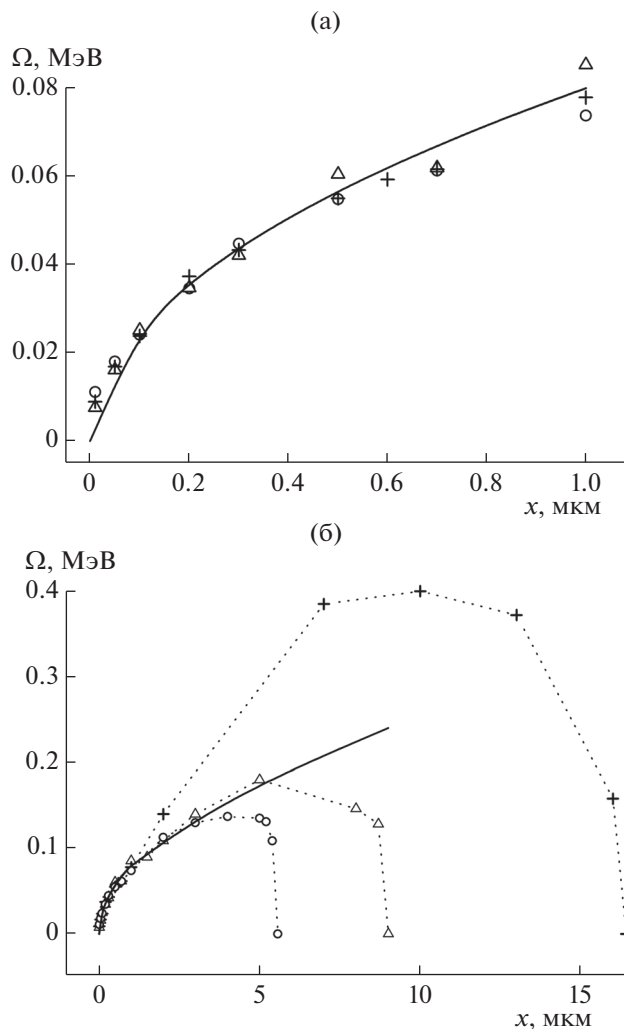


Рис. 1. Зависимость статистического разброса потери энергии ионов аргона в углероде от толщины мишени при энергии ионов: 0.5 (о); 1 (Δ); 2 МэВ/нуклон (+). Сплошной линией обозначена зависимость статистического разброса в виде $\Omega \sim \sqrt{x}$.

риментальные данные для быстрых протонов (рис. 3). Экспериментальное и вычисленное распределения имеют асимметрию. Медленное уменьшение количества ионов при увеличении потери энергии в результатах моделирования связано с вкладом больших переданных импульсов и образованием δ -электронов. Для количественной характеристики отличия распределения $f(E')$ от функции Гаусса $f_G(E')$ можно использовать интеграл

$$F = \int_{E_1}^{E_2} dE' [f(E') - f_G(E')] \quad (5)$$

по области энергии $E_1 \leq E \leq E_2$, в которой $f(E') \geq f_G(E')$. Из экспериментального распределения

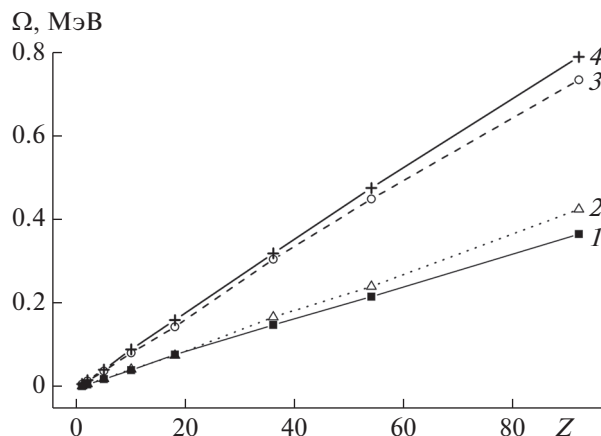


Рис. 2. Зависимость статистического разброса потери энергии ионов с энергией $E \geq 0.5$ МэВ/нуклон после прохождения мишени толщиной $x = 1$ мкм при заряде ядра атома мишени: 6 (1); 14 (2); 29 (3); 47 (4).

(рис. 3) получаем, что $E_1 = 8.7$ кэВ, $E_2 = 13$ кэВ и $F_{\text{ex}} \approx 0.163$. Параметр (5) можно применить также к распределению Ландау–Вавилова $f_{\text{LV}}(E')$. Результаты расчетов распределения быстрых ионов по программе GEANT4 показали, что в диапазоне значений энергии протона $5 \text{ МэВ} \leq E_0 \leq 5 \text{ ГэВ}$ и толщины мишени из кремния $x > 1$ мкм распределение $f_{\text{LV}}(E')$ отличается от $f_G(E')$ более чем на 12% ($F_{\text{LV}} > 0.12$). Из-за асимметрии функции $f_{\text{LV}}(E')$ энергия иона E_{max} , при которой потери энергии в распределении Ландау–Вавилова достигают максимальной величины $f_{\text{LV}}^{\text{max}} = f_{\text{LV}}(E_{\text{max}})$, отличается от среднего значения E (2). По сравнению с распределением Гаусса максимум в распределении Ландау–Вавилова возрастает до $f_{\text{LV}}^{\text{max}} > f_G(E)$, а ширина на половине высоты уменьшается (рис. 3). Такое перераспределение ионов по энергии приводит к тому, что в области энергии $E' \approx E$ функция Гаусса дает завышенную оценку количества ионов $f_G(E') > f_{\text{LV}}(E')$, а в областях $E' \leq E_{\text{max}}$ и $E' \gg E$ соотношение для функций распределения меняется на противоположное: $f_G(E') < f_{\text{LV}}(E')$. Отношение $f_{\text{LV}}(E_{\text{max}})/f_G(E_{\text{max}})$, как и параметр F (5),

Таблица 1. Значения коэффициента A (4) для часто используемых аморфных мишеней при аппроксимации статистического разброса потери энергии ионов с произвольным зарядом ядра Z и энергией $E \geq 0.5$ МэВ/нуклон

Z_i	A , кэВ/мкм ^{1/2}
6	3.98 ± 0.04
14	4.62 ± 0.04
29	8.06 ± 0.10
47	8.61 ± 0.07

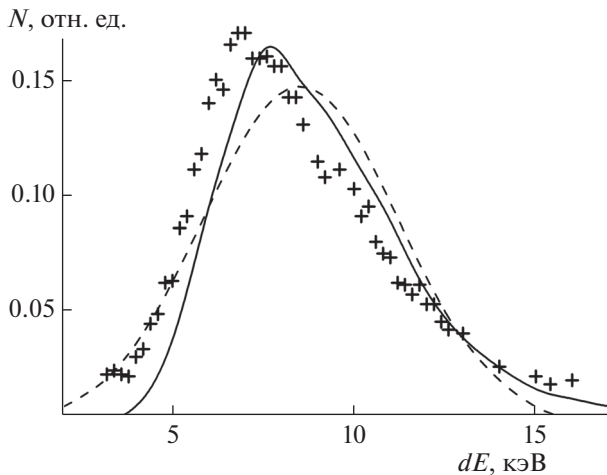


Рис. 3. Распределение по энергии протонов с энергией $E_0 = 2$ ГэВ после прохождения мишени из кремния толщиной $x = 32$ мкм: точки — экспериментальные данные [15]; сплошная линия — результаты расчетов по программе GEANT4 [13]; штриховая линия — результат аппроксимации экспериментальных данных функцией Гаусса с параметрами $dE = 8.7$ МэВ, $\Omega = 3.5$ МэВ.

характеризует погрешность аппроксимации распределения Ландау–Вавилова $f_{LV}(E')$, выполненного с помощью функции Гаусса $f_G(E')$. Результаты расчетов по программам GEANT4 и FLUKA показали, что отношение $f_{LV}(E_{max})/f_G(E)$ при изменении толщины мишени меняется мало и медленно возрастает с увеличением E_0 .

Трудно однозначно ответить на вопрос о том, какую модель лучше использовать для описания экспериментальных распределений быстрых ионов — распределение Ландау–Вавилова и результаты моделирования с использованием программ GEANT4 и FLUKA или распределение Гаусса и моделирование с помощью программы SRIM. С одной стороны, распределение Ландау–Вавилова качественно описывает медленное уменьшение количества ионов при больших потерях энергии, которое получается в эксперименте. С другой стороны, аппроксимация экспериментального распределения функцией Гаусса приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными в области малых потерь энергии (рис. 3). Для описания распределения по энергии быстрых ионов лучше использовать обе модели, а отличия в теоретических оценках по ним интерпретировать как теоретическую погрешность выбора модели.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для описания распределения ионов по энергии после их прохождения через мишень имеются две модели, в которых это распределение описы-

вается либо функцией Гаусса [12], либо функцией Ландау–Вавилова [13, 14]. Отличие этих подходов связано с учетом в распределении больших переданных импульсов.

При использовании распределения Гаусса предполагается, что столкновение иона с атомом мишени происходит при больших прицельных параметрах и ион в каждом столкновении теряет небольшой импульс. Для описания распределения ионов в этой модели используются либо теоретические оценки параметра Ω^2/Ω_B^2 для тонкой мишени $x \leq x_{max}(E_0)$, либо моделирование методом Монте-Карло с помощью программы SRIM для мишени произвольной толщины. Моделирование по программе SRIM позволило определить границы применимости приближения Бора. Параметр Ω_B^2 можно использовать для описания распределения по энергии быстрых ионов с энергией $E_0 \geq 0.5$ МэВ/нуклон и мишеней толщиной $x \ll R(E_0)$. Для статистического разброса потери энергии быстрых ионов в углероде ($Z_t = 6$), кремнии ($Z_t = 14$), меди ($Z_t = 29$) и серебре ($Z_t = 47$) получены эмпирические соотношения.

Экспериментальные распределения по энергии быстрых ионов характеризуются асимметрией, которая описывается распределением Ландау–Вавилова и учитывается при моделировании с использованием программ GEANT4 и FLUKA. Результаты расчетов показали, что в широком диапазоне значений E_0 и толщины мишени асимметрия в распределении по энергии ионов сохраняется.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sigmund P.* Particle Penetration and Radiation Effects. Volume 2: Penetration of Atomic and Molecular Ions. Cham–Heidelberg–New York–Dordrecht–London: Springer, 2014. 602 p.
2. *Бор Н.* Прохождение атомных частиц через вещество М.: ИЛ, 1950. 158 с.
3. *Lindhard J., Scharff M.* // K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 1953. V. 27. № 15.
4. *Bonderup E., Hvelplund P.* // Phys. Rev. A. 1971. V. 4. P. 562.
5. *Chu W.K.* // Phys. Rev. A. 1976. V. 13. P. 2057.
6. *Brandt W., Kitagawa M.* // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 5631.
7. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. New York: Pergamon, 1985.
8. *Yang Q., O'Connor D.J., Wang Z.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1991. V. 61. P. 149.
9. *Bishel H.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1990. V. 52. P. 136.
10. *Landau L.* // J. Phys. USSR. 1944. V. 8. P. 201.
11. *Вавилов П.В.* // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 920.

12. Ziegler J., Biersack J.P. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter. www.srim.org.
13. Allison J., Amako K., Apostolakis J. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2016. V. 835. P. 186. geant4.web.cern.ch.
14. Böhlen T.T., Cerutti F., Chin M.P.W. et al. // Nuclear Data Sheets. 2014. V. 120. P. 211. www.fluka.org/fluka.php.
15. Bak J.F., Burenkov A., Petersen J.B.B. et al. // Nucl. Phys. B. 1987. V. 288. P. 681.

Description of Ion Energy Loss Straggling after Passing through Thin Target

N. V. Novikov^{1, *}, Ya. A. Teplova^{1, **}

¹Moscow State University, Skobel'tsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

**e-mail: sonatina1929@mail.ru

The energy loss straggling for fast ions is simulated by Monte Carlo method for large and small transferred momenta. The range of applicability of the Bohr approximation is determined for frequently used solid targets. The asymmetry in the distribution of ion energy losses is associated with the effect of large transferred momenta and is observed in a wide range of ion energies and target thicknesses.

Keywords: energy losses, ion energy mean, energy loss straggling, Landau–Vavilov distribution, Monte Carlo method.