

## ИЗМЕНЕНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО И РАВНОВЕСНОГО СРЕДНЕГО ЗАРЯДА ИОНОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТОЛЩИНЫ ПРОЙДЕННОГО СЛОЯ ВЕЩЕСТВА

© 2022 г. Ю. А. Белкова\*

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

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

Поступила в редакцию 26.07.2021 г.

После доработки 27.08.2021 г.

Принята к публикации 30.08.2021 г.

Рассмотрено изменение зарядовых фракций  $F_i(x)$  и среднего заряда ионов  $\bar{i}(x)$  по мере убывания энергии ионов при увеличении толщины пройденного слоя вещества  $x$ . С помощью предложенного полуэмпирического метода проведены аналитические расчеты для прохождения ионов N с начальными скоростями  $V_0 = 4 \times 10^8$  и  $6 \times 10^8$  см/с через целлулоид. Показано, что в неравновесной области зависимость зарядовых фракций и средних зарядов от  $x$  определяется начальными скоростями и начальными зарядами ионов  $i_0$ , а после достижения зарядового равновесия средние заряды ионов убывают и увеличивается нейтральная фракция  $F_0$  с ростом  $x$  независимо от начальных условий для всех рассмотренных  $V_0$  и  $i_0$ .

**Ключевые слова:** торможение ионов, потери энергии ионов, зарядовые фракции, неравновесный и равновесный средний заряд ионов.

**DOI:** 10.31857/S1028096022030050

### ВВЕДЕНИЕ

При прохождении быстрых ионов через вещество потеря и захват электронов приводят к изменению величины зарядовых фракций в ионном пучке. В случае тонкой мишени быстрые ионы, как правило, не успевают достичь состояния зарядового равновесия, зарядовые распределения и средний заряд ионов зависят от толщины мишени  $x$ . Изменением энергии ионов за счет торможения в случае тонкой мишени пренебрегают [1–4]. Равновесное зарядовое распределение устанавливается в том случае, если слой вещества достигает равновесной толщины  $T_{eq}$  [4, 5]. Тогда равновесные зарядовые фракции и средний равновесный заряд  $\bar{i}_{eq}$  считаются не зависящими от  $x$  и начального заряда налетающего иона  $i_0$  и определяются начальной энергией ионов  $E_0$ .

Если толщина мишени сравнима по величине с пробегом ионов, то потери энергии ионов в веществе приводят к существенному уменьшению их скорости и соответствующему изменению равновесных зарядовых фракций и равновесного среднего заряда ионов по мере увеличения прой-

денного слоя  $x$  [6]. Предложенная ранее степенная аппроксимация для неупругих потерь энергии [7] позволила аналитически описать изменение энергии ионов при торможении и зависимость равновесного среднего заряда ионов от пройденного слоя вещества [8].

В настоящей работе на примере прохождения ионов азота через целлулоид рассмотрено изменение зарядовых фракций и средних зарядов ионов в зависимости от толщины пройденного слоя  $x$  как в области малых толщин — до достижения зарядового равновесия, так и в равновесной области. Это позволяет проследить за эволюцией зарядового распределения ионов по мере прохождения через вещество, начиная от начального зарядового состояния при влете ионов в мишень с некоторой начальной энергией и практически до остановки ионов в веществе.

### МЕТОД РАСЧЕТОВ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

При прохождении ионного пучка с зарядами ядер  $Z$  через вещество изменение его зарядового

состава описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dF_i}{dx} = \sum_k F_k \sigma_{ki} - F_i \sum_k \sigma_{ik}, \quad \sum_i F_i = 1, \quad (1)$$

где заряд иона  $i$  может принимать значения от  $-1$  до  $Z$ . Величина зарядовой фракции  $F_i$  меняется с толщиной мишени  $x$ , а сечения потери или захвата электрона  $\sigma_{ik}$  считают постоянными. Аналитическое решение системы уравнений (1) возможно в том случае, если при рассмотрении ионного пучка можно ограничиться небольшим числом зарядовых компонент. Для двухкомпонентного пучка решение хорошо известно [9]. Его можно обобщить на случай трех компонент в случае, когда поведение двух фракций в зависимости от  $x$  подобно (обе фракции стремятся к нулю при  $x \rightarrow 0$  и монотонно возрастают при увеличении  $x$ ). В этом случае зарядовые фракции и средний заряд  $\bar{i} = \sum_i i F_i(x)$  можно представить в виде [10, 11]:

$$F_i = F_{ieq} + (F_{i0} - F_{ieq}) \exp(-\beta x), \quad (2)$$

$$\bar{i} = \bar{i}_{eq} + (i_0 - \bar{i}_{eq}) \exp(-\beta x), \quad (3)$$

где  $F_{i0}$  – начальное значение  $i$ -й зарядовой компоненты,  $i_0$  – начальный заряд иона,  $F_{ieq}$  и  $\bar{i}_{eq}$  – значения зарядовых компонент и среднего заряда ионов в пучке после достижения равновесия (при  $x > T_{eq}$ ). Коэффициент  $\beta$  может быть выражен через сечения потери и захвата электрона.

В приближении тонкой мишени при рассмотрении установления зарядового равновесия обычно считают, что энергия иона остается практически постоянной и равна начальной энергии  $E_0$ . Тогда величины  $F_{ieq}$  и  $\bar{i}_{eq}$  становятся постоянными после достижения зарядового равновесия и не меняются при изменении  $x$ . Однако, если увеличить толщину слоя вещества, пройденного ионами, уменьшение энергии ионов становится существенным. Таким образом, при замедлении ионов изменяются равновесные значения  $F_{ieq}$  и  $\bar{i}_{eq}$ , которые зависят от энергии ионов, а, следовательно, и от пройденного слоя вещества  $x$ .

Для определения зависимости  $F_{ieq}(x)$  и  $\bar{i}_{eq}(x)$  необходимо описать уменьшение энергии (скорости) ионов по мере увеличения  $x$ . Для проведения анализа удобно использовать степенную аппроксимацию неупругих потерь энергии ионов  $S_e$  [12, 13], параметрами которой являются максимальное значение потерь энергии ионов  $S_{e\max}$  и скорость иона  $V_{\max}$  (энергия  $E_{\max}$ ), при которой потери энергии достигают величины  $S_{e\max}$ . Так, например, если начальная скорость иона  $V_0$  меньше, чем  $V_{\max}$ , то можно получить [13]:

$$S_e = \frac{V}{V_{\max}} S_{e\max}, \quad (4)$$

$$E^{1/2} = E_0^{1/2} - \frac{S_{e\max}}{2E_{\max}^{1/2}} x, \quad x \leq \frac{2E_0^{1/2} E_{\max}^{1/2}}{S_{e\max}}.$$

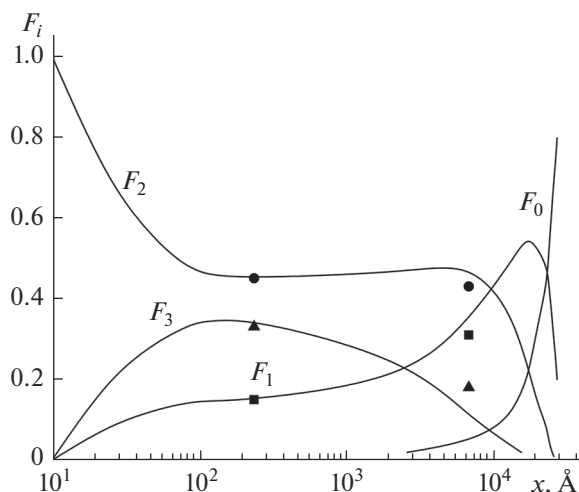
Полученное выражение для энергии ионов  $E(x)$  позволяет связать толщину мишени  $x$  с энергией, которую будет иметь ион, пройдя такой слой вещества:

$$x = \frac{2E_{\max}^{1/2}}{S_{e\max}} (E_0^{1/2} - E^{1/2}), \quad (5)$$

что позволит описать зависимость  $F_{ieq}(x)$  на основе известных данных о равновесных зарядовых фракциях при различной энергии ионов. Тогда использование полученной зависимости совместно с (2) делает возможным определение зарядовых фракций ионов  $F_i(x)$  как в неравновесной ( $x < T_{eq}$ ), так и в равновесной области ( $x \geq T_{eq}$ ). Аналогичное описание среднего заряда ионов  $\bar{i}(x)$  возможно, если учесть изменение среднего равновесного заряда по мере прохождения через вещество [13]:

$$\bar{i}_{eq}(x) = Z \left[ 1 - \exp \left( -\sqrt{\frac{E_0}{E_{\max}}} + \frac{S_{e\max}}{2E_{\max}} x \right) \right]. \quad (6)$$

Результаты расчетов изменения зарядовых фракций ионов  $N$  в зависимости от толщины пройденного слоя в целлулоиде приведены на рис. 1 и 2 для начальных скоростей ионов  $V_0 = 4 \times 10^8$  и  $6 \times 10^8$  см/с соответственно. При малых значениях  $x$ , до наступления зарядового равновесия, величина зарядовых фракций изменяется в результате процессов потери и захвата электрона ионами в соответствии с системой уравнений (1). В обоих представленных случаях основную роль играют три фракции ( $F_1, F_2, F_3$  для  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с и  $F_2, F_3, F_4$  для  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с), поэтому в расчетах использован метод, предложенный в [10], и зависимость зарядовых фракций от  $x$  была представлена в виде (2). Равновесная толщина мишени  $T_{eq}$ , при которой наступает зарядовое равновесие, зависит от начальных скоростей и зарядов ионов. Для ионов  $N$  в целлулоиде  $T_{eq}$  равна примерно  $100 \text{ \AA}$  [10]. Если учесть, что неупругие потери энергии равны  $S_e = 77 \text{ эВ/\AA}$  для  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с и  $S_e = 112 \text{ эВ/\AA}$  для  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с [14], изменение энергии ионов в неравновесной области  $\Delta E \cong 10 \text{ кэВ}$ , что составляет менее 1% от начальной энергии  $E_0$ . Таким образом, предположение о том, что энергия ионов, и, следовательно, сечения потери и захвата электрона в (1) остаются неизменными в ходе установления зарядового равновесия, можно считать справедливым.

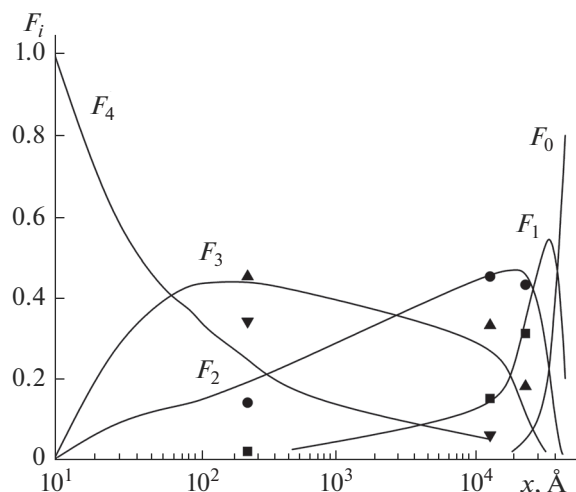


**Рис. 1.** Зарядовые фракции ионов N в зависимости от толщины пройденного слоя вещества  $x$  в целлюлоиде (экспериментальные данные [15]): ■ –  $F_1$ ; ● –  $F_2$ ; ▲ –  $F_3$ . Начальная скорость ионов  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с, начальный заряд ионов  $i_0 = 2$ . Сплошные кривые – результаты расчетов, зарядовые фракции указаны рядом с кривыми.

После достижения зарядового равновесия  $x \geq T_{\text{eq}}$  величина равновесных зарядовых фракций становится постоянной, если пренебречь замедлением ионов при прохождении через вещество. Однако если рассматривать мишень, толщина которой сравнима с пробегом ионов, то уменьшение энергии ионов становится существенным и приводит к тому, что равновесные зарядовые фракции изменяются с увеличением  $x$ . В рассмотренных примерах (рис. 1 и 2) условие  $V_0 < V_{\text{max}}$  выполняется в обоих случаях, поэтому для определения соотношения энергии ионов и пройденного слоя вещества при расчетах использовали выражения (4) и (5). Расчеты равновесных зарядовых фракций в зависимости от  $E(x)$  соответствуют полученным в [5], экспериментальные данные для равновесных и неравновесных зарядовых фракций приведены в [15].

Представленные на рис. 1 и 2 результаты показывают, что равновесные зарядовые фракции ионов азота  $F_3$  и  $F_2$  для  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с и  $F_4$  и  $F_3$  для  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с убывают при увеличении  $x$ . Фракции, соответствующие меньшим значениям ионного заряда ( $F_1$  для  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с и  $F_1, F_2$  для  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с), возрастают по мере замедления ионов и убывают только в конце пробега, когда доминирующей становится нейтральная фракция  $F_0$ .

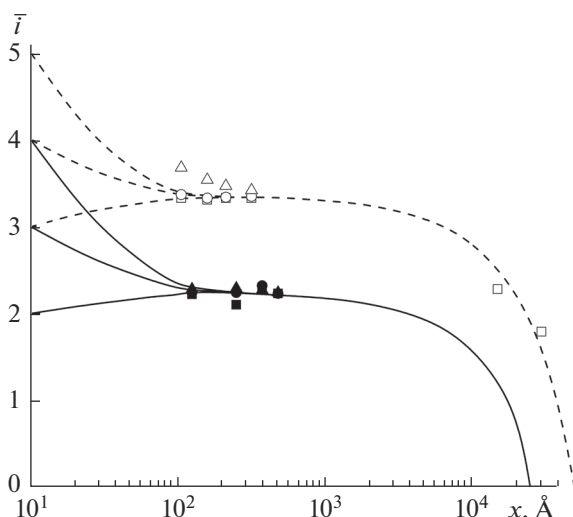
Результаты расчета средних зарядов ионов N (рис. 3) проводили по формуле (6), что соответствует случаю начальных скоростей ионов  $V_0 < V_{\text{max}}$ . В неравновесной области ( $x < T_{\text{eq}}$ ) величина



**Рис. 2.** Зарядовые фракции ионов N в зависимости от толщины пройденного слоя вещества  $x$  в целлюлоиде (экспериментальные данные [15]): ■ –  $F_1$ ; ● –  $F_2$ ; ▲ –  $F_3$ ; ▼ –  $F_4$ . Начальная скорость ионов  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с, начальный заряд ионов  $i_0 = 4$ . Сплошные кривые – результаты расчетов, зарядовые фракции указаны рядом с кривыми.

на средних зарядах зависит от начального заряда ионов, а при увеличении  $x$  приближаются к значению  $\bar{i}_{\text{eq}}$ , которое определяется начальными скоростями ионов  $V_0 = 4 \times 10^8$  и  $6 \times 10^8$  см/с соответственно. После достижения зарядового равновесия средний заряд медленно убывает на расстоянии  $x$  до нескольких тысяч ангстрем. В конце пробега, когда толщина слоя вещества достигает порядка микрометра, равновесный заряд ионов уменьшается и становится близким к нулю при  $x = x_{\text{max}}$ . Как отмечалось ранее [8], величина  $x_{\text{max}}$  может превосходить пробеги ионов, рассчитанные в SRIM, что связано с рассмотрением в настоящей работе неупругих потерь энергии, в то время как при малых скоростях упругие потери энергии становятся сравнимы по величине, что приводит к более быстрому убыванию энергии ионов.

Таким образом, средний заряд ионов зависит от толщины пройденного слоя вещества на всей длине пути, но характер этой зависимости меняется: в неравновесной области средний заряд зависит от начального заряда ионов и может быть рассчитан по формуле (3). Если  $i_0 > \bar{i}_{\text{eq}}$  для данной начальной скорости ионов, то  $\bar{i}$  убывает с увеличением  $x$ . И наоборот, если  $i_0 < \bar{i}_{\text{eq}}$ , средний заряд  $\bar{i}$  возрастает по мере прохождения ионов через вещество вплоть до наступления зарядового равновесия, после чего  $\bar{i} = \bar{i}_{\text{eq}}$  для всех начальных зарядов ионов. При дальнейшем увеличении  $x$  равновесный средний заряд  $\bar{i}_{\text{eq}}$  убывает при замедлении ионов.



**Рис. 3.** Средний заряд ионов  $\bar{N}$  в зависимости от толщины пройденного слоя вещества  $x$  в целлюлоиде для различных начальных зарядов  $i_0$  (экспериментальные данные [15]):  $\blacksquare$  – 2;  $\bullet$  – 3;  $\blacktriangle$  – 4 при  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с;  $\square$  – 3;  $\circ$  – 4;  $\triangle$  – 5 при  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с. Результаты расчетов: сплошные линии – начальная скорость ионов  $V_0 = 4 \times 10^8$  см/с, пунктирные линии –  $V_0 = 6 \times 10^8$  см/с,  $i_0$  соответствует значению  $\bar{i}$  на оси ординат.

### ВЫВОДЫ

Представлен полуэмпирический метод расчета изменения зарядовых фракций и среднего заряда ионов по мере убывания энергии ионов при торможении в веществе. Приведены аналитические выражения для зависимости величины зарядовых фракций и среднего заряда ионов от толщины пройденного слоя вещества  $x$  как в неравновесной области ( $x < T_{eq}$ ), так и после достижения зарядового равновесия. Проведены расчеты зависимости  $F_i(x)$  и  $\bar{i}(x)$  для ионов N с начальными скоростями  $V_0 = 4 \times 10^8$  и  $6 \times 10^8$  см/с в целлюлоиде.

Расчеты показали, что зарядовые фракции и средние заряды ионов зависят от толщины пройденного слоя  $x$  вещества. В неравновесной области изменение  $F_i(x)$  и  $\bar{i}(x)$  происходит за счет процессов потери и захвата электрона ионами, в результате чего устанавливается зарядовое равновесия; зарядовые фракции и средние заряды приобретают равновесные значения  $F_{ieq}$  и  $\bar{i}_{eq}$ , которые не зависят от начальных зарядов ионов  $i_0$  и определяются их начальными скоростями  $V_0$ . При  $x < T_{eq}$  изменением энергии ионов можно пренебречь. При рассмотрении дальнейшего замедления ионов необходимо учитывать уменьше-

ние скорости ионов и соответствующее изменение  $F_{ieq}$  и  $\bar{i}_{eq}$ ; равновесные заряды ионов уменьшаются по мере увеличения  $x$ , зарядовые фракции, игравшие основную роль в начале торможения, убывают, а величина фракций  $F_1$  и  $F_0$  возрастает.

Полученные результаты могут быть использованы для описания торможения ионов в веществе, так как позволяют описать эволюцию зарядового распределения ионов в зависимости от толщины пройденного слоя вещества.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Blazevic A., Bohlen H.G., von Oertzen W.* // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 032901.
2. *Woods C.J., Sofield C.J., Cowern N.E.B. et al.* // J. Phys. B. 1984. V. 17. P. 867.
3. *Теплова Я.А., Дмитриев И.С.* // Изв. РАН. Сер. физ. 1998. Т. 62. № 4. С. 786.
4. *Zaikov V.P., Kralkina E.A., Nikolaev V.S. et al.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1986. V. 17. P. 97.
5. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. // 2016. V. 373. P. 35.
6. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Modern Phys. Lett. B. 2020. P. 2050150. <https://doi.org/10.1142/S021798492050150X>
7. *Белкова Ю.А., Теплова Я.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2019. № 4. С. 34. <https://doi.org/10.1134/S0207352819040048>
8. *Белкова Ю.А., Теплова Я.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 3. С. 39. <https://doi.org/10.31857/S1028096021030043>
9. *Аллисон С., Гарсиа-Муньос М.* // Атомные и молекулярные процессы / Ред. Бейтс Д. М.: Мир, 1964. С. 624.
10. *Белкова Ю.А., Теплова Я.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. № 6. С. 772.
11. *Belkova Yu.A., Teplova Ya.A.* // Rad. Eff. Defects Solids. 2013. V. 168. № 5. P. 365. <https://doi.org/10.1080/10420150.2013.777446>
12. *Белкова Ю.А., Теплова Я.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. № 8. С. 43. <https://doi.org/10.1134/S0207352818080073>
13. *Belkova Yu.A., Teplova Ya.A.* // Rad. Eff. Defects Solids. 2018. V. 173. № 3–4. P. 175. <https://doi.org/10.1080/10420150.2018.1462365>
14. *Ziegler J.F.* SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter ([www.srim.org](http://www.srim.org)).
15. *Белкова Ю.А., Теплова Я.А.* Равновесные и неравновесные зарядовые состояния ионов при прохождении через газы и твердотельные мишени. Препринт НИИЯФ МГУ № 2011-14/878. М., 2011. 62 с.

## Change in Non-Equilibrium and Equilibrium Mean Charge of Ions Depending on the Thickness of the Passed Layer of a Matter

Yu. A. Belkova\*

*Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia*

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

The change in the charge fractions  $F_i(x)$  and the mean ion charge  $\bar{i}(x)$  as the ion energy decreases with increasing thickness of the passed layer of matter  $x$  is considered. Using the proposed semi-empirical method, analytical calculations have been carried out for the passage of N ions with initial velocities  $V_0 = 4 \times 10^8$  and  $4 \times 10^8$  cm/s through celluloid. It is shown that in the non-equilibrium region the dependence of charge fractions and mean ion charge on  $x$  is determined by the initial velocities and initial charges of the ions  $i_0$ , and after reaching the charge equilibrium, the mean charges of the ions decrease and the value of the neutral fraction  $F_0$  increases with increasing  $x$ , regardless of the initial conditions for all considered  $i_0$  and  $V_0$ .

**Keywords:** ion deceleration, ion energy loss, charge fractions, non-equilibrium and equilibrium ion mean charge.