

УДК 539.186

ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ ИОНОВ В ПРОЦЕССЕ ПЕРЕЗАРЯДКИ

© 2016 г. Ю. А. Белкова, Н. В. Новиков, Я. А. Теплова*

НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобелыцина Московского государственного университета
им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

*E-mail: teplova@anna19.sinp.msu.ru

Поступила в редакцию 20.06.2015 г.

Предложен метод расчета потерь энергии ионов в процессах перезарядки. Установлено, что вклад процесса перезарядки в неупругие потери энергии для ионов с зарядом ядра $Z = 5-10$ является значительным и для некоторых ионов достигает 15% в области энергии от 30 до 100 кэВ/нуклон. При замене газовой мишени на твердую потери энергии иона от процессов перезарядки уменьшаются.

Ключевые слова: зарядовое распределение ионов, средний заряд, сечение потери электрона, сечение захвата электрона, неупругие потери энергии.

DOI: 10.7868/S0207352816040053

ВВЕДЕНИЕ

В экспериментальных исследованиях потерь энергии ионов, прошедших через вещество, измеряются общие потери энергии от упругих и всех неупругих процессов. Эмпирические [1] и теоретические [2, 3] программы позволяют в широком диапазоне энергии ионов E получить суммарные потери энергии во всех неупругих процессах, но не позволяют рассчитывать потери энергии ионов, обусловленные отдельными процессами — ионизации и возбуждения атома мишени, а также перезарядки иона. Известно [4], что в области $E \geq 0.5$ МэВ/нуклон основной вклад в неупругие потери энергии быстрых ионов вносят процессы ионизации и возбуждения атома мишени. Вклад процессов перезарядки становится заметным в области меньшей энергии, где средний заряд иона значительно отличается от заряда ядра.

Оценка вклада отдельных процессов в неупругие потери энергии ионов важна для объяснения некоторых особенностей потерь энергии, например соотношения неупругих потерь энергии в газе и в твердой мишени [5]. Ранее отмечалось [1, 6], что неупругие потери энергии ионов, приходящиеся на единицу плотности мишени, слабо зависят от ее агрегатного состояния. С другой стороны, потери энергии быстрых ионов на ионизацию и возбуждение атома мишени в соответствии с первым порядком теории возмущений пропорциональны квадрату среднего заряда иона, а заметное увеличение среднего заряда иона в твердой мишени по сравнению с газами подтверждается экспериментально [1, 7]. Это противоречие до сих пор не получило объяснения.

Сложность анализа соотношения между потерями энергии ионов в различных средах связана с недостатком информации о сечениях неупругих столкновений в твердой мишени. Зарядовое распределение ионов, прошедших через вещество, оценивается на основе зависимости среднего заряда иона от энергии E , полученной либо эмпирически для газообразной [9] и твердой [9, 10] мишеней, либо в приближении эффективного заряда [8]. Это позволяет описать потенциал взаимодействия бесструктурной частицы и атома мишени и получить равновесные зарядовые фракции ионов [2], но не сечения перезарядки.

Метод оценки сечений с учетом эффекта плотности [11, 12] позволяет получить сечения перезарядки ионов, необходимые для оценки потерь энергии в процессах перезарядки. Считается, что в твердой мишени сечение потери электрона ионом больше, а сечение захвата электрона меньше, чем в газе при той же энергии [13], что объясняет увеличение среднего заряда ионов в твердой мишени по сравнению с газами.

Цель данной работы — проанализировать вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии ионов с зарядом ядер $Z = 5-10$ в области энергии от 10 кэВ/нуклон до 10 МэВ/нуклон и рассмотреть особенности неупругих потерь энергии, возникающие при замене газовой мишени на твердую.

НЕУПРУГИЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ

Неупругие потери энергии ионов S_e в газах представляются в виде суммы [14]:

$$S_e = S_{q\pm 1} + S_i + S_{nl}, \quad (1)$$

где $S_{q\pm 1}$ — потери энергии иона в процессе перезарядки, S_i и S_{nl} — потери энергии в процессах ионизации и возбуждения атома мишени соответственно. Потери энергии в процессе перезарядки можно записать в виде [14]:

$$S_{q\pm 1} = \sum_q F_q \left[\sigma_{q,q+1} \left(\frac{mV^2}{2} + |\epsilon_q| \right) + \sigma_{q,q-1} \left(\frac{mV^2}{2} - |\epsilon_{q-1}| \right) \right], \quad (2)$$

где q — заряд иона, F_q — равновесные зарядовые фракции, $\sigma_{q,q+1}$ и $\sigma_{q,q-1}$ — сечения потери и захвата одного электрона, m — масса электрона, V — скорость иона, $\epsilon_q, \epsilon_{q-1}$ — энергия связи электрона в основном состоянии иона с зарядом q и $q-1$ соответственно. Равновесные зарядовые фракции и сечения перезарядки связаны между собой системой линейных уравнений

$$\sum_k F_k(E) \sigma_{kq} - F_q(E) \sum_k \sigma_{qk} = 0 \quad (3)$$

и условием нормировки $\sum_q F_q(E) = 1$. В приближении (2) считается, что ион захватывает свободный электрон в основное состояние. Процесс захвата электрона в возбужденное состояние иона с последующим испусканием фотона или оже-электрона является дополнительным источником потерь энергии, который в сумму (2) не включается.

Вклад отдельных слагаемых в выражение (2) изменяется с увеличением E и зависит от величины F_q . Значение F_q достигает максимума при $q \approx \bar{q}$, где $\bar{q}$ — равновесный средний заряд иона,

$$\bar{q} = \sum_q q F_q. \quad (4)$$

В области энергии, где $q \approx \bar{q}$, ион с равной вероятностью может как потерять, так и захватить один электрон, и поэтому выполняется соотношение $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$ [15]. Для быстрых столкновений при $F_Z \approx 1$ в сумме (2) остается только слагаемое с $\sigma_{Z,Z-1}$, и потери энергии (2) быстро уменьшаются с увеличением энергии $S_{q\pm 1} \sim E^{-n}$, где $n \sim 3$.

В общем случае вклады в сумму (2) от процессов потери и захвата электрона различны. Так как сечение $\sigma_{q,q+1}$ уменьшается, а сечение $\sigma_{q,q-1}$, наоборот, увеличивается с возрастанием q , то при $q < \bar{q}$ выполняется соотношение $\sigma_{q,q+1} > \sigma_{q,q-1}$, и в сумме (2) доминируют слагаемые, связанные с процессами потери электрона. При $q > \bar{q}$, где $\sigma_{q,q+1} < \sigma_{q,q-1}$, ситуация изменяется на обратную. Отметим также, что процессы захвата электрона могут приводить как к увеличению (при

$mV^2/2 > |\epsilon_{q-1}|$), так и к уменьшению (при $mV^2/2 < |\epsilon_{q-1}|$) потерь энергии иона.

Сечения потери и захвата ионом одного электрона вычисляются с помощью компьютерной программы CCCS [16]. Эта программа основана на оценке сечений перезарядки в инертных и некоторых двухатомных (H_2 и N_2) газах в виде непрерывных и медленно изменяющихся функций $\sigma_{q,q+1}$ и $\sigma_{q,q-1}$ от E, q, Z и Z_t , где Z_t — заряд ядра атома мишени. Эффект плотности учитывается введением поправочного множителя $C_{g-s}(Z, Z_t)$, на который умножаются все сечения $\sigma_{q,q+1}$ и делятся все сечения $\sigma_{q,q-1}$ в твердой мишени:

$$\begin{aligned} \sigma_{q,q+1}^{\text{solid}} &= \sigma_{q,q+1} \times C_{g-s}(Z, Z_t), \\ \sigma_{q,q-1}^{\text{solid}} &= \sigma_{q,q-1} / C_{g-s}(Z, Z_t). \end{aligned} \quad (5)$$

Необходимо отметить, что коэффициент $C_{g-s}(Z, Z_t)$ не зависит от E и q . Величина множителя $C_{g-s}(Z, Z_t)$ определяется из эмпирического соотношения для среднего заряда иона в твердой мишени $\bar{q}_{\text{solid}}$ [10] и увеличивается с ростом Z от 1.5 для ионов бора до 2.5 для ионов неона. Потери энергии ионов в процессах перезарядки в твердой мишени можно вычислить из (2), используя сечения перезарядки и зарядовые фракции для твердой мишени:

$$S_{q\pm 1}^{\text{solid}} = \sum_q F_q^{\text{solid}} \left[\sigma_{q,q+1}^{\text{solid}} \left(\frac{mV^2}{2} + |\epsilon_q| \right) + \sigma_{q,q-1}^{\text{solid}} \left(\frac{mV^2}{2} - |\epsilon_{q-1}| \right) \right], \quad (6)$$

где F_q^{solid} , $\sigma_{q,q+1}^{\text{solid}}$ и $\sigma_{q,q-1}^{\text{solid}}$ — равновесные зарядовые фракции, сечения потери и захвата одного электрона в твердой мишени, соответственно. В приближении (6) предполагается, что увеличение плотности мишени не изменяет энергию связи электрона в движущемся ионе. Изменение величины потерь энергии в твердых мишенях по сравнению с газами связано, с одной стороны, с увеличением $\sigma_{q,q+1}^{\text{solid}}$ и уменьшением $\sigma_{q,q-1}^{\text{solid}}$, а с другой стороны, со сдвигом равновесного зарядового распределения F_q^{solid} в сторону больших q , что увеличивает вклад второго слагаемого в (6).

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Вычисления потерь энергии в процессах перезарядки (2) и (6) проводились с помощью программы CCCS [16] для ионов с зарядами ядер $Z = 5-10$. Для расчетов суммарных неупругих потерь энергии в газе S_e и твердой мишени S_e^{solid} использовалась программа SRIM [1].

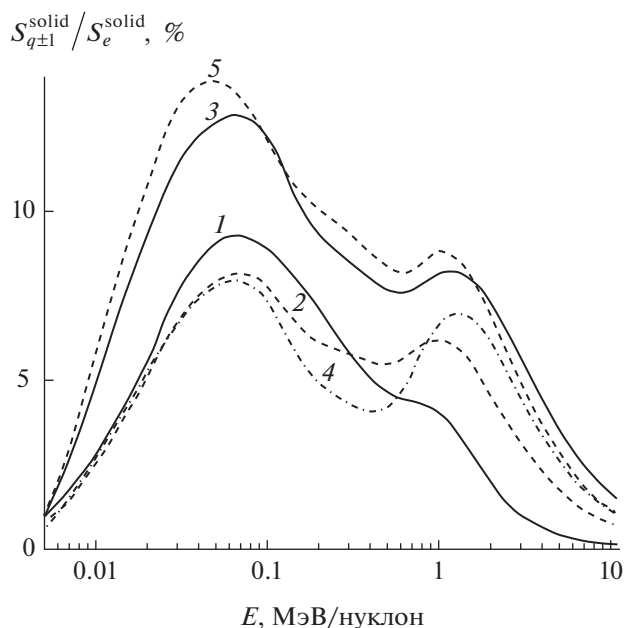


Рис. 1. Отношение потерь энергии в процессах перезарядки к сумме всех неупругих потерь энергии $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ для ионов азота ($Z=7$) в зависимости от энергии E для разных зарядов ядер мишени Z_t : 1 – 6; 2 – 13; 3 – 28; 4 – 42; 5 – 79.

Результаты расчетов отношения $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ в различных твердых мишенях (рис. 1), показывают, что вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии зависит от энергии столкновения. Немонотонный характер этой зависимости определяется тем, что величины F_q^{solid} , $\sigma_{q,q+1}^{\text{solid}}$ и $\sigma_{q,q-1}^{\text{solid}}$ в сумме (6) по-разному зависят от E и q . Отношение $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ достигает своего максимального значения в области энергии $30 \leq E \leq 100$ кэВ/нуклон. В этом диапазоне энергии влияние процессов перезарядки на неупругие потери энергии является значительным. Величина $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ зависит от Z_t немонотонно, но положение максимума функции $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ от E для разных мишеней не изменяется. Для быстрых столкновений, когда ион теряет почти все свои электроны ($E > 10$ МэВ/нуклон), влияние процессов перезарядки на потери энергии становится незначительным.

Вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии ионов в конкретной среде возрастает с уменьшением Z (рис. 2). Максимальное значение функции $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ для ионов бора увеличивается примерно в два раза по сравнению с

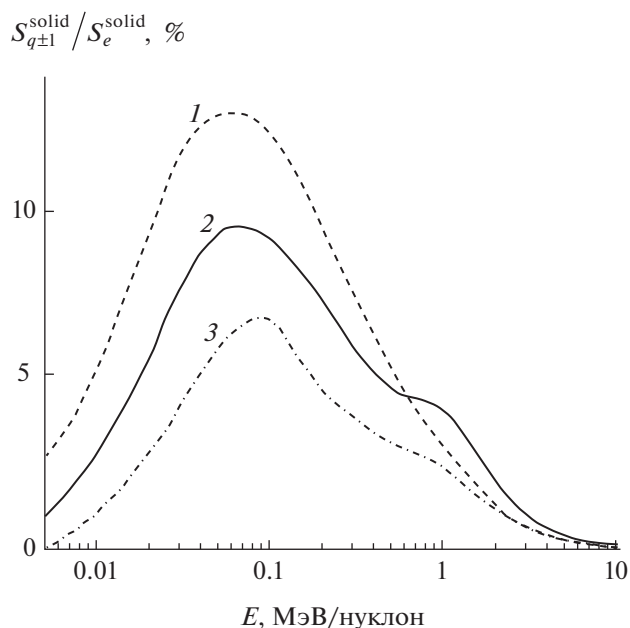


Рис. 2. Отношение потерь энергии в процессах перезарядки к сумме всех неупругих потерь энергии $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ в углероде ($Z_t=6$) в зависимости от энергии E для разных зарядов ядер иона Z : 1 – 5; 2 – 7; 3 – 10.

данными для ионов неона. При этом положение максимума слабо смещается в область меньших энергий.

Представленный метод позволяет провести сравнительный анализ потерь энергии ионов в твердых мишенях и газах. Результаты расчетов по программе SRIM, представленные на рис. 3, показывают, что суммарные неупругие потери энергии в твердой мишени (кривая 1 на рис. 3) отличаются от потерь энергии в газе не более чем на 7–8% во всем рассмотренном диапазоне E . Для быстрых столкновений ($E \geq 3$ МэВ/нуклон) суммарные неупругие потери энергии в твердой мишени больше, чем в газе, $S_e^{\text{solid}} > S_e$, но это превышение составляет не более 2–3%. В этой области энергии неупругие потери энергии пропорциональны квадрату заряда налетающего иона (кривая 2 на рис. 3). В области меньшей энергии $E < 1$ МэВ/нуклон из эмпирических соотношений [9, 10] следует значительное увеличение среднего заряда ионов при переходе от газов к твердой мишени, но суммарные неупругие потери энергии в твердой мишени становятся меньше, чем в газе.

На основе предложенной модели были выполнены расчеты соотношения потерь энергии в процессах перезарядки при переходе от газа к

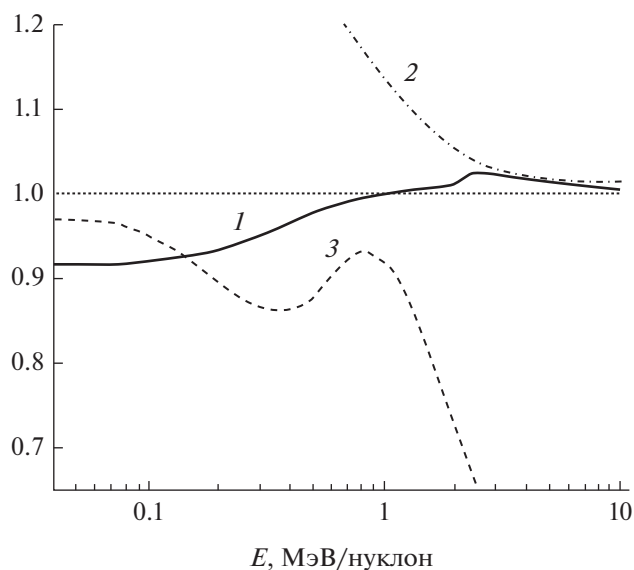


Рис. 3. Результаты расчетов величин, характеризующих неупругие потери энергии в твердой и газообразной мишенях для равновесного зарядового распределения ионов азота ($Z = 7$) в углероде ($Z_t = 6$): 1 – отношение неупругих потерь энергии в твердой мишени S_e^{solid} к потере энергии в газе S_e [1]; 2 – квадрат отношения среднего заряда в твердой [10] и газообразной [9] мишенях $(\bar{q}_{\text{solid}}/\bar{q})^2$; 3 – отношение потерь энергии от процессов перезарядки в твердой мишени $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}$ (6) к потере энергии в газе $S_{q\pm 1}$ (2).

твердой мишени (кривая 3 на рис. 3). Во всем диапазоне энергии ионов потери энергии от процессов перезарядки в твердой мишени меньше, чем в газе ($S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_{q\pm 1} < 1$). Это можно объяснить сдвигом равновесного зарядового распределения в сторону больших q в твердой мишени и увеличением значения энергии, при котором выполняется соотношение $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$. Возрастание энергии приводит к уменьшению величин $\sigma_{q,q+1}$ и $\sigma_{q,q-1}$ и, следовательно, уменьшению потерь энергии $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}$. Полученный эффект частично компенсирует предполагаемое увеличение потерь энергии в твердом веществе за счет возрастания среднего заряда. Необходимо отметить, что влияние эффектов перезарядки на отношение S_e^{solid}/S_e не является значительным и составляет около 1%, так как основной вклад в неупругие потери энергии вносят процессы ионизации атома мишени (рис. 1, 2). В области энергии $30 \leq E \leq 100$ кэВ/нуклон, где вклад процессов перезарядки в суммарные потери энергии заметен (рис. 1), отношение $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_{q\pm 1}$ отличается от единицы примерно на 2–3% (рис. 3).

В области энергии $E \geq 0.3$ МэВ/нуклон, где отношение $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_{q\pm 1}$ значительно меньше единицы, вклад процессов перезарядки в суммарные потери энергии становится менее 4–5%. Для объяснения слабой зависимости суммарных потерь энергии от агрегатного состояния мишени, кроме уменьшения потери энергии в процессах перезарядки, предполагается учесть уменьшение энергии связи валентных электронов и изменение сечения ионизации атома в твердой мишени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретическая оценка сечений перезарядки позволяет рассчитать потери энергии от процессов перезарядки ионов с $Z = 5–10$ в широком диапазоне энергии. Установлено, что потери энергии в процессе перезарядки влияют на неупругие потери энергии для рассмотренных ионов при $E \leq 3$ МэВ/нуклон. Отношение $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_{q\pm 1}$ достигает максимума в области энергии $30 \leq E \leq 100$ кэВ/нуклон. Этот диапазон энергии слабо изменяется в зависимости от величины заряда ядер атомов мишени, а величина максимального значения отношения $S_{q\pm 1}^{\text{solid}}/S_e^{\text{solid}}$ возрастает при уменьшении заряда ядра иона Z и может достигать 10–15%.

При замене газообразной мишени на твердую потери энергии от процессов перезарядки уменьшаются, что объясняется изменением баланса между процессами потери и захвата электрона ионом. Этот эффект позволяет частично объяснить слабое возрастание суммарных потерь энергии в твердой мишени по сравнению с газами. Однако учета потери энергии от эффекта, связанного с перезарядкой, недостаточно для описания слабой зависимости суммы всех неупругих потерь энергии от агрегатного состояния мишени, поскольку основной вклад в эту сумму дают потери энергии, связанные с ионизацией атома мишени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
2. Grande P.L., Schiwietz G. // Adv. Quantum Chem. 2004. V. 45. P. 7.
3. Sigmund P., Schinner A. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 195. P. 64.
4. Bimbot R., Geissel H., Paul Y. et al. J. Int. Commission of Radiation Units and Measurements (ICRU). V. 5. № 1. Rep. 73. Oxford University Press, 2005. 253 p.
5. Sigmund P. Stopping of Heavy Ions. A Theoretical Approach. Berlin: Springer, 2004. 255 p.
6. Теплова Я.А., Николаев В.С., Димитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 44.

7. *Betz Y.* // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. P. 465.
8. *Brandt W., Kitagawa M.* // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 5631.
9. *Schiwietz G., Grande P.L.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2001. V. 175–177. P. 125.
10. *Schiwietz G., Czeski K., Stauffebiel F., Grande P.L.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2004. V. 225. P. 4.
11. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.*, Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 3. С. 35.
12. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Phys. Lett. A. 2014. V. 378. P. 1286.
13. *Woods C.J., Sofield C.J., Cowern N.E. et al.* // J. Phys. B. 1984. V. 17. P. 867.
14. *Belkova Yu. A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2015. V. 343. P. 110.
15. *Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А.*, Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2009. № 3. С. 20.
16. *Novikov N.V.* Charge-Changing Cross Sections code. <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/cccs/HTM/ccscscode.htm>

Ion Energy Losses during Charge Exchange Process

Yu. A. Belkova, N. V. Novikov, Ya. A. Teplova

A method for calculation of ion energy losses during the charge exchange process is proposed. The contribution of the charge exchange process to inelastic energy losses is found to be significant for ions with nuclear charge $Z = 5-10$ and to reach 15% for several ions in an energy region from 30 to 100 keV/amu. If the gaseous target is replaced by the solid one the energy losses during charge exchange process decrease.