

УДК 539.186

ТРЕХКОМПОНЕНТНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ПРИ ОЦЕНКЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ЗАРЯДОВЫХ ФРАКЦИЙ ИОНОВ БОРА И АЗОТА ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ТОНКИЕ ПЛЕНКИ

© 2013 г. Ю. А. Белкова, Я. А. Теплова

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

Поступила в редакцию 17.07.2012 г.

На основе трехкомпонентного приближения получены аналитические выражения для неравновесных зарядовых фракций и средних зарядов ионов в зависимости от толщины мишени. Проведены расчеты для ионов B^{i+} и N^{i+} со скоростями 12×10^8 см/с ($E = 0.75$ МэВ/нуклон) при прохождении их через тонкие органические пленки (целлULOид). Результаты расчетов совпадают с экспериментальными данными в пределах точности измерений (2–5%).

DOI: 10.7868/S0207352813030074

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в связи с развитием нанотехнологий отмечается возрастание интереса к процессам, происходящим в тонких пленках. Известно, что при прохождении быстрых ионов через вещество потеря и захват электронов приводят к изменению величины зарядовых фракций в ионном пучке. При этом равновесное зарядовое распределение устанавливается в том случае, если слой вещества достаточно толстый. Тогда средний равновесный заряд \bar{i}_{eq} является удобным параметром для описания процесса торможения, так как не зависит от начального заряда налетающего иона i_0 . Напротив, при прохождении через тонкие пленки быстрые ионы, как правило, не успевают достичь состояния зарядового равновесия, и энергетические потери существенно изменяются в зависимости от i_0 [1]. Поэтому более подробное исследование неравновесных зарядовых распределений является актуальным как для описания торможения ионов в тонких пленках, так и для оценки толщин пленок, при которых отклонение зарядового распределения от равновесного является существенным и должно быть учтено.

В настоящее время опубликовано несколько обзоров, в которых приведены величины равновесных зарядовых фракций и средних равновесных зарядов ионов различной энергии, например [2, 3], а также полуэмпирические соотношения для определения средних равновесных зарядов ионов с различными значениями заряда ядра Z , заряда ядра мишени Z , и скорости иона V [4, 5]. Однако для неравновесных зарядовых состояний легких ионов ($Z \leq 10$) существуют лишь отдельные экспериментальные исследования [1, 6–8], без последовательного теоретического описания.

В работах [9, 10] предложен полуэмпирический метод оценки неравновесных зарядовых фракций, основанный на экспериментальных данных о прохождении легких ионов через пленки углерода и целлULOида.

В данной работе предлагается аналитический метод расчета неравновесных зарядовых фракций и средних зарядов ионов в зависимости от толщины мишени на основе трехкомпонентного приближения, применимость которого подтверждается сравнением с данными экспериментов по прохождению ионов B^{i+} и N^{i+} через органические пленки (целлULOид).

МЕТОД РАСЧЕТА

Известно, что изменение зарядового состава моноэнергетического ионного пучка, проходящего через газовую мишень, описывается системой дифференциальных уравнений:

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

где заряд иона i может принимать значения от -1 до Z . Величины зарядовых фракций F_i меняются в соответствии с изменением толщины мишени t , а сечения потери или захвата электрона σ_{ik} относятся к невозбужденным ионам и считаются постоянными. Аналитическое решение (1) возможно в том случае, если при рассмотрении ионного пучка можно ограничиться небольшим числом зарядовых компонент.

Для двухкомпонентной системы решение хорошо известно [11]:

$$F_i = F_{i\infty} + (F_{i0} - F_{i\infty}) \exp[-(\sigma_{12} + \sigma_{21})t], \quad (2)$$

где F_{i0} – начальное значение i -ой зарядовой компоненты, а $F_{i\infty}$ – значения зарядовых компонент после достижения равновесия (при достаточно больших значениях t), которые могут быть выражены через сечения σ_{ik} :

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

Для среднего заряда $\bar{i} = \sum_i iF_i(t)$ с учетом (2) можно получить выражение:

$$\bar{i} = \bar{i}_{\text{eq}} + (i_0 - \bar{i}_{\text{eq}}) \exp[-(\sigma_{12} + \sigma_{21})t], \quad (4)$$

где i_0 – начальный заряд иона, а \bar{i}_{eq} – средний заряд ионов в ионном пучке после установления зарядового равновесия.

Двухкомпонентное приближение может успешно применяться при описании прохождения быстрых ионов, когда в пучке доминируют компоненты с $i=Z$ и $i=Z-1$ [9]. Энергетическая область применимости этого приближения зависит от заряда ядра налетающего иона. Так, для протонов энергия должна превышать сотни кэВ, для ионов Не – 1 МэВ/нуклон, для более тяжелых ионов – несколько МэВ/нуклон. Для ионов меньшей энергии, как видно из экспериментальных данных для равновесных состояний, чаще реализуется случаи, когда три равновесные фракции сравнимы по величине [2, 3, 12].

Для трехкомпонентной системы аналитическое решение также возможно при некотором соотношении между сечениями потери и захвата электрона, однако оно более громоздко и неудобно для анализа [11]. Решение задачи значительно упрощается, если поведение двух фракций в зависимости от t подобно (обе фракции стремятся к нулю при $t \rightarrow 0$ и монотонно возрастают при увеличении t).

Рассмотрим случай, когда три компоненты в ионном пучке значительны после достижения равновесия, причем наибольшую величину имеет компонента F_2 . Пусть в начальный момент в пучке присутствует только F_2 : $F_{20} = 1$, $F_{10} = 0$, $F_{30} = 0$. Представим фракцию F_3 в виде $F_3(t) = \alpha F_1(t)$, при этом значение α считается не зависящим от толщины мишени t и определяется как $\alpha = \frac{F_{3\infty}}{F_{1\infty}}$. Тогда

решение системы уравнений (1) можно получить в аналитическом виде:

$$\begin{aligned} F'_2 &= \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha)} + \frac{\sigma_{21}(1+\alpha)}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha)} \times \\ &\quad \times \exp[-(\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha))t], \\ F'_1 &= \frac{\sigma_{21}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha)} (1 - \exp[-(\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha))t]), \\ F'_3 &= \alpha F'_1. \end{aligned} \quad (5)$$

Вводя обозначения

$$F'_{1\infty} = \frac{\sigma_{21}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha)}, \quad F'_{2\infty} = \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha)}, \quad (6)$$

$$F'_{3\infty} = \alpha F'_{1\infty}, \quad \beta = \sigma_{12} + \sigma_{21}(1+\alpha),$$

можно зарядовые фракции (5) и средний заряд представить аналогично случаю двухкомпонентной системы:

$$F'_i = F'_{i\infty} + (F'_{i0} - F'_{i\infty}) \exp[-\beta t], \quad (7)$$

$$\bar{i}' = \bar{i}'_{\text{eq}} + (i_0 - \bar{i}'_{\text{eq}}) \exp[-\beta t]. \quad (8)$$

Несложно показать, что решение системы (1) для других начальных условий также можно привести к виду (7) и (8), при этом значения $F'_{i\infty}$, α и β зависят от начального заряда иона. Если в начальный момент в пучке присутствует только фракция F_1 : $F_{10} = 1$, $F_{20} = 0$, $F_{30} = 0$, в этом случае $F_3(t) = \alpha F_2(t)$, где $\alpha = \frac{F_{3\infty}}{F_{2\infty}}$, и получаем:

$$F'_{1\infty} = \frac{\sigma_{21}/(1+\alpha)}{\sigma_{12} + \sigma_{21}/(1+\alpha)}, \quad F'_{2\infty} = \frac{\sigma_{12}/(1+\alpha)}{\sigma_{12} + \sigma_{21}/(1+\alpha)}, \quad (9)$$

$$F'_{3\infty} = \alpha F'_{2\infty}, \quad \beta = \sigma_{12} + \sigma_{21}/(1+\alpha).$$

Если в начальный момент в пучке присутствует только фракция F_3 : $F_{10} = 0$, $F_{20} = 0$, $F_{30} = 1$, тогда $F_1(t) = \alpha F_2(t)$, где $\alpha = \frac{F_{1\infty}}{F_{2\infty}}$, и получаем:

$$F'_{3\infty} = \frac{\sigma_{23}/(1+\alpha)}{\sigma_{32} + \sigma_{23}/(1+\alpha)}, \quad F'_{2\infty} = \frac{\sigma_{32}/(1+\alpha)}{\sigma_{32} + \sigma_{23}/(1+\alpha)}, \quad (10)$$

$$F'_{1\infty} = \alpha F'_{2\infty}, \quad \beta = \sigma_{32} + \sigma_{23}/(1+\alpha).$$

Отметим, что выражения (7) и (8) использовались в работах [9, 10] для проведения оценок F_i и \bar{i} , при этом коэффициент β подбирался из условия соответствия экспериментальным данным и зависел от начального состояния налетающего иона. Предлагаемый в данной работе метод позволяет не подбирать, а рассчитывать F_i и \bar{i} в зависимости от толщины мишени, если известны значения равновесных зарядовых фракций и сечений потери и захвата электрона.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Метод использован для расчета неравновесных зарядовых фракций и средних зарядов ионов В и N при их прохождении через пленки целлULOИда. Рассматриваются ионы с $V = 12 \times 10^8$ см/с ($E = 0.75$ МэВ/нуклон), в этом случае в пучке ионов присутствуют три сравнимые по величине равновесные компоненты: $F_3 = 0.21$,

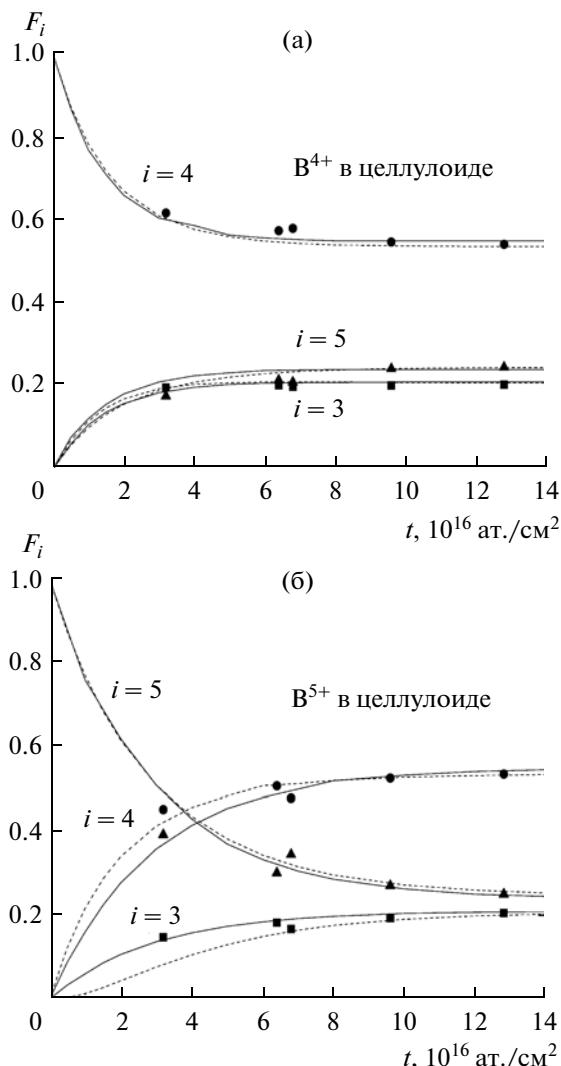


Рис. 1. Зарядовые фракции F_i ионов В в зависимости от толщины целлULOидной мишени t для различных значений начального заряда ионов: а – $i_0 = 4$, б – $i_0 = 5$. Скорость ионов 12×10^8 см/с. ■, ●, ▲ – экспериментальные данные, сплошные линии – результаты данной работы, пунктирные линии – расчет по системе уравнений (1).

$F_4 = 0.54$, $F_5 = 0.24$ для ионов В и $F_4 = 0.15$, $F_5 = 0.57$, $F_6 = 0.24$ для ионов N. Суммарный вклад остальных фракций в равновесном состоянии не превышает 5%. Экспериментальные значения F_i и сечения потери и захвата электрона σ_{ik} приведены в [12–15].

На рис. 1 и 2 представлены результаты расчетов неравновесных зарядовых фракций ионов В и N в зависимости от толщины целлULOидной мишени для различных начальных зарядов ионов. Расчеты проводились по формуле (7), причем для начальных зарядов $i_0 = 4$ ионов В и $i_0 = 5$ ионов N коэффициенты определялись по уравнению (6), а для начальных зарядов ионов В, $i_0 = 5$, и ионов N, $i_0 = 6$,

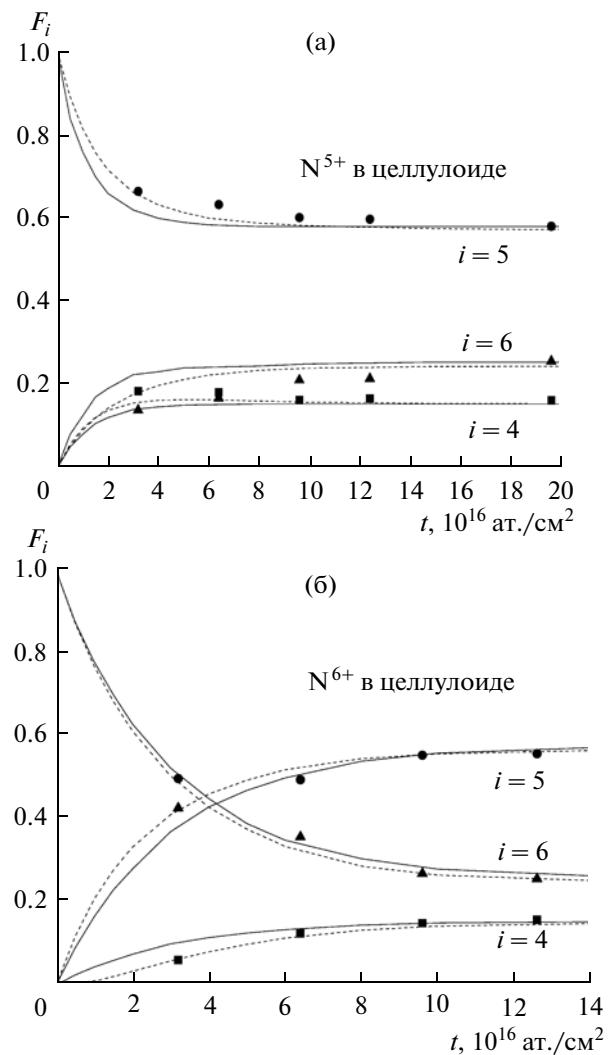


Рис. 2. Зарядовые фракции F_i ионов N в зависимости от толщины целлULOидной мишени t для различных значений начального заряда ионов: а – $i_0 = 5$, б – $i_0 = 6$. Скорость ионов 12×10^8 см/с. ■, ●, ▲ – экспериментальные данные, сплошные линии – результаты данной работы, пунктирные линии – расчет по системе уравнений (1).

коэффициенты определялись по (10). Для сравнения на рисунках также приведены результаты численного решения системы уравнений (1). Анализ показывает, что для рассмотренных ионов предложенное трехкомпонентное приближение (7) хорошо описывает данные эксперимента и соответствует результатам численного решения (1) при толщинах мишени $t > 6 \times 10^{16}$ ат./см². При меньших толщинах в некоторых случаях наблюдается отклонение как в сторону более быстрого установления зарядового равновесия, так и наоборот. Это может быть связано с некоторой неопределенностью в вычислении сечений перезарядки в конденсированной среде, поскольку время между

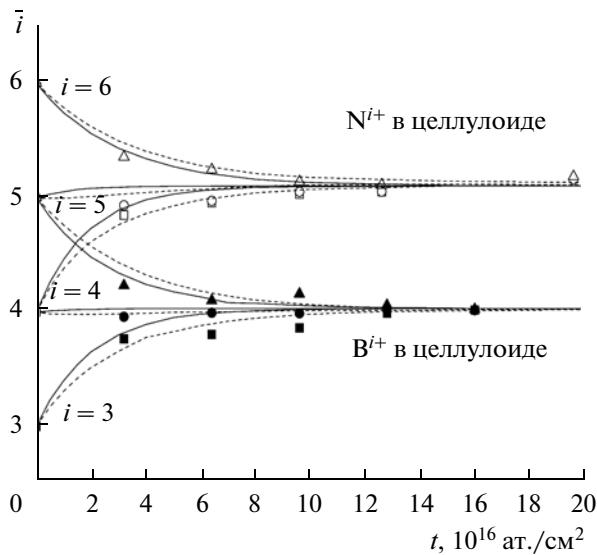


Рис. 3. Средние заряды ионов В и N в зависимости от толщины целлULOидной мишени для различных значений i_0 . Скорость ионов 12×10^8 см/с. ■, ●, ▲ — экспериментальные данные для ионов В, □, ○, Δ — экспериментальные данные для ионов N. Сплошные линии — результаты данной работы, пунктирные линии — расчет по системе уравнений (1).

двумя последовательными столкновениями между ионом и атомами мишени становится меньше, чем время жизни возбужденных состояний налетающей частицы, и значительная часть быстрых ионов участвует в процессах перезарядки, имея электроны в возбужденных состояниях. Таким образом, в твердой мишени сечения перезарядки усредняются по возбужденным состояниям налетающего иона, что затрудняет их анализ и требует введения некоторых "эффективных" величин. Поскольку коэффициенты в (6), (9) и (10) полностью определяются значениями сечений перезарядки, поведение зарядовых фракций оказывается весьма чувствительным к точности определения величины сечений, которая составляет 10–15% [15].

На рис. 3 приведены результаты расчетов неравновесного среднего заряда ионов В и N в зависимости от толщины целлULOидной мишени для различных начальных зарядов ионов. Расчеты, проведенные по формуле (8), успешно описывают данные эксперимента, причем в области малых толщин соответствие может быть даже лучше, чем для результатов численного решения (1), также представленных на рисунке. Отметим, что для ионов с начальными зарядами $i_0 < \bar{i}_{eq}$ равновесие наступает быстрее, чем для ионов с $i_0 > \bar{i}_{eq}$. Этот факт, установленный ранее экспериментально [16], не согласуется с результатами двухкомпонентного приближения, которое симметрично относительно \bar{i}_{eq} . В предложенном приближении коэффициент β в (8) в зависимости от

начального заряда ионов определяется выражениями (6), (9) или (10). Проведенные оценки показали, что для обоих рассмотренных ионов величина β максимальна при i_0 , близком к \bar{i}_{eq} ($i_0 = 4$ для ионов В и $i_0 = 5$ для ионов N), а при $i_0 > \bar{i}_{eq}$ имеет наименьшее значение, что обуславливает более медленное достижение равновесия.

ВЫВОДЫ

Предложенный в данной работе метод приближенного решения системы уравнений (1) применим в том случае, когда в ионном пучке присутствуют, в основном, три зарядовые фракции, а величина остальных фракций не превышает 5%. Подобный состав ионного пучка характерен для легких ионов средней энергии.

Выражения для неравновесных зарядовых фракций и средних зарядов ионов в зависимости от толщины мишени получены в простой аналитической форме, при этом учитывается различие в начальных зарядах ионов. Значения коэффициентов в выражениях (7) и (8) определяются величинами равновесных зарядовых фракций и сечений перезарядки, которые известны для большого числа налетающих ионов и мишеней в широком диапазоне энергии. Это позволяет использовать предложенный метод в том случае, когда экспериментальные данные о неравновесных зарядовых состояниях ионов отсутствуют, а после формирования зарядового равновесия в пучке установлено наличие трех компонент.

Сравнение полученных результатов с данными эксперимента для случая прохождения ионов В и N через целлULOидную мишень показывает, что расчеты, проведенные с помощью данного метода, качественно верно описывают зависимость зарядовых фракций и средних зарядов ионов от толщины мишени, а также отражают более медленное установление зарядового равновесия в том случае, когда начальный заряд ионов больше, чем \bar{i}_{eq} .

Предложенный метод удобен для анализа процессов, сопровождающих прохождение ионов через тонкие мишени. Так, например, он позволяет оценить толщину мишени, для которой зарядовое равновесие в пучке ионов нельзя считать установленным, а также более детально исследовать потери энергии, в том числе учесть зависимость потерь энергии от начального заряда ионов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Blazevic A., Bohlen H.G. and von Oertzen W. // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 032901.
2. Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44. № 3. P. 465.
3. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M., Tawara H. Equilibrium charge fraction of ions of $Z = 4\text{--}92$ (0.02–6 MeV/u) and $Z = 4\text{--}20$ (up to 40 MeV/u) emerging

- from a carbon foil // Research Report NIFS-Data 10. Nagoya: Japan, 1991. 83 P.
4. Дмитриев И.С., Николаев В.И. // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 615.
 5. Schiawietz G., Czerski K., Roth M. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2004. V. 225. P. 4.
 6. Woods C.J., Sofield C.J., Cowern N.E.B. et al. // J. Phys. B. 1984. V. 17. P. 867.
 7. Zaikov V.P., Kralkina E.A., Nikolaev V.S. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1988. V. 33. P. 202.
 8. Rosner B., Datz S., Wu W. et al. // Phys. Rev. A. 1998. V. 57. P. 2737.
 9. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2012. № 3. С. 10.
 10. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2012. Т. 76. № 6. С. 772.
 11. Аллисон С., Гарсиа-Муньос М. Захват и потеря электрона при высоких энергиях. // Атомные и молекулярные процессы. / Ред. Д. Бейтс. 1964. М.: Мир, С. 624.
 12. Дмитриев И.С., Николаев В.С. // ЖТФ. 1993. Т. 63. С. 122.
 13. Белкова Ю.А., Теплова Я.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2002. № 4. С. 39.
 14. Теплова Я.А., Белкова Ю.А. Равновесные и неравновесные зарядовые состояния легких ионов при прохождении через газовые и твердотельные мишени // Препринт. М.: НИИЯФ МГУ. № 2011-14/878. 2011. 62 С.
 15. Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A. et al. // Atomic Data and Nucl. Data Tables 2010. V. 96. P. 85.
 16. Dmitriev I.S., Zaikov V.P., Kralkina E.A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1986. V. 14. P. 515.

Three-Component Approximation for Evaluation of Nonequilibrium Charge Fractions of B and N Ions Passing through Thin Films

Yu. A. Belkova, Ya. A. Teplova

Analytical expressions for nonequilibrium charge fractions and mean charges depending on the target thickness are obtained on the basis of three components approximation. The calculations for B^{i+} и N^{i+} ions with velocity 12×10^8 cm/s ($E = 0.75$ MeV/ nucleon) passing through thin organic films (celluloid) were performed. The results of calculations coincide with experimental data within measurement accuracy (2–5%).