

7. *Sofield C.J., Cowern N.B.E., Draper J. et al.* // Nucl. Instrum. and Meth. 1980. **170**. P. 257.
8. *Woods C.J., Sofield C.J., Cowern N.B.E. et al.* // J. Phys. B. 1984. **17**. P. 867.
9. *Gaillard V.J., Poizat C.J., Ratkowski A. et al.* // Phys. Rev. 1977. **A16**. P. 2323.
10. *Теплова Я.А., Дмитриев И.С.* // Изв. АН. СССР, сер. физ. 1998. **62**, № 4. С. 786.
11. *Zaikov V.P., Kralkina E.A., Nikolaev V.S. et al.* // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. 1986. **B17**. P. 97.
12. *Tordoir X., Bastin T., Dumont P.-D., Garnir H.P.* // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. 2001. **B173**. P. 275.
13. *Maynard G., Chabot M., Gardes D.* // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. 2000. **B164–165**. P. 139.
14. *Shima K., Kuno N., Yuamanouchi M., Tawara H.* Res. Rep. NIFS-DATA. Series NIFS-DATA-10. 1991. Nagoya, Japan.
15. *Дмитриев И.С., Теплова Я.А., Николаев В.С., Фатеева Л.Н.* // Приб. и техн. эксперимента. 1959. **6**. С. 131.
16. *Betz H.D.* // Rev. Mod. Phys. 1972. **44**. P. 465.
17. *Николаев В.С.* // УФН. 1965. **85**. С. 679.

Поступила в редакцию  
19.12.01

УДК 537.534.74; 537.533.74

## СРЕДНИЙ ЗАРЯД МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В НЕРАВНОВЕСНОМ РЕЖИМЕ ИХ ПРОХОЖДЕНИЯ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО

В.В. Балашов, А.В. Бибииков, И.В. Бодренко

(НИИЯФ)

E-mail: balvse@anna19.npi.msu.su

**В рамках предложенного авторами ранее метода связанных кинетических уравнений исследовано поведение средних (эффективных) зарядов быстрых многозарядных ионов в неравновесном режиме прохождения через вещество. Расчеты параметров торможения быстрых ионов кислорода в тонких углеродных пленках находятся в согласии с недавно полученными экспериментальными данными.**

### Введение

Главной особенностью процесса прохождения многозарядных ионов через вещество является непрерывный обмен электронами между движущимся ионом и средой [1]. В толстых мишенях между различными зарядовыми фракциями проходящего пучка устанавливается динамическое равновесие, характер которого определяется скоростями переходов между ними; в этом случае процесс торможения можно описать небольшим числом усредненных параметров, таких, как средний равновесный заряд иона, величина которых не зависит от начального зарядового состояния пучка на входе в мишень. В случае предравновесного режима прохождения через вещество, при котором кинетика торможения неотделима от формирования самого распределения между различными зарядовыми фракциями, вопрос оказывается более сложным. В его разработку большой вклад внесла группа В.С. Николаева, выполнившая в НИИЯФ МГУ, начиная с 1960-х гг. [2], серию экспериментальных и теоретических исследований, относящихся к концепции среднего заряда ионов в веществе. Среди них особое место заняли измерения, позволившие сопоставить друг с другом средний заряд пучка ионов, определяемый по соотношению статистических весов его зарядовых фракций, и, с другой стороны, «эффективный» (эк-

вивалентный) заряд, вычисляемый на основании средней тормозной способности вещества мишени по отношению к проходящему пучку [3].

В 1970-е гг. Винтербоном [4], а позднее и другими авторами [5, 6] были предложены последовательные подходы к расчету основных характеристик процесса прохождения быстрых многозарядных ионов через вещество в неравновесном режиме. В рамках этих подходов концепция среднего заряда пучка ионов допускает ясное толкование, а сами значения среднего заряда могут быть вычислены с помощью вполне определенных алгоритмов, коль скоро известны эффективные сечения (скорости) элементарных процессов, отвечающих за торможение и перезарядку. В настоящей работе на основе сформулированного ранее авторами подхода к единому описанию торможения и перезарядки в рамках диффузионного приближения [6] выполнены количественные расчеты средних зарядов ионов и с их помощью прослежен процесс установления равновесия между зарядовыми фракциями проходящего пучка в типичных условиях экспериментов последнего времени.

### 1. Теория

Пусть  $\Delta = E_0 - E$  — энергия, потерянная ионом на расстоянии  $t$  от входа в мишень, а  $F_i(\Delta, t)$  при  $i = 1, \dots, N$  — ее распределения для каждой из

$N$  зарядовых фракций проходящего пучка. Введем параметры эффективного торможения и стреглинга (straggling) ионов  $S_i$  и  $\Omega_i^2$ , «замороженных» в определенном зарядовом состоянии. Когда перезарядка отсутствует, эти параметры, если принять диффузионное приближение, полностью определяют спектры потерянной энергии в каждой из фракций:

$$F_i(\Delta, t) = \frac{\exp\left\{-[\Delta - S_i t]^2 / 2\Omega_i^2 t\right\}}{\sqrt{2\pi\Omega_i^2 t}};$$

это известный закон Гаусса. Для учета перезарядки можно воспользоваться методом Монте-Карло, задаваясь при этом тем или иным конкретным законом распределения потерь энергии в каждом акте столкновения проходящего иона с атомами среды. Альтернативой методу Монте-Карло являются подходы, основанные на кинетических уравнениях для парциальных функций распределения  $F_i(\Delta, t)$  или для первых низших моментов этих распределений [4, 5]. К их числу относится и работа авторов [6].

Отправным пунктом при получении уравнений для парциальных функций распределения является общий подход Ландау–Винтербона [4, 7] к описанию процесса торможения быстрых заряженных частиц в веществе на основе кинетических уравнений типа уравнения Больцмана:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i(\Delta, t)}{\partial t} = & -\lambda_i^{\text{tot}} F_i(\Delta, t) + \\ & + \int \lambda_{ii}(T) F_j(\Delta - T, t) dT + \int \sum_{j \neq i} \lambda_{ji}(T) F_j(\Delta - T, t) dT. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $\lambda_{i \rightarrow j}(T) \equiv \lambda_{ij}(T)$  — удельная (на единицу потерянной энергии  $T$ ) скорость перехода иона из состояния  $i$  в состояние  $j$  при столкновении с атомом среды;  $\lambda_i^{\text{tot}} = \int \sum_j \lambda_{ij}(T) dT$  — суммарная скорость перехода из состояния  $i$  во все другие зарядовые состояния. При  $i = j$  функции  $\lambda_{ii}(T)$  характеризуют скорость потери энергии ионом в столкновениях без перезарядки.

Если характеристическая величина потери энергии в одном столкновении, определяемая функциями  $\lambda_{ii}(T)$ , мала по сравнению с шириной распределения  $F_i(\Delta, t)$ , парциальные распределения  $F_j(\Delta - T, t)$  в правой части уравнений (1) можно разложить в ряд Тейлора вокруг  $\Delta$ :

$$F_j(\Delta - T, t) = F_j(\Delta, t) + \sum_{n=1} \frac{(-1)^n}{n!} T^n \frac{\partial^n F_j}{\partial \Delta^n}. \quad (2)$$

Это приводит к следующей модификации системы уравнений (1) для парциальных функций распре-

ления:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i(\Delta, t)}{\partial t} = & -\lambda_i^{\text{tot}} F_i(\Delta, t) + \sum_j \lambda_{ji} F_j(\Delta - \bar{\Delta}_{ji}, t) - \\ & - S_i \frac{\partial F_i}{\partial \Delta} + \frac{\Omega_i^2}{2} \frac{\partial^2 F_i}{\partial \Delta^2} - \frac{N_i}{6} \frac{\partial^3 F_i}{\partial \Delta^3} + \dots, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $S_i = \int \lambda_{ii}(T) T dT$  — эффективное торможение, а  $\Omega_i^2 = \int \lambda_{ii}(T) T^2 dT$  и  $N_i = \int \lambda_{ii}(T) T^3 dT$  — параметры стреглинга и асимметрии (skewness) в каждом из рассматриваемых зарядовых состояний. Опуская все высокие ( $n > 2$ ) моменты  $\int \lambda_{ii}(T) T^n dT$  распределений  $\lambda_{ii}(T)$ , начиная с параметра асимметрии  $N_i(T)$ , а также вводя приближение фиксированной потери энергии в каждом из актов перезарядки:

$$\lambda_{ij}(T) = \lambda_{ij} \delta(T - \bar{\Delta}_{ij}), \quad i \neq j, \quad (4)$$

приходим к уравнениям, которые в интегральной форме представляют собой систему связанных уравнений работы [6]:

$$\begin{aligned} F_i(\Delta, t) = & e^{-\lambda_i t} \int g_i(\Delta - \Delta', t) F_i(\Delta', t = 0) d\Delta' + \\ & + \sum_{j \neq i} \lambda_{ji} \int_0^t dt' \int e^{-\lambda_i(t-t')} \times \\ & \times g_i(\Delta - \bar{\Delta}_{lk} - \Delta', t - t') F_j(\Delta', t') d\Delta'. \end{aligned} \quad (5)$$

Сюда входят функции источника

$$\begin{aligned} g_i(\Delta - \Delta', t - t') = \\ = \frac{\exp\left\{-[\Delta - \Delta' - S_i(t - t')]^2 / 2\Omega_i^2(t - t')\right\}}{\sqrt{2\pi\Omega_i^2(t - t')}} \end{aligned} \quad (6)$$

характеризующие торможение пучка ионов, «замороженного» в определенном зарядовом состоянии  $i$ , и парциальные распределения  $F_i(\Delta, t = 0)$  на входе в мишень.

Для определенности рассмотрим далее случай, когда пучок входит в мишень с заданной энергией и в выбранном зарядовом состоянии  $i_0$ :

$$F_i(\Delta, t = 0) = \delta_{i i_0} \delta(\Delta), \quad (7)$$

и будем отмечать парциальные распределения  $F_i(\Delta, t)$  после прохождения пучком ионов заданного пути  $t$ , получаемые из решения системы (5) с начальным условием (7), индексом зарядового состояния на входе в мишень:

$$F_i(\Delta, t) \rightarrow F_{i_0 \rightarrow i}(\Delta, t).$$

Аналогичное уточнение введем также при обозначении относительных вероятностей (весов) разных зарядовых состояний:

$$f_{i_0 \rightarrow i}(t) = \int F_{i_0 \rightarrow i}(\Delta, t) d\Delta,$$

средних потерь энергии:

$$\langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i}(t) = \frac{1}{f_{i_0 \rightarrow i}(t)} \int F_{i_0 \rightarrow i}(\Delta, t) \Delta d\Delta,$$

параметров их разброса (стреглинга):

$$\begin{aligned} & \left\langle (\Delta - \langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i})^2 \right\rangle_{i_0 \rightarrow i} (t) = \\ & = \frac{1}{f_{i_0 \rightarrow i}(t)} \int F_{i_0 \rightarrow i}(\Delta, t) (\Delta - \langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i})^2 d\Delta \end{aligned}$$

и тормозной способности вещества при переходе из начального состояния иона на входе в мишень  $i_0$  в конечное состояние на выходе из мишени  $i$ , которую, следуя обычному соглашению, определим как производную по пройденному пути от средней потерянной энергии в соответствующем канале:

$$\left( -\frac{dE}{dx} \right)_{i_0 \rightarrow i} (t) = \frac{d}{dt} (\langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i} (t)). \quad (8)$$

Эти обозначения будут полезны при рассмотрении различных сочетаний зарядового состояния пучка ионов на входе и зарядового состояния, фиксируемого детектором на выходе из мишени. Будем всюду нормировать распределения зарядовых фракций на единицу:

$$\sum_{i=1}^N f_{i_0 \rightarrow i}(t) = 1.$$

Перейдем к определениям среднего заряда пучка ионов.

*Средним статистическим зарядом*  $q_{i_0}^{(\text{stat})}(t)$  в точке  $t$  назовем среднее взвешенное от зарядов  $q_i$  ионов, достигших этой точки:

$$q_{i_0}^{(\text{stat})}(t) = \sum_{i=1}^N q_i f_{i_0 \rightarrow i}(t).$$

Отвлекаясь от эффекта Баркаша [8] и других отклонений тормозной способности от закона  $Z_1^2$ , определим *средний эквивалентный заряд*  $q_{i_0}^{(\text{equiv})}(t)$  как заряд, которым должна была бы обладать частица, движущаяся с той же скоростью и не подверженная перезарядке, которая теряет в точке  $t$  то же количество энергии *на единицу пути*  $(-dE/dx)$ , что и рассматриваемый пучок ионов в среднем:

$$q_{i_0}^{(\text{equiv})}(t) \equiv \sqrt{\left\langle \left( -\frac{dE}{dx} \right) (t) \right\rangle_{i_0} / \left( -\frac{dE}{dx} \right)_p}. \quad (9)$$

Здесь  $\left( -\frac{dE}{dx} \right)_p$  — тормозная способность для протонов, а  $\left\langle \left( -\frac{dE}{dx} \right) (t) \right\rangle_{i_0}$  — средняя тормозная способность для ионов, входящих в мишень в зарядовом состоянии  $i_0$ , определяемая как производная по пройденному пути от средней потерянной энергии:

$$\langle \Delta \rangle_{i_0} (t) = \sum_i \langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i} (t) f_{i_0 \rightarrow i}(t),$$

$$\left\langle \left( -\frac{dE}{dx} \right) \right\rangle_{i_0} = \frac{d}{dt} (\langle \Delta \rangle_{i_0} (t)).$$

При изучении торможения частиц в тонких слоях вещества оказывается удобным [9] определить

тормозную способность не по формуле (8), а через отношение конечных разностей:

$$\left( -\frac{\Delta E}{\Delta x} \right)_{i_0 \rightarrow i} (t) \equiv \frac{\langle \Delta \rangle_{i_0 \rightarrow i} (t)}{t}.$$

Соответствующая такому определению средняя тормозная способность вещества есть

$$\left\langle \left( -\frac{\Delta E}{\Delta x} \right) (t) \right\rangle_{i_0} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\Delta E}{\Delta x} \right)_{i_0 \rightarrow i} (t) f_{i_0 \rightarrow i}(t).$$

В связи с этим помимо определения (9) введем *средний эквивалентный заряд* (обозначим его  $Q_{i_0}^{(\text{equiv})}(t)$ ) еще одним способом — как заряд, которым должна была бы обладать частица, не подверженная перезарядке, которая теряет при той же скорости движения по прохождении всего пути  $t$  то же количество энергии  $\Delta E$ , что и рассматриваемый пучок ионов в среднем:

$$Q_{i_0}^{(\text{equiv})}(t) \equiv \sqrt{\left\langle \left( -\frac{\Delta E}{\Delta x} \right) (t) \right\rangle_{i_0} / \left( -\frac{dE}{dx} \right)_p}.$$

## 2. Результаты расчетов и обсуждение

В качестве конкретного объекта рассмотрим процесс прохождения ионов кислорода  $O^{q+}$  с энергией 10–25 МэВ через тонкие углеродные пленки толщиной от 5 до 25 мкг/см<sup>2</sup>. Его отдельные характеристики исследовались экспериментально, а также с помощью метода Монте-Карло [9]. Возьмем из работы [9] расчетные данные о скоростях элементарного процесса перезарядки  $\lambda_{ij}$  при взаимодействии иона кислорода с атомами углерода в мишени и выберем, как и в этой работе, следующие девять состояний ионов в качестве базиса для решения системы уравнений (5):

$$O^{4+}(1s^2[n=2]^2),$$

$$O^{5+}(1s^2[n=2]^1),$$

$$O^{6+}(1s^2), O^{6+}(1s^1[n=2]^1), O^{6+}(1s^1[n=3]^1), \quad (10)$$

$$O^{7+}(1s^1), O^{7+}([n=2]^1), O^{7+}([n=3]^1),$$

$$O^{8+}.$$

Отметим, что в этот набор помимо основных состояний ионов включены также несколько низших возбужденных состояний гелиеподобных и водородоподобных ионов  $O^{6+}$  и  $O^{7+}$ .

Параметры эффективного торможения  $S_i$  для ионов, «замороженных» в определенном зарядовом состоянии, рассчитываем, умножая соответствующие известные данные для протонов [10] на квадрат заряда иона с учетом поправки на экранировку  $c(q)$  [9]:

$$S_i = S_p \cdot [q_i]^2 \cdot [1 + c(q_i)].$$

Для последовательности зарядовых состояний ионов кислорода  $O^{(4+)}, \dots, O^{(8+)}$  при энергии 16 МэВ они составляют соответственно: 5.45; 7.47; 9.6; 11,9 и  $14.7 \frac{\text{кэВ}}{\text{мкг/см}^2}$ ; при этом  $S_p = 0.23 \frac{\text{кэВ}}{\text{мкг/см}^2}$ . Аналогичные параметры стреглинга  $\Omega_i^2$  вычисляем по Бору [1] и считаем их одинаковыми для всех состояний (10):  $\Omega_i^2 = \Omega_B^2 = 5.0 \frac{\text{кэВ}^2}{\text{мкг/см}^2}$ .

Установление равновесия между зарядовыми фракциями пучка в случаях, когда на мишень падает пучок ионов  $O^{8+}$ , полностью лишенных электронов, и ионов в зарядовом состоянии  $O^{5+}$ , иллюстрируется на рис. 1. В первом случае сначала происходит очень быстрый подхват ядром кислорода электрона среды, но на образующемся при этом ионе  $O^{7+}$  процесс не задерживается, с большой скоростью идет подхват второго электрона, и в итоге основную часть проходящего пучка в равновесии составляют

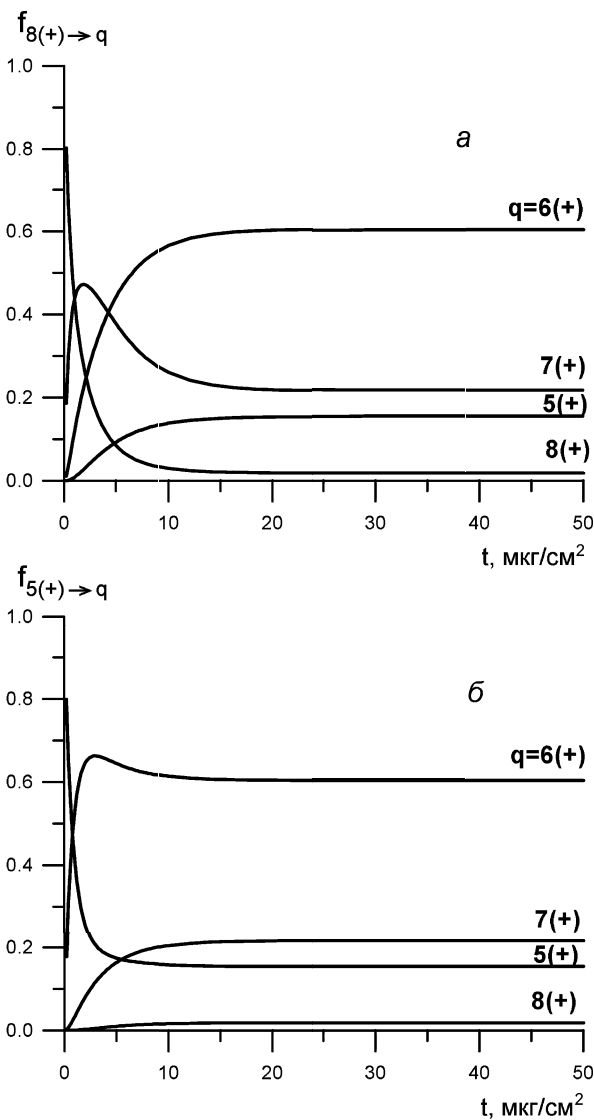


Рис. 1. Распределение зарядовых фракций в пучке ионов кислорода с начальной энергией  $E_0 = 16$  МэВ при прохождении углеродной мишени; начальные зарядовые состояния пучка:  $O^{8+}$  (а) и  $O^{5+}$  (б)

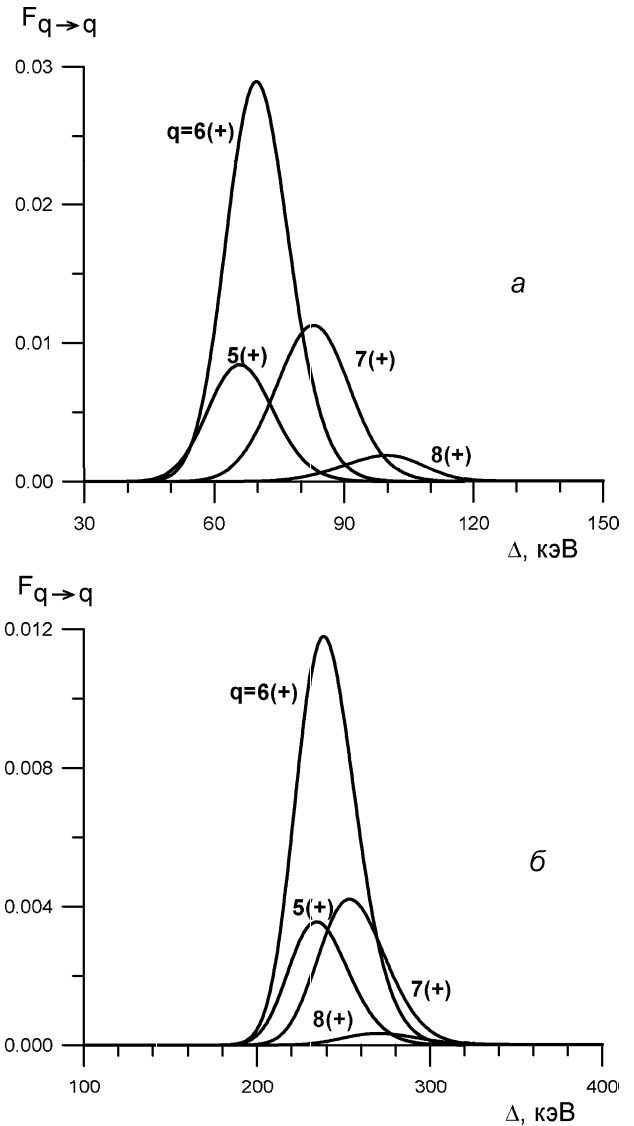


Рис. 2. Разрешенные по зарядовым состояниям иона при входе и выходе из мишени распределения потерь энергии ионов кислорода начальной энергии  $E_0 = 16$  МэВ; толщина мишени: 7.5 (а) и 25 мкг/см<sup>2</sup> (б)

гелиеподобные ионы  $O^{6+}$ . Если на мишень падает пучок ионов  $O^{5+}$ , каскад процессов перезарядки идет по-другому, но в конечном счете очень скоро (и даже быстрее, чем в первом случае) достигается такое же равновесное распределение фракций. Его формирование определяется исключительно соотношениями скоростей перезарядки и не связано с тем, как идет процесс торможения. Уравнения (1)–(6) позволяют связать вместе эти две стороны явления. На рис. 2 показаны парциальные энергетические распределения ионов разной зарядности на выходе из тонкой мишени, рассчитанные для случаев (что соответствует условиям эксперимента [9]), когда зарядовое состояние ионов на выходе — то же, что и на входе в мишень. При толщине углеродной пленки  $t = 7.5$  мкг/см<sup>2</sup> (это случай работы [9]) и даже при значительно большей толщине  $t = 25$  мкг/см<sup>2</sup>, где, как видно из рис. 1, распределение фракций уже совершенно нечувствительно к тому, каким бы

ло начальное зарядовое состояние ионов, различие между парциальными энергетическими распределениями все еще весьма велико. Равновесие между зарядовыми фракциями проходящего пучка, если его оценивать по средней потеряннй энергии в различных зарядовых фракциях (рис. 3), достигается значительно позже, нежели если оценивать по парциальным эффективным зарядам  $q_{i_0}^{(stat)}$  или по соотношению весов самих фракций.

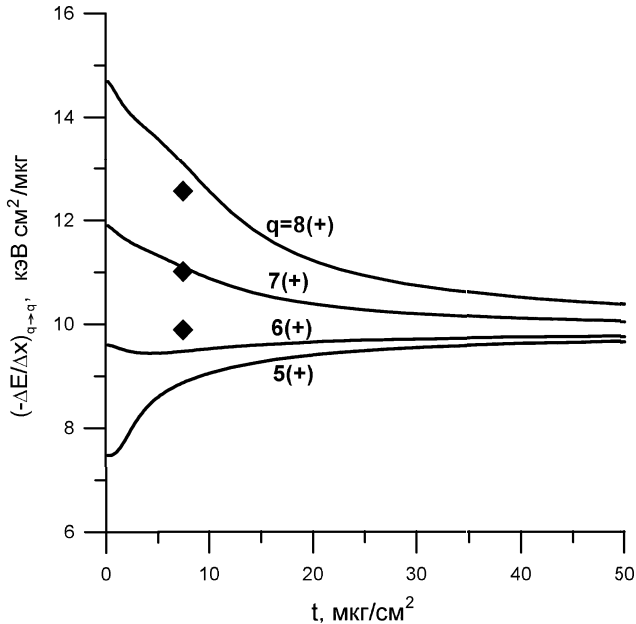


Рис. 3. Разрешенные по зарядовым состояниям иона при входе и выходе из мишени расчетные данные о зависимости тормозной способности углерода  $(-\frac{\Delta E}{\Delta x})_{q \rightarrow q}$  от толщины мишени  $t$  для ионов кислорода с начальной энергией  $E_0 = 16$  МэВ; точки — экспериментальные данные из работы [9]

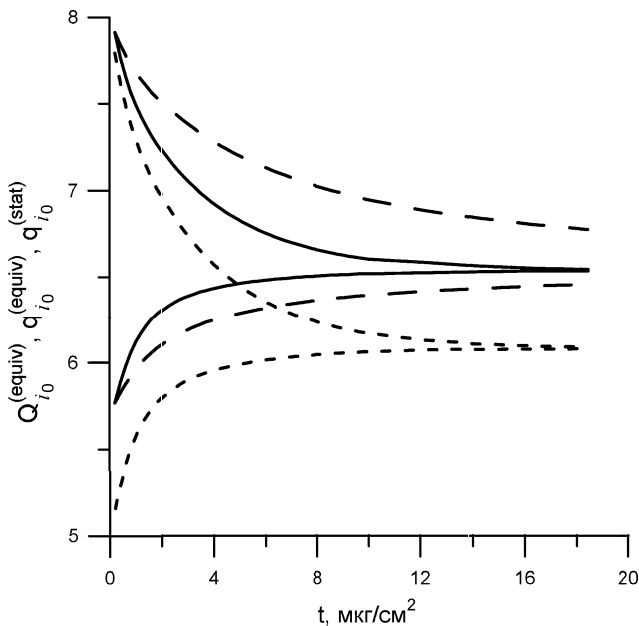


Рис. 4. Средние заряды  $q_{i_0}^{(stat)}(t)$  (линии из коротких штрихов),  $q_{i_0}^{(equiv)}(t)$  (сплошные линии) и  $Q_{i_0}^{(equiv)}(t)$  (линии из длинных штрихов) ионов кислорода с начальной энергией  $E_0 = 16$  МэВ при прохождении тонкой углеродной мишени ( $i_0 = 5$  — возрастающие,  $i_0 = 8$  — убывающие кривые)

Для приложений особенно интересен вопрос о том, как ведут себя средние заряды  $q_{i_0}^{(stat)}(t)$ ,  $q_{i_0}^{(equiv)}(t)$  и  $Q_{i_0}^{(equiv)}(t)$  пучка ионов на начальной стадии их торможения. Из рис. 4 видно, что их изменение по мере пройденного ионами расстояния лишь только в общих чертах согласуется с эмпирическим законом

$$q(t) = q(\infty) - (q(\infty) - q(t=0)) \exp(-t/\tau),$$

к которому нередко обращаются на практике (см., напр., [11]). В действительности этот закон сложнее, и равновесие достигается для каждого из рассматриваемых зарядов по-разному. Особо отметим существенное различие между эквивалентными зарядами  $q_{i_0}^{(equiv)}(t)$  и  $Q_{i_0}^{(equiv)}(t)$ .

### Заключение

Влияние работ группы В.С. Николаева на развитие физики взаимодействия быстрых ионов с веществом прослеживается вплоть до исследований самого последнего времени. Это относится и к достигнутому к настоящему времени прогрессу в едином теоретическом описании торможения и перезарядки многозарядных ионов в предравновесном режиме прохождения через вещество.

Авторы благодарны Я.А. Теплоу за обсуждение.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 00-02-17207 и 01-02-06248).

### Литература

1. Bohr N. // Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1948. **18**(8) (Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество. М.: ИЛ, 1950).
2. Николаев В.С. // УФН. 1965. **85**. С. 679.
3. Теплова Я.А., Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1962. **42**. С. 44.
4. Winterbon K.B. // Nucl. Instrum. and Meth. 1977. **144**. P. 311.
5. Sigmund P. // Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. 1992. **B69**. P. 113.
6. Балашов В.В., Бибииков А.В., Бодренко И.В. // ЖЭТФ. 1997. **111**. P. 2226.
7. Landau L. // J. of Phys. (USSR). 1944. **8**. P. 201.
8. Barkas W.H., Dyer N.J., Neckmann H.H. // Phys. Rev. Lett. 1963. **11**. P. 26.
9. Rosner B., Datz S., Wu W. et al. // Phys. Rev. 1998. **A57**. P. 2737.
10. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. N.Y.: Pergamon Press, 1985.
11. Garcia-Molina R., Heredia-Avalos S. // Phys. Rev. 2001. **A63**. P. 044901.

Поступила в редакцию  
19.12.01