

Брашеников В. С. и др.  
2232/91

342a +



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Б 1-2-91-93

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

Дубна 1991

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
Лаборатория вычислительной техники и автоматизации

Б1-2-91-93

В.С. Барашенков, А. Полянский<sup>\*)</sup>, А.Н. Сяснин, С.Ю. Шамаков

Расчет пробегов  
и ионизационных потерь энергии заряженных частиц в средах

<sup>\*)</sup> Постоянный адрес: Институт Ядерных Исследований, Свερк, ПР

Дубна 1991

Введен в печать 15.02.91

Институт Ядерных Исследований  
Свερк, ПР

### Аннотация

Дана сводка соотношений, используемых в прикладных задачах для вычисления пробегов и потерь энергии мезонами, протонами и более тяжелыми ионами в различных средах. Рассматривается область энергий от нескольких эВ до нескольких десятков ГэВ.

## Введение

При моделировании межъядерных каскадов в облучаемом веществе, исследовании характеристик проектируемых электроядерных бридиров, при решении различных микродозиметрических и других прикладных задач необходимо знать пробеги и потери энергии заряженных частиц. Методы расчета этих величин достаточно хорошо разработаны и обсуждались во многих работах. В литературе содержится такое большое количество феноменологических соотношений и теоретических выражений различной степени точности, что тому, кто специально не занимался этим вопросом, часто трудно сделать свой выбор, особенно на стыках различных приближений. В то же время определение потерь энергии — важный этап любого расчета транспорта частиц в веществе, от которого существенно зависит точность результата.

Во многих случаях — например, при вычислении суммарного тепловыделения и накопления новых нуклидов, при расчете полного выхода нейтронов и различных пространственных распределений с шагом, большим нескольких миллиметров, — вполне достаточно полуфеноменологической формулы Стернхаймера /1-3/. Такой алгоритм используется, в частности, в программу и комплексе "КАСКАД" /4/.

Однако, в более сложных задачах подобный подход оказывается слишком грубым. Например, при моделировании каскадов, инициированных тяжелыми ионами низких и средних энергий, при исследовании радиационных повреждений электронных микросхем и энерговыведения в тонких пленках, где большой вклад дают ядра отдачи, образующиеся в упругих и неупругих ядерных взаимодействиях. В таких случаях приходится прибегать к более детальному и более трудоемкому способу расчета.

Ниже мы рассмотрим оба — приближенный "стернхаймеровский" и более точный — подходы и определим границы их применимости.

Следует подчеркнуть, что ниже речь всегда будет идти о длине пробега вдоль траектории частицы. Его можно заменить отрезком прямой, соединяющей начальную и конечную точки траектории вдоль

направления начальной скорости частицы, как это обычно делается при моделировании межядерного каскада, лишь при условии, что влияние многократного кулоновского рассеяния не велико, или если пробеги каскадных частиц (особенно тяжелых ионов) значительно меньше деталей облучаемой системы и подавляющая часть родившихся в них частиц там и остаются. Этому соответствуют размеры деталей в десятки микрометров. При меньших размерах следует учитывать различие пробегов и их проекций на направление движения. В нашей программе таких различий не делается.

Далее мы везде будем использовать обозначения:

$T$  - кинетическая энергия частицы,  $E = T + M$  - ее полная энергия;

$V$  - скорость частицы,  $\beta = v/c$  - ее скорость в единицах скорости света;

$A$  - массовое число частицы (для  $\pi$ -мезона  $A = 0.14$ );

$Z$  - зарядовое число частицы;

$A_T$  и  $Z_T$  - массовое и зарядовое числа ядер среды;

Если среда содержит  $N$  ядерных компонент, то  $\xi_n$  - относительная доля  $n$ -ой компоненты;  $\sum_{n=1}^N \xi_n = 1$ .

Расчет в приближении Стернхаймера.

В этом случае пробег протона в веществе с ионизационным потенциалом  $I$

$$R_p(T, I) = R_p(2 \text{ МэВ}) + \frac{A_T}{2} \frac{T}{Z_T} \phi(T) \sum_{n=0}^3 \beta_n(T) \chi^n(I), \quad (1)$$

$$\chi(I) = \log_{10}(I [\text{эВ}] / 166),$$

здесь  $R_p(2 \text{ МэВ})$  - задаваемая величина пробега с энергией  $T = 2 \text{ МэВ}$ . Значения функций  $\phi(T)$  и  $\beta(T)$  определяются интерполяцией их табличных значений (см. /1-3/).  $I$  - ионизационный потенциал для сред с зарядом  $Z_T \leq 14$ , он задается таблицей 1, для сред с  $Z_T > 14$  используется аппроксимация /1,2/.

$$I = 9.76 Z_T + 58.8 / Z_T^{0.19}, \text{ эВ} \quad (2)$$

Таблица 1

$Z_T$	$I, \text{эВ}$	$Z_T$	$I, \text{эВ}$	$Z_T$	$I, \text{эВ}$
1	18.7	6	78.0	11	150.0
2	42.0	7	99.5	12	157.0
3	39.0	8	98.5	13	163.0
4	60.0	9	117.0	14	172.0
5	68.0	10	140.0	-	-

При этом протоны с энергией  $T < 2 \text{ МэВ}$  считаются остановившимися (в противном случае для вычисления их пробега следует использовать алгоритм, описанный в следующем разделе).

В случае  $N$  - компонентной среды следует использовать усредненные значения:

$$A_T = \sum_{n=1}^N \xi_n A_{Tn}, \quad Z_T = \sum_{n=1}^N \xi_n Z_{Tn} \quad (3)$$

$$\lg I = \sum_{n=1}^N \xi_n Z_{Tn} \lg T_n / Z_T \quad (4)$$

Пороговый пробег  $R_p$  (2 МэВ,  $I$ ) задается для среднего значения  $I$ .

Формулы (1), (2) можно использовать также для вычисления пробегов мезонов и легких ионов, если учесть скейлинговое соотношение

$$R(T) = \frac{A}{Z^2} R_p(T) \quad (5)$$

где  $R$  - пробег частицы с массовым и зарядовым числами  $A$ ,  $Z$ ,  $R_p$  - пробег протона,  $T$  - энергия в единицах  $\text{МэВ}/A$ , или более точное соотношение:

$$R(T) = R(T^*) + \frac{A}{Z^2} [R_p(T) - R_p(T^*)], \quad (6)$$

где  $T^*$  имеет значение порядка нескольких  $\text{МэВ}/A$ , значения пробегов  $R(T^*)$  и  $R_p(T^*)$  должны быть заданы заранее.

Точность соотношений (5) и (6) для легких ионов при выборе

различных значений  $T^*$  иллюстрирует таблица 2.

Таблица 2

Относительная разность пробегов  $\Delta = [R(T) - R_p(T) A/Z^2] / R(T), \%$ , для  $\alpha$ -частиц и ионов  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^9\text{Be}$  в углероде. Значения  $T$  и  $T^*$  в единицах МэВ/А.

T	$\alpha$		Li		Be	
	форм (5)	форм (6) $T^*=1$	форм (5)	форм (6) $T^*=2.5$	форм (5)	форм (6) $T^*=2.8$
2	3	0.2	11	--	20	-
3.2	1	0.2	6	0.7	11	1.5
5	0.2	0.5	3	0.1	5	0.2
7	0.2	0.6	1.5	0.2	3	0.1
10	0.5	0.7	0.6	0.2	1.5	0.05

Для других ионов величину  $T^*$  можно оценить, например, путем сравнения формул (5), (6) с табличными значениями пробегов  $R$  и  $R_p$ , приведенными в работах /5,6/.

Рассмотрим теперь более точный алгоритм расчета пробегов, который имеет различный вид в четырех областях: при низких, высоких, промежуточных между ними  $T$  при ультравысоких энергиях.

#### Область низких энергий.

Это область энергий

$$T < T_2 = \frac{m v^2}{2A} = \frac{m c^2}{2} \cdot \left( Z^{2/3} / 137 \right)^2 = 0.0250 Z^{4/3} \text{ МэВ/А}, \quad (7)$$

при которых скорость частицы  $v$  меньше скорости орбитального электрона, рассчитанной с помощью теории Томаса-Ферми,

$$v/c < Z^{2/3} / 137, \quad (8)$$

Граничная энергия  $T_2/A$  не зависит от свойств среды и определяется лишь типом тормозящейся частицы. Представление о ее

величине дает таблица 3.

Таблица 3

Энергетические границы различных приближений

$T < T_1$  - область ядерных (упругих, кулоновских) потерь

$T < T_2$  - область применимости формул Линдхарда

$T > T_3$  - область применимости теории Бете-Блоха

Частица	p	$\alpha$	$^{12}_6\text{C}$	$^{28}_{14}\text{Si}$	$^{74}_{32}\text{Ge}$	$^{238}_{92}\text{U}$
$T_1/A, \text{МэВ}$	0.01	0.016	0.033	0.058	0.10	0.20
$T_1, \text{МэВ}$	0.01	0.064	0.40	1.6	7.4	48
$T_2/A, \text{МэВ}$	0.025	0.063	0.27	0.84	2.5	10.4
$T_2, \text{МэВ}$	0.025	0.25	3.3	24	185	2480.
$T_3/A, \text{МэВ}$	0.75	1.9	8.3	26	85	335
$T_3, \text{МэВ}$	0.75	7.6	100	740	$2.7 \times 10^3$	$8 \times 10^4$

Как видно, в зависимости от типа частицы энергия  $T_2$  изменяется в очень широких пределах - от десятков КэВ для легких сред до нескольких ГэВ для тяжелых ионов.

В области  $T < T_2$  пробег и удельные ионизационные потери частицы вычисляются в приближении Линдхарда [7]:

$$R(T) = \int_0^T \frac{dE}{dE/dx} [мкм] \quad (9)$$

$$\frac{dE}{dx} = -5.102 d \sum_{i=1}^N \left( \frac{d\sigma/d\rho \right)_i \xi_i \frac{A}{A_{Ti} (A + A_{Ti})} \times \frac{Z Z_{Ti}}{(Z^{2/3} + Z_{Ti}^{2/3})^{1/2}} \quad [МэВ/мкм] \quad (10)$$



где  $d$  - плотность среды в единицах  $[г/см^3]$ ,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\rho}\right)_i = \left(\frac{d\sigma}{d\rho}\right)_i^{(in)} + \left(\frac{d\sigma}{d\rho}\right)_i^{(el)} \quad (11)$$

Потери в неупругих столкновениях частицы с атомными электронами

$$\left(\frac{d\sigma}{d\rho}\right)_i^{(in)} = 0.0793 K \frac{(A + A_{Ti})^{3/2}}{A^{3/2} A_{Ti}^{1/2}} \times$$

$$\times \frac{(Z Z_{Ti})^{1/2} Z^{1/6}}{(Z^{2/3} + Z_{Ti}^{2/3})^{3/4}} e_i^{1/2} \quad (12)$$

Потери в упругих (кулоновских) столкновениях частицы с атомными ядрами:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\rho}\right)_i^{(el)} = \begin{cases} 0, & \text{при } T > T_1 \\ 4.51 e^{1/2} \exp(-2.51 e^{0.277}) & \text{при } T \leq T_1 \end{cases} \quad (13)$$

(это выражение представляет собой аналитическую аппроксимацию кривой  $dE/dX$  с рис. 2 работы /7/, рассчитанной с помощью теории Томаса-Ферми);

$$e_i = 3.255 \times 10^4 \frac{A_{Ti} A}{(A + A_{Ti}) Z Z_{Ti}} \frac{1}{(Z^{2/3} + Z_{Ti}^{2/3})^{1/2}} (E/A) \quad (14)$$

$$R = 1.659 \times 10^5 \frac{A}{(A + A_{Ti})^2 (Z^{2/3} + Z_{Ti}^{2/3})} (R) \quad (15)$$

универсальные параметры /7/, характеризующие энергию и пробег ионов, соответственно,

$$T_i = \frac{M v^2}{2A} = \frac{M_p c^2}{2} \beta_2^2 = 0.01 Z^{2/3}, \text{ МэВ/А} \quad (15)$$

1) В некоторых случаях (см., например, таблицы /5,6/ пробег  $R$  выражают в единицах  $(мг/см^2)$ , удельные потери  $dE/dX$  - в единицах  $МэВ/(мг/см^2)$ . Для перехода к таким единицам выражение (9) следует умножить, а выражение (10) - разделить на фактор  $\eta = 0.1 d [г/см^2]$ .

Из таблицы 3 видно, что область, где существенны упругие столкновения, значительно ниже границы применимости линдхардовских формул. Правда, следует подчеркнуть, что выбор пороговых энергий  $T_1$  и  $T_2$  весьма приблизителен.

Что касается коэффициента  $K$  в выражении (12), то, следуя работе /7/, его обычно полагают равным единице. Однако в ряде случаев (см. таблицу 4) он заметно отличается от единицы, поэтому для улучшения точности целесообразно использовать феноменологическую корреляцию

$$K = \sum_{i,j=1}^4 C_{i,j} z^{i-1} z^{j-1} \quad (16)$$

с коэффициентами, указанными в Таблице 5.

Таблица 4

Значения коэффициента  $K$ , полученные путем сравнения выражения (12) с подогнанными под эксперимент табличными данными работы /5/ при  $T = 0.0125$  МэВ/А.

Ion	$\rho$	$\alpha$	${}^9_4\text{Be}$	${}^{28}_{14}\text{Si}$	${}^{74}_{32}\text{Ge}$	${}^{238}_{92}\text{U}$
Target						
${}^9_4\text{Be}$	0.63	0.90	1.1	1.4	1.5	1.5
${}^{12}_6\text{C}$	0.63	0.86	1.0	1.1	1.2	1.2
${}^{27}_{13}\text{Al}$	0.90	1.2	1.3	1.2	1.1	1.0
${}^{74}_{32}\text{Ge}$	1.1	1.3	1.3	1.1	0.90	0.72
${}^{153}_{63}\text{Eu}$	1.2	1.4	1.4	1.0	0.75	0.53
${}^{181}_{73}\text{Ta}$	1.2	1.4	1.4	0.97	0.72	0.50
${}^{238}_{92}\text{U}$	1.2	1.4	1.4	0.95	0.69	0.46

Указанные коэффициенты  $C_{ij}$  обеспечивают точность не хуже 15–20 % и применимы для наиболее важной в практическом отношении области ионов от водорода до германия и сред от бериллия до европия.

Таблица 5

Коэффициенты  $C_{ij}$  в формуле (6)

i	j	1	2	3	4
1		0.10497	0.18187	$-9.6718 \times 10^{-3}$	$1.7917 \times 10^{-4}$
2		$6.8027 \times 10^{-2}$	$2.1275 \times 10^{-3}$	$-7.8531 \times 10^{-4}$	$1.7656 \times 10^{-5}$
3		$-1.7788 \times 10^{-3}$	$-1.3348 \times 10^{-4}$	$2.8330 \times 10^{-5}$	$-6.1445 \times 10^{-7}$
4		$1.4419 \times 10^{-5}$	$1.2776 \times 10^{-6}$	$-2.5577 \times 10^{-7}$	$5.4885 \times 10^{-9}$

#### Область высоких энергий

Область, где применима теория Бете-Блока с поправками, учитывающими связь среды и ее поляризацию электрическим полем частицы. Сравнительные расчеты показывают, что этому соответствует скорость частиц

$$v/c > \begin{cases} 0.04 Z^{2/3} & \text{при } Z \leq 30 \\ 0.0705 Z^{1/2} & \text{при } Z > 30 \end{cases} \quad (17)$$

Соответствующие граничные значения энергии указаны в таблице 3.

Со стороны очень высоких энергий рассматриваемое приближение имеет границу

$$T \leq 10 \text{ ГэВ/А} \quad (18)$$

выше которой следует учитывать влияние пространственных размеров атомных ядер и рождение электрон-позитронных пар [8,9].

Удельные потери энергии частиц в рассматриваемой области

$$dE/dX = - d \sum_{i=1}^N (dE/dX)_i \xi_i \quad (19)$$

$$(dE/dX) = 0.3072 \frac{Z^2 Z_{Ti}}{A_{Ti} \beta^2} (B + E + P_i) \quad (20)$$

$$B = \ln(1.022 \times 10^6 \beta^2 \gamma^2 / I [\text{эВ}]) - \beta^2 \quad (21)$$

$$\text{где } \gamma^2 = 1/(1-\beta^2), \beta^2 = T(T+2M)/(T+M)^2 \quad (22)$$

$M$  - масса тормозящейся частицы;  $I$  - средний ионизационный потенциал среды в электронвольтах (см. формулу (4)).

Поправка, учитывающая связь электронов в атомах /10,11/:

$$E = - (e_1 + e_2 I) I^2 Z_T / \beta^2 \gamma^2 \quad (23)$$

$$e_1 = c_1 + c_2 / \beta^2 \gamma^2 + c_3 / \beta^3 \gamma^3 \quad (24)$$

$$e_2 = c_4 + c_5 / \beta^2 \gamma^2 + c_6 / \beta^3 \gamma^3 \quad (25)$$

где  $Z_T$  - средний заряд тормозящей среды.

Константы  $c_i$  указаны в таблице 6.

Таблица 6

$c_1$	$4.22377 \times 10^{-7}$
$c_2$	$3.04043 \times 10^{-8}$
$c_3$	$-3.8106 \times 10^{-10}$
$c_4$	$3.858019 \times 10^{-9}$
$c_5$	$-1.667989 \times 10^{-10}$
$c_6$	$1.57955 \times 10^{-12}$

Поправка на поляризацию среды

$$P_i = -0.5 \ln(\beta^2 \gamma^2) + \ln(I/I_{oi}) + 0.5 \quad (26)$$

$$I_{oi} = 28.80 (d Z_{Ti} / A_{Ti})^{1/2} \quad (27)$$

$I$  - средний ионизационный потенциал (4).

### Область промежуточных энергий.

В интервале  $T_2 < T < T_3$ , где не применимы ни формулы Линдхарда, ни теория Бете-Блоха, можно воспользоваться сплайн-интерполяцией  $\ln(dE/dX)$  по  $\ln T$ .

### Область сверхвысоких энергий.

Поскольку такие энергии редко встречаются в прикладных задачах, мы ограничимся всего лишь несколькими замечаниями.

К членам  $B$ ,  $K$ ,  $P_i$  в формуле (20) здесь добавляются поправки, учитывающие пространственную структуру ядер (их форм-факторы) и вероятность рождения электрон-позитронных пар /8,9,12/.

Учет структуры ядра дает поправку около 1% при  $T = 10$  ГэВ/А и приблизительно 10% при  $T = 300$  ГэВ/А. Примерно такую же величину имеет здесь поправка на поляризацию среды /12/.

### Литература

1. Sternheimer R. Phys. Rev., 1966, v.145, p.247.
2. Sternheimer R. Phys. Rev., 1971, v.38, p.3681.
3. Стародубцев С.В., Романов А.М. Прохождение заряженных частиц через вещество. Ташкент, 1962.
4. Барашенков В.С. и др. Сообщение ОИЯИ Р2-85-173, Дубна, 1985.
5. Northcliffe L.C., Schilling R.F. Nucl. Data Tables, 1970, v.A7, p.235.
6. Hubert F., Bimbot R. Gauvin H. Atomic Data and Nucl. Data Tables, 1990, v.46, p.1.
7. Lindhard L., Scharff M., Schiott H.E. Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 1963, v.33, N14.
8. Горячев Б.И. и др. ЯФ, 1989, т.49, с.1046.
9. Quan S., von Ginneben A. Nucl. Inst. Meth., 1987, v.A256, p.285.
10. Walske M. Phys. Rev., 1952, v.88, p.1283.
11. Walske M. Phys. Rev., 1956, v.101, p.940.
12. Потемкин Е.Л. и др. ЯФ, 1978, т.27, с.900.

  
Polanski



