

УДК 539.186

МЕТОД РАСЧЕТА НЕРАВНОВЕСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕГКИХ ИОНОВ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ТОНКИЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ПЛЕНКИ

© 2014 г. Ю. А. Белкова, Я. А. Теплова

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова,
Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына
E-mail: teplova@anna19.sinp.msu.ru

Предложен метод расчета зарядовых фракций, средних зарядов, полуширины и скошенности зарядового распределения в пучке ионов при прохождении тонких органических пленок до наступления зарядового равновесия. Представлены расчеты для ионов азота с различными начальными скоростями $V = (8-12) \cdot 10^8$ см/с. Проведены оценки потерь энергии ионов в зависимости от начального зарядового состояния и скорости налетающих ионов.

DOI: 10.7868/S0367676514060076

ВВЕДЕНИЕ

При прохождении быстрых ионов через вещество происходят процессы перезарядки, в результате которых в достаточно толстой мишени устанавливается зарядовое равновесие. Основными характеристиками ионного пучка в этом случае удобно считать средний равновесный заряд $\bar{i} = \sum_i i \cdot F_i$ и полуширину зарядового распределения $d = \sqrt{\sum_i (i - \bar{i})^2 \cdot F_i}$, которые определяют потери энергии и стрэгглинг энергетических потерь ионов в веществе. В том случае, когда равновесное зарядовое распределение не является симметричным (гауссовым), рассматривается также скошенность $s = \left[\sum_i (i - \bar{i})^3 \cdot F_i \right] / d^3$. Эти параметры не зависят от начального зарядового состояния ионов в пучке, однако могут существенно различаться для различных значений заряда ядра налетающего иона Z , заряда ядра мишени Z_t и скорости иона V [1].

В настоящее время опубликовано несколько обзоров, в которых приведены величины равновесных параметров, а также полуэмпирические соотношения для их определения при некоторых комбинациях ион–мишень и различной энергии [2, 3]. Однако единые теоретические подходы к описанию процессов перезарядки ионов в достаточно широком диапазоне зарядов и скоростей отсутствуют, что связано со сложностью и многообразием процессов, происходящих при взаимодействии многоэлектронных ионов с веществом.

Кроме того, в последнее время отмечается возрастание интереса к процессам торможения ионов

в тонких пленках. В этом случае ионы не успевают достичь зарядового равновесия, и параметры торможения могут существенно зависеть от начального заряда налетающего иона при прохождении первых нескольких атомных слоев (сотен нанометров) [4].

В данной работе на основе экспериментальных данных предложен полуэмпирический метод, позволяющий рассчитывать величины зарядовых фракций, среднего заряда, полуширины и скошенности зарядового распределения в ионном пучке, а также потери энергии ионов в зависимости от начального зарядового состояния и толщины мишени до наступления зарядового равновесия.

МЕТОД РАСЧЕТА

Предложенный метод основан на использовании известного двухкомпонентного приближения, которое успешно применяется при описании прохождения быстрых ионов через вещество, когда в пучке доминируют компоненты с $i = Z$ и $i = Z - 1$. Для ионов средней энергии, однако, чаще реализуется случай, когда несколько фракций имеют значительную величину после достижения равновесия, что видно из экспериментальных данных [5], приведенных в табл. 1.

В данной работе предложено описание установления зарядового равновесия на основе единого подхода для различного количества зарядовых фракций в ионном пучке, который позволяет записать основные соотношения следующим образом [6]:

$$F_i = F_{i\infty} + (F_{i0} - F_{i\infty}) \cdot \exp[-\beta t], \quad (1)$$

$$\bar{i} = \bar{i}_{eq} + (i_0 - \bar{i}_{eq}) \cdot \exp[-\beta t], \quad (2)$$

$$d = d_{eq} \{1 - \exp[-\beta t] + \frac{(i_0 - \bar{i}_{eq})^2}{d_{eq}^2} \exp[-\beta t] (1 - \exp[-\beta t])\}^{1/2}, \quad (3)$$

$$s = \frac{s_{eq} - \frac{(i_0 - \bar{i}_{eq})}{d_{eq}} \cdot \exp(-\beta t) \cdot \left(3 - \frac{(i_0 - \bar{i}_{eq})^2}{d_{eq}^2} (1 - 2 \exp(-\beta t))\right)}{(1 - \exp(-\beta t))^{1/2} \left(1 + \frac{(i_0 - \bar{i}_{eq})^2}{d_{eq}^2} \exp(-\beta t)\right)^{3/2}}. \quad (4)$$

Для случая двух компонент в ионном пучке коэффициент β одинаков для обеих зарядовых компонент и равен сумме сечений потери и захвата электрона [1]. В случае трехкомпонентной системы представление (1) возможно, если поведение двух фракций F_i и F_j в зависимости от t подобно (обе фракции стремятся к нулю при $t \rightarrow 0$ и монотонно возрастают при увеличении t). Тогда одну из фракций можно приближенно представить в виде $F_i(t) = \alpha_{ij} F_j(t)$. Величина α_{ij} считается не зависящей от толщины мишени t и определяется как $\alpha_{ij} = F_{i\infty}/F_{j\infty}$. При этом значения F_i , α_{ij} и β зависят от начального значения заряда иона:

1) в начальный момент в пучке присутствует только фракция F_1 : $F_{10} = 0$, $F_{20} = 0$, $F_{30} = 1$, тогда

$$F_{1\infty} = \frac{\sigma_{21}/(1 + \alpha_{32})}{\sigma_{12} + \sigma_{21}/(1 + \alpha_{32})},$$

$$F_{2\infty} = \frac{\sigma_{12}/(1 + \alpha_{32})}{\sigma_{12} + \sigma_{21}/(1 + \alpha_{32})}, \quad F_{3\infty} = \alpha_{32} F_{2\infty};$$

$$\beta = \sigma_{12} + \sigma_{21}/(1 + \alpha_{32});$$

2) в начальный момент в пучке присутствует только фракция F_2 : $F_{10} = 0$, $F_{20} = 1$, $F_{30} = 0$, тогда

$$F_{1\infty} = \frac{\sigma_{21}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1 + \alpha_{31})},$$

$$F_{2\infty} = \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1 + \alpha_{31})}, \quad F_{3\infty} = \alpha_{31} F_{1\infty}, \quad (5)$$

$$\beta = \sigma_{12} + \sigma_{21}(1 + \alpha_{31});$$

3) в начальный момент в пучке присутствует только фракция F_3 : $F_{10} = 0$, $F_{20} = 1$, $F_{30} = 0$, тогда

$$F_{3\infty} = \frac{\sigma_{23}/(1 + \alpha_{12})}{\sigma_{32} + \sigma_{23}/(1 + \alpha_{12})},$$

$$F_{2\infty} = \frac{\sigma_{32}/(1 + \alpha_{12})}{\sigma_{32} + \sigma_{23}/(1 + \alpha_{12})}, \quad F_{1\infty} = \alpha_{12} F_{2\infty},$$

$$\beta = \sigma_{32} + \sigma_{23}/(1 + \alpha_{12}).$$

Полученные результаты могут быть легко обобщены на большее количество зарядовых компонент в ионном пучке.

Отметим, что выражения (1) и (2) использовались в работе [7] для проведения оценок F_i и $\bar{i}$, при этом коэффициент β подбирался из условия соответствия зарядовых фракций и средних зарядов экспериментальным данным. В настоящей работе все параметры могут быть рассчитаны на основе данных о сечениях потери и захвата электрона.

Знание величин зарядовых фракций и средних зарядов $\bar{i}(t)$ ионов позволяет описать торможение ионов за счет взаимодействия с электронной подсистемой мишени S_e , используя $\bar{i}^2$ как масштабный фактор для известной тормозной способности протонов: $S_e(t) = S_p \bar{i}^2(t)$. Если предположить, что зависимость $\bar{i}(t)$ определяется в основном быстро меняющейся экспоненциальной функцией в (2), и считать S_p постоянной, то легко полу-

Таблица 1. Экспериментальные данные о равновесных зарядовых фракциях F_i ионов азота после прохождения целлулоидной пленки, а также значения средних зарядов $\bar{i}_{eq}$ и полуширины зарядового распределения d_{eq} [5]

$V, 10^8$ см/с	F_0	F_1	F_2	F_3	F_4	F_5	F_6	F_7	$\bar{i}_{eq}$	d_{eq}
3.04	0.06	0.31	0.43	0.18	0.02				1.79	0.875
4.11	0.01	0.15	0.45	0.33	0.06				2.28	0.83
5.69		0.02	0.14	0.45	0.34	0.05			3.26	0.83
7.02			0.03	0.26	0.50	0.20	0.01		3.90	0.78
7.91				0.14	0.50	0.32	0.04		4.26	0.74
9.15				0.05	0.38	0.50	0.07		4.59	0.69
11.64				0.01	0.13	0.58	0.25	0.03	5.16	0.64

Таблица 2. Средний заряд $\bar{i}$, полуширина d и скошенность s зарядового распределения ионов N^{i+} с различными начальными зарядами i_0 в зависимости от толщины целлюлоидной мишени t . Скорость ионов $V = 8 \cdot 10^8$ см/с. Расчеты проведены на основе (2)–(4). Звездочкой * отмечены экспериментальные данные [10]

$t, 10^{16}$ ат./см ²	$i_0 = 3$			$i_0 = 4$			$i_0 = 5$		
	$\bar{i}$	d	s	$\bar{i}$	d	s	$\bar{i}$	d	s
1	3.50	0.76	0.84	4.13	0.54	0.009	4.77	0.54	–1.96
3	3.98	0.84	–0.07	4.23	0.70	–0.36	4.50	0.70	–0.86
4*	4.12	0.63	0.31	4.20	0.64	–0.16	4.34	0.65	–0.24
5	4.16	0.79	–0.32	4.25	0.73	–0.39	4.37	0.73	–0.58
7.6*	4.22	0.64	–0.24	4.24	0.65	–0.35	4.28	0.65	–0.47
9.2*	4.17	0.65	–0.15	4.18	0.65	–0.20	4.25	0.65	–0.37
10	4.25	0.75	–0.39	4.26	0.74	–0.39	4.28	0.74	–0.37

Таблица 3. Средний заряд $\bar{i}$, полуширина d и скошенность s зарядового распределения ионов N^{i+} с различными начальными зарядами i_0 в зависимости от толщины целлюлоидной мишени t . Скорость ионов $V = 12 \cdot 10^8$ см/с. Расчеты проведены на основе (2)–(4). Звездочкой * отмечены экспериментальные данные [10]

$t, 10^{16}$ ат./см ²	$i_0 = 4$			$i_0 = 5$			$i_0 = 6$		
	$\bar{i}$	d	s	$\bar{i}$	d	s	$\bar{i}$	d	s
1	4.45	0.92	0.46	5.05	0.45	0.16	5.74	0.83	–0.50
3	4.89	0.74	0.13	5.09	0.60	–0.08	5.43	0.74	–0.55
3.2*	4.84	0.65	0.06	4.93	0.59	0.12	5.35	0.66	–0.18
5	5.03	0.67	–0.05	5.10	0.62	–0.11	5.27	0.60	–0.35
6.4*	4.95	0.60	0.07	4.97	0.60	0.08	5.24	0.67	–0.30
7	5.07	0.64	–0.07	5.10	0.62	–0.11	5.16	0.65	–0.17
9.6*	5.03	0.63	–0.08	5.10	0.61	–0.28	5.14	0.64	–0.18
10	5.10	0.63	–0.15	5.10	0.62	–0.11	5.13	0.64	–0.13

чить аналитическое выражение для потерь энергии ионов в веществе [8]:

$$\Delta E = \int_0^t S_e(t) dt = S_{eq} t + S_{eq} \left[\frac{2}{\beta} \left(\frac{i_0}{i_{eq}} - 1 \right) (1 - \exp(-\beta t)) + \frac{1}{2\beta} \left(\frac{i_0}{i_{eq}} - 1 \right)^2 (1 - \exp(-2\beta t)) \right], \quad (6)$$

$$S_{eq} = S_p \bar{i}_{eq}^2.$$

Полученное выражение позволяет исследовать отклонение величины потерь энергии от равновесного значения при малых толщинах мишени. Толщину мишени, для которой подобное рассмотрение представляет интерес, также можно оценить на основе предложенного метода [7].

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На основе (1)–(5) были проведены расчеты зарядовых фракций, средних зарядов, полуширины и скошенности зарядового распределения для ионов азота со скоростями $V = 8 \cdot 10^8$ см/с и $V = 12 \cdot 10^8$ см/с в зависимости от толщины мишени и начального зарядового состояния ионов. В расчетах использовались экспериментальные данные о рав-

новесных зарядовых фракциях ионов азота, приведенные в табл. 1, а также информацию о сечениях потери и захвата электрона ионами [9]. Так для $V = 8 \cdot 10^8$ см/с: $\sigma_{43} = 0.11$, $\sigma_{54} = 0.25$, $\sigma_{34} = 0.43$, $\sigma_{45} = 0.18$ в единицах 10^{-16} см². Для $V = 12 \cdot 10^8$ см/с: $\sigma_{54} = 0.12$, $\sigma_{65} = 0.24$, $\sigma_{45} = 0.44$, $\sigma_{56} = 0.10$ в тех же единицах.

Результаты расчетов параметров зарядовых распределений представлены в табл. 2 и 3 совместно с данными эксперимента [10]. Анализ приведенных результатов показывает, что рассчитанные величины средних зарядов соответствуют экспериментальным. Для полуширины зарядового распределения наблюдается качественное соответствие расчетов и экспериментальных данных. Скошенность является параметром, наиболее чувствительным к выбору приближения, в том числе и к ограничению количества рассматриваемых компонент, поэтому для некоторых рассмотренных случаев рассчитанные и экспериментальные значения скошенности различаются существенно.

На рис. 1 представлены зарядовые фракции для ионов N со скоростью $V = 8 \cdot 10^8$ см/с и начальными зарядовыми состояниями $i_0 = 3$ и $i_0 = 5$. Приведенные данные показывают, что при малых толщинах мишени зарядовые составы пучка

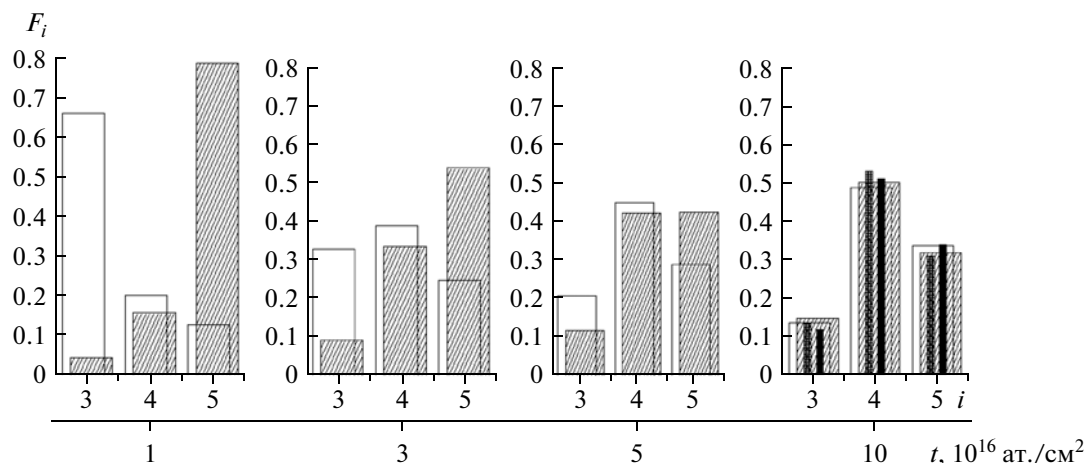


Рис. 1. Зарядовые фракции ионов N^{i+} в зависимости от толщины мишени (целлулоид) и начального заряда ионов. Скорость ионов $V = 8 \cdot 10^8$ см/с. $\square$ – расчеты и штриховка – экспериментальные данные [10] для $i_0 = 3$, штриховка – расчеты и $\blacksquare$ – экспериментальные данные [10] для $i_0 = 5$.

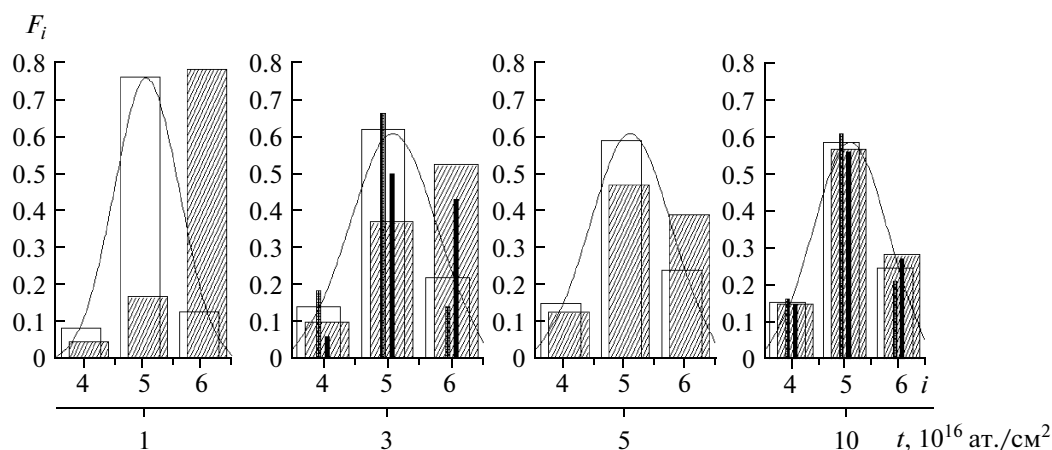


Рис. 2. Зарядовые фракции ионов N^{i+} в зависимости от толщины мишени (целлулоид) и начального заряда ионов. Скорость ионов $V = 12 \cdot 10^8$ см/с. $\square$ – расчеты и штриховка – экспериментальные данные [10] для $i_0 = 5$, штриховка – расчеты и $\blacksquare$ – экспериментальные данные [10] для $i_0 = 6$, сплошные линии – расчеты, проведенные согласно распределению Гаусса со значениями среднего заряда и полуширины распределения из табл. 3.

ионов существенно различны. По мере прохождения ионного пучка через вещество величина зарядовых фракций изменяется за счет процессов перезарядки, и при $t = 10^{15}$ атом/см² формируется равновесное зарядовое распределение, не зависящее от начального зарядового состояния. Расчеты величины зарядовых фракций совпадают с экспериментальными значениями.

На рис. 2 приведены зарядовые фракции для ионов N со скоростью $V = 12 \cdot 10^8$ см/с и различными начальными зарядовыми состояниями. Если начальный заряд ионов $i_0 = 5$, что близко к равновесному среднему заряду $\bar{i}_{eq} = 5.1$, то зарядовое распределение в пучке ионов близко к симметричному и удовлетворительно описывается распределением Гаусса по всей толщине мишени.

При $i_0 = 6$ зарядовое распределение асимметрично при малых толщинах мишени вплоть до достижения зарядового равновесия. Необходимо отметить, что асимметрию зарядовых распределений рассматривали в ряде работ для равновесной области [11, 12]. Изменение (уменьшение) асимметрии зарядового распределения по мере прохождения пучка через вещество, которое можно проследить по рис. 2, представляет собой открытую тему для теоретических исследований.

При описании потерь энергии ионов в тонких пленках до установления зарядового равновесия различия начального зарядового состояния ионного пучка могут привести к заметному изменению величины потерь энергии [4]. Предложенный метод позволяет исследовать это различие аналитически. На рис. 3 представлены результаты

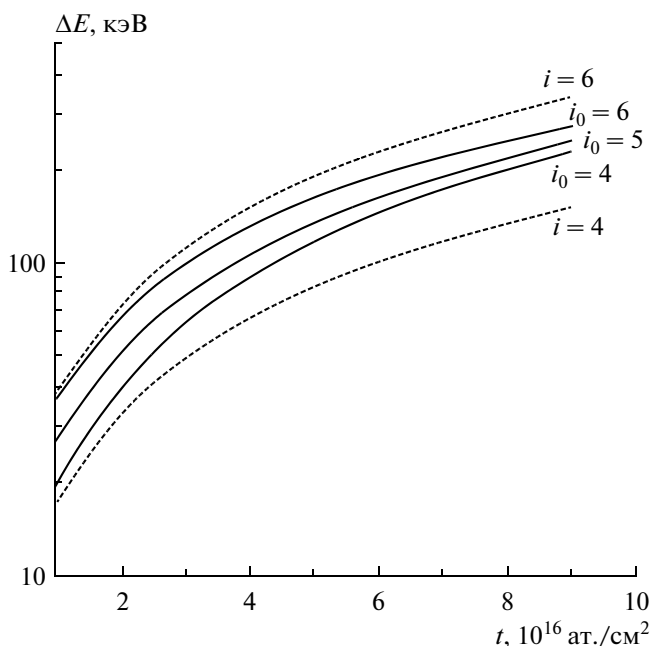


Рис. 3. Потери энергии ΔE ионов N^{i+} в целлюлоиде в зависимости от толщины мишени t . Скорость ионов $V = 12 \cdot 10^8$ см/с. Сплошные линии — расчеты данной работы с учетом зависимости средних зарядов от толщины мишени, пунктирные линии — расчеты для “замороженных” зарядов ионов.

расчетов потерь энергии ионов N со скоростью $V = 12 \cdot 10^8$ см/с в целлюлоиде, полученные при постоянных значениях зарядов ионов (приближение “замороженных состояний”) и с помощью (6). Из рисунка видно, что при $t \leq 10^{16}$ атом/см² результаты расчетов, полученные для “замороженных состояний” и в данном приближении (6), практически совпадают и отличаются от равновесных [13]. При увеличении толщины мишени представленные расчеты (6) расходятся с приближением “замороженных состояний” и стремятся к равновесным, что позволяет предположить качественное соответствие результатов предложенного метода и экспериментальных данных, наблюдаемых при больших толщинах мишеней. Подобное поведение потерь энергии объясняется изменением среднего заряда в ионном пучке вплоть до установления равновесного зарядового состояния. Данный метод успешно использовался в [8] для описания экспериментальных данных по потерям энергии, зависящим от начального заряда ионов [14].

ВЫВОДЫ

Представленный в данной работе метод позволяет приближенно, в простой аналитической форме описать зарядовые фракции, средний заряд, полуширину и скошенность зарядового распределе-

ния в том случае, когда в ионном пучке присутствуют в основном три зарядовые фракции, что характерно для области средних энергий ионов. Возможно обобщение предложенного подхода на случай более сложного состава ионного пучка [9].

До установления зарядового равновесия параметры зарядового распределения зависят не только от толщины мишени, но и от начальных зарядов налетающих ионов. Сравнение полученных результатов с данными эксперимента для случая прохождения ионов N через целлюлоидную мишень показывает их качественное совпадение.

Использование данного метода позволяет исследовать потери энергии при прохождении ионов через тонкие мишени до наступления зарядового равновесия с учетом различия в потерях энергии ионов с $i_0 > \bar{i}_{eq}$ и $i_0 < \bar{i}_{eq}$.

В предложенном методе расчеты основаны на информации о величинах сечений перезарядки, равновесных зарядовых фракций и равновесных потерь энергии, которые известны для большого числа налетающих ионов и мишеней в широком диапазоне энергии. Это позволяет использовать предложенный метод для описания прохождения ионных пучков через тонкие пленки в том случае, когда экспериментальные данные о неравновесных характеристиках ионов отсутствуют.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аллисон С., Гарсиа-Муньос М. // Атомные и молекулярные процессы / Под ред. Бейтса Д. М.: Мир, 1964. С. 624.
2. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M. et al. // Research Report, NIFS-Data-10. Nagoya, Japan. 1991.
3. Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. № 3.44. P. 465.
4. Schiwietz G., Czerski K., Roth M. et al. // Nucl. Instrum. Methods. B. 2004. V. 225. P. 4.
5. Николаев В.С., Фатеева Л.Н., Дмитриев И.С., Теплова Я.А. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 965.
6. Дмитриев И.С., Николаев В.С. // ЖТФ. 1993. Т. 63. Вып. 1. С. 122.
7. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. № 6. С. 772; Belkova Yu.A., Teplova Ya.A. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2012. V. 76. № 6. P. 674.
8. Belkova Yu.A., Teplova Ya.A. // Rad. Eff. 2013. V. 168. № 5. P. 365.
9. Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A. et al. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 2010. V. 96. P. 85.
10. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Препринт НИИЯФ МГУ. № 2011-14/878. 2011. 62 С.
11. Baudinet-Robinet Y. // Nucl. Instrum. Methods. 1981. V. 190. P. 197.
12. Shima K., Ishihara T., Miyoshi T. et al. // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. № 4. P. 2162.
13. Теплова Я.А., Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н. // ЖЭТФ. 1962. Т. 2. С. 44.
14. Blazevic A., Bohlen H.G., von Oertzen W. // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. 032901.