

УДК 537.533.35:53.072

ЗАВИСИМОСТЬ ЗАРЯДОВОГО СОСТОЯНИЯ ПУЧКА ЛЕГКИХ ИОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ ОТ СКОРОСТИ ЧАСТИЦ

© 2024 г. Н. Н. Михеев^а, *, И. Ж. Безбах^а

^аИнститут кристаллографии им. А.В. Шубникова

ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, 119333 Россия

*e-mail: kmikran@spark-mail.ru

Поступила в редакцию 31.07.2023 г.

После доработки 10.10.2023 г.

Принято к публикации 10.10.2023 г.

Представлены результаты применения статистики дискретного процесса многократного рассеяния для аналитического описания зависимости зарядового состояния легких ионов в веществе от скорости частиц. Показано, что использование методики, основанной на учете зависимости зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества, позволяет проводить расчеты тормозной способности вещества для ионов лития, бериллия, бора и углерода средних и низких энергий, соответствующие экспериментальным результатам.

Ключевые слова: направленный пучок моноэнергетических ионов, многократное неупругое рассеяние, тормозная способность вещества, зарядовое состояние пучка ионов.

DOI: 10.31857/S1028096024030111, EDN: HEWLLY

ВВЕДЕНИЕ

Тормозная способность вещества для направленных пучков моноэнергетических заряженных частиц представляет собой исключительно важную характеристику сложных процессов взаимодействия частиц с веществом, которая необходима для многих областей как фундаментальной, так и прикладной физики [1–3]. Если в случае пучка быстрых заряженных частиц тормозная способность S вещества зависит от величины их электрического заряда z как $S \sim z^2$, то с уменьшением скорости ионов необходимо учитывать зависимость зарядового состояния пучка ионов от их скорости. Поэтому для эффективного применения направленных ионных пучков средних и низких энергий как прецизионного технологического и исследовательского инструмента требуется детальная информация о зарядовом состоянии пучка ионов z_{eff} . Например, при модификации физико-химических свойств и пространственной морфологии в тонкопленочных структурах или при проведении локальной диагностики свойств вещества. Законченной теории, описывающей зависимость этой величины от скорости, нет. Используют различные полуэмпирические методики и программы [4–6], основанные, как правило, на использовании выражения из [7] для z_{eff} :

$$z_{\text{eff}} = z[1 - C \exp(-z^{-\gamma} V_0 / Z^{2/3} V_B)],$$

где $C \approx 1$, $V_B = 2.18 \times 10^8$ см/с, Z – средний атомный номер мишени, $\gamma \approx 2/3$ для большинства материалов. Детальный обзор существующих аналитических выражений, применяемых при описании зарядового состояния низкоэнергетических ионов, проведен в [8].

Ранее в [9] была предложена принципиально новая методика учета зарядового состояния альфа-частиц, учитывающая зависимость зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества. Она позволила решить прямую задачу аналитического описания зависимости тормозной способности вещества от энергии для пучка моноэнергетических альфа-частиц в широком диапазоне их первичной энергии. Важными результатами работы стали: аналитическое выражение для z_{eff} и установление предельного для пучка альфа-частиц равновесного эффективного заряда z_{eq} , равного $1.414q_e$, после того как их скорость становится в полтора раза меньше минимальной скорости электронов конденсированного вещества. Хотя ранее [8, 10] полагали, что с уменьшением скорости ионного пучка его эффективный заряд должен также непрерывно уменьшаться, в пределе стремясь к нулю.

Цель настоящей работы заключалась в проведении аналитического описания зависимости тормозной способности вещества от энергии для ряда легких ионов, на основе учета зависимости зарядового состояния частиц от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества. При использовании разработанной для альфа-частиц методики [9] для ионов лития, бериллия, бора и углерода определены базовые параметры, характеризующие зависимости их зарядового состояния от скорости в широком диапазоне энергии. Проведены модельные расчеты тормозной способности S ряда веществ. Выполнено сравнение расчетов с имеющимися в компиляции Хельмута Пауля [11] экспериментальными результатами измерений тормозной способности.

БАЗОВЫЕ ФОРМУЛЫ

Для заряженных частиц средних и низких энергий, как показано в [9, 12], электронная тормозная способность S вещества, т.е. средние потери энергии пучка частиц на каждом атоме мишени, отнесенные к единице длины их пробега, описываются следующей формулой:

$$S = \frac{2\pi q_e^4 Z z_{\text{eff}}^2}{m_e V_0^2} F_M^N \ln \left[\frac{m_e V_0^2}{\epsilon_{li}} \right], \quad (1)$$

где m_e — масса покоя электрона, q_e — заряд электрона, Z — средний атомный номер мишени, $m_e V_0^2$ — максимально вероятная однократная потеря энергии, z_{eff} — эффективный заряд ионов пучка, функция F_M^N описывает уменьшение вероятности неупругого рассеяния частиц на электронах мишени, когда скорость частиц становится сопоставимой со скоростью электронов [13].

Величина эффективного заряд z_{eff} пучка ионов согласно [9] определяется как:

$$z_{\text{eff}} = z[1 - \exp(-\beta V_0/V_{li})], \quad (2)$$

где z — заряд ядра иона пучка, β — параметр, учитывающий зависимость z_{eff} от отношения скорости ионов V_0 к минимальной скорости электронов вещества V_{li} .

Как следует из формулы (1), величина S тонких пленок вещества в области средних и низких энергий сильно зависит от параметра ϵ_{li} . Диапазон его возможных значений в твердотельных образцах невелик — от ≈ 5 до ≈ 14 эВ в зависимости от физико-химических свойств и качества вещества: состава материала, его примесно-дефектной структуры, метода получения, степени окисления, уровня легирования (в полупроводниках). Но эти сравнительно небольшие изменения согласно

формуле (1) сильнейшим образом должны сказываться на измеряемой величине S . И они действительно сказываются, проявляясь в виде весьма заметного разброса экспериментальных значений тормозной способности, который так характерен для S практически всех одноэлементных материалов, особенно в низкоэнергетическом диапазоне [11], и который связан главным образом с различиями в качестве используемого исследователями пленочного материала. Вышесказанное определило выбор углерода и алюминия в качестве модельных материалов для проверки — апробации предлагаемой методики расчета зарядового состояния пучков ионов лития, бериллия, бора и углерода. Это материалы со стабильно прогнозируемыми значениями параметра ϵ_{li} , а именно для углерода $\epsilon_{li} = 11.26$ эВ, для алюминия $\epsilon_{li} = 6.0-7.0$ эВ [14, 15].

ПАРАМЕТРЫ РАСЧЕТА ДЛЯ ИОНОВ ЛИТИЯ, БЕРИЛЛИЯ, БОРА И УГЛЕРОДА

В результате применения методики [9] определены значения параметров β , z_{eq} и f_{eq} для пучков ионов лития, бериллия, бора и углерода, которые приведены в табл. 1. Следует отметить выявленные особенности полученных результатов. Первое, если для альфа-частиц величина β пусть функционально слабо, но зависела от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов, то начиная с лития β — фиксированный для каждого типа частиц параметр, который, как и параметр z_{eq} , не зависит от свойств облучаемого ионами образца. Это существенно упрощает проведение расчетов z_{eff} и S по формулам (1) и (2). Возрастание электрического заряда ядер ионов в ряду от лития до углерода сопровождается монотонным снижением параметра β и монотонным ростом равновесного заряда z_{eq} .

МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ ТОРМОЗНОЙ СПОСОБНОСТИ S РЯДА ВЕЩЕСТВ. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ

Полученные значения параметров β , f_{eq} и z_{eq} для пучков ионов лития, бериллия, бора и углерода были использованы при проведении модельных

Таблица 1. Значения параметров β , z_{eq} и f_{eq} для ионов лития, бериллия, бора и углерода

Ион	z	β	z_{eq}	$f_{\text{eq}} = z_{\text{eq}}/z$
^3Li	3	0.430	1.610	0.5367
^4Be	4	0.353	1.876	0.4690
^5B	5	0.300	2.236	0.4472
^6C	6	0.266	2.595	0.4324

расчетов тормозной способности ряда веществ по формуле (1). Результаты расчетов и сравнение полученных функциональных распределений $S = F(E_0)$ с экспериментальными данными приведены на рис. 1–5.

На рис. 1 две кривые представляют распределения электронной тормозной способности алюминия для ионов лития, рассчитанные по формуле (1): при $\epsilon_{li} = 6.0$ эВ (сплошная кривая) и при $\epsilon_{li} = 7.0$ эВ (штрихпунктирная кривая). Видно, что в сравнительно узком диапазоне энергии ионного пучка на кривых $S(E)$ энергетических распреде-

лений присутствует характерная особенность в виде “ступеньки”. Появление такой особенности связано напрямую с тем, что зарядовое состояние ионного пучка в этой области энергии достигает своего минимального и равновесного значения z_{eq} . Функция z_{eff} в формуле (2) превращается в константу, а ее производная — в ноль, что и вызывает указанную особенность в распределении $S(E)$. Дальнейшее уменьшение энергии пучка ионов сопровождается снижением S , которое пропорционально скорости пучка заряженных частиц [9, 12]. Видно, что уменьшение параметра ϵ_{li}

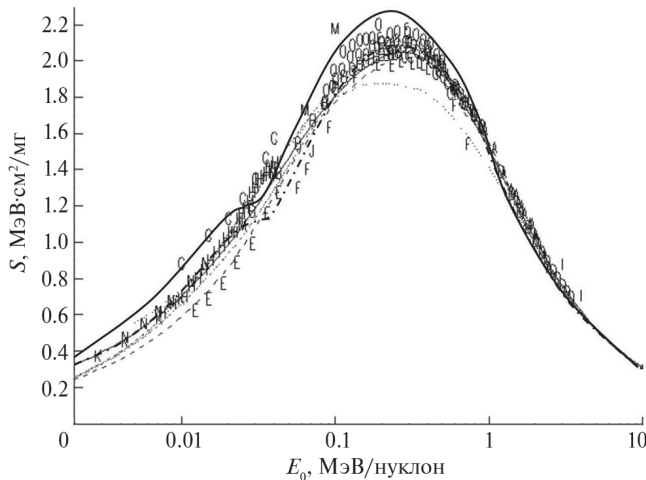


Рис. 1. Зависимость тормозной способности алюминия S для пучка ионов лития с различной энергией: сплошная линия — расчет с $\epsilon_{li} = 6$ эВ; штрихпунктир — расчет с $\epsilon_{li} = 7$ эВ; линии — приближенные данные сторонних авторов [11]; символы — экспериментальные данные из компиляции Х. Пауля [11].

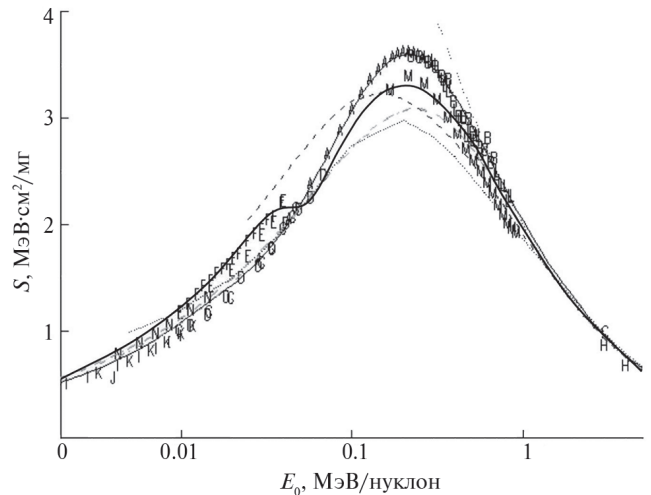


Рис. 2. Зависимость тормозной способности углерода для пучка ионов лития с различной энергией: сплошная линия — расчет; линии — приближенные данные сторонних авторов [11]; символы — экспериментальные данные из компиляции Х. Пауля [11].

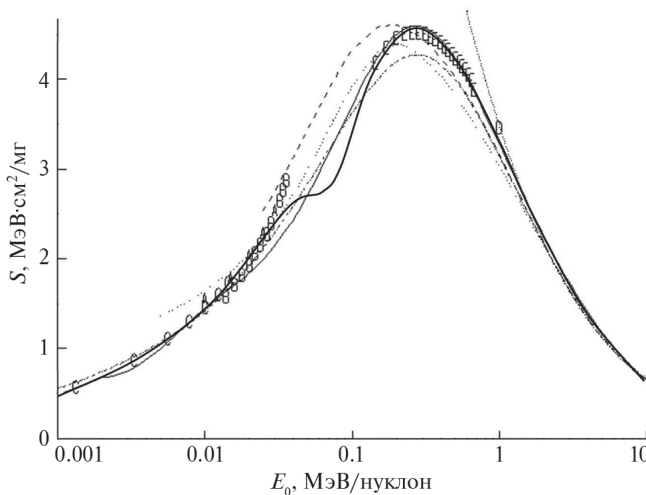


Рис. 3. Зависимость тормозной способности углерода для пучка ионов бериллия с различной энергией: сплошная линия — расчет; линии — приближенные данные сторонних авторов [11]; символы — экспериментальные данные из компиляции Х. Пауля [11].

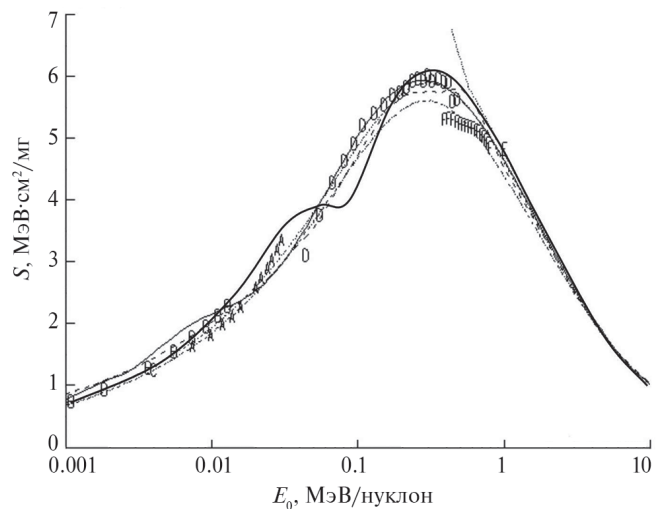


Рис. 4. Зависимость тормозной способности углерода для пучка ионов бора с различной энергией: сплошная линия — расчет; линии — приближенные данные сторонних авторов [11]; символы — экспериментальные данные из компиляции Х. Пауля [11].

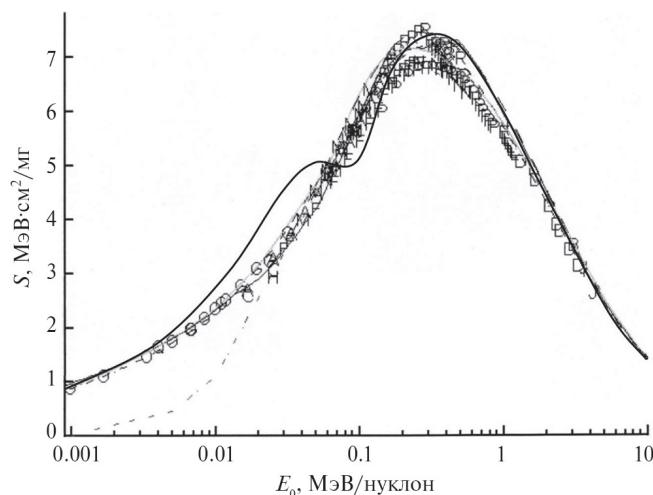


Рис. 5. Зависимость тормозной способности углерода для пучка ионов углерода с различной энергией: сплошная линия — расчет; линии — приближенные данные сторонних авторов [11]; символы — экспериментальные данные из компиляции Х. Пауля [2].

всего на 1 эВ приводит к снижению максимума тормозной способности вещества и к его смещению в сторону больших значений энергии. Из сопоставления выполненных расчетов с большим массивом экспериментальных данных, взятых из компиляции Х. Пауля [11], следует, что в отсутствие какой-либо информации о величинах ϵ_{li} в проведенных экспериментах они достаточно хорошо соответствуют друг другу. На рис. 2 сплошная кривая отражает рассчитанное энергетическое распределение тормозной способности углерода для пучка ионов лития, выполненное с теми же параметрами для ионов, что и для алюминия (рис. 1). Из-за естественных различий в значениях параметров электронных оболочек атомов углерода и алюминия, которые во многом определяют поведение функции F_M^N в (1), “ступенька” в распределении $S(E)$ становится более широкой. Рост равновесного заряда z_{eq} (в ряду ионов от лития к углероду) с одновременным уменьшением параметра β приводит к формированию распределений $S(E)$ углерода для ионов бериллия, бора и углерода, которые изображены на рис. 3–5 сплошными линиями. Сопоставление этих энергетических распределений с экспериментальными значениями тормозной способности алюминия и углерода для пучков ионов лития, бериллия, бора и углерода позволяет сделать следующий вывод. При имеющемся в научных публикациях разбросе измеренных значений тормозной способности методика [9], основанная на учете зависимости зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества, позволяет проводить расчеты

тормозной способности S вещества для пучка ионов средних и низких энергий, соответствующие экспериментальным результатам.

ВЫВОДЫ

Определены базовые параметры, характеризующие зависимости тормозной способности вещества для ионов лития, бериллия, бора и углерода от их скорости в широком диапазоне энергии. На их основе выполнены модельные расчеты тормозной способности S углерода и алюминия для направленных пучков ионов лития, бериллия, бора и углерода. Проведена их апробация в результате сопоставления расчетов тормозной способности с массивом экспериментальных измерений этой величины в компиляции Х. Пауля. Показано, что использование предложенной методики, основанной на учете зависимости зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества, позволяет проводить расчеты тормозной способности S вещества для ионов лития, бериллия, бора и углерода средних и низких энергий, соответствующие результатам экспериментов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

Конфликт интересов. Авторы данной статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ICRU Report 73. Stopping of Ions Heavier Than Helium. International Commission on Radiation Units and Measurements. 2005.
2. ICRU Report 49. Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles. International Commission on Radiation Units and Measurements. 1993.
3. Van Gastel R., Hlawacek G., Zandvliet H.J.W., Poelsema B. // Microelectron. Reliab. 2012. V. 52. № 9–10. P. 2104. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2012.06.130>
4. Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org)
5. Weick H. ATIMA. <https://web-docs.gsi.de/~weick/atima/>
6. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2010. V. 268. № 11–12. P. 1818. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.02.091>
7. Betz H.D., Hortig G., Leischner E., Schmelzer Ch., Stadler B., Weihrauch J. // Phys. Lett. A. 1966. V. 22. P. 643.

8. Cruz S.A. // Radiat. Eff. 1986. V. 88. P. 159.
9. Михеев Н.Н., Безбах И.Ж. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2023. № 1. С. 20. <https://doi.org/10.31857/S1028096023010168>
10. Белкова Ю.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 3. С. 66. <https://doi.org/10.31857/S1028096022030050>
11. Paul H. IAEA, NDS. <https://www-nds.iaea.org/stopping/>
12. Михеев Н.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 3. С. 94. <https://doi.org/10.31857/S1028096022030141>.
13. Михеев Н.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2010. № 4. С. 25.
14. Зигбан К., Нордлинг К., Фальман А. и др. Электронная спектроскопия. М.: Мир, 1971. 494 с.
15. Физические величины: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

Dependence of the Charge State of a Light Ion Beam in Matter on Particle Velocity

N. N. Mikheev^{1,*}, I. Zh. Bezbakh¹

¹*Shubnikov Institute of Crystallography of FSRC "Crystallography and Photonics" RAS,
Moscow, 119333 Russia*

**e-mail: kmikran@spark-mail.ru*

The results of applying the statistics of a discrete multiple scattering process to analytically describe the dependence of the charge state of light ions in matter on particle velocity are presented. It is shown that the use of a technique based on taking into account the dependence of the charge state of the beam ions on the ratio of the ion velocity to the minimum velocity of the electrons of the substance makes it possible to calculate the stopping power of the substance for lithium, beryllium, boron and carbon ions of medium and low energies, corresponding to the experimental results.

Keywords: directed beam of monoenergetic ions, multiple inelastic scattering, stopping power of matter, charge state of an ion beam.