

На правах рукописи

Ковшов Дмитрий Константинович

**ПОЛУЭМПИРИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА
ЭЛЕКТРОННЫХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ ИОНОВ
В ПРОСТЫХ ВЕЩЕСТВАХ
И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ВЫЯВЛЕННЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ**

01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Автор:

Саров 2009

Работа выполнена в Федеральном государственном унитарном предприятии «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник
Фомушкин Эдуард Федорович
(ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
профессор
Ремизович Валерий Стефанович
(НИЯУ МИФИ)
доктор физико-математических наук
ведущий научный сотрудник
Сиротинин Евгений Иванович
(НИЯФ им. Д.В.Скобельцына
МГУ им. М.В.Ломоносова)

Ведущая организация: Физический институт им. П.Н.Лебедева
Российской академии наук

Защита состоится «16» декабря 2009 г. в «15:00» часов на заседании диссертационного совета Д212.130.07 в Московском инженерно-физическом институте (государственном университете) (МИФИ) по адресу:

115409, Москва, Каширское шоссе, 31, телефон (495) 324-84-98

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МИФИ

Автореферат разослан «13» ноября 2009 г.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном экземпляре, заверенный печатью организации

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук



С.Е.Улин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одной из главных характеристик прохождения частицы через вещество является величина энергии, потерянной частицей на единице пути. Знать ее необходимо для многих научных и прикладных задач (воздействие излучения на вещество, радиационная стойкость; обработка материалов при помощи пучков частиц – ионное плавление, ионное травление и др.; ионное легирование, в т.ч. полупроводников; пучковый нагрев плазмы; тяжело-ионный инерциальный термоядерный синтез; исследование материалов при помощи ионных пучков – методы RBS, SIMS, PIXE и др.; корпускулярная диагностика плазмы; измерение периода полураспада ядер методом DSA; преобразование пучков частиц фильтрами; разработка детекторов частиц; биологическое действие излучения, дозиметрия и защита от ионизирующих излучений; лучевая терапия).

Однако теории потерь энергии для всех энергий, представляющих практический интерес (0,01÷100 МэВ/а.е.м.), не существует; экспериментальные данные противоречат друг другу и содержат большие пробелы; а таблицы, формулы и компьютерные программы, полученные путем обобщения экспериментальных данных и интерполяции, опровергаются результатами новых экспериментов. Потребность в данных такого рода остается неудовлетворенной. Эта потребность и стимулировала проведение данной работы.

Выбор конкретной темы обусловлен следующими соображениями. Из всех частиц наибольший интерес представляют ионы, поскольку ионные пучки являются наиболее мощным средством корпускулярного воздействия на вещество и одним из основных средств корпускулярной диагностики. Из всех веществ наибольший интерес представляют простые, поскольку лишь на их основе можно изучать потери энергии в сложных веществах. Из всех видов потерь энергии наибольший интерес представляют электронные, в широком диапазоне энергий преобладающие над всеми остальными.

Объектом исследования являются электронные потери энергии атомарных ионов (от протона до ^{238}U) в неупорядоченном неионизованном простом веществе (от водорода до урана) в условиях равновесного распределения зарядовых состояний и произвольного направления иона на выходе. Не являются объектом исследования: потери энергии электрона, позитрона, μ -, π -, K -мезонов, нейтрона и антипротона; потери энергии молекулярных ионов и ионных кластеров; ядерные потери энергии; потери энергии в сложных веществах; потери энергии при каналировании; потери энергии в плазме; потери энергии ионов в чистом зарядовом состоянии; зависимость потерь энергии от толщины вещества; зависимость потерь энергии от выходного угла иона; распределение потерь энергии и страгглинг.

Предметом исследования является зависимость вышеуказанных потерь энергии от вещества (характеризуемого атомным номером Z_0), иона (характеризуемого атомным номером Z и атомной массой M) и его скорости (характеризуемой кинетической энергией на единицу массы $E = E/M$).

Цель исследования: получить формулу электронных потерь энергии иона в зависимости от Z_0 , Z и E , не противоречащую совокупности имеющихся экспериментальных данных.

Методологические основы. Исследование опиралось на следующие, общепринятые в настоящее время, представления о торможении ионов.

Существует несколько видов потерь энергии, различающихся механизмом ее передачи. Основные из них – электронные (в неупругих столкновениях, изменяющих состояние атома вещества) и ядерные (в упругих столкновениях).

Согласно схеме, восходящей к Линдхарду [1], шкала энергий делится на 4 характерные области – область медленных частиц; область максимума потерь; область быстрых частиц; релятивистская область, – в которых действуют разные эффекты, влияющие на процесс торможения. Положение границ между областями зависит от вещества и частицы.

В области быстрых частиц электронные потери энергии описываются формулой Бете [2]

$$\Sigma_3 = \Sigma_E Z_0 Z^2 \frac{v_B^2}{v^2} L(v), \quad L = \ln \frac{2m_e v^2}{I_0},$$

где Σ_3 – сечение электронных потерь энергии, отнесенное к 1 атому вещества; $\Sigma_E = 4\pi\hbar^2/m_e = 1,534 \cdot 10^{-37}$ Дж·м² = $9,577 \cdot 10^{-15}$ эВ·см² – константа, введенная нами для упрощения записи формул; v_B – боровская скорость; v – скорость частицы; L – безразмерная величина, называемая тормозным числом; I_0 – величина, характеризующая вещество и называемая средней энергией ионизации.

При незначительном видоизменении формула Бете распространяется и на релятивистскую область.

В области максимума потерь действуют эффекты, не учтенные в формуле Бете: зарядовые (частичная нейтрализация иона за счет захвата электронов из вещества), оболочечные (орбитальное движение электронов вещества) и нелинейные (возмущение волновых функций электронов вещества тормозящимся ионом; различают поправку Блоха, связанную с точным рассмотрением почти сингулярной части резерфордова сечения, и поправку Баркаша, обусловленную поляризацией атома вещества налетающим ионом). Количественной теории, учитывающей их все, не существует; имеются лишь выражения для поправок к формуле Бете на каждый из эффектов в отдельности. В настоящей работе решено было отказаться от использования этих поправок: заметно усложняя формулу, они лишь незначительно расширяют область ее применимости.

Численные расчеты и эксперименты свидетельствуют, что с убыванием скорости Σ_3 достигает максимума, а затем убывает. Зависимость Σ_3 от Z_0 становится немонотонной, обнаруживая периодичность, отчасти коррелирующую с положением вещества в таблице Менделеева. Зависимость от Z остается монотонной, но отклоняется от квадратичной.

В области медленных частиц три имеющиеся теории (Ферми-Теллера [3], Фирсова [4] и Линдхарда [5]) сходятся в том, что в пределе $v \rightarrow 0$ $\Sigma_3 \sim v$. Мы исходили из этого утверждения, несмотря на отдельные экспериментальные дан-

ные и теоретические соображения, ставящие его под сомнение.

В этой области, кроме периодичности потерь энергии по Z_0 , появляется периодичность по Z .

Благодаря очень большому отношению масс иона и электрона, электронные потери энергии иона при любой энергии (кроме ультрарелятивистского случая, в данной работе не рассматриваемого) не зависят от его массы.

При низких энергиях необходимо учитывать ядерные потери. Для их описания пользуются безразмерными величинами, введенными Линдхардом и Шарффом [5]. Зависимость безразмерных ядерных потерь от безразмерной энергии есть универсальная функция для всех частиц во всех веществах.

Все перечисленные факты и концепции были использованы для построения функции, описывающей зависимость потерь энергии иона от его энергии, а также от атомных номеров вещества и иона. В функцию был введен ряд параметров, значения которых были затем определены путем аппроксимации экспериментальных данных.

Этапы исследования

1. Сбор экспериментальных данных о потерях энергии ионов в простых веществах, опубликованных в мировой научной периодике. Приведение данных к единообразному виду, отбраковка инородных и грубо ошибочных данных.
2. Аппроксимация зависимости потерь энергии от энергии отдельно для каждой комбинации «вещество + частица».
3. Исследование зависимости параметров аппроксимации от атомных номеров вещества и частицы. Выявление закономерностей.
4. Окончательная аппроксимация зависимости $\Sigma(Z_0, Z, E)$ сразу для всех частиц во всех веществах.
5. Интерпретация полученных результатов.

Научная новизна. В ходе исследования были применены следующие новые методологические подходы:

1. Все параметры функции потерь энергии $\Sigma_9(E)$ для каждой комбинации «ве-

щество + частица» были физически осмысленными величинами.

2. Была изучена зависимость параметров от атомного номера частицы.
3. Вся имеющаяся совокупность данных аппроксимировалась совместно.
4. Соответствие формулы экспериментальным данным было проверено методами дисперсионного анализа.

Были получены следующие новые результаты:

1. Получена формула потерь энергии, адекватная экспериментальным данным в более широкой области значений Z_0 , Z и E , чем ранее существовавшие формулы и алгоритмы.
2. Полностью разделено влияние вещества и влияние частицы на потери энергии, в том числе в области медленных частиц, что до сих пор считалось принципиально невозможным.
3. Впервые периодичность потерь энергии объяснена исходя из оболочечного строения атома тормозящего вещества.

Практическая значимость

1. Полученная формула имеет большое значение для всех задач, связанных с прохождением ионов через вещество.
2. Пробелы в результатах (область неадекватности формулы; параметры, значения которых не удалось определить) указывают наиболее перспективные направления дальнейших экспериментальных исследований.
3. Выявленные закономерности изменения электронных потерь энергии в зависимости от атомных номеров вещества и частицы послужат материалом для развития теории торможения ионов в веществе.
4. Результаты, относящиеся к зависимости потерь энергии от атомного номера иона, могут быть использованы при изучении потерь энергии в сложных веществах.

На защиту выносятся:

1. Компиляция и статистический анализ экспериментальных данных по потерям энергии ионов в простых веществах.

2. Формула электронных потерь энергии ионов в простых веществах.
3. Оценка влияния зарядовых, оболочечных и нелинейных эффектов на потери энергии ионов промежуточных энергий.
4. Корреляция между осцилляциями потерь энергии ионов и периодичностью электронного строения атома тормозящего вещества.

Вклад автора. Все изложенные в работе результаты получены автором лично.

Апробация результатов и публикации. Результаты данной работы прошли апробацию:

- на семинаре «Полуэмпирическая формула электронных потерь энергии ионов в простых веществах» (ИЯРФ РФЯЦ-ВНИИЭФ, 24 января 2008 г.);
- на семинаре «Полуэмпирическая формула электронных потерь энергии ионов в простых веществах» (ИЛФИ РФЯЦ-ВНИИЭФ, 3 июня 2008 г.).

Они опубликованы в виде 5 статей в журнале «Вопросы атомной науки и техники. Серия Теоретическая и прикладная физика».

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы (525 наим.). Она содержит 15 таблиц и 47 рисунков. Общий объем текста, включая таблицы, рисунки и список литературы, составляет 167 страниц. К диссертации имеется 4 приложения общим объемом 120 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, очерчен круг явлений, составляющих объект исследования, сформулирована цель исследования, изложены его методологические основы, перечислены положения, выносимые на защиту, подчеркнута их новизна и практическая значимость.

Глава 1 «Экспериментальные данные и их обработка» содержит общую характеристику опубликованных в научной периодике экспериментальных данных по потерям энергии ионов в простых веществах; подробный перечень работ, сгруппированный по веществам, частицам и энергиям, вынесен в приложение. Общий объем данных составляет 17,8 тыс. точек. Приведены рисунки, показывающие наличие данных для отдельных веществ, частиц и энергий.

Остальная часть главы посвящена методике обработки этих данных.

Описаны предварительные преобразования, позволяющие свести все данные к единообразному виду. Выявлены 2 работы, результаты которых резко выпадают из общей картины; они исключены из дальнейшего рассмотрения.

Сформулированы 6 требований к функции, аппроксимирующей зависимость $\Sigma_s(E)$ для каждой комбинации «вещество + частица»: она должна быть непрерывной, гладкой и в каждой из 4 характерных энергетических областей вести себя в соответствии с теорией. В свете этих требований рассмотрены 15 аппроксимирующих функций, встречающихся в литературе, и с учетом их достоинств и недостатков сконструирована функция

Ошибка!

Здесь f_{\uparrow} и f_{\downarrow} – безразмерные функции, описывающие восходящий ($0 < E < E_{max}$) и нисходящий ($E_{max} < E < E_{zp}$) участки кривой; E_{max} и Σ_{max} – положение и величина максимума потерь; h_0 – параметр, определяющий поведение функции при $E \rightarrow 0$; E_{zp} – нижняя граница применимости формулы Бете; Σ_{zp} – значение потерь энергии в точке E_{zp} ; h_{zp} – параметр, определяющий производную в точке E_{zp} ; B и D – параметры, определяющие потери энергии в области быстрых частиц.

Функции $f_{\uparrow}(x,h)$ и $f_{\downarrow}(x,h)$ могут быть произвольными непрерывными и гладкими функциями, удовлетворяющими 3 условиям: при $h=\text{const}$ f монотонно возрастает по x от $f(0,h)=0$ до $f(1,h)=1$; при $x=0$ $\partial f(x,h)/\partial x=h$; при $x=1$ $\partial f(x,h)/\partial x=0$. Были выбраны функции

$$f_{\uparrow}(x;h)=\frac{hx}{1+(h-2)x+x^2}; \quad f_{\downarrow}(x;h)=\frac{hx(1-x/2)}{1+(h-2)x(1-x/2)}.$$

Из 8 параметров ($B, D, E_{zp}, \Sigma_{zp}, h_{zp}, E_{max}, \Sigma_{max}, h_0$) Σ_{zp} и h_{zp} определяются условиями непрерывности и гладкости в точке E_{zp} ; B задан формулой Бете и не подлежит варьированию; D пропорционален средней энергии ионизации, h_0 – коэффициенту электронного торможения медленного иона $k_{\text{э}}=(d\Sigma_{\text{э}}/d\sqrt{E})_{E=0}$:

$$D=\frac{I_0}{4m_e}; \quad h_0=\frac{\sqrt{E_{max}}}{\Sigma_{max}} k_{\text{э}}.$$

Таким образом, в качестве параметров аппроксимации выбраны $I_0, E_{zp}, E_{max}, \Sigma_{max}, k_{\text{э}}$. Все они имеют ясный физический смысл. Влияние разных параметров на аппроксимирующую функцию локализовано на разных участках энергетической шкалы, так что их погрешности будут слабо коррелированы друг с другом; это – важное достоинство для аппроксимирующей функции.

Далее введены функции, описывающие зависимость параметров от Z_0 и Z :

$$I_0=I_0(Z_0); \quad E_{zp}=k_{zp}D+E_{zp0}Z^{P_{zp}}; \quad E_{max}=E_{max0}(Z_0)Z^{P_{E_{max}}};$$

$$\frac{1}{\Sigma_{max}}=\frac{1}{\Sigma'_{max}(Z_0)Z^{P'_{S_{max}}}}+\frac{1}{\Sigma_{max0}Z_0^{P_{S_{max}0}}Z^{P''_{S_{max}}}}; \quad k_{\text{э}}=\frac{k_{\text{э}0}Z_0^{P_{k_0}}Z^{P_k}}{[g_0(Z_0)+g(Z)]^{q_k}}.$$

Параметры должны удовлетворять двум ограничениям: $k_{zp}>\exp(1)\approx 2,718$; $P'_{S_{max}}>P''_{S_{max}}$. Параметру $k_{\text{э}0}$ можно без потери общности придать любое фиксированное значение; следуя формуле Пича-Хаузера-Нойвирта [6], положим $k_{\text{э}0}=2\sqrt{2} \Sigma_E/\nu_B=0,1216\cdot 10^{-15} \text{ эВ}^{1/2}\cdot \text{а.е.м.}^{1/2}\cdot \text{см}^2/\text{атом}$.

Формула для $k_{\text{э}}$ обладает высокой степенью общности: из нее подходящим выбором показателей P_{k_0}, P_k, q_k можно получить все существующие формулы

потерь энергии медленных ионов. Это позволяет по результатам аппроксимации сделать выбор между тремя теориями торможения медленного иона.

Особенностью предложенных формул является «разделение переменных»: входящие в них параметры зависят либо только от Z , либо только от Z_0 (либо вообще ни от чего не зависят), но не от того и другого одновременно. В частности, это относится к формуле для k_3 ; тем самым опровергнуто пессимистическое утверждение Уорда [7] о невозможности разделить влияние вещества и частицы на потери энергии медленного иона. С практической точки зрения разделение переменных очень полезно: оно позволяет рассчитать Σ_3 для любой частицы в любом веществе, если известны потери энергии данной частицы в каком-либо веществе и потери энергии какой-либо частицы в данном веществе.

Итак, электронные потери энергии выражены через 11 универсальных параметров (E_{zp0} , p_{zp} , k_{zp} , $p_{E\max}$, $\Sigma_{\max0}$, $p_{S\max0}$, $p'_{S\max}$, $p''_{S\max}$, p_{k0} , p_k , q_k), 4 параметра для каждого вещества (I_0 , $E_{\max0}$, Σ'_{\max} , g_0) и 1 параметр для каждой частицы (g).

Среди параметров имеется 8 показателей степени: p_{zp} , $p_{E\max}$, $p_{S\max0}$, $p'_{S\max}$, $p''_{S\max}$, p_{k0} , p_k , q_k . Из соображений физического смысла следует ожидать, что они будут рациональными числами с небольшими знаменателями (не выше 3). Поэтому значения, полученные при аппроксимации, нужно округлить. Это ухудшает качество аппроксимации и уменьшает область ее адекватности, но не слишком сильно: после округления проводится повторный расчет всех остальных параметров, который уменьшает возникшие расхождения.

Для медленных тяжелых ионов необходимо учитывать ядерные потери энергии. Для их описания была использована аппроксимация Юдина [8], несколько видоизмененная, с тем чтобы лучше передать спад $\Sigma_{я}$ при больших энергиях, и выраженная через положение и величину максимума ядерных потерь:

Ошибка!;

$$E_{я\max} = \frac{M+M_0}{MM_0} ZZ_0 \sqrt{Z^{2/3} + Z_0^{2/3}} E_{я0}, \quad \Sigma_{я\max} = \frac{M}{M+M_0} \frac{ZZ_0}{\sqrt{Z^{2/3} + Z_0^{2/3}}} \Sigma_{я0}.$$

Здесь $E_{я0}$ и $\Sigma_{я0}$ – параметры; согласно теории, они составляют $E_{я0}=8,86$ эВ, $\Sigma_{я0}=3,45 \cdot 10^{-15}$ эВ·см²/атом.

Глава завершается описанием используемых статистических методов. Аппроксимация проводилась методом наименьших квадратов, причем мерой согласия экспериментальных данных с аппроксимирующей функцией служили не абсолютные, а относительные невязки; от использования весовых множителей, учитывающих различную точность данных, решено было отказаться.

Для оценки погрешностей был привлечен аппарат дисперсионного анализа. Применялась модель компонент дисперсии при иерархической классификации; она учитывала три источника изменчивости – статистические ошибки данных, полученных в одной и той же работе; разброс между данными разных работ, обусловленный систематическими погрешностями (которые благодаря большому числу анализируемых работ рандомизируются); неадекватность аппроксимирующей формулы. Приведены формулы для оценок компонент дисперсии и для их доверительных интервалов; на их основе предложен приближенный критерий адекватности аппроксимации.

Описан способ проверки допущения о случайном характере разброса между данными разных работ. Он позволяет также выявить работы, данные которых выходят за пределы статистического разброса.

В главе 2 «Результаты» приведены значения параметров, полученные в результате аппроксимации. Показатели степени округлены до $p_{ep}=3/2$; $p'_{s\ max}=2$; $p''_{s\ max}=1$; $p_{s\ max0}=2/3$; $p_k=p_{k0}=1$; $q_k=3/2$; $p_{E\ max}=0,713 \pm 0,005$ оставлен без округления. Прочие универсальные параметры составляют $E_{zp0}=307 \pm 18$ кэВ/а.е.м.; $k_{zp}=5,4 \pm 0,3$; $\Sigma_{max0}=(9,05 \pm 0,04) \cdot 10^{-15}$ эВ·см²/атом.

Отмечено, что значения показателей p_{k0} , p_k , q_k согласуются с формулой Линдхарда, если фактор Линдхарда ξ_3 считать константой (вопреки общепринятой формуле $\xi_3 \approx Z^{1/6}$), и расходятся с формулами Ферми-Теллера и Фирсова.

Параметры I_0 , E_{max0} , Σ'_{max} , g_0 , g представлены таблицами и графиками (рис.1 и 2). Получены кусочно-квадратичные формулы, описывающие их ос-

цилляции и позволяющие находить значения параметров для веществ и частиц, для которых нет данных: I_0 , Σ'_{max} , E_{max0} – при $Z_0 \leq 92$; g_0 – при $Z_0 \leq 83$; g – при $Z \leq 54$. Предложены оценочные формулы для монотонной части зависимостей (показаны на рис. 1 и 2 пунктиром):

$$E_{max0} \sim (70 + Z_0) \text{ кэВ/а.е.м.}; \quad \Sigma'_{max} \sim 15 \cdot 10^{-15} Z_0^{1/3} \text{ эВ} \cdot \text{см}^2/\text{атом};$$

$$g_0 \sim 0,8 Z_0^{2/3}; \quad g \sim 1,4 \sqrt{Z}.$$

Получена оценка константы Блоха $K = I_0/Z_0 = 11,7 \pm 0,3$ эВ ($Z_0 > 50$).

Величины I_0 , E_{max} , Σ_{max} , k_ε сравниваются с экспериментальными и теоретическими значениями. Высказано предположение, что наши значения E_{max} для тяжелых ионов систематически занижены; но расхождение не является статистически значимым. В остальных случаях наблюдается согласие с экспериментом в пределах экспериментального разброса; теоретические значения I_0 занижены.

Статистический анализ показал, что среднеквадратический разброс данных, полученных в одной и той же работе, составляет (в среднем по всем веществам, частицам и энергиям) $\sigma_0 = 3,0\%$, тогда как разброс между данными разных работ существенно выше: $\sigma_1 = 6,8\%$. σ_0 слабо зависит от вещества, частицы и энергии; σ_1 сильно возрастает с убыванием энергии, достигая 25% при $E \sim 1$ кэВ/а.е.м. Проверка статистических свойств разброса между данными разных работ подтвердила, что его можно рассматривать как непрерывную случайную величину с распределением, близким к нормальному. Обнаружено 23 работы, результаты которых систематически смещены относительно прочих; для них найдены величины смещений в зависимости от E .

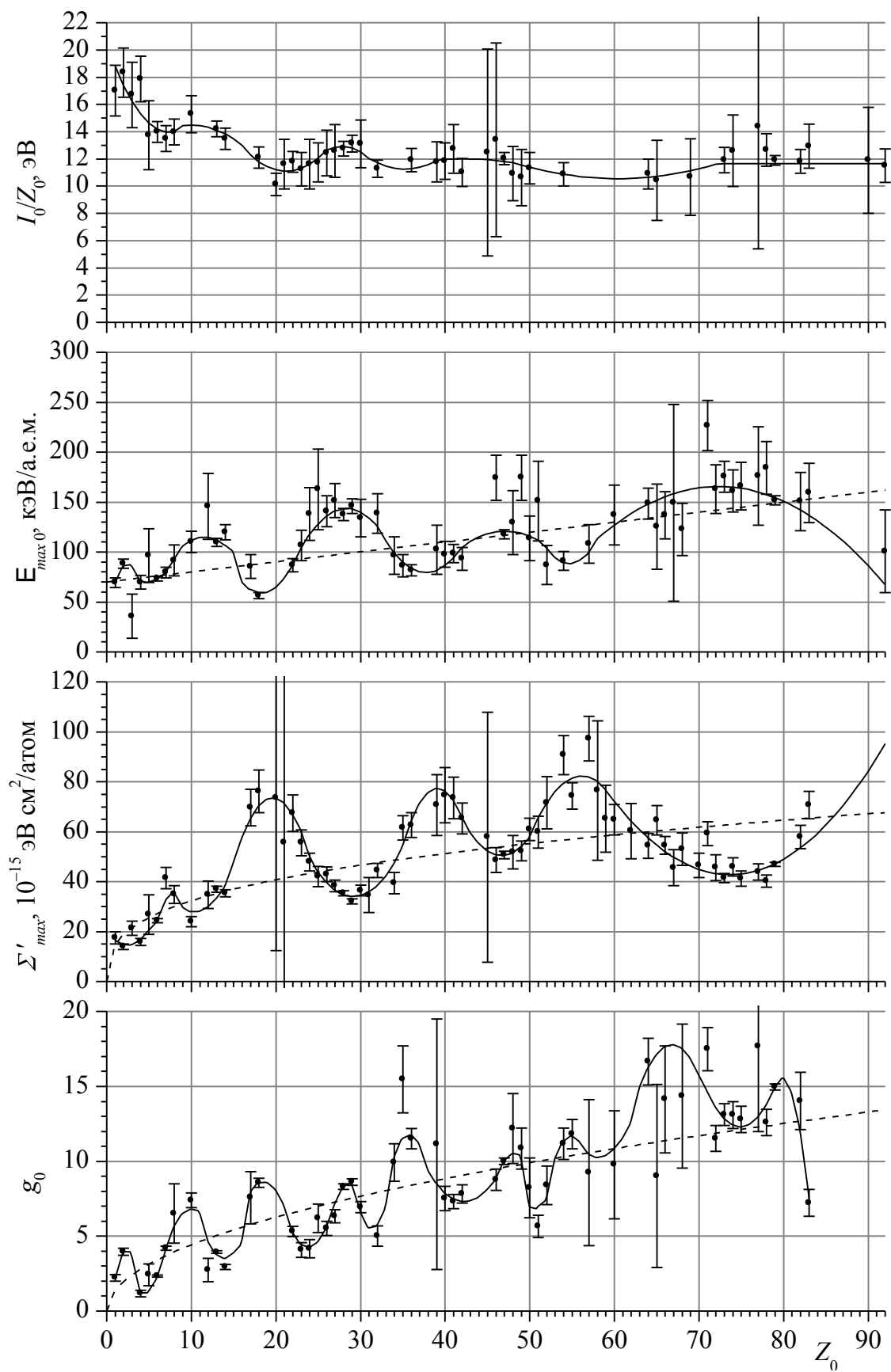


Рис.1. Параметры, характеризующие вещества

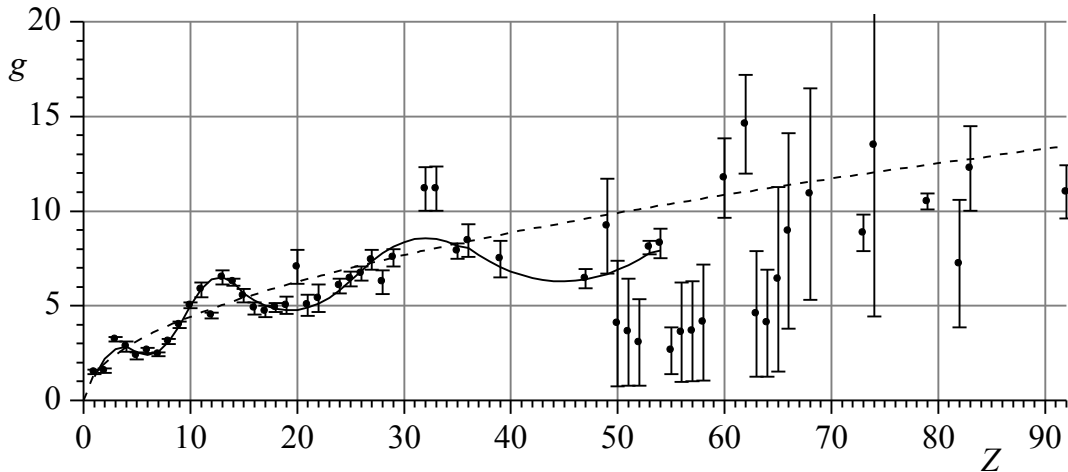


Рис.2. Параметр g , характеризующий частицу

Аппроксимация проверена на адекватность в зависимости от Z и E . Основная доля расхождений приходится на тяжелые частицы в области максимума потерь и в медленной области; в остальных случаях согласие удовлетворительное. Таким образом, предлагаемая формула имеет обширную область адекватности (рис.3), охватывающую 84% экспериментальных данных.

Погрешность аппроксимации (среднеквадратическое отклонение от истинного значения) в пределах области адекватности возрастает с убыванием энергии от 1,6% при 1 ГэВ/а.е.м. до 6,3% при 1 кэВ/а.е.м.

Выполнено сравнение адекватности и точности предлагаемой формулы и программы SRIM – основного, общепризнанного метода расчета потерь энер-

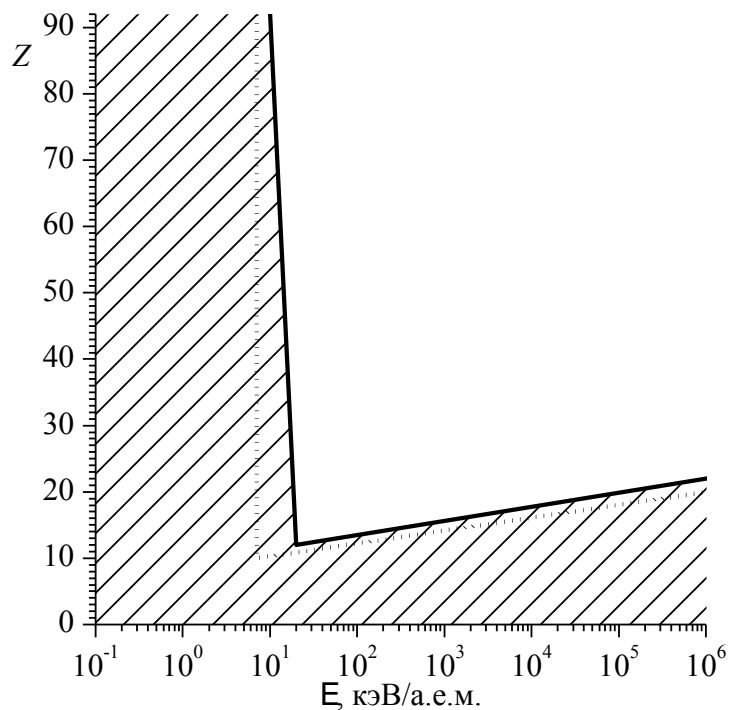


Рис.3. Область адекватности предлагаемой аппроксимации (сплошная линия) и программы SRIM (пунктир)

гии (версия SRIM-2008.04; см. <http://www.srim.org>). Предлагаемая формула дает меньшие расхождения с экспериментом, ее область адекватности полностью покрывает такую же программы SRIM (см. рис.3), а ее точность для медленных ионов гораздо выше (до 7 раз), чем у программы SRIM.

Глава 3 «Интерпретация результатов» начинается с рассмотрения, на основе результатов гл.2, положения границ характерных энергетических областей. Отмечено смыкание области максимума потерь у тяжелых частиц, с одной стороны, с областью ядерных потерь, а с другой – с релятивистской областью.

Рассмотрена роль различных эффектов, приводящих к отклонению потерь энергии от формулы Бете, в формировании верхней границы области максимума. Для каждого из эффектов найдена обусловленная им E_{gp} (определенная как энергия, при которой величина эффекта равна погрешности экспериментальных данных) в зависимости от Z_0 и Z . Из сравнения с эмпирической E_{gp} сделан вывод: для легких ионов в легком веществе E_{gp} определяется зарядовыми эффектами либо поправкой Блоха (сделать выбор между ними невозможно: в этой области $E_{gp \text{ заряд}} \approx E_{gp \text{ Блох}}$), для легких ионов в тяжелом веществе – оболочечными эффектами, а для тяжелых ионов во всех веществах – зарядовыми. Эффект Баркаша вблизи E_{gp} не играет определяющей роли.

Из формулы для Σ_{max} , в особенности из значений $p'_{S \text{ max}}$ и $p''_{S \text{ max}}$, сделаны выводы о том, какие эффекты порождают максимум потерь. У легкой частицы его вызывают оболочечные эффекты; монотонная составляющая зависимости $\Sigma_{max}(Z_0)$ сопоставлена с рассуждениями Бора [9. С.99] о том, что в торможении участвуют только те электроны вещества, орбитальная скорость которых ниже скорости частицы. У тяжелого иона Σ_{max} определяется зарядовыми эффектами.

Обсуждается формула для E_{max} . Ее физический смысл неясен; возможно, она лишь приближенно передает истинную зависимость $E_{max}(Z_0, Z)$, однако все попытки усовершенствовать ее не увенчались успехом.

Выведено соотношение между $E_{max}(Z)$ и $\Sigma_{max}(Z)$ для двух моделей: действуют только оболочечные и зарядовые эффекты; действуют только оболочеч-

ные эффекты и поправка Блоха. Из полученных формул и аппроксимации $\Sigma_{max}(Z)$ найдены зависимости $E_{max}(Z)$. В легких веществах и $E_{max \text{ Блох}}$ и $E_{max \text{ заряд}}$ укладываются в пределы разброса экспериментальных данных; в тяжелых веществах $E_{max \text{ заряд}}$ согласуется с экспериментом при малых Z , $E_{max \text{ Блох}}$ — при больших. Наша аппроксимация E_{max} близка к $E_{max \text{ заряд}}$.

Проверена взаимосвязь зависимостей $\Sigma_{max}(Z_0)$ и $E_{max}(Z_0)$, выражаемая формулой Линдхарда-Шарффа [10] $\Sigma_{max} \sqrt{E_{max}/Z_0} = \text{const}$. В пределе $Z \rightarrow 0$ формула подтверждается с точностью $\pm 50\%$; отмечено некоторое отклонение от нее для тяжелых веществ. При $Z=1$ уже начинают сказываться зарядовые и нелинейные эффекты, нарушая эту взаимосвязь. Подтверждено наличие остаточных осцилляций левой части формулы по Z_0 , обнаруженных Сиротининым [11; 12].

Рассматривается связь E_{max} с теми или иными характерными энергиями или скоростями. Показано, что с орбитальными скоростями внешних электронов вещества E_{max} не коррелирует; это объясняется тем, что в торможении участвуют не только внешние электроны, но отчасти и электроны более глубоких оболочек, а потому точка максимума должна определяться скоростями всех электронов, усредненными некоторым способом. Подтверждена предсказанная Арнау и Эшеником [13] для легких ионов корреляция E_{max} с энергией Ферми вещества.

В связи с тем, что недавно Зигмунд и Шиннер [14] подвергли сомнению концепцию эффективного заряда и на роль главного эффекта выдвинули поправку Блоха, подчеркнута большая роль зарядовых эффектов при торможении тяжелых ионов в области максимума потерь. Расчеты, основанные на одной лишь поправке Блоха и не учитывающие нейтрализацию иона, неспособны правильно описать его потери энергии.

Показано, что оболочечные эффекты играют определяющую роль для легких ионов в тяжелых веществах, но в легких веществах они слабеют. Эффект Баркаша во всех случаях не является статистически значимым.

Вблизи нижней границы области максимума проверено наблюдение Ахи-

езера и Давыдова [15]: при переходе из медленной области в область максимума рост потерь ускоряется по сравнению с зависимостью $\Sigma_3 \sim v$. Эффект Ахиезера-Давыдова подтверждается, по крайней мере, для всех ионов тяжелее Н.

Подробно рассмотрена периодичность Σ_3 по Z_0 . Параметры, определяющие торможение при высоких и промежуточных энергиях, $-I_0/Z_0$, E_{max0} , Σ'_{max} , — плохо коррелируют с положением вещества в периодической системе; это еще раз подтверждает, что в указанных энергетических областях в торможении участвуют внутренние электроны. У параметра g_0 связь с периодической системой проявляется отчетливо, свидетельствуя, что торможение медленных частиц происходит только на внешних электронах; его максимумы соответствуют электронным конфигурациям s^2p^6 (инертные газы) и $d^{10}s^1$ (подгруппа меди), минимумы — конфигурациям s^2p^2 (IV группа) и d^5s^1 (подгруппа хрома).

Изучена зависимость периодичности потерь энергии от энергии частицы. У медленных ионов положение экстремумов $\Sigma_3(Z_0)$ не зависит от E . При переходе в область максимума потерь положение минимумов остается неизменным, максимумы же начинают смещаться по Z_0 , причем максимумы, соответствующие p -элементам, смещаются вправо, d - и f -элементам — влево. С дальнейшим ростом энергии экстремумы исчезают, попарно сливаясь друг с другом.

Первыми исчезают пары экстремумов, соответствующие p -элементам. При торможении протона их критические точки лежат при $30 \div 40$ кэВ/а.е.м. (за исключением первой пары, соответствующей p -элементам второго периода: у нее $E_{кр} = 200$ кэВ/а.е.м.). С ростом Z критические энергии растут и при торможении иона Mg составляют $150 \div 250$ кэВ/а.е.м. (у первой пары — 360 кэВ/а.е.м.). Значения Z_0 в критической точке соответствуют электронной конфигурации s^2p^5 (галогены).

Пары экстремумов, соответствующие d - и f -элементам, сначала расходятся за счет смещения максимумов влево по Z_0 . Наибольшее смещение каждого максимума составляет $2 \div 4$ единицы, соответствует электронной конфигурации s^2 (щелочноземельные металлы) и достигается при $40 \div 60$ кэВ/а.е.м. для протона

и $200 \div 300$ кэВ/а.е.м. для иона Mg. Затем экстремумы вновь сближаются и исчезают. Критические энергии лежат в области $500 \div 1500$ кэВ/а.е.м.; зависимость их от Z неясна. Значения $Z_{0\text{кр}}$ соответствуют электронной конфигурации d^5s^2 (подгруппа марганца).

Классификация экстремумов позволяет обнаружить, что осцилляции Σ'_{max} и $E_{\text{max}0}$ все же связаны с периодической системой, но только начиная с четвертого ее периода; максимумы Σ'_{max} соответствуют электронной конфигурации s^2 , минимумы – конфигурации $d^{10}s^1$; максимумы $E_{\text{max}0}$ – конфигурации $d^{10}s^1$, минимумы – конфигурации s^1 (щелочные металлы).

Предложена качественная теория для объяснения обнаруженных закономерностей. Тормозная способность атома вещества рассматривается как сумма тормозных способностей всех его электронов: $\Sigma_{\text{э}} = \sum N_{nl} \Sigma_{nl}$, где N_{nl} – числа заполнения подоболочек, Σ_{nl} – тормозная способность электрона nl -подоболочки. Увеличение заряда ядра повышает энергии связи электронов и уменьшает размеры электронного облака; поэтому все Σ_{nl} убывают с ростом Z_0 . Кроме того, по мере заполнения nl -подоболочки Σ_{nl} убывает из-за межэлектронного взаимодействия в ней. При заполнении p -, d - и f -подоболочек, особенно их второй половины, суммарная убыль Σ_{nl} не компенсируется тормозной способностью добавившегося электрона, и на графике $\Sigma_{\text{э}}(Z_0)$ наблюдается убывающий участок; максимум примерно соответствует наполовину заполненной подоболочке, минимум – полностью заполненной.

Изменение картины периодичности с ростом энергии объясняется соотношениями энергий максимума Σ_{nl} у разных подболочек. Максимум тормозной способности p -электрона лежит при более высокой энергии, чем у s -электрона той же оболочки; по достижении $E_{\text{max}ns}$ тормозная способность s -электрона начинает снижаться; снижается и ее убыль вследствие роста Z_0 ; теперь тормозная способность добавившегося p -электрона компенсирует эту убыль; убывающий участок сокращается, p -максимум смещается вправо.

Аналогично, высоко лежащий максимум тормозной способности d -электрона второй снаружи оболочки $E_{max (n-1)d}$ по сравнению со свободным электроном объясняет смещение вправо d -максимума; а так как электроны внутренних оболочек имеют меньшую тормозную способность, чем внешние и свободные, то критические точки d -экстремумов лежат высоко, когда тормозная способность свободных электронов уже сильно упадет и вклад d -электрона станет ощутимым. Обратное (левое) смещение d -максимумов при низких энергиях объясняется эффектом Ахиезера-Давыдова для свободных электронов: он оказывает обратное действие, изменяя соотношение тормозных способностей в пользу свободных электронов. Все сказанное о d -экстремумах относится и к f -экстремуму.

Точки максимума, в свою очередь, напрямую связаны с орбитальными скоростями электронов: $v_{max nl}/v_B \approx 2,0(\langle v \rangle_{nl}/v_B)^{0,87}$ (получено из расчетов Канэко [16]).

Периодичность по Z во многом сходна с периодичностью по Z_0 , хотя имеются и различия. С ростом энергии максимумы движутся только вправо по Z , минимумы – только влево. Критические энергии лежат в интервале 100÷400 кэВ/а.е.м. Они возрастают с ростом Z , но всегда остаются ниже E_{max} , так что величина Σ_{max} не подвержена осцилляциям по Z . С ростом Z_0 (точнее, с ростом g_0) критические энергии понижаются, ширина убывающего участка уменьшается, и в конце концов он исчезает вовсе.

Результаты сопоставлены с теорией Бриггса-Патака [17; 18]. Найденные нами положения первых двух максимумов близки к теоретическим; но третий максимум смещен по Z от теоретического положения на 10 единиц и лежит как раз там, где по Бриггсу и Патаку должен быть минимум. Далее, наше значение критической энергии для первой пары экстремумов в легких веществах согласуется с расчетами Патака; но в этих расчетах как максимум, так и минимум с ростом энергии смещаются вправо по Z , мы же наблюдаем у всех минимумов смещение влево. Таким образом, наши результаты лишь отчасти подтверждают

теорию Бриггса-Патака.

Отмечено, что критические скорости в бериллии образуют последовательность $v_{кр}/v_B=1,93; 3,05; 4,00$, близкую к целочисленной; возможно, они связаны со значениями квантового числа l при рассеянии.

В **заключении** намечены пути устранения области неадекватности аппроксимации при дальнейших исследованиях и перечислены выявленные по ходу работы «белые пятна» в экспериментальных данных, на которые следует обратить внимание экспериментаторам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lindhard J. Slowing-down of ions. // Proc.Roy.Soc. A.– 1969.– V.311, No.1504.– P.11-19.
2. Bethe H.A. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. // Ann.Physik (Leipzig).– 1930.– V.5.– P.325-401.
3. Fermi E., Teller E. The Capture of Negative Mesotrons in Matter. // Phys.Rev.– 1947.– V.72, No.5.– P.399-408.
4. Фирсов О.Б. Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях. // ЖЭТФ.– 1959.– Т.36, вып.5.– С.1517-1523.
5. Lindhard J., Scharff M. Energy Dissipation by Ions in the kev Region. // Phys.Rev.– 1961.– V.124, No.1.– P.128-130.
6. Pietsch W., Hauser U., Neuwirth W. Stopping powers from the inverted Doppler shift attenuation method: Z-oscillations; Bragg's rule of chemical effects; solid and liquid state effects. // Nucl.Instr.Meth.– 1976.– V.132.– P.79-87.
7. Ward D., Andrews H.R., Mitchell I.V. et al. Systematics for the Z_1 -oscillation in stopping powers of various solid materials. // Can.J.Phys.– 1979.– V.57, No.5.– P.645-656.
8. Юдин В.В. Аналитический расчет пробегов с использованием аппроксимированной энергетической зависимости ядерного торможения. // ДАН

СССР.– 1972.– Т.207, №2.– С.325-326.

9. Bohr N. The Penetration of Atomic Particles through Matter. // Dan.Mat.Fys.Medd.– 1948.– Bd.18, nr.8.
10. Lindhard J., Scharff M. // NAS-NRC Publ. No.752.– 1960.– P.49.
11. Sirotinin E.I., Tulinov A.F., Khodyrev V.A., Mizgulin V.N. Proton energy loss in solids. // Nucl.Instr.Meth. B.– 1984.– V.4, No.3.– P.337-345.
12. Sirotinin E.I. Some regularities in proton stopping cross sections. // Nucl.Instr.Meth. B.– 1987.– V.27, No.2.– P.323-325.
13. Arnau A., Echenique P.M. Stopping power of an electron gas for partially stripped ions. // Nucl.Instr.Meth. B.– 1989.– V.42, No.2.– P.165-170.
14. Sigmund P., Schinner A. Effective charge and related/unrelated quantities in heavy-ion stopping. // Nucl.Instr.Meth. B.– 2001.– V.174, No.4.– P.535-540.
15. Ахиезер И.А., Давыдов Л.Н. Теория электронного торможения тяжелых ионов в металлах. // УФН.– 1979.– Т.129, вып.2.– С.239-254.
16. Kaneko T. Partial and Total Electronic Stopping Cross Sections of Atoms and Solids for Protons. // At.Data Nucl.Data Tables.– 1993.– V.53, No.2.– P.271-340.
17. Briggs J.S., Pathak A.P. The stopping power of solids for low-velocity channelled heavy ions. // J.Phys. C.– 1974.– V.7, No.11.– P.1929-1936.
18. Pathak A.P. Systematic study of channeling stopping-power oscillations for low-velocity heavy ions. // Phys.Rev. B.– 1980.– V.22, No.1.– P.96-98.

СПИСОК РАБОТ, НАИБОЛЕЕ ПОЛНО ОТРАЖАЮЩИХ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

- I. Ковшов Д.К. Потери энергии ионов в простых веществах. I. Быстрые ионы. // ВАНТ. Серия Теоретическая и прикладная физика.– 2005.– Вып. 1-2.– С.3-12.
- II. Ковшов Д.К. Потери энергии ионов в простых веществах. II. Ионы промежуточных энергий. // ВАНТ. Серия Теоретическая и прикладная физика.– 2005.– Вып. 1-2.– С.13-19.
- III. Ковшов Д.К. Потери энергии ионов в простых веществах. III. Медленные ионы. // ВАНТ. Серия Теоретическая и прикладная физика.– 2005.– Вып. 3.– С.3-9.
- IV. Ковшов Д.К. Потери энергии ионов в простых веществах. IV. Сравнительная роль различных эффектов в области максимума потерь. // ВАНТ. Серия Теоретическая и прикладная физика.– 2008.– Вып. 1.– С.43-49.
- V. Ковшов Д.К. Потери энергии ионов в простых веществах. V. Периодичность. // ВАНТ. Серия Теоретическая и прикладная физика.– 2008.– Вып. 1.– С.50-55.

537.534.7 **Ковшов Д.К.** Полуэмпирическая формула электронных потерь энергии ионов в простых веществах и интерпретация выявленных закономерностей: Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. – Саров, 2009. – 23 с.

Отпечатано с оригинал-макета заказчика
в типографии ТПК
607185 Нижегородская обл., г. Саров,
ул. Зернова, 24-а, тел. (831-30) 6-26-46

Подписано в печать 06.11.2009.
Формат 84×108 ¹/₃₂. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл.печ.л. 1,26. Уч.-изд.л. 1,05. Заказ 913.
Тираж 100 экз.