

# **Тема 3. Взаимодействие ускоренных ионов с веществом**

## **(часть 1)**

- 1. Торможение ускоренных ионов в упругих столкновениях**
  - 1.1. Потенциалы взаимодействия.
  - 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах.
  - 1.3. Представление сечений с использованием безразмерных параметров.
  - 1.4. Ядерная тормозная способность.
  - 1.5. Особенности ядерного торможения.

## Введение

- Теоретические основы торможения ускоренных ионов в веществе были заложены в классической работе Н. Бора [Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество – М.: Иностранная литература, 1950, 149 с.], а также в начале 60-х годов в работах датских ученых Дж. Линдхарда, М. Шарффа и Г.Е. Шиотта.
- Согласно Бору, совместный эффект упругих и неупругих столкновений вызывает постепенное торможение и рассеяние частиц.
- Хотя упругие и неупругие потери энергии ускоренной частицы связаны между собой, их обычно, следуя Бору и Линдхарду, считают независимыми.
- Полные потери энергии равны сумме потерь энергии в упругих и неупругих столкновениях. В различных диапазонах энергии ускоренных частиц вклады этих составляющих различны. Они зависят не только от скорости и энергии частиц, но и от их сорта, а также от материала облучаемой мишени.

# Введение

- Под ядерным торможением понимается процесс потерь энергии ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов вещества мишени.
- Под электронным торможением понимается процесс потерь энергии ускоренного иона в неупругих взаимодействиях с электронной подсистемой вещества мишени.

# Тормозная способность в широком диапазоне энергий ионов



# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

- В результате упругого соударения происходит перераспределение кинетической энергии между сталкивающимися атомами.
- При этом рассеивающийся атом не только теряет часть своей кинетической энергии, но и меняет направление своего движения.
- Получающий энергию атом вещества мишени может покинуть свою позицию и также начать двигаться в веществе.
- Упругое взаимодействие ускоренных ионов с ядрами атомов, как правило, описывают с помощью представления о последовательных парных столкновениях иона с отдельными атомами. Связь между этими атомами не учитывается.

Примечание. Такое приближение справедливо, если:

- 1) расстояния между ионом и атомом, на которых происходят основные изменения состояний сталкивающихся частиц, меньше, чем расстояния между соседними атомами среды;
- 2) энергия, передаваемая при каждом столкновении, больше энергии связи атомов в веществе.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

Потенциал взаимодействия двух ионов – функция  $V(r)$ , описывающая энергию их взаимодействия, являющегося по своей природе кулоновским, в зависимости от расстояния между сталкивающимися частицами.

Примечание. Чем больше энергия налетающего иона, тем на меньшее расстояние могут сблизиться частицы (т.е. тем меньше прицельный параметр взаимодействия).

### Основные принципы описания парных взаимодействий ионов.

- На достаточно больших расстояниях до и после соударения частиц их взаимодействие отсутствует. Когда происходит наибольшее сближение частиц, «включается» их взаимодействие, т.е. в этот короткий промежуток времени и происходит «соударение».
- Во время «соударения» процесс описывается потенциалом взаимодействия  $V(r)$ .
- Если атомы (или ионы) сферически симметричны, то потенциал можно считать центральным.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- Не существует единой формулы  $V(r)$  для всех расстояний.

Основной принцип построения  $V(r)$ :

1) при достаточно больших  $r$  существует притяжение, а затем, по мере сближения, появляется отталкивание; как правило, в расчетах учитывают только ветвь отталкивания;

2) разграничительным параметром для выбора  $V(r)$  могут служить:

$a$  – расстояние между атомами ( $a = 2 - 3$  Ангстрема),

$a_0$  – радиус первой Боровской орбиты в атоме водорода

( $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$  см).

Следовательно, при описании упругих потерь энергии ускоренных ионов особо интересны чисто «отталкивающие» потенциалы, которые должны учитывать особенности упругих столкновений атомных частиц в широком интервале (от 100 эВ до  $10^3$  кэВ).

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- Особенности упругих столкновений в интервале энергий от 100 эВ до  $10^3$  кэВ:
  - явно выраженная анизотропия рассеяния при больших энергиях (максимум в угловом распределении, соответствующий рассеянию «вперед»);
  - почти изотропный характер рассеяния при малых энергиях.

В соответствии с этим при больших значениях энергии наиболее вероятны передачи энергии  $T$ , малые по сравнению с энергией частицы  $E$ , а при малых  $E$  – практически равновероятны любые значения  $T$ .

Указанные особенности могут быть учтены с разной степенью точности, определяемой выбором потенциала, а также процедурой построения дифференциального сечения.

Примечание. Вычисление  $V(r)$  из основных принципов даже при достаточно грубых предположениях является достаточно сложной задачей.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \gg a$ .

На расстояниях порядка 0,1-0,8 нм оба атома находятся в своих основных состояниях. Электроны занимают нормальные энергетические уровни в каждом атоме. При сближении атомов начинают перекрываться валентные оболочки. Возможно появление сил притяжения, которые образуют химическую связь между атомами. Взаимодействие между атомами, связанными химической связью, аппроксимируется потенциалом Морза:

$$V_M(r) = D\{\exp[-2\alpha(r - a)] - 2\exp[-\alpha(r - a)]\} \quad (1)$$

где  $\alpha$  - характеристика жесткости взаимодействия,  $D$  - энергия диссоциации. Параметры потенциала определяются в основном по энергии сублимации, модулю всестороннего сжатия и по критерию устойчивости решетки.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $a_0 < r < a$ .

По мере сближения атомов происходит перекрытие внутренних заполненных оболочек. Возникает эффект взаимного отталкивания заполненных электронных оболочек. Приближенное выражение для потенциала отталкивания имеет вид первого слагаемого в потенциале Борна –Майера:

$$V_{BM}(r) = A \exp(-\gamma r) - \frac{Q}{r} \quad (2)$$

- Первое слагаемое этого потенциала описывает отталкивание, что эквивалентно первому слагаемому потенциала Морза (1).
- Параметры потенциала подгоняют по модулю всестороннего сжатия и измерениям некоторых энергетических характеристик структуры. Определены константы этого потенциала для наиболее распространенных пар взаимодействующих атомов (ионов), они приводятся в научной литературе

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$ :

При сближении ядер между ними проникают электроны, и кулоновское взаимодействие ядер экранируется пространственным зарядом глубоких электронных оболочек.

Потенциал, описывающий такое взаимодействие, называется экранированным кулоновским.

Наиболее широко в задачах атомных столкновений используется модель атома Томаса-Ферми. В этой модели атом рассматривается как положительное ядро, окруженное непрерывно размазанными атомными электронами, распределение которых вычисляется по квантовой статистике.

Когда осуществляется учет обменных эффектов, то модель называется моделью Томаса-Ферми-Дирака.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$ . (продолжение)

Модель Томаса-Ферми имеет преимущество, поскольку она дает универсальный потенциал взаимодействия между двумя любыми атомами, который записывается в виде:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a_F}\right) \quad (3)$$

где  $\Phi(r/a_F)$  функция экранирования,  $a_F$  - характерная длина экранирования (параметр экранирования).

В качестве  $\Phi(r/a_F)$  может использоваться функция экранирования Томаса-Ферми. Она не имеет точного аналитического представления, однако она протабулирована и может быть найдена в справочниках.

Использование функции Томаса-Ферми в качестве экранирующей дает хорошее соответствие с экспериментом для области  $r \leq 0,1$  нм.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$ . (продолжение)

Функцию  $\Phi(r/a_F)$  необходимо выбирать таким образом, чтобы:

1) она давала максимальное приближение к реальности по крайней мере для того диапазона  $r$ , который определяет интересующий нас в конкретном случае эффект.

2) желательно, чтобы она имела удобную для математической обработки форму.

Обычно  $\Phi(r/a_F)$  вводят либо на основании тех или иных теоретических предпосылок, либо эмпирически, либо комбинируя и то, и другое, подгоняя теоретические параметры под существующие параметры.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$ . (продолжение)

Ситуация 1. Когда заряд ядра одной из взаимодействующих частиц много меньше заряда ядра другой частицы, то потенциал взаимодействия полагают равным потенциалу изолированного тяжелого атома (3), а в качестве параметра экранирования используют радиус экранирования Томаса – Ферми:

$$a_F \approx 0,8853 a_0 / Z^{1/3} . \quad (4)$$

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$  (продолжение)

Ситуация 2. В случае взаимодействия тяжелых атомов или ионов определение потенциала становится более сложным, так как необходимо учитывать экранирование ядер обеих взаимодействующих частиц.

Эта проблема была тщательно рассмотрена О.Б. Фирсовым. Он оценил границы, между которыми заключена энергия электронов при наличии двух ядер, и показал, что в пределах точности модели атома Томаса-Ферми взаимодействие между двумя атомами при  $r \leq 10^{-8}$  см можно описать потенциалом вида:

$$V(r) = (Z_1 Z_2 e^2 / r) \Phi_{\text{ТФФ}}(r/a_\phi) \quad (5)$$

где  $\Phi_{\text{ТФФ}}$  – функция экранирования Томаса-Ферми Фирсова для изолированного атома,

$$a_\phi = \frac{C_F a_0}{(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^{2/3}}, \quad C_F = \sqrt[3]{\frac{9\pi^2}{128}} \approx 0,8853 \quad (6)$$

$a_\phi$  – радиус экранирования по Фирсову, или

$$a_\phi = 0,8853 a_0 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \quad 15$$

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия (продолжение)

И. Линдхард, М. Шарфф, Х. Шиотт и О.Б. Фирсов рассматривали в качестве экранирующей функции функцию Томаса – Ферми. Однако параметр экранирования у них отличается.

$$a_L = 0,8853a_0(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} ;$$

$$a_\Phi = 0,8853a_0(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} .$$

Здесь  $a_L$  – радиус экранирования по Линдхарду,  $a_\Phi$  – по Фирсову.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \leq a_0$  (продолжение)

Хорошим приближением потенциала (3) является кулоновский потенциал с экспоненциальным экранированием, предложенный Бором:

$$V_B = Z_1 Z_2 e^2 \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{a_b}\right) \quad (7)$$

где константа экранирования  $a_b = C a_0 (Z_1 Z_2)^{-1/6}$ , а множитель  $C$  порядка 1.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- $r \ll a_0$ :

На малых расстояниях наиболее значительный вклад во взаимодействие двух атомов будет вносить кулоновское отталкивание их ядер, описываемое простым кулоновским потенциалом:

$$V_K(r) = Z_1 Z_2 e^2 \frac{1}{r} \quad (8)$$

Потенциал Бора (7) в пределе малых расстояний ( $r \ll a_0$ ) переходит в потенциал (8).

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.1. Потенциалы взаимодействия

- Для описания потенциала в области  $r < a_0$  получена интерполяционная формула:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a'} \frac{\exp(-r / a_{BM})}{1 - \exp(-r / a')} \quad (9)$$

где  $a'$  - подгоночный параметр,  $a_{BM} = 1/\gamma$  - константа потенциала Борна-Майера. При больших  $r$  формула (9) переходит в первое слагаемое потенциала Борна-Майера (2), описывающее отталкивание, а при малых  $r$  в кулоновский потенциал (8).

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

Зная потенциал взаимодействия, можно найти дифференциальное сечение рассеяния иона на заданный угол  $\sigma_n(Z_1, Z_2, m_1, m_2, E, \theta_1)$  или дифференциальное сечение передачи энергии неподвижному атому  $\sigma_n(Z_1, Z_2, m_1, m_2, E, T)$ .

Получить дифференциальное сечение в аналитической форме, выразив его в явном виде через  $V(r)$ , можно только для ограниченного числа потенциалов взаимодействия.

Развитые к настоящему времени методы решения задачи потенциального рассеяния позволяют провести точные вычисления в аналитической форме лишь для очень ограниченного числа потенциалов. К ним относятся потенциал твердых шаров (SS) и степенные потенциалы.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Потенциал твердых шаров является весьма приближенным, особенно при больших энергиях, но очень простым по виду. Взаимодействующие атомы рассматриваются как две абсолютно жесткие непроницаемые сферы радиусами  $R_1$  (налетающий) и  $R_2$  (покоящийся). Взаимодействие равно нулю, когда  $r > R_1 + R_2$  и сильно возрастает, когда  $r \rightarrow R_1 + R_2$ . При этом потенциал можно записать в виде:

$$V_{ss}(r) = \begin{cases} \infty, & R \leq R_1 + R_2 \\ 0, & R > R_1 + R_2 \end{cases} \quad (10)$$

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Потенциал твердых шаров (продолжение)

Поскольку расстояние определяется суммой радиусов, можно рассматривать взаимодействие точечной налетающей массы с шаром радиусом  $R_0 = R_1 + R_2$  в качестве мишени. Радиус  $R_0$  называют радиусом жесткой сердцевины.

Рассеяние в этом случае – просто отражение налетающей частицы по касательной плоскости к неподвижной сфере в точке соударения.

Следовательно, рассеяние, описываемое потенциалом  $V_{SS}$ , является изотропным, а соответствующее дифференциальное сечение передачи энергии не зависит от переданной энергии  $T$ :

$$\sigma_{SS}(E, T) = \pi R_0^2 \frac{1}{\Lambda E} \quad (11)$$

где

$$\Lambda = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad .$$

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Потенциал твердых шаров (продолжение)
- В общем случае следует считать радиус  $R_0$  зависящим от энергии налетающей частицы  $E$ . Причем  $R_0$  должен убывать с ростом  $E$ .
- Приближение этого потенциала применимо для столкновений, близких к лобовым.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Степенные потенциалы

Такие потенциалы имеют вид: 
$$V(r) = Cr^{-n} . \quad (12)$$

Появление степенных потенциалов вызвано необходимостью замены реальных потенциалов функциями, которые в некоторой ограниченной области энергий имеют простое аналитическое выражение.

Для кулоновского потенциала, когда  $n=1$ ,  $C=Z_1Z_2e^2$ , дифференциальное сечение передачи энергии имеет вид:

Из (13) видно, что  $\sigma_v(E, T) = \pi \frac{m_1}{m_2} \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{ET} \right)^2$  (13) в процессах рассеяния с таким сечением преобладают малые значения  $T$ , что соответствует рассеянию «вперед».

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Степенные потенциалы (продолжение)

Рассеяние на потенциале вида  $1/r$  можно рассматривать с помощью классической механики лишь для малых  $g$ .

На больших расстояниях, или, что то же самое, при малых углах рассеяния, следует учитывать экранирование, т.е. изменить вид потенциала.

Потенциал вида (11), но с  $n=2$ , можно применять для приближенного описания столкновений атомов с энергиями в диапазоне  $10^2$ - $10^5$  эВ.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.2. Потенциалы и сечения, используемые в аналитических расчетах

- Степенные потенциалы (продолжение)

К числу подходящих подгоночных потенциалов относится потенциал Линдхарда, который подходит для подгонки экранированных кулоновских потенциалов. Этот потенциал имеет вид:

$$V_L(r) = Z_1 Z_2 e^2 k_\xi a_F^{1/\xi-1} \xi r^{1-\xi} \quad (14)$$

где  $k_\xi \approx 1$ ,  $a_F = 0,8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ ,  $0 < \xi < 1$  и слабо зависит от  $E$ .

Выражения для сечения получаются, если воспользоваться малоугловым приближением. Практически во всем интервале переданной энергии  $T$  при условии, что  $E$  достаточно велико, можно пользоваться для дифференциального сечения следующей формулой:

$$\sigma_L(E, T) = F_L T^{(1+\xi)} E^\xi \quad (15)$$

где  $F_L = F_L(m_1, m_2, Z_1, Z_2, \xi)$

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.3. Представление сечений с использованием безразмерных параметров

Разработаны различные способы для облегчения задачи получения  $\sigma$ . Например, вводят безразмерную приведенную энергию:

$$\varepsilon = a_F E_{\text{отн}} / (Z_1 Z_2 e^2) = a_F m_2 E / [Z_1 Z_2 e^2 (m_1 + m_2)] \quad (16)$$

Здесь  $E_{\text{отн}} = E m_2 (m_1 + m_2)^{-1}$ .

Если ввести безразмерный параметр  $t = \varepsilon^2 T / T_m$  (17)

где  $T_m = 4m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2 E$  – максимальная энергия, которая может быть передана при упругом столкновении, то  $\sigma_n$  можно представить в виде

функции одного аргумента  $t$ , а не двух ( $\theta_1$  и  $E$ ), как это было раньше.

$T$  – величина переданной энергии.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.3. Представление сечений с использованием безразмерных параметров

Выражение для  $\sigma_n$  принимает более простой вид:

$$d\sigma_n = \pi a_F^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2}) \quad (18)$$

где  $a_F$  – радиус экранирования Томаса-Ферми,  
 $f(t^{1/2})$  – приведенное сечение рассеяния - функция, определяемая потенциалом взаимодействия.

Для каждого потенциала взаимодействия зависимость  $f(t^{1/2})$  является универсальной, т.е. не зависящей от конкретной пары ион-атом.

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.3. Представление сечений с использованием безразмерных параметров

Так как функции  $f(t^{1/2})$  для большинства потенциалов нельзя получить в аналитической форме, то желательно хотя бы приближенно представить их в виде аналитического выражения.

Для потенциала Линдхарда это сделал К.Б. Уинтербон:

$$f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/2-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q} \quad (19)$$

где  $\lambda = 1,309$ ;  $m = 1/3$ ;  $q = 2/3$ .

Оказалось, что экспериментальные данные хорошо описываются этим же приближением, если в (19) считать  $\lambda=2,54$ ,  $m=0,25$ ,  $q=0,475$ .

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.4. Ядерная тормозная способность

Если известно  $d\sigma_n$ , то можно определить удельные потери энергии при упругих соударениях вдоль траектории частицы  $(dE/dR)_n$ , т.е. определить энергию, теряемую первичной частицей в таких взаимодействиях на единицу длины пробега.

Для вещества, состоящего из атомов одного сорта:

$$(dE / dR)_n = - n_0 \sigma_n \bar{T} \quad (20)$$

где  $n_0$  – концентрация атомов в твердом теле;  $\sigma_n$  – полное сечение упругого взаимодействия, которое определяет вероятность упругого соударения с передачей любой энергии, и  $\bar{T}$  – средняя энергия, передаваемая атому в таком столкновении.

$$\bar{T} = \int_0^{T_m} T d\sigma_n(T) / \int_0^{T_m} d\sigma_n(T) = \sigma_n^{-1} \int_0^{T_m} T d\sigma_n \quad (21)$$

где  $T_m = (4m_1 m_2 / (m_1 + m_2)^2) \cdot E$  .

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.4. Ядерная тормозная способность

Таким образом,

$$(dE/dR)_n = -n_0 \int_0^{T_m} T d\sigma_n = -n_0 S_n; \quad S_n = \int_0^{T_m} T d\sigma_n(T) \quad (22)$$

Величина  $S_n$  называется ядерной тормозной способностью на атом или сечением ядерного (упругого) торможения и равна потере энергии на единицу длины в среде с единичной концентрацией ( $n_0=1$ ).

# 1. Торможение ускоренных ионов в упругих взаимодействиях с ядрами атомов

## 1.5. Особенности ядерного торможения

- 1) Потери энергии в упругих (ядерных) столкновениях зависят от кинетической энергии налетающей частицы, а не от ее скорости; поэтому линейные потери ( $dE/dR$ ) являются функцией  $E$ .
- 2) Потери энергии в каждом упругом соударении  $T$  сравнимы с энергией налетающей частицы  $E$ .
- 3) Передача импульса в таких столкновениях может стать большой; при этом может быть значительное изменение угла, т. е. траектория частицы вследствие упругих взаимодействий существенно отклоняется от прямолинейной.
- 4) Ядерные потери в отдельных столкновениях однозначно определяются прицельным параметром и энергией налетающей частицы  $E$ .