

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-84-371

Д.Бардош, Г.М.Гавриленко

ЭЛЕКТРОННОЕ ТОРМОЖЕНИЕ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ

Направлено в журнал "Acta Physica Hungarica"

1984



Во многих теоретических расчетах по радиационным повреждениям в материалах, вызванных энергетическими ионами, требуется знание зависимости электронного торможения частицы в мишени от энергии <sup>1/1/</sup>.

При малых значениях энергий /меньше чем  $24 Z_1^{4/3}$  МэВ/нуклон, где  $Z_1$  - заряд ядра иона/ электронное торможение зависит линейно от скорости. В этой области энергий зависимость теории электронного торможения была развита в работах Фирсова <sup>2/</sup> и Линдхарда /так называемая LSS -формула/ <sup>3/</sup>. Фирсов для объяснения зависимости электронного торможения от энергии использует квазимолекулярное представление. и объясняет возникновение торможения за счет передачи энергии электронам мишени при перекрывании электронных облаков ионов мишени и снаряда. Модель Линдхарда является динамической, использует представления о поляризуемости среды и диэлектрический формализм. В обеих этих моделях существенно, чтобы скорости электронов ионных облаков были значительно больше скоростей ионов снарядов, облучающих мишень. Зависимость электронного торможения от энергии хорошо согласуется с опытом в модели Фирсова при  $Z_2 \approx Z_1$  /где  $Z_2, Z_1$  - зарядовые числа ионов мишени и снаряда/, в то время как при большой разнице зарядовых чисел формула Линдхарда "работает" лучше. В дальнейшем <sup>4/</sup> было показано, как объединить эти подходы, т.е. как из квазимолекулярных представлений Фирсова получить формулу, подобную LSS -формуле.

При достаточно высоких энергиях налетающая частица лишается всех своих электронов, и в этой области энергий теория Бетте-Блоха дает хорошие результаты <sup>5,6/</sup>.

В промежуточной области энергий при замедлении частицы в ее электронной структуре происходят очень сложные процессы. Вследствие статистического характера столкновений заряд налетающей частицы становится определенной величиной только в среднем и зависит от величины энергии налетающей частицы. Понятие эффективного заряда широко использовалось в <sup>7,8/</sup>. В промежуточной области энергий Сугияма предложил использовать синтез теорий Бетте-Блоха и Линдхарда <sup>4/</sup>. Он обратил внимание на то, что в этом диапазоне энергий потери связаны не только с передачей энергии электронам мишени, но и с обменом электрона мишени на электрон снаряда, и предложил использовать понятие эффективного заряда в формуле Бетте-Блоха, а также модифицировать формулу Линдхарда.

Цель этой работы - проанализировать функцию электронного торможения в промежуточной области энергий, следуя теории Су-



гиямы, используя при этом вместо расчетов плотности электронных облаков ионов по методу Томаса-Ферми, простую универсальную функцию электронного распределения, предложенную Гашпаром<sup>/9/</sup>.

### СТАТИСТИЧЕСКИЕ ПРЕДПОЛОЖЕНИЯ СТОЛКНОВЕНИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ

Следуя основной идее модели, предложенной Сугиямой, разобьем электроны в электронных облаках налетающего иона и иона мишени на две группы: внешние и внутренние. Внешними электронами называются те, скорость которых меньше скорости налетающей частицы, остальные, скорость которых больше, - внутренними. Далее предполагается, что внешние электроны дают вклад  $S_1^*$  в электронное торможение по механизму Бетте-Блоха, а внутренние  $S_2^*$  - по механизму Фирсова. Электронное торможение получается как сумма вкладов электронных торможений

$$S = S_1^* + S_2^* \quad /1/$$

Электронное торможение  $S_1$  энергетического тяжелого иона с рядом  $Z_1 e$  и скоростью  $v$ , согласно формуле Бетте-Блоха, равно

$$S_1 = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m v^2} N Z_2 \ln \frac{2m v^2}{I} \quad /2/$$

где  $m$  - масса электрона,  $Z_2$  - атомное число иона мишени,  $N$  - плотность вещества мишени,  $I$  - средняя энергия возбуждения атома. Предполагая, что в  $S_1$  дают вклад только внешние электроны, имеем

$$S_1^* = \frac{4\pi Z_1^{*2} e^4}{m v^2} N Z_2^* \ln \frac{2m v^2}{I^*} \quad /3/$$

где  $Z_1^*$ ,  $Z_2^*$  - эффективные заряды, обусловленные внешними электронами ионов,  $I^*$  - эффективный средний ионизационный потенциал внешних электронов. Согласно изложенной выше идее,  $Z^*$  определяется по формуле

$$Z^* = \int_{r_b}^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) dr \quad /4/$$

где  $\rho(r)$  - функция плотности электронного облака,  $r$  - расстояние от ядра,  $a$ ,  $r_b$  - параметр, определяемый условием

$$v = b v_e(r_b) = b \hbar / m [3\pi^2 \rho(r_b)]^{1/3} \quad /5/$$

где  $v$  - скорость налетающей частицы,  $b \approx 1,3^{10/}$ . Средняя эффективная энергия ионизации вычисляется по формуле /11/

$$\ln I^* = \frac{1}{Z_2^*} \int_{r_b}^{\infty} \ln[\gamma \hbar \omega(r)] 4\pi r^2 \rho(r) dr \quad /6/$$

где  $\gamma$  - параметр теории /порядка единицы/ и  $\omega(r) = (4\pi e^2 \rho(r)/m)^{1/2}$ . Электронное торможение вычислим  $S_2$  по LSS-формуле, которую получил Сугияма на основе квазимолекулярной теории Фирсова<sup>/4/</sup>:

$$S_2 = 8\pi e^2 a \phi N \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \left(\frac{v}{v\phi}\right) \quad /7/$$

Предполагая, что в квазимолекулярной связи участвуют только электроны внутренних оболочек, модифицируем /6/ аналогично /5/:

$$S_2^* = 8\pi e^2 a \phi N \frac{\tilde{Z}_1 \tilde{Z}_2}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}} \left(\frac{v}{v\phi}\right) \quad /8/$$

$\tilde{Z}_1$ ,  $\tilde{Z}_2$  - эффективные заряды, обусловленные внутренними электронами:

$$\tilde{Z} = \int_{r_b}^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r) dr = Z - Z^* \quad /9/$$

Из определений вытекает, что  $S$  переходит в формулу Бете-Блоха при  $v \rightarrow \infty$  и в формулу типа LSS при  $v \rightarrow \phi$ . В промежуточной области энергий, таким образом, электронное торможение параметризуется двумя параметрами  $b$ ,  $\gamma$  и функцией распределения электронной плотности  $\rho(r)$ . Определим  $\rho(r)$  с помощью универсального распределения, предложенного Гашпаром<sup>/9/</sup>:

$$\rho(r) = C \frac{e^{-\alpha r/\mu}}{1 + A r/\mu} \quad /10/$$

где  $\alpha = 0,04$ ,  $A = 9$ ,  $\mu = 0,8853 a_0 / Z^{1/3}$ .  $C$  определяется условием нормировки

$$\int_{r_b}^{\infty} \rho(r) 4\pi r^2 dr = Z \quad /11/$$

### РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ И ДРУГИМИ ТЕОРЕТИЧЕСКИМИ РАСЧЕТАМИ

Исследовалось электронное торможение налетающих ионов H, He, Li, C, O, Mg, Si в диапазоне энергий от 0,2 до 30 МэВ/нуклон в мишенях Al, Ni, Ag, Au. При численных расчетах параметр  $b$  полагался равным 1,26,  $\gamma = 1,0$ . Результаты численных расчетов представлены на рис.1-4. Согласие теоретических расчетов и экспериментальных данных при рассеянии ионов на углероде и никеле



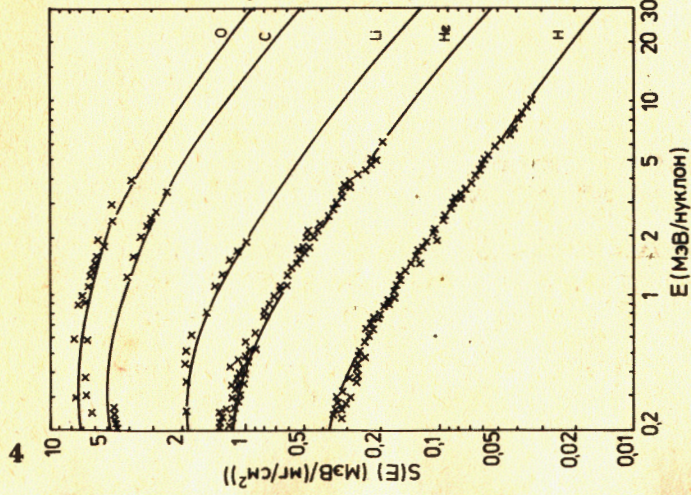


Рис.1. Электронное торможение ионов H, He, Li, C, O в Al. Сплошные кривые - теоретические расчеты. Экспериментальные данные /8,12/.

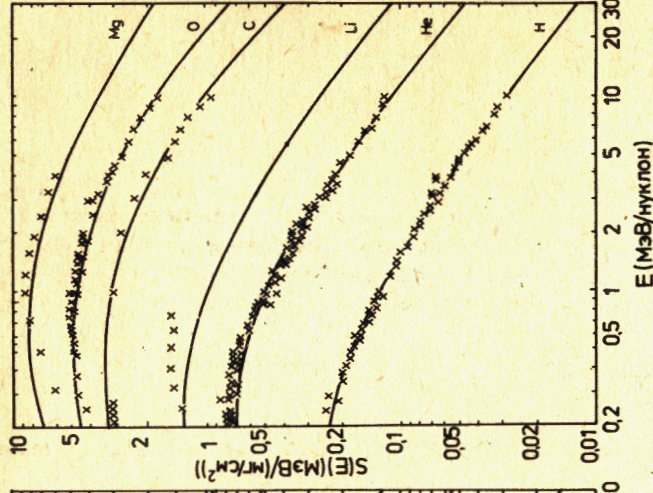


Рис.2. Электронное торможение ионов H, He, Li, C, O, Mg в Ni. Экспериментальные данные /8/.

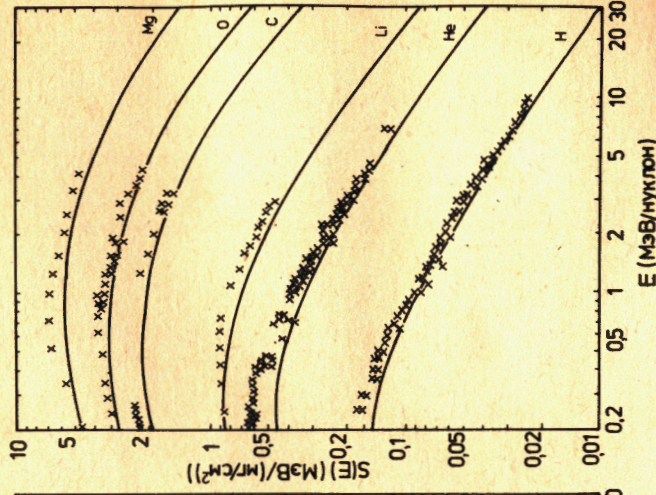


Рис.3. Электронное торможение ионов H, He, Li, C, O, Mg в Ag. Экспериментальные данные /8,12/.

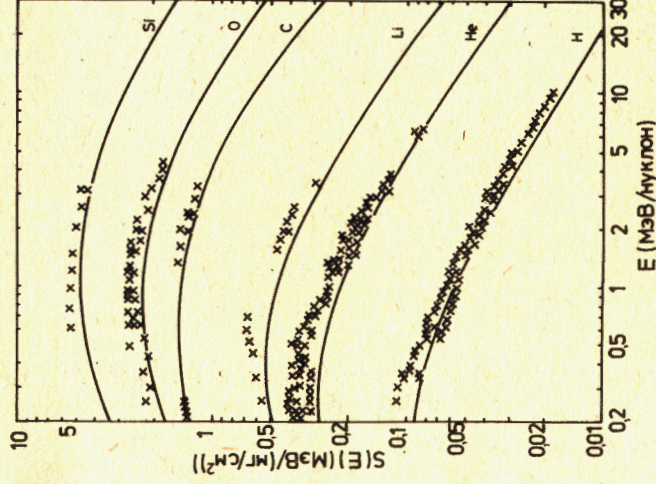


Рис.4. Электронное торможение ионов H, He, Li, C, O, Si в Al. Экспериментальные данные /8,12/.

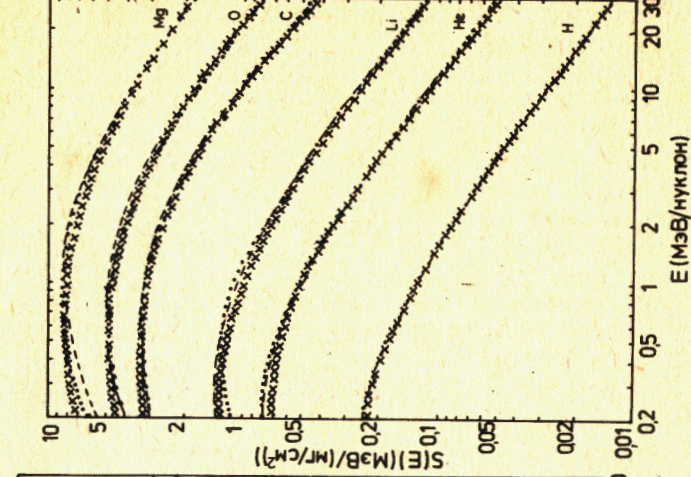


Рис.5. Сравнение электронного торможения ионов H, He, Li, C, O, Mg в Ni с расчетами /7,8/. Крестики - наши расчеты; штриховая линия - расчеты /7/, пунктирная - /8/.

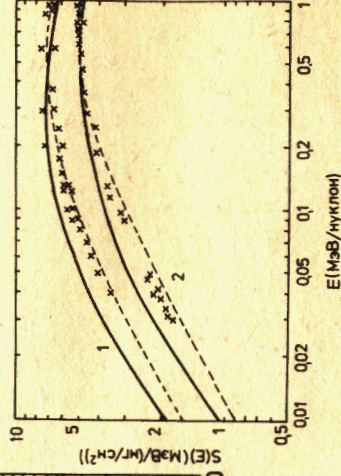


Рис.6. Сравнение электронного торможения ионов O в Al /кривая 1/ и Ni /кривая 2/. Сплошная кривая - теоретические расчеты, штриховая - расчеты /7/. Экспериментальные данные /4,8/.



вполне удовлетворительное /рис.1 и 2/, но наблюдается некоторое расхождение в рассеянии на серебре и особенно на золоте /рис.3 и 4/. Эти расхождения указывают, прежде всего, на отсутствие универсального характера параметров теории  $b$  и  $\gamma$ , которые использовались при определении эффективного заряда. Сравнение энергетических потерь представленных расчетов и полуфеноменологических расчетов других авторов показано на рис.5 и 6. При высоких энергиях совпадение вполне хорошее, однако в районе низких энергий полуфеноменологическое описание дает лучшее согласие с экспериментом. Эти расхождения можно устранить, используя вместо универсальной функции для электронной плотности функцию, рассчитанную по теории Хартри-Фока-Слэтера, учитывая влияние обменно-корреляционной энергии.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Bardos G., Fedyanin V.K., Gavrilenko G.M. JINR, E17-83-303, Dubna, 1983.
2. Фирсов О.Б. ЖЭТФ, 1959, 36, с. 1517.
3. Lindhard J., Scharff M., Schiøt H.E. Mat-Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk., 1963, 33, No 14.
4. Sugiyama H. Rad.Eff., 1981, 56, p. 205.
5. Bethe H.A. Ann.Phys., 1930, 5, p. 325.
6. Bloch F. Ann.Phys., 1930, 16, p. 285.
7. Northcliffe L.C., Schilling R.F. Nuclear Data Tables, 1970, 7A, p. 3-4.
8. Ziegler J.F. Handbook of Stopping Cross Sections of Energetic Ions in All Elements, Pergamon Press Inc., 1980, Vol.5.
9. Gaspar R. Acta Phys.Hung., 1954, 3, p. 263.
10. Brand W. Atomic Collisions in Solids, Plenum Press, New York, 1975, vol. 1.
11. Lindhard J., Scharff M. Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid.Selsk., 1953, 27, No. 15.
12. Anthony J.M., Lanford W.A. Phys.Rev., 1982, A25, p. 1868.

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 мая 1984 года.

#### НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований



**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ  
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Бардош Д., Гавриленко Г.М.

P17-84-371

Электронное торможение энергетических ионов

Рассчитано электронное торможение ионов H, He, Li, C, O, Mg, Si в диапазоне энергий от 0,2 до 30 МаВ/нуклон в мишенях Al, Ni, Ag, Au. Электронное торможение вычислялось по модифицированной формуле Бетте и Линдхарда /так называемая LSS-формула/. Для вычисления эффективных величин зарядов использовалась универсальная функция распределения электронов Гашпара.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод авторов

Bardos G., Gavrilenko G.M.

P17-84-371

Electronic Stopping Power Formula for Energetic Ions

Electronic stopping power has been calculated for H, He, Li, C, O, Mg and Si ion projectiles in Al, Ni, Ag and Au substrates. Ion energies range from 0.2 MeV/amu to 30 MeV/amu. The stopping power formula has been expressed as the sum of a modified Bethe formula and a modified Lindhard-Scharff-Schiott (LSS) formula. In the both formulas effective charges has been applied, which were computed on the basis of universal electronic density suggested Gaspar.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984