

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-86-336

Д. Бардош

ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ  
УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА БОЛЬЦМАНА  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПОТОКА  
И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОДОЛЬНОГО ПРОБЕГА  
БЫСТРЫХ ИОНОВ

Направлено в журнал "Physics Letters A"

**1986**

Применение линеаризованного уравнения переноса Больцмана для описания торможения быстрых ионов в веществе хорошо известно. Такие параметры распределения, как средний продольный пробег и разброс продольных пробегов, можно легче всего получить, решая уравнения переноса обратного вида <sup>1,2/</sup>. Эти уравнения были введены Линдхардом и его сотрудниками <sup>3/</sup>. Техника решения этих уравнений основана на методе моментов. Одной из основных проблем этого метода является построение функции распределения по ее моментам, особенно в случае высокоэнергичных ионов. Чтобы избежать этой трудности, в работе <sup>4/</sup> был предложен альтернативный подход для вычисления низкоинтенсивного хвоста распределения продольного пробега. В этом подходе автор использовал простую статистику столкновения и классические уравнения механики для описания торможения ионов. Это дает возможность описать низкоинтенсивный хвост благодаря тому, что он определен рассеянием на большие углы, а вероятность таких рассеяний мала, пока ион тормозится от начальной энергии до энергии максимального торможения.

На основе этой идеи в данной работе предлагается метод последовательных приближений для послойного решения линеаризованного уравнения переноса Больцмана. Приближение основано на малости величины вероятности рассеяния  $\xi$  на большие углы в некотором слое мишени. Можно показать, что в случае быстрых ионов  $\xi \ll 1$ , если толщина слоя  $\Delta x$  является достаточно малой. Поток и распределение продольного пробега до полной остановки иона можно получить, если приближенные уравнения решать последовательно для каждого слоя до полной остановки всех ионов.

В обычной постановке эксперимента частицы пучка летят в одном направлении, начиная свое движение из плоского источника. Поэтому удобно решать уравнение переноса с плоской симметрией. Предположим, что ось  $x$  системы координат перпендикулярна поверхности мишени, и источник пучка является плоским и параллельным. Тогда стационарное распределение ионного пучка характеризуется потоком  $\phi(E, \vec{e}, x)$  иона, где  $E$  — энергия,  $\vec{e}$  — направление движения иона и  $x$  — глубина. Эволюция функции  $\phi$  в пространстве определяется линеаризованным уравнением переноса Больцмана:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = I_n^0[\phi] + I_n^1[\phi] + I_e[\phi]. \quad (I)$$

Здесь первые два члена с правой стороны уравнения описывают интеграл столкновения иона с атомами мишени, при этом разделяются интегралы по рассеянию на малые и большие углы, то есть по малым и боль-

шим передаваемым энергиям:

$$I_n^0[\phi] = N \int_0^{\xi E} \frac{d\sigma_n(E+\tau, \tau)}{\omega \gg \theta} \phi(E+\tau, \vec{e}, x) - N \int_0^{\xi E} \frac{d\sigma_n(E, \tau)}{\omega \gg \theta} \phi(E, \vec{e}, x) \quad (2)$$

и

$$I_n^1[\phi] = N \int_{\xi E}^{\infty} \frac{d\sigma_n(E' \rightarrow E, \vec{e}' \rightarrow \vec{e})}{\omega \gg \theta'} \phi(E', \vec{e}', x) - N \int_{\xi E}^{\infty} \frac{d\sigma_n(E' \rightarrow E, \vec{e}' \rightarrow \vec{e})}{\omega \gg \theta} \phi(E, \vec{e}, x) \quad (3)$$

где  $N$  — плотность вещества,  $d\sigma_n$  — сечение рассеяния между ионом и атомами мишени,  $\theta$  — угол между направлением скорости и осью  $x$ ,  $\xi E$  — предел малой передаваемой энергии. В случае рассеяния на малые углы изменением направления движения можно пренебречь.

Разложим в ряд первый интеграл в выражении (2) по  $T/E$ , получаем

$$I_n^0[\phi] = \frac{1}{\omega \gg \theta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial E^k} \phi(E, \vec{e}, x) N \int_0^{\xi E} T^k d\sigma_n \quad (4)$$

Здесь интегралы представляют собой моменты потери энергии в случае малых передаваемых энергий.  $k=1$  отвечает средней потере энергии на единицу длины:

$$-\frac{\Delta E}{\Delta x} = S_{n0}(E) = N \int_0^{\xi E} T d\sigma_n \quad (5)$$

Третий член в уравнении (I) описывает взаимодействие иона с электронами мишени:

$$I_e[\phi] = N \int \frac{d\sigma_e(E+\tau, \tau)}{\omega \gg \theta} \phi(E+\tau, \vec{e}, x) - N \int \frac{d\sigma_e(E, \tau)}{\omega \gg \theta} \phi(E, \vec{e}, x), \quad (6)$$

он имеет одинаковую форму с уравнением (2). Первый интеграл разлагаем в ряд по  $T/E$  и получаем

$$I_e[\phi] = \frac{1}{\omega \gg \theta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial E^k} \phi(E, \vec{e}, x) N \int T^k d\sigma_e \quad (7)$$

В этом выражении интегралы описывают моменты электронной потери энергии. Член  $k=1$  дает так называемое электронное торможение:

$$S_e(E) = N \int T d\sigma_e. \quad (8)$$

Опуская в уравнениях (2) и (7) члены с  $k \geq 2$ , приходим к следующей форме уравнения переноса (I):

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{\omega \omega_0} \frac{\partial}{\partial E} [(S_e(E) + S_{n_0}(E))\phi] + I_n^{\pm}[\phi] \quad (9)$$

Ищем решение уравнения (9) в слое  $[0, \Delta x]$  методом последовательных приближений, учитывая, что вероятность рассеяния на большие углы мала:

$$\phi = \phi^{(0)} + \zeta \phi^{(1)} + \zeta^2 \phi^{(2)} + \dots \quad (10)$$

Интегрируя (9) по  $x$  и используя ряд (10), получаем

$$\phi^{(0)} + \zeta \phi^{(1)} + \zeta^2 \phi^{(2)} + \dots = \phi(x=0) + \int_0^x \frac{dx'}{\omega \omega_0} \frac{\partial}{\partial E} [(S_e(E) + S_{n_0}(E))(\phi^{(0)} + \zeta \phi^{(1)} + \zeta^2 \phi^{(2)} + \dots)] + \int_0^x dx' I_n^{\pm}[\phi^{(0)} + \zeta \phi^{(1)} + \zeta^2 \phi^{(2)} + \dots] \quad (11)$$

Следя обыкновенной процедуре метода последовательных приближений, разделим уравнение (11) в ряд уравнений по одинаковой степени малого параметра  $\zeta$ . В результате получаем систему дифференциальных уравнений

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi^{(i)} = \frac{1}{\omega \omega_0} \frac{\partial}{\partial E} [(S_e(E) + S_{n_0}(E))\phi^{(i)}] + Q_i, \quad i=0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

где

$$Q_0 = \phi(x=0), \quad Q_i = I_n^{\pm}[\phi^{(i-1)}], \quad i=1, 2, \dots$$

Система уравнений (12) решалась с точностью до второго порядка последовательно в каждом слое до полной остановки иона  $H$  в мишени  $Ni$  с начальными энергиями 0,2, 0,5, 10, 50, 100 МэВ. Распределение продольного пробега  $F(x)$  было вычислено из потока следующим предложением:

$$F(x) = \int \phi(E=0, \vec{e}, x) d\vec{e} \quad (13)$$

Средний продольный пробег

$$R_p = \int_{-\infty}^{\infty} x F(x) dx \quad (14)$$

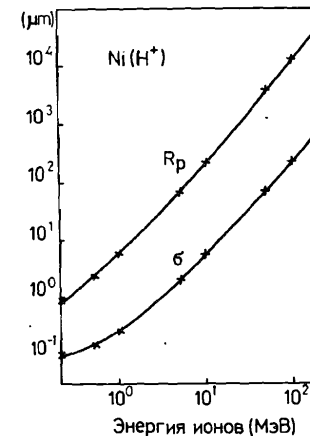


Рис. 1.

Средний продольный пробег  $R_p$  и разброс продольного пробега  $\sigma$  для протона в  $Ni$ . (x) - результаты данной работы, сплошные кривые - результаты, полученные методом моментов в работе [5].

и разброс продольного пробега  $\sigma$ , где

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - R_p)^2 F(x) dx, \quad (15)$$

представляет собой хорошую проверку последовательных приближений по рассеяниям на большие углы. Численные результаты вместе с данными полученными методом моментов [5], показаны на рис. 1. Наблюдается хорошее совпадение для быстрых ионов.

Распределение продольного пробега, средний пробег и разброс для иона  $H$  в мишени  $Ni$  с энергией 0,2, 1, 5 МэВ показаны на рис. 2. Как видно из рисунков, использование моментов для описания распределения продольных пробегов может быть обманчиво, особенно в случае высокоэнергичных ионов. Хотя средняя величина (первый момент) распределения приблизительно совпадает с величиной с максимальной вероятностью, вклад от пика во второй центральный момент быстро уменьшается с увеличением энергии ионов.

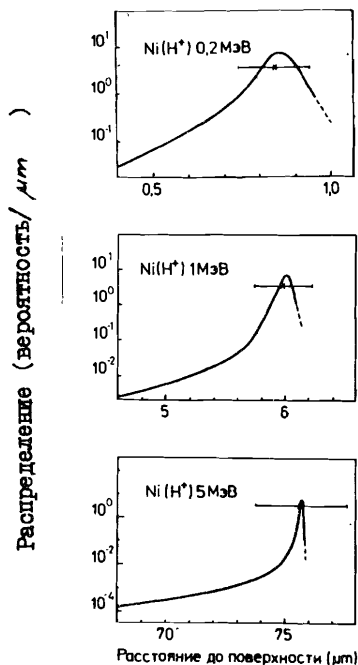


Рис. 2.

Распределения продольных пробегов, средние продольные пробеги и среднеквадратичные разбросы продольного пробега для протона с энергиями 0,2, 1 и 5 МэВ в Ni.

Автор благодарит Г.М. Гавриленко за многочисленные полезные дискуссии.

#### Литература

1. Winterbon K.B., Sigmund P., Sanders J.B. Mat.Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 1970, 37, No 14.
2. Littmark U., Ziegler J.F. Phys. Rev., 1981, A23, p. 64.
3. Lindhard J., Nielsen V., Scharff M. and Thomsen P.V. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1963, 33, No 10.
4. Cowern N.E.B. Nucl. Instr. Meth., 1982, 194, p. 101.
5. Littmark U., Ziegler J.F. The Stopping and Range of Ions in Matter, v. 6, Pergamon Press, New York, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 мая 1986 года.

Бардош Д.

P17-86-336

Об использовании уравнения переноса Больцмана для описания потока и распределения продольного пробега быстрых ионов

Описан метод последовательных приближений для вычисления потока быстрых ионов в слое материала. Использование приближенных уравнений последовательно для каждого слоя среды ведет к описанию движения иона до полной его остановки в среде. Распределения продольного пробега были рассчитаны для быстрых ионов в мишени Ni в диапазоне энергий от 0,2 до 100 МэВ. Параметры распределения - средний продольный пробег и разброс продольных пробегов - согласуются с результатами, полученными вычислением методом моментов.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод автора

Bardos G.

P17-86-336

Application of the Boltzmann Transport Equation to Calculations of Flux and Range Distributions of Energetic Ions

An approximation method for calculating a flux of energetic ions in a layer of matter is presented. Used successively for every layer of a medium, approximation equations describe an ion motion till its complete slowing-down. Range distributions for H ions incidenting on a Ni target at an energy of 0.2-100 MeV are calculated. Characteristic parameters - the mean range and longitudinal straggling - are in good agreement with those obtained by the moment method.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986