

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
имени Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА

На правах рукописи

НОВИКОВ НИКОЛАЙ ВИКТОРОВИЧ

**СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ЗАРЯДАМ
В ПУЧКАХ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ, ПРОХОДЯЩИХ ЧЕРЕЗ ГАЗООБРАЗНЫЕ
И ТВЕРДЫЕ МИШЕНИ**

Специальность 01.04.20 – Физика пучков заряженных частиц и ускорительная техника

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Москва – 2017

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. ОБЗОР МЕТОДОВ ОЦЕНКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ ПО ЗАРЯДАМ	
1.1. Распределение ускоренных ионов по зарядам	12
1.2. Особенности распределений ионов в пучке по зарядам в газах и твердой среде	14
1.3. Эмпирические оценки параметров равновесного зарядового распределения	16
1.4. Методы расчета сечения потери одного электрона	20
1.5. Методы расчета сечения захвата одного электрона	26
1.6. Влияние оболочечной структуры иона и атома мишени на сечения перезарядки.....	32
1.7. Эффект плотности в зарядовых распределениях ускоренных ионов	40
1.8. Методы оценки потерь энергии ускоренных ионов	46
1.9. Энергетические, угловые и зарядовые распределения ионов, отраженных от поверхности.....	54
ГЛАВА 2. РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ	
2.1. Сечения потери одного электрона с учетом возбужденных состояний атома мишени.....	58
2.2. Сечение захвата электрона с учетом кулоновского взаимодействия тяжелых частиц.....	67
2.3. Вклад возбужденных состояний быстрого иона в сечение захвата электрона.....	74
2.4. Волновые функции возбужденных состояний атомов и ионов с зарядом ядра $Z \leq 18$	77
2.5. Результаты, способствующие развитию квантово-механических методов расчета сечений перезарядки.....	84

ГЛАВА 3. ОПИСАНИЯ СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ НА ОСНОВЕ

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ

3.1. Экспериментальные данные о сечениях перезарядки.....	87
3.2. Основные приближения при оценке сечений перезарядки.....	90
3.3. Сечение потери одного электрона в газах	91
3.4. Сечение захвата одного электрона в газах	97
3.5. Влияние процессов потери и захвата двух электронов на распределение ионов в пучке по зарядам	102
3.6. Сечения потери и захвата электрона в твердой мишени	111
3.7. Интерполяция сечений в газах для произвольного заряда ядра атома мишени	122
3.8. Компьютерная программа расчета сечений перезарядки ускоренных ионов.....	124
3.9. Результаты, полученные методом расчета сечений перезарядки	131

ГЛАВА 4. ОПИСАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОХОЖДЕНИЯ ИОНОВ ЧЕРЕЗ

ВЕЩЕСТВО И ИХ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ПОВЕРХНОСТИ

4.1. Толщина мишени для установления равновесного зарядового распределения	134
4.2. Параметры равновесного зарядового распределения в пучке ускоренных ионов.....	147
4.3. Распределение по заряду отраженных от поверхности ионов	172
4.4. Вклад процессов перезарядки в потери энергии ускоренных ионов.....	180
4.5. Результаты применения метода расчета сечений перезарядки к некоторым задачам с участием ускоренных ионов	191

ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

	196
--	-----

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....

	200
--	-----

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....

	203
--	-----

ОБОЗНАЧЕНИЯ.....

	230
--	-----

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании пучков многозарядных ионов важен учет процесса перезарядки, так как от заряда иона зависят условия ускорения, например, параметры резонанса в циклических ускорителях. Многозарядные ионы при прохождении через вещество могут изменить свой заряд. Вероятность этого процесса особенно велика на начальном этапе ускорения, и поэтому для ускорительной техники необходимо знать условия изменения заряда иона при изменении его энергии. Кроме того, пучок ускоренных ионов в целях использования в лабораторных и промышленных условиях необходимо транспортировать по ионопроводам на большие расстояния. В этом процессе ионы пучка сталкиваются с молекулами остаточного газа и стенками ионопровода, что увеличивает вероятность их выбывания из пучка. Поэтому для достижения нужной интенсивности пучка ионов с требуемым зарядом [1] необходимы данные о сечениях перезарядки при взаимодействии ионов с различными материалами и остаточным газом [2], а также исследования потерь энергии ионов [3] и особенностей рассеяния ионов поверхностью [4] при разных (особенно при скользящих) углах падения пучка. Все указанные параметры пучков многозарядных ионов при их ускорении и транспортировке необходимо знать в широком диапазоне значений энергии и ионных зарядов. Для расширения прикладного использования ускоренных пучков ионов и моделирования процессов их получения, ускорения и транспортировки требуется разработка теоретических методов и компьютерных программ, позволяющих рассчитать параметры ионных пучков и анализировать их воздействие на различные материалы мишени.

Исследование зарядовых распределений ионов в пучках при их прохождении через газообразные и твердые мишени является одним из перспективных направлений развития квантовой физики столкновений и ускорительной техники, которое необходимо в различных областях науки:

- для описания неравновесных процессов при прохождении пучков ускоренных ионов через тонкие пленки;
- при оценке потерь энергии ионов в веществе [3];
- для описания процессов, сопровождающих формирование трека заряженной частицы в веществе [5];
- при теоретических оценках потенциала взаимодействия ионов;
- в расчетах энергии и числа вторичных частиц, образующихся при взаимодействии пучков ионов со средой (ядер отдачи, электронов, фотонов) [6–8].

Информация о зарядовых и энергетических распределениях ионов в пучках важна также для развития ряда технических приложений:

- в ускорительной технике для получения ионного пучка высокой интенсивности с определенным зарядом ионов [1];
- для моделирования радиационного воздействия космических лучей [9, 10] на бортовую электронику [11, 12] путем наземного тестирования с использованием пучков ускоренных ионов;
- в радиационном материаловедении при оценке концентрации, профиля распределения по глубине и типам образующихся дефектов при ионной имплантации для создания материалов с требуемыми характеристиками;
- для уточнения пробегов ионов и выделения энергии в радиационной медицине.

Время жизни инжектированного пучка в ускорителе зависит от энергии ионов, давления, концентраций компонентов остаточного газа, а также от сечений взаимодействия ионов с атомами и молекулами остаточного газа [2]. На практике измерить синхронно время жизни и концентрации остаточного газа бывает затруднительно. В этом случае можно решить обратную задачу: оценить плотность молекул остаточного газа по

известному экспериментальному времени жизни инжектированного пучка и теоретическим значениям сечений перезарядки ионов.

Важные теоретические и технические применения зарядовых распределений ионов связаны с исследованием процессов, приводящих к изменению свойств материала мишени при ее взаимодействии с ионами. Учет зарядового состояния иона необходим для понимания механизмов формирования структурно-фазовых изменений (аморфизации, локального плавления, спекания границ зерен и слоев) на поверхности мишени и вблизи трека быстрого иона, а также для описания их пространственно-временной эволюции [5]. Большие потери энергии при взаимодействии быстрого иона с веществом могут приводить к нагреву материала мишени и неоднородному распределению плотности. Описание механизмов перераспределения избытка энергии вблизи трека иона используется в материаловедении [13] для оценки радиационной стойкости материалов. Большое значение также имеет надежность полупроводниковых приборов, находящихся под действием космических лучей [11, 12], тяжелая компонента которых может вызывать необратимые сбои электроники [9, 10]. Распределение ионов по заряду необходимо также учитывать при оценке глубины образования дефектов [6, 13] для создания композитных материалов с нужными свойствами. В ряде материалов треки быстрых ионов используют для создания фильтров различного назначения [6].

Зарядовые распределения ионов необходимо учитывать для оценки числа и параметров вторичных частиц, образующихся при взаимодействии ионов со средой (ядер отдачи, электронов, фотонов) [7, 8]. От заряда иона зависит распределение атомов отдачи по скоростям и глубине образования, а также глубина выхода электронов, что важно для расчета коэффициента ионно-электронной эмиссии [8], которая применяется для контроля чистоты поверхности, создания пучков электронов, регистрации малых ионных токов и потоков нейтральных частиц. В области скоростей ионов $V \leq 10^6$ см/с коэффициент

потенциальной ионно-электронной эмиссии возрастает с увеличением заряда иона [8]. Заряд иона также влияет на коэффициент неупругого распыления [14], что используется при десорбции примесей с поверхности металлов и диэлектриков, для масс-спектрометрических исследований высокомолекулярных и биологических объектов и при изготовлении элементов микроэлектроники.

Один из методов диагностика плазмы основан на измерении энергетического распределения быстрых атомов, которые покидают объем, занятый плазмой. Зная состав нейтрального газа, окружающего плазму, и сечение перезарядки, можно вдали от области, занятой плазмой, получить распределение ионов по энергии [15, 16].

В последние годы в связи с развитием нанотехнологий возрастает интерес к описанию процессов прохождения ионов через тонкие пленки. Поэтому развитие методов оценки сечений неупругих процессов, потерь энергии ионов и толщины мишени, при которой устанавливается равновесное зарядовое распределение, является актуальным.

Приведенный перечень свидетельствует о том, что исследования особенностей формирования зарядовых распределений и потерь энергии пучков ионов при их прохождении через различные среды находятся в центре внимания различных научных и технических задач.

Исследование столкновений в квантовых системах нескольких частиц является сложной задачей физики элементарных частиц. Процесс прохождения заряженных частиц через вещество и связанные с этим изменения их энергии и заряда принадлежат к числу тех проблем, которые были поставлены при возникновении современных представлений о строении атома. Этапы решения этой задачи совпадали с этапами развития квантовой механики, а теоретические результаты исследований служили важными критериями для проверки новых теорий.

После открытия явления радиоактивности А. Беккерелем в 1896 году появилась возможность изучения прохождения ионов через вещество. Необходимость исследования явления перезарядки ионов и атомов возникла при определении связи между энергией и пробегом частиц в веществе. Сначала этот эффект наблюдался для α -частиц, образующихся при распаде в радиоактивном источнике [17]. Было экспериментально установлено, что поток α -частиц при прохождении через воздух частично состоит из ионов He^+ , количество которых увеличивается при уменьшении скорости иона. Исследования Э. Резерфорда [18] показали, что непрерывный захват и потеря электронов происходят на протяжении всего пробега ионов. Создание циклического (американцем Э. Лоуренсом в 1931 году) и линейного (англичанином Д. Кокрофтом и ирландцем Э. Уолтоном в 1932 году) ускорителей способствовало исследованиям зависимости потерь энергии и пробегов от энергии. Были измерены потери энергии и пробеги сначала ускоренных протонов [19, 20], а затем и более тяжелых ионов [21]. Открытие процесса деления тяжелых ядер в 1939 году дало возможность начать изучение процесса прохождения через вещество осколков деления с массой и зарядом, во много раз превышающими массу и заряд α -частиц [1, 22]. В дальнейшем с этим же явлением столкнулись при регистрации тяжелых ядер, входящих в состав космических лучей. Интенсивные экспериментальные исследования процессов взаимодействия тяжелых ионов с веществом начались в нашей стране с 50-х годов прошлого столетия в НИИЯФ МГУ на циклотроне “Сокол” [23] и продолжались более 40 лет. За это время было накоплено и опубликовано много экспериментальных данных об особенностях взаимодействия ионов с веществом в разном агрегатном состоянии.

Основными характеристиками торможения заряженных частиц в веществе являются потери энергии и пробег частиц. Несмотря на непосредственную связь этих величин, они на практике имеют вполне самостоятельное значение и могут быть измерены

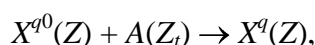
независимо. Многозарядные ионы имеют значительное количество электронов, которое увеличивается по мере замедления иона, что связано с конкуренцией процессов захвата и потери электронов, а также с образованием и распадом возбужденных состояний сталкивающихся частиц. При замедлении проявляются осцилляции пробега, потерь энергии и среднего заряда ионов, которые выходят за пределы разброса экспериментальных данных (долей процента при измерении пробега и потерь энергии), а соотношение между пробегом и скоростью тяжелых ионов отличается от аналогичного соотношения для легких частиц [1].

Первая модель описания явления перезарядки на основе классической электродинамики была предпринята Р. Фулером [24], который сравнил баланс между захватом и потерей электрона α -частицами с термодинамическим равновесием между ионами He^{2+} и He^+ в электронном газе определенной температуры и плотности. В основополагающей работе Н. Бора [25] была дана трактовка изменения заряда иона и флуктуации заряда частицы, теряющей и захватывающей электроны при ее прохождении через вещество. Используя классическое описание движения иона и статистические закономерности распределения электронов в атомах, были получены качественные оценки сечений перезарядки ионов, прошедших через легкие и тяжелые газы малой плотности [25]. Уточнения этой модели [26–28] позволили дать качественную интерпретацию захвата и потери электрона многозарядными ионами и описать сечения перезарядки осколков деления в газах.

Развитие ускорительной техники в середине прошлого века способствовало накоплению значительного объема экспериментальных данных о зарядовых распределениях ионов в газовых и твердых мишенях [29–36], что стимулировало появление целого ряда теоретических методов квантово-механического описания процессов перезарядки. Однако целостной картины описания зарядового распределения

иона с заданным зарядом ядра и определенным составом мишени до сих пор еще нет. К сожалению, теория даже в простейшем случае, когда средой является водород или гелий, не описывает экспериментальных данных в области максимума потерь энергии в пределах точности измерений.

В диссертации рассматривается процесс, в котором ион с зарядом q_0 и энергией E проходит через слой вещества толщиной t . В результате многократных столкновений иона и атомов мишени его заряд изменяется:



где q – заряд иона, Z – заряд ядра иона, Z_t – заряд ядра атома мишени. Задача состоит в том, чтобы во всей области зарядов иона ($q \leq Z$) и широкой области значений энергии описать зарядовое распределение ионов для выбранных значений Z и Z_t . Мишень описывается как однородный аморфный или поликристаллический материал, поэтому зависимость от ориентации мишени относительно падающего пучка не учитывается. При рассмотрении процесса столкновения считается, что в результате взаимодействия ионного пучка с мишенью ее структура и свойства не изменяются. Процессы распыления мишени, рождение вторичных частиц, ионно-электронная эмиссия, структурные изменения мишени при выделении энергии, а также сегрегация многокомпонентной мишени не рассматриваются.

Цель работы состоит в том, чтобы разработать квантово-механические и эмпирические методы оценки сечений потери и захвата электронов ионами в газообразной и твердой средах и проанализировать особенности зарядовых распределений и потерь энергии ионов от бора ($Z = 5$) до аргона ($Z = 18$), прошедших через мишень и отраженных от поверхности.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. В первой главе приведен обзор методов оценки распределения ионов по зарядам, где

отмечается, что уже сделано и какие проблемы остались. В главе 2 приводятся результаты, развивающие квантово-механические методы расчета сечений потери и захвата электрона быстрыми ионами. В главе 3 дается описание предложенного метода расчета сечений перезарядки на основе экспериментальных данных и теоретических закономерностей. В главе 4 обсуждаются результаты, полученные при решении некоторых задач с участием пучков ионов, анализируются особенности зарядовых распределений и потерь энергии ионов. В заключении приводятся положения, выносимые на защиту, и отмечается новизна полученных результатов, научное и практическое значение работы.

Если не оговаривается специально, для всех величин используется атомная система единиц.

ГЛАВА 1

ОБЗОР МЕТОДОВ ОЦЕНКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ ПО ЗАРЯДАМ

1.1. Распределение ускоренных ионов по зарядам

Распределение ускоренных ионов по зарядам описывается зарядовыми фракциями, которые соответствуют относительному количеству ионов с зарядом q . В общем случае эти величины зависят не только от энергии столкновения E и зарядов ядер сталкивающихся частиц Z, Z_t , но и от толщины мишени t и заряда иона до столкновения с мишенью q_0 . Распределение по заряду ускоренных ионов в пучке, проходящем через мишень, описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\Phi_q(t)}{dt} = \sum_{k \neq q} \Phi_k(t) \sigma_{kq}(E, Z, Z_t) - \Phi_q(t) \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E, Z, Z_t) \quad (1.1)$$

с начальным условием

$$\Phi_{q_0}(0) = 1 \quad (1.2)$$

и условием нормировки

$$\sum_q \Phi_q(t) = 1, \quad (1.3)$$

где $\Phi_q(t)$ – неравновесные зарядовые фракции, $\sigma_{k,q}(E, Z, Z_t)$ – сечения перезарядки, а индексы k и q – заряд иона до и после столкновения соответственно ($k \neq q$). В каждом из уравнений (1.1) учитывается динамика изменения заряда ускоренного иона – сколько ионов с зарядом q появилось, а сколько изменили свой заряд в результате столкновения. Когда толщина мишени t увеличивается, в области $t \geq T$ величины зарядовых фракций $\Phi_q(t)$ от t не зависят:

$$\Phi_q(t) \rightarrow F_q \text{ при } t \geq T, \quad (1.4)$$

где T – толщина мишени, необходимая для установления равновесного зарядового распределения ионов в пучке. Система дифференциальных уравнений (1.1) в этом случае сводится к системе однородных линейных уравнений:

$$\sum_{k \neq q} F_k \sigma_{kq}(E, Z, Z_t) - F_q \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E, Z, Z_t) = 0, \quad (1.5)$$

где F_q – равновесные зарядовые фракции ионов с зарядом q , величина которых уже не зависит от начальных условий (1.2).

Равновесное зарядовое распределение ионов в пучке характеризуется безразмерными параметрами:

$$\bar{q} = \sum_q q F_q, \quad d^2 = \sum_q (q - \bar{q})^2 F_q, \quad s = \sum_q (q - \bar{q})^3 F_q / d^3, \quad (1.6)$$

где \bar{q} – средний равновесный заряд, параметры d и s описывают ширину и асимметрию равновесного зарядового распределения соответственно. Эти параметры зависят как от энергии столкновения E , так и от зарядов Z и Z_t .

Методы описания зарядовых распределений ускоренных ионов можно разделить на три группы: эксперимент, теоретические оценки на основе квантово-механических расчетов сечений перезарядки и вычисление параметров равновесного зарядового распределения (1.6) с помощью эмпирических соотношений.

Экспериментальный метод является наиболее надежным и достоверным с точностью до погрешности измерения. Однако процесс столкновения иона $X^q(Z)$ с атомом мишени $A(Z_t)$ характеризуется кроме энергии E еще тремя параметрами q , Z , Z_t , которые изменяются в широком диапазоне значений. В результате вероятность того, что в необходимой области значений энергии E для выбранной пары многозарядный ион–атом мишени есть данные об экспериментальных зарядовых распределениях, невелика.

Следовательно, требуется развитие теоретических методов оценки зарядовых распределений ускоренных ионов для тех диапазонов значений параметров E , q , Z , Z_t , для которых экспериментальные данные отсутствуют или их недостаточно.

Эмпирический метод оценки зарядового распределения ионов в пучке основан на предположении, что параметры равновесного зарядового распределения (1.6) являются непрерывными и плавными (без осцилляций) функциями энергии E и зарядов ядер Z , Z_t . Вид этих функций определяется на основании усреднения экспериментальных данных. Это позволяет получить оценку равновесного зарядового распределения для выбранной пары ион–атом мишени, используя экспериментальные данные для столкновений с близкими к искомому случаю параметрами E , Z и Z_t . Недостатком эмпирического метода является отсутствие оценки сечений перезарядки, которые необходимы для расчетов потерь энергии и неравновесных зарядовых распределений ускоренных ионов.

Метод расчетов зарядовых распределений ионов с помощью сечений перезарядки точнее эмпирического, но более трудоемкий. Сложность заключается в том, что $\sigma_{k,q}(E,Z,Z_t)$ – функция не только энергии E , но и трех параметров q , Z и Z_t . Причем изменение даже на единицу любого из них может поменять зависимость сечения от E .

1.2. Особенности распределений ионов в пучке по зарядам в газах и твердой среде

В известных экспериментальных работах [29–32] измеряли обычно неравновесные $\Phi_q(t)$ зарядовые фракции ионов, прошедших слой вещества t газообразной или твердой мишени. Далее, используя измеренную зависимость неравновесных зарядовых фракций от толщины t и уравнения перезарядки (1.1)–(1.3), определяли сечения перезарядки $\sigma_{k,q}(E,Z,Z_t)$. Для этого выполняли несколько измерений при разной толщине мишени, которая не превышала равновесную толщину T для иона с энергией E . При измерениях в

газообразной среде это достигалось изменением давления в рабочей камере. При увеличении толщины мишени в области значений $t < 1 \text{ мкг/см}^2$ неравновесные зарядовые фракции быстро изменялись. В этом случае измерения в нескольких точках, соответствующих толщинам до 1 мкг/см^2 , позволили провести оценку сечений потери и захвата одного электрона в газах с точностью порядка 7–15%, а сечений потери и захвата нескольких электронов – с точностью до 25–50%. Выполнить такие измерения для твердой мишени труднее из-за технологических сложностей при изготовлении тонких пленок. Измерения зависимости зарядовых распределений ускоренных ионов в твердой мишени от ее толщины порядка 1 мкг/см^2 обычно только начинаются. При толщинах $t \geq 1 \text{ мкг/см}^2$ неравновесные зарядовые фракции $\Phi_q(t)$ медленно изменяются в зависимости от t , что увеличивает погрешность результатов измерения сечений перезарядки в твердой мишени по сравнению с газами. Это привело к тому, что имеется несколько сотен экспериментальных работ по определению сечений перезарядки в газах и всего несколько работ по определению неравновесных зарядовых фракций $\Phi_q(t)$ и сечений перезарядки в твердой мишени. Причем погрешность этих измерений заметно больше, чем измерений в газах. В экспериментах с твердыми мишенями обычно измеряли равновесные зарядовые фракции F_q , из которых можно вычислить параметры равновесного зарядового распределения ионов в пучке (1.6), но не сечения перезарядки, поскольку количество коэффициентов в системе уравнений (1.5) превышает количество уравнений.

Сечения потери и захвата электронов ионом являются основными характеристиками процесса перезарядки. Если известны сечения для любых q при данной E , то можно вычислить равновесные F_q и неравновесные $\Phi_q(t)$ зарядовые фракции ускоренных ионов, толщину мишени, необходимую для установления равновесного зарядового распределения T , а также потери энергии иона в процессах перезарядки. Поэтому в экспериментах с газовой мишенью основное внимание было уделено именно

получению сечений перезарядки. Результаты измерений неравновесных зарядовых распределений ускоренных ионов в газах обычно не публиковали, поскольку, зная сечения перезарядки, эту информацию можно воспроизвести. По этой причине эмпирический анализ параметров неравновесных зарядовых распределений ионов (средний заряд и ширина зарядового неравновесного распределения) не проводился. Аналитическое решение системы уравнений для неравновесных зарядовых фракций (1.1) было дано в случае двухкомпонентной системы [37], а его анализ в матричном виде для многокомпонентной системы приведен в [38].

1.3. Эмпирические оценки параметров равновесного зарядового распределения

Эмпирические оценки параметров зарядового распределения ускоренных ионов основаны на аппроксимации экспериментальных данных для параметров (1.6) непрерывной и медленно меняющейся функцией E , Z и Z_t без учета их осцилляций. Первоначально такие эмпирические оценки выполняли для всех мишеней, как газовых, так и твердых [25]. Позже было установлено [39], что точность аппроксимации экспериментального зарядового распределения ускоренных ионов улучшается, если вычислять эмпирическую зависимость параметров (1.6) отдельно для газовой и твердой мишеней. Сначала получают некоторую усредненную оценку параметров (1.6) в зависимости от энергии E по всем экспериментальным данным для данной пары ион–атом мишени. Затем эта зависимость сглаживается в представлении, что параметры (1.6) медленно изменяются при изменении Z и Z_t . Экспериментальная погрешность величин d и s заметно больше, чем величины \bar{q} , что обусловлено повышением роли зарядовых фракций малой интенсивности, экспериментальная погрешность которых больше.

Важнейшей характеристикой зарядового распределения ускоренных ионов в пучке является их средний заряд. При классической оценке равновесного среднего заряда ионов [26] предполагали, что быстрый ион при движении через газовую среду сохраняет только те электроны, орбитальная скорость которых больше, чем скорость иона V . В этой модели средний заряд ионов в пучке описывался выражением [26]:

$$\bar{q}/Z = Z^{-2/3} V/V_0, \quad (1.7)$$

где $V_0 = 2.19 \times 10^8$ см/с. В случае быстрых столкновений это соотношение было уточнено на основе модели атома Томаса–Ферми. В результате отношение среднего заряда иона \bar{q} к заряду ядра Z представлялось в виде:

$$\bar{q}/Z = [1 - \exp(-V/(V_0 Z^{2/3}))]. \quad (1.8)$$

В пределе быстрых столкновений ($V \gg V_0$) выражение (1.8) приводит к соотношению $\bar{q}/Z \rightarrow 1$, а при ($V \ll V_0$) переходит в (1.7). Из эмпирических оценок экспериментальных данных для ионов с $Z > 20$ было также получено более точное выражение [40]:

$$\bar{q}/Z = \{1 + [V/(1.24 V_0 Z^{0.45})]^{-5/3}\}^{-3/5}. \quad (1.9)$$

Отметим, что в оценках (1.7)–(1.9) не учитывается зависимость среднего заряда \bar{q} ускоренного иона от агрегатного состояния мишени и заряда ядра Z_t . Другими словами, предполагалось, что величина \bar{q} определяется только свойствами иона, а не среды, через которую он проходит.

Сейчас известно несколько приближенных выражений для среднего заряда ионов в пучке с учетом зависимости от энергии E и зарядов ядер Z, Z_t [26, 39–43]. Наиболее точными считаются соотношения для \bar{q} в газе [41]

$$\bar{q}^{\text{gas}}/Z = \frac{376x + x^6}{1428 + 1206x^{0.5} + 690x + x^6},$$

$$x = [Z_t^{0.03-0.17y} y]^{1+0.4/Z}, \quad y = Z^{-0.52} V/V_0 \quad (1.10)$$

и в твердой мишени [42]

$$\bar{q}^{\text{-solid}} / Z = \frac{8.29 X + X^4}{0.06 / X + 4 + 7.4X + X^4},$$

$$X = [1 - 0.26 \exp(-Z_i / 11 - (Z_i - Z)^2 / 9) [Y / (1 + 0.03 Y \ln(Z_i)) / 1.54]^{1+1.83/Z},$$

$$Y = Z^{-0.543} V / V_0. \quad (1.11)$$

Погрешность аппроксимации экспериментальных значений \bar{q} (1.6) соотношениями (1.10) и (1.11) зависит от энергии E . В области значений энергии $E < 0.1$ МэВ/нуклон эта погрешность для газов заметно меньше, чем для твердой мишени.

Надо отметить, что некоторые вещества могут иметь достаточно большой диапазон изменения плотности в нормальных условиях, например, плотность графита в зависимости от его марки изменятся от 1.7 до 2.6 г/см³. Эти отличия не учитываются при эмпирической оценке параметров (1.6), поскольку плотность мишени в эмпирическую оценку не входит. Следовательно, в соответствии с (1.10) средний равновесный заряд ускоренного иона для разреженного и плотного газа будет одинаковым. Таким образом, эффект плотности при замене газообразной мишени твердой в эмпирических оценках параметров (1.6) учитывается дискретно: мишень – либо газ, либо твердая среда.

Средний заряд быстрого ускоренного иона в среде можно также вычислить из экспериментальных данных о неупругих потерях энергии иона S_e [44]. Для этого используется отношение потерь энергии иона к потерям энергии протона с такой же скоростью. Тогда квадрат среднего заряда иона можно вычислить как [45, 46]:

$$\bar{q}^2 = S_e(Z) / S_e(Z=1) \text{ для } E > E_S, \quad (1.12)$$

где E_S – энергия, при которой неупругие (электронные) потери энергии ускоренного иона S_e в данной среде достигают максимальной величины. Этот метод вычисления среднего заряда иона \bar{q} может быть использован для многокомпонентной мишени, так как

неупругие потери энергии S_e в основном удовлетворяют свойству аддитивности, когда вклад отдельной компоненты мишени пропорционален ее плотности. Эмпирические соотношения (1.7)–(1.11) таким свойством не обладают.

Соотношений для оценки ширины зарядового распределения в пучке ионов значительно меньше [32]. Одно из них [40]

$$d^2 = \{ 1 - (\bar{q}/Z)^{5/3} \} \bar{q}/4 \quad (1.13)$$

применялось как для газа, так и для твердой среды. В приближении (1.13) ширина распределения ускоренных ионов по зарядам не зависит от заряда ядра атома мишени Z_t . В случае медленных столкновений d увеличивается как $d^2 \sim \bar{q}$, а в случае быстрых столкновений уменьшается по степенному закону. В работах японской группы авторов [36] также отмечалось, что ширина распределения d быстрых ускоренных ионов ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$) в углероде ($Z_t = 6$) может быть также представлена в виде функции количества электронов в ионе $Z - \bar{q}$.

Эмпирические соотношения для оценки параметра асимметрии равновесного зарядового распределения ионов в пучке s отсутствуют. Если считать зарядовое распределение симметричным ($s = 0$) и близким к распределению Гаусса, то можно приближенно получить равновесные зарядовые фракции F_q [36]:

$$F_q = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d} \exp[-(q - \bar{q})^2 / (2d^2)] . \quad (1.14)$$

В этом приближении чем больше ширина зарядового распределения d , тем меньше максимальная величина наиболее вероятной зарядовой фракции F_q при $q \approx \bar{q}$.

Таким образом, с помощью соотношения (1.14) и эмпирических закономерностей (1.10), (1.11), (1.13) равновесное зарядовое распределение ускоренных ионов в пучке описывается в широкой области значений энергии. К недостаткам такого подхода можно

отнести то, что ширина распределения d (1.13) одна и та же для твердой и газообразной мишеней и не зависит от Z_t . Кроме того, не учитывается асимметрия зарядового распределения ($s = 0$), а также в (1.10), (1.11) и (1.13) нет учета аддитивности для многокомпонентной мишени. Если в случае быстрых столкновений ($E > E_S$) ускоренных ионов в многокомпонентной мишени можно использовать приближение (1.12), то для области значений энергии $E < E_S$ эмпирических оценок зарядового распределения ионов в многокомпонентной мишени нет. Конечно, если многокомпонентная мишень состоит из атомов с близкими значениями Z_t , можно использовать соотношения (1.10), (1.11) и (1.13) для некоторого среднего значения Z_t , но тогда требуется оценка погрешности этого дополнительного приближения.

Опубликованных эмпирических соотношений для параметров неравновесного зарядового распределения ускоренных ионов нет. Отчасти это связано с недостатком экспериментальных данных для неравновесных зарядовых распределений, теоретические оценки которых возможны, только если известны сечения перезарядки. Если в неравновесном зарядовом распределении ионов в пучке присутствуют только две доминирующие компоненты, то можно неравновесные зарядовые фракции Φ_q [47], параметры ширины [48, 49] и асимметрии [49] неравновесного зарядового распределения ионов в пучке выразить через толщину мишени и сечения перезарядки. Недавно этот метод был расширен на случай трех доминирующих зарядовых компонент [50].

1.4. Методы расчета сечения потери одного электрона

Потеря одного электрона многоэлектронным ионом или атомом является фактически процессом ионизации при столкновении с атомом вещества или со свободным электроном. В результате столкновения с атомом быстрая частица $X^q(Z)$, где $q \geq 0$, теряет

один электрон, а атом мишени $A(Z_t)$ может остаться в основном состоянии, перейти в одно из возбужденных состояний или ионизоваться:



С теоретической точки зрения задача сложная, поскольку рассматривается столкновение двух многоэлектронных систем, и требуется учесть взаимодействие электрона каждой оболочки быстрой частицы не только с ядром и каждым электроном атома мишени, но и с ядром и всеми остальными электронами этого иона. Причем изменение даже на единицу заряда иона q или одного из заряда ядер Z или Z_t может существенно изменить экранировку и условия взаимодействия иона с атомом мишени.

Сечения потери электрона $\sigma_{q,q+1}$ ионами с различным зарядом q имеют качественно одинаковую зависимость от энергии E [30]. Сечение $\sigma_{q,q+1}$ сначала увеличивается с ростом энергии E вследствие увеличения импульса, переданного выбиваемому электрону, а потом уменьшается из-за сокращения времени взаимодействия. Энергия E_q , при которой сечение $\sigma_{q,q+1}$ достигает максимального значения, пропорциональна энергии связи валентного электрона в ионе ε_q , а величина сечения $\sigma_{q,q+1}(E_q)$ пропорциональна количеству валентных электронов.

В области значений энергии ($E \leq E_q$), в которой скорость столкновения V близка к скорости электронов валентной оболочки иона, для расчетов сечения потери одного электрона используют метод сильной связи каналов. В этом методе волновая функция электрона в поле двух центров представляется в виде суммы по конечному числу базисных функций $\varphi_k(\vec{r}, \tau)$:

$$\Psi(\vec{r}, \tau) = \sum_k a_k(\tau) \varphi_k(\vec{r}, \tau), \quad (1.16)$$

где τ – время, а переменная \vec{r} характеризует положение активного электрона. При подстановке этой функции в уравнение Шредингера получается система

дифференциальных уравнений относительно коэффициентов разложения $a_k(\tau)$, решение которой с начальными условиями для $\tau \rightarrow -\infty$ описывает вероятность нахождения электрона в состоянии $\varphi_k(\vec{r}, \tau)$. При правильном выборе базисных функций $\varphi_k(\vec{r}, \tau)$ этот метод позволяет получить сечения потери и захвата электрона налетающей частицей, а также сечения возбуждения и ионизации атома мишени. В качестве базисных функций в (1.16) выбирали атомные или молекулярные волновые функции, также функции псевдосостояний [51], которые удобны для численной реализации метода. Ввиду сложности вычисления метод сильной связи использовался для одноэлектронных систем в области значений энергии, в которой скорость столкновения близка к скорости электронов в атоме и налетающей частице. С увеличением заряда иона q и скорости столкновения трудности в расчетах этим методом возрастают [52]. Если при расчетах сечений в процессе столкновения с протонами было достаточно в (1.16) двух или трех базисных функций, для ионов Be^{4+} необходима уже 21 функция, для ионов C^{6+} – 36, а для ионов O^{8+} – 46 [53]. Причем увеличение количества базисных функций иногда приводит и к ухудшению результатов расчета [51], поэтому в каждом случае приходится исследовать вопрос о размерах базиса, необходимого для удовлетворительного согласия с экспериментальными данными.

Один из первых теоретических методов описания сечения потери электрона быстрым ионом был предложен Н. Бором [25]. В этой модели предполагалось, что в области, где скорость столкновений значительно превышает скорость валентных электронов атома мишени $V \gg V_0$, можно пренебречь связью электронов атома мишени с ядром и рассматривать взаимодействие активного электрона с атомом как его взаимодействие со свободными электронами. Тогда сечение потери быстрым ионом одного из электронов описывается соотношением:

$$\sigma_{q,q+1} = 4\pi a_0^2 \frac{Z_t^2 + Z_t}{Z^2} \left(\frac{V_0}{V} \right)^2. \quad (1.17)$$

Важно отметить, что сечение потери электрона быстрым ионом (1.17) для любых зарядов ускоренного иона q и зарядов ядер Z или Z_t убывает с увеличением скорости по одному закону ($\sigma_{q,q+1} \sim 1/V^2$).

Более аккуратный подход к описанию взаимодействия быстрого ускоренного иона с атомом основан на первом борновском приближении [51]. В случае быстрых столкновений (1.15) налетающий и рассеянный ионы могут быть описаны плоскими волнами, и влияние атома мишени на энергию связи электронов в ионе можно не учитывать. После суммирования по всем возбужденным состояниям атома мишени, включая непрерывный спектр, и учета взаимодействия активного электрона с ядром и со всеми электронами атома мишени амплитуда перехода в процессе потери электрона быстрым ионом в первом борновском приближении представляется в виде:

$$f_{\text{los}} = \sum_{\nu\lambda} \sum_{j=1}^{Z_t} \langle \exp(i\vec{K}_f \vec{R}) \psi_{E_e}(\vec{y}) \Phi_f(\vec{x}_j) \left| \frac{Z_t}{|\vec{R} + \vec{y}|} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}_j + \vec{y}|} \right| \exp(i\vec{K}_i \vec{R}) \psi_{\nu\lambda}(\vec{y}) \Phi_i(\vec{x}_j) \rangle, \quad (1.18)$$

где \vec{x}_j – вектор, характеризующий положение j -го электрона в атоме мишени; \vec{y} – вектор, характеризующий положение активного электрона относительно ядра иона; \vec{R} – вектор, характеризующий положение тяжелых частиц; \vec{K}_i и \vec{K}_f – импульсы иона до и после столкновения; $\psi_{\nu\lambda}(\vec{y})$ – волновая функция активного электрона в ионе до столкновения; ν и λ – главное квантовое и орбитальное числа активного электрона; $\psi_{E_e}(\vec{y})$ – волновая функция активного электрона с энергией E_e в непрерывном спектре; волновые функции $\Phi_i(\vec{x}_j)$ и $\Phi_f(\vec{x}_j)$ описывают начальное и конечное состояния электронов в атоме мишени

соответственно. После интегрирования по \vec{R} и выделение в амплитуде (1.18) упругого канала, в котором состояние атома мишени не изменяется, амплитуда (1.18) преобразуется к виду:

$$f_{\text{los}} = \frac{4\pi}{K^2} \langle \psi_{E_e}(\vec{y}) | \exp(-i\vec{K}\vec{y}) | \psi_{v\lambda}(\vec{y}) \rangle \{ Z_t - \sum_{j=1}^{Z_t} \langle \Phi_i(\vec{x}_j) | \exp(i\vec{K}\vec{x}_j) | \Phi_i(\vec{x}_j) \rangle - \sum_{f \neq i} \sum_{j=1}^{Z_t} \langle \Phi_f(\vec{x}_j) | \exp(i\vec{K}\vec{x}_j) | \Phi_i(\vec{x}_j) \rangle \} , \quad (1.19)$$

где $\vec{K} = \vec{K}_f - \vec{K}_i$ – переданный импульс.

В первом порядке теории возмущений сечение потери электрона быстрыми ионами $\sigma_{q,q+1}$ описывалось соотношением:

$$\sigma_{q,q+1} = \frac{8\pi}{V^2} \sum_{v\lambda} \int_0^\infty dE_e \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} \frac{dK}{K^3} f_{v\lambda}(K, E_e) |q_t(K)|^2 . \quad (1.20)$$

Пределы интегрирования по K в (1.20) – K_{\min} и K_{\max} – определялись законами сохранения энергии и импульса, $q_t(K)$ – эффективный заряд атома мишени,

$$f_{v\lambda}(K, E_e) = \sum_{l\lambda'} (2\lambda'+1) C(\lambda\lambda'l';000)^2 \left| \int dy y^2 \varphi_{E_e l'}(y) j_{\lambda'}(Ky) \varphi_{v\lambda}(y) \right|^2 , \quad (1.21)$$

где l' – орбитальный момент выбитого электрона, λ' – мультипольность перехода, $C(\lambda\lambda'l';000)$ – коэффициент Клебша–Гордана, $j_{\lambda'}(Ky)$ – сферическая функция Бесселя, $\varphi_{E_e l'}(y)$ – радиальная часть волновой функции выбитого электрона, нормированная по шкале энергии, $\varphi_{v\lambda}(y)$ – радиальная часть волновой функции начального состояния активного электрона в приближении Хартри–Фока.

Эффективный заряд $q_t(K)$ учитывает экранировку ядра атома мишени собственными электронами в конечном состоянии. Поскольку состояние атома после столкновения в

(1.15) не регистрируется, в теоретических сечениях выполнялось суммирование по всем разрешенным законами сохранения энергии и импульса состояниям атома мишени:

$$|q_t(K)|^2 = (Z_t - F^0(K))^2 + \sum_{n'l'} |F_{n'l'}^{l'}(K)|^2 h\left(K - \frac{\Delta\varepsilon_{n'l'}}{V}\right) + \int d\varepsilon' |F_{\varepsilon'l'}^{l'}(K)|^2 h\left(K - \frac{I_t + \varepsilon'}{V}\right), \quad (1.22)$$

где ε' – энергия выбитого из атома мишени электрона, $F_{n'l'}^{l'}(K)$ и $F_{\varepsilon'l'}^{l'}(K)$ – коэффициенты разложения по парциальным волнам формфактора в процессах возбуждения и ионизации атома мишени соответственно, $h(x)$ – функция Хевисайда ($h = 0$ при $x < 0$, и $h = 1$ при $x > 0$), $\Delta\varepsilon_{n'l'}$ – энергия возбуждения атома мишени, I_t – потенциал ионизации атома мишени.

При малых переданных импульсах K состояние атома мишени в (1.15) не изменяется, и в (1.22) остается только первое слагаемое. Тогда для нейтрального атома получаем:

$$F^0(K) \rightarrow Z_t, \quad q_t(K) \rightarrow 0 \quad \text{при } K \rightarrow 0. \quad (1.23)$$

С увеличением переданного импульса K первое слагаемое в (1.22) становится отличным от нуля, а когда переданная атому мишени энергия превышает энергию возбуждения $\Delta\varepsilon_{nl}$, в (1.22) появляются дополнительные слагаемые. Если переданная энергия превышает потенциал ионизации I_t , возможен процесс одновременной ионизации налетающего иона и атома мишени, и в (1.22) появляется последнее слагаемое. В связи с необходимостью учета бесконечной суммы по этим состояниям для вычисления (1.22) обычно использовалось правило сумм [54–56]:

$$\sum_{n'l'} |F_{n'l'}^{l'}(K)|^2 + \int d\varepsilon' |F_{\varepsilon'l'}^{l'}(K)|^2 = Z_t \quad \text{при } K \rightarrow 0, \quad (1.24)$$

тогда

$$|q_t(K)|^2 \approx (Z_t - F^0(K))^2 + (Z_t - |F^0(K)|)^2. \quad (1.25)$$

Это приближение нарушается при увеличении переданного атому мишени импульса K . В пределе больших значений $K \rightarrow \infty$ вместо соотношения $|q_t(K)|^2 \rightarrow Z_t^2$, которое следует из (1.22), из (1.25) получаем: $|q_t(K)|^2 \rightarrow Z_t^2 + Z_t$ [57], т.е. такую же зависимость $\sigma_{q,q+1}$ от Z_t , как в модели Бора (1.17).

Расчеты сечения потери электрона быстрыми ионами обычно ограничивались случаями столкновения водородоподобного или гелиеподобного налетающих ионов и простейших атомов мишени. Соотношения (1.20) и (1.25) применялись для расчетов потери электрона быстрыми ионами в столкновениях с атомом водорода [58, 59], гелия [58, 59], азота [60].

1.5. Методы расчета сечения захвата одного электрона

В противоположность процессу потери электрона, который можно сравнить с ионизацией атома, захват ионом одного из электронов атома мишени



представляет собой более сложное явление, в котором принимают участие по крайней мере три взаимодействующие частицы. Теоретические методы описания сечения захвата электрона быстрым ионом [51, 61, 62] основаны на различных вариантах теории возмущений или методе искаженных волн. В случае медленных столкновений используется метод сильной связи каналов. Каждый из методов имеет свои ограничения по скорости столкновения V и параметрам иона q, Z .

В области значений энергии $E < 0.1$ МэВ/нуклон, в которой скорость ускоренного иона близка к скорости валентных электронов в атоме мишени, для описания захвата электрона используется метод сильной связи атомных или молекулярных состояний. В этой области необходимо учитывать движение активного электрона в поле двух

кулоновских центров. Сечение захвата электрона медленными ионами ($V < V_0$) слабо зависит от энергии E , что связано с захватом электрона в большое количество возбужденных состояний [63]. Это позволяет в области скоростей $V < V_0$ нормировать сечение $\sigma_{q,q-1}$ для $Z > 10$ на константу [64]:

$$\sigma_{q,q-1} \approx \pi a_0^2 Z^2 / (2I_0)^2, \quad (1.27)$$

где I_0 – потенциал ионизации атома мишени.

Захват электрона быстрым ускоренным ионом принципиально отличается от других неупругих процессов взаимодействия заряженных частиц с атомом. Для процессов возбуждения и ионизации атомов быстрыми ионами основной вклад в амплитуду перехода вносят большие прицельные параметры, малые переданные импульсы и малые углы рассеяния. В этом случае взаимодействие иона с электронами атома мишени можно рассматривать как возмущение и использовать отношение q/V в качестве параметра для разложения амплитуды перехода. Основной вклад в сечение ионизации и возбуждения атома при столкновении с быстрыми ионами $q/V \ll 1$ дает первый порядок теории возмущения, а остальные слагаемые, имеющие более сильную зависимость от V в области быстрых столкновений, могут рассматриваться как поправки. В случае процесса захвата электрона быстрым ионом нет такого малого параметра, по которому можно разложить амплитуду. Амплитуду перехода можно представить в виде матричного элемента:

$$f_{\text{cap}} = \langle \varphi(\vec{K}_f, \vec{R}) \psi_{nl}(\vec{y}) \mid V(\vec{x}, \vec{R}) \mid \varphi(\vec{K}_i, \vec{R}) \psi_{\nu\lambda}(\vec{x}) \rangle, \quad (1.28)$$

где волновая функция $\psi_{\nu\lambda}(\vec{x})$ описывает начальное состояние электрона с квантовыми числами ν и λ в атоме мишени, $\psi_{nl}(\vec{y})$ описывает конечное состояние электрона с квантовыми числами n и l в рассеянной частице, волновые функции $\varphi(\vec{K}_i, \vec{R})$ и $\varphi(\vec{K}_f, \vec{R})$

описывают движение иона до и после столкновения соответственно, $V(\vec{x}, \vec{R})$ – потенциал взаимодействия иона и атома.

Матричный элемент (1.28) содержит два экспоненциальных множителя $\psi_{v\lambda}(\vec{x}) \propto \exp(-\varepsilon_i x)$ и $\psi_{nl}(\vec{y}) \propto \exp(-\varepsilon_f y)$, где $y = |\vec{R} - \vec{x}|$, константы $\varepsilon_i > 0$ и $\varepsilon_f > 0$ характеризуют энергию связи активного электрона в атоме мишени и рассеянном ионе соответственно. Из-за этой особенности захват электрона быстрым ионом происходит только при его пролете через электронное облако атома мишени. Основной вклад в (1.28) вносят малые межъядерные расстояния $R \sim 1$ и большие переданные импульсы. При увеличении скорости столкновения V уменьшаются время пролета иона через область взаимодействия и вероятность захвата ионом одного из электронов атома, что приводит к быстрому уменьшению сечения $\sigma_{q,q-1}$ при $E > 0.1$ МэВ/нуклон. Сложность теоретического описания захвата электрона быстрым ускоренным ионом объясняется тем, что потенциал $V(\vec{x}, \vec{R})$ в области взаимодействия $R \sim 1$ нельзя считать возмущением. Кроме того, волновые функции $\psi_{v\lambda}(\vec{x})$ и $\psi_{nl}(\vec{y})$ в матричном элементе (1.28) являются собственными функциями разных гамильтонианов, и условия ортогональности для них не выполняются. Другая сложность описания процесса (1.26) связана с отсутствием соотношений, аналогичных правилу сумм (1.24), которые хотя бы приблизительно могли бы учесть вклад всех возбужденных состояний в сечение захвата электрона быстрыми ионами. Как следствие, в расчетах сечения захвата электрона быстрым ускоренным ионом (1.26) для каждого значения энергии E необходимо проверять условия сходимости в сумме по возбужденным состояниям иона X^{q-1} , чтобы эту сумму ограничить.

Первоначально для квантово-механического описания сечения захвата электрона быстрыми ускоренными ионами использовали методы, основанные на первом порядке теории возмущений. Приближение Оппенгеймера–Бринкмана–Крамерса (ОБК) [65, 66] –

самое простое из них. В этом приближении, учитывающем оболочечную структуру быстрого иона и атома мишени [67, 68], захват электрона происходит только за счет его взаимодействия с ионом, а межъядерный потенциал взаимодействия и изменение кинематики разлета в конечном состоянии за счет кулоновского взаимодействия при $q \neq 1$ не учитываются. В этих приближениях амплитуда перехода (1.28) при захвате электрона быстрым ускоренным ионом записывается в виде:

$$f_{\text{cap}}^{\text{ОБК}} = \langle \exp(i\vec{K}_f \vec{R}) \psi_{nl}(\vec{y}) \left| -\frac{q}{y} \right| \exp(i\vec{K}_i \vec{R}) \psi_{v\lambda}(\vec{x}) \rangle. \quad (1.29)$$

Приближение ОБК (1.29) является упрощенной версией первого борновского приближения (FBA – First Born Approximation) [69], в котором взаимодействие тяжелых частиц учитывается оператором $V(\vec{x}, \vec{R})$:

$$f_{\text{cap}}^{\text{FBA}} = \langle \exp(i\vec{K}_f \vec{R}) \psi_{v\lambda}(\vec{y}) \left| \frac{qq_T}{R} - \frac{q}{y} \right| \exp(i\vec{K}_i \vec{R}) \psi_{nl}(\vec{x}) \rangle, \quad (1.30)$$

где q_T – эффективный заряд, характеризующий поле, в котором движется активный электрон атома мишени ($q_T \rightarrow 1$ при $R \rightarrow \infty$).

Основным недостатком ОБК-приближения является завышенное значение вычисленного сечения [70, 71], которое в разы может превышать экспериментальные данные даже в области быстрых столкновений. Попытки уточнить это приближение столкнулись с рядом трудностей. Оказалось, что первое борновское приближение (1.30) описывает экспериментальные сечения $\sigma_{q,q-1}$ при быстрых столкновениях порой хуже, чем ОБК-приближение [72]. Связано это с тем, что вклад межъядерного потенциала взаимодействия в амплитуду процесса захвата электрона отличен от нуля только из-за неортогональности волновых функций в (1.28), и межъядерный потенциал нельзя рассматривать в первом порядке теории возмущений без учета амплитуды более высоких порядков [61, 73]. Так, если сечение захвата $1s$ -электрона ядром быстрого иона ($q = Z$) в

первом порядке теории возмущений пропорционально V^{-12} , то при учете межъядерного потенциала и во втором порядке теории возмущений оно убывает медленнее и пропорционально V^{-11} .

Вопрос о целесообразности применения методов второго и более высоких порядков теории возмущения к расчету сечения захвата электрона при столкновениях быстрых ионов и многоэлектронного атома остается открытым. С одной стороны, есть область значений энергии, где использование второго порядка борновского приближения при описании дифференциального по углу рассеяния сечения захвата электрона протонами позволило улучшить согласие расчетов [74] с экспериментальными данными. Однако для учета процессов рассеяния в промежуточном состоянии при таких расчетах необходима перенормировка расходящихся интегралов. В результате изменение величины сечения при учете механизмов захвата электрона, описываемых амплитудами второго и более высоких порядков теории возмущения, становится соизмеримым с погрешностью расчета, связанной с выбором пробных волновых функций многоэлектронной мишени.

Трудности при использовании традиционной теории возмущения объясняют использование при описании процесса захвата электрона быстрыми ионами различных вариантов метода искаженных волн (CDW – Continuum Distorted Waves) [61, 75], которые учитывают более высокие порядки теории возмущений для описания взаимодействия электрона атома мишени и ускоренного иона. Обычно кулоновским взаимодействием тяжелых частиц в методах искаженных волн пренебрегают при вычислениях матричных элементов, считая, что это взаимодействие приводит только к сдвигу фазы в амплитуде перехода и не изменяет полное сечение. Отметим, что это приближение, которое успешно использовалось в задачах возбуждения и ионизации атомов быстрыми ионами, не отражает специфики процесса (1.26), так как основной вклад в амплитуду (1.28) дают малые межъядерные расстояния и прицельные параметры. Существует несколько

модификаций метода искаженных волн. Например, в случае столкновений при большой разнице между зарядами q и Z_t использовали метод сильного потенциала в борновском приближении (Strong Potential Born Approximation – SPBA) [76]. Из-за сложности численной реализации методы искаженных волн использовали преимущественно для расчетов сечения захвата K -электрона. И только когда была создана программа CDW1 [77], появилась возможность проводить расчеты сечений захвата электрона любой оболочки атома мишени в произвольное возбужденное состояние многоэлектронного иона. В случае быстрых столкновений влияние возбужденных состояний рассеянного иона уменьшается, но количество таких состояний и их вклад в полное сечение могут зависеть от энергии столкновения [78].

В результате сложилась ситуация, когда существовало несколько теоретических методов расчетов сечений захвата электрона в возбужденное состояние быстрого иона (ОБК, ФВА, CDW, SPBA) и имелись расчетные программы, но почти не было волновых функций, позволяющих проводить такие расчеты. Можно было вычислить только сечение захвата электрона ядром иона, когда образуется водородоподобный ион в возбужденном состоянии. Применение водородоподобных функций к многоэлектронным ионам и атомам является грубым приближением с точки зрения учета корреляций активного электрона. Кроме того, это приближение не учитывает многообразие возможных возбужденных состояний в многоэлектронных атомах и ионах.

Волновые функции в приближении Хартри–Фока широко используются при вычислениях матричных элементов, связанных с сечениями различных реакций, в оценках ширины энергетических уровней, расчетах оптической силы осциллятора. Программа Multi Configuration Hartree Fock (MCHF) [79, 80] находит решение нерелятивистского уравнения Хартри–Фока для основных и возбужденных состояний атомов и ионов. Табличный вид этого решения (значения функции при определенных значениях

аргумента) пригоден только для численных расчетов матричных элементов. Необходимость аппроксимации этого решения аналитическими функциями связана с возможностью упростить и ускорить расчет многих матричных элементов и получить наглядный результат этого интегрирования. Решение уравнения Хартри–Фока в виде аналитических функций может быть включено в различные коды атомных и молекулярных расчетов в задачах атомной физики и квантовой химии. Метод аналитической аппроксимации численного решения уравнения Хартри–Фока с помощью комбинаций слэйтеровских орбиталей был использован для волновых функций отрицательных ионов с зарядом ядра $Z \leq 16$ [81], атомов с зарядом ядра $Z \leq 54$ [82, 83], $Z = 55$ [84], $55 \leq Z \leq 92$ [85] и ионов с $Z \leq 18$ [82]. Все эти результаты относятся только к основному состоянию атомов и ионов, поскольку использование этого традиционного метода для аппроксимации волновых функций возбужденных состояний атомов и ионов приводит к значительному увеличению погрешности оценки. Опубликованных данных о волновых функциях возбужденных состояний многоэлектронных атомов и ионов в виде разложения по аналитическим функциям нет.

1.6. Влияние оболочечной структуры иона и атома мишени на сечения перезарядки

В теоретических и экспериментальных исследованиях ионно-атомных столкновений значительное место занимают особенности сечений, связанные с их немонотонной зависимостью от энергии E и зарядов ядер Z и Z_t . Как правило, эти особенности появляются из-за оболочечной структуры иона и атома мишени и наблюдаются, прежде всего, в случае сечения захвата электрона, поскольку это сечение быстро изменяется с увеличением E .

Вероятность захвата ускоренным ионом электрона определенной оболочки атома мишени становится наибольшей, когда скорость столкновения V близка к скорости электронов этой оболочки $V_{v\lambda} = \sqrt{2\varepsilon_{v\lambda}}$, где $\varepsilon_{v\lambda}$ – энергия связи электронов атома мишени, а v и λ – главное квантовое число и орбитальный момент активного электрона соответственно. При столкновении быстрых ионов с многоэлектронным атомом эта особенность может привести к немонотонному уменьшению сечения с увеличением энергии E . На рис. 1 приведена зависимость сечения захвата электрона ионами He^{2+} в процессе столкновения с атомами аргона [86]. При энергии $E < 0.25$ МэВ/нуклон основной вклад в полное сечение вносит захват электрона M -оболочки атома аргона. Этот электрон имеет наименьшую энергию связи в атоме аргона, и вероятность его захвата ионом большая. С увеличением энергии E скорость столкновения V приближается к скорости электрона L -оболочки атома мишени, и при $E > 0.25$ МэВ/нуклон основной вклад в полное сечение захвата электрона ионом He^{2+} вносит захват электрона L -оболочки атома аргона. В этой области значений энергии влияние оболочечной структуры атома аргона на сечение захвата одного электрона $\sigma_{q,q-1}$ приводит к появлению точки перегиба при $E \approx 0.4$ МэВ/нуклон на зависимости сечения $\sigma_{q,q-1}$ от энергии E и более медленному его убыванию при увеличении энергии E по сравнению с сечением $\sigma_{q,q-1}$ в случае столкновений ионов He^{2+} в водороде и гелии.

Увеличение сечений потери и захвата одного электрона с возрастанием Z_t объясняется увеличением количества электронов, с которыми ион может взаимодействовать [32]. В.С. Николаев, сравнивая результаты расчета сечения захвата одного электрона в ОБК-модели и экспериментальные данные, указал на немонотонную зависимость сечения $\sigma_{q,q-1}$ от Z_t [30]. Позже было экспериментально подтверждено [89], что сечение захвата электрона ионами N^{3+} в азоте при энергии $E = 0.035$ МэВ/нуклон больше аналогичного сечения ионов азота в неоне, а сечение захвата электрона $\sigma_{q,q-1}$

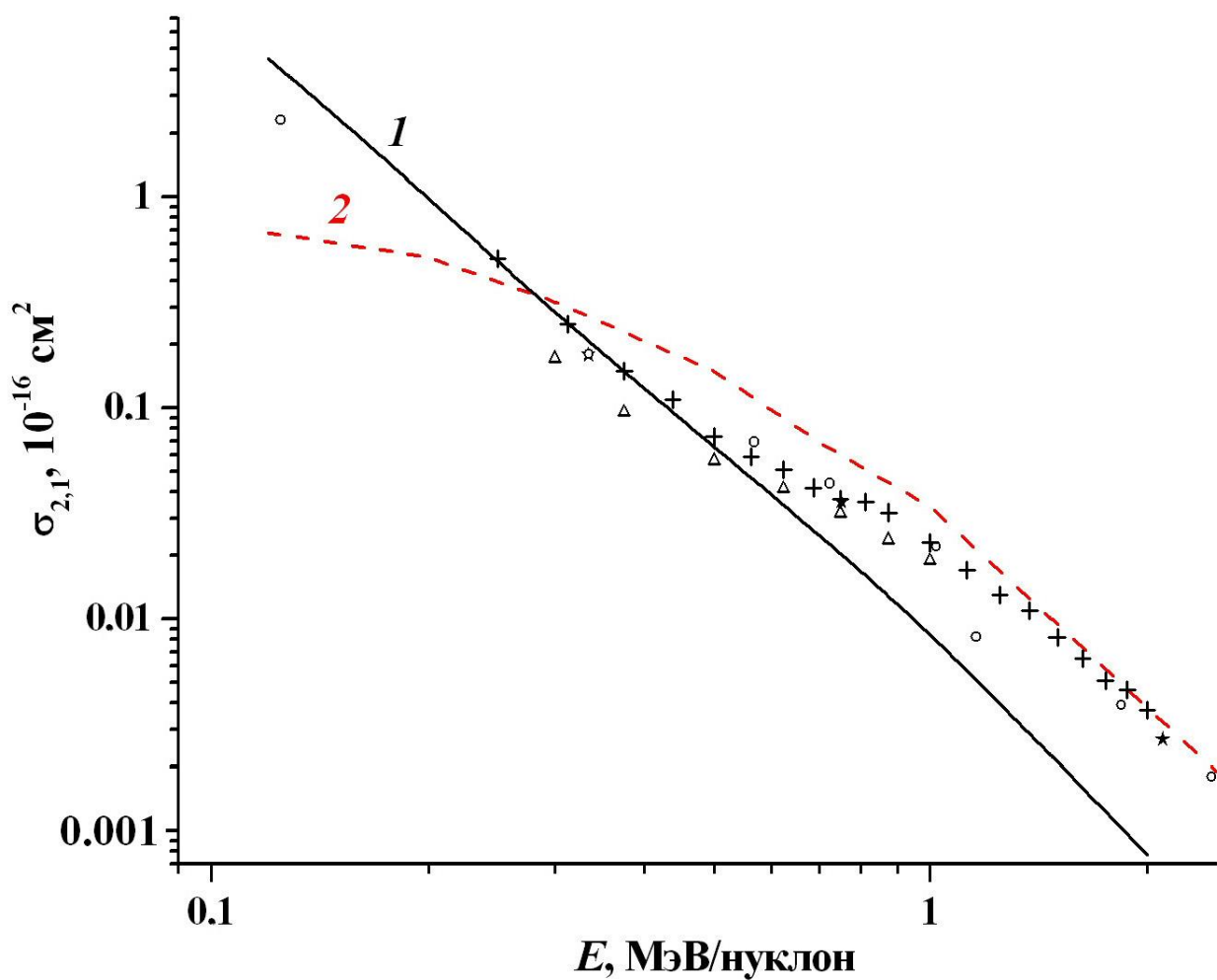


Рис. 1. Сечения захвата электрона $\sigma_{2,1}$ ионами He^{2+} в аргоне. Экспериментальные данные: (\star) – [68]; (o) – [86]; (+) – [87]; (Δ) – [88]. Результаты расчетов методом искаженных волн [86]: 1 – сечение захвата электрона M -оболочки атома аргона; 2 – сечение захвата электрона L -оболочки атома аргона.

ионами азота N^{q+} ($1 \leq q \leq 6$) в неоне превышает при $E = 0.334$ МэВ/нуклон сечение захвата ионов азота в аргоне. Объясняется эта особенность изменением энергии связи электронов атома мишени при увеличении Z_t , а при $Z_t > 18$ и нерегулярным заполнением оболочек атомов мишени валентными электронами. Детально исследовать эту немонотонную зависимость сечения $\sigma_{q,q-1}$ от Z_t сложно, так как эксперименты проводились преимущественно в инертных газах, для которых медленное изменение энергии связи электронов заполненной валентной оболочки сочетается с быстрым увеличением общего числа электронов в атоме. В результате это приводит к почти монотонному увеличению $\sigma_{q,q-1}$ при увеличении Z_t , если $Z_t = 2, 10, 18, 36, 54$. Однако в диапазоне Z_t , в рядах элементов между инертными газами, теоретические оценки сечения $\sigma_{q,q-1}$ в ОБК-приближении предсказывают осциллирующую зависимость $\sigma_{q,q-1}$ от Z_t [68]. На рис. 2 приведена зависимость сечения захвата электрона ионами He^{2+} в различных средах. С увеличением энергии столкновения E амплитуда осцилляций на зависимости $\sigma_{q,q-1}$ от Z_t уменьшается [90], так как возрастает влияние электронов заполненных на 100% внутренних оболочек атома мишени, энергия связи которых почти монотонно увеличивается с возрастанием Z_t .

Косвенно эффект немонотонной зависимости сечения захвата одного электрона от заряда ядра атома мишени подтвердился в экспериментальных исследованиях выхода рентгеновских лучей при прохождении ионов хлора через твердые мишени [92]. Немонотонная зависимость выхода от Z_t объяснялась уменьшением вероятности образования вакансии в быстрых ионах из-за захвата ими электронов на K -оболочку.

Экспериментальные исследования показали, что могут наблюдаться отклонения от монотонной зависимости сечения потери одного электрона $\sigma_{q,q+1}$ от Z из-за различия потенциалов ионизации разных ионов и числа валентных электронов в них. В одной и той

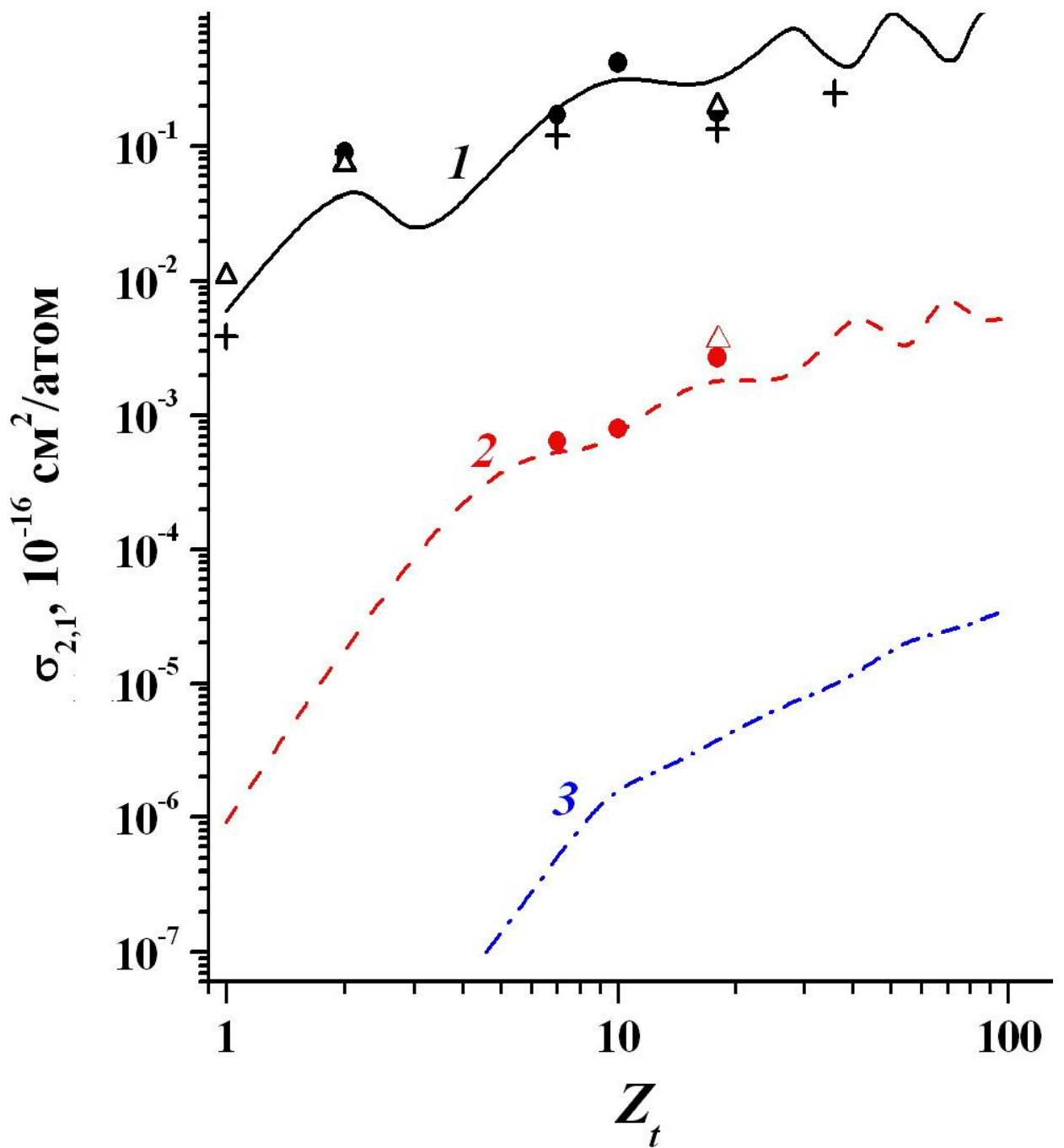


Рис. 2. Сечения захвата одного электрона $\sigma_{2,1}$ ионами He^{2+} . Экспериментальные данные: (•) – [68]; (Δ) – [87]; (+) – [91]. Линии – результаты расчетов в ОБК-приближении [68]: 1 – $E = 0.334$ МэВ/нуклон; 2 – $E = 2.1$ МэВ/нуклон; 3 – $E = 10.1$ МэВ/нуклон.

же среде сечение потери электрона атомом гелия оказалось меньше сечения потери электрона атомом водорода [29], а ионами Na^{2+} , Mg^{2+} меньше, чем ионами Ne^{2+} , N^{2+} [30]. В области значений энергии, где скорость V близка к скорости валентных электронов иона, возможно и резкое возрастание сечения при небольшом изменении Z . Так, сечение $\sigma_{1,2}$ для ионов B^+ в гелии и азоте [90] в 2–3 раза превышает аналогичное сечение для ионов Li^+ [93] при той же скорости. Возможно также и немонотонное поведение сечения потери электрона $\sigma_{q,q+1}$ в зависимости от Z_t [94].

Осциллирующая зависимость сечений потери и захвата одного электрона от Z_t может привести к немонотонной зависимости среднего равновесного заряда \bar{q} от заряда ядра Z_t [95, 96]. Величина \bar{q} формируется за счет сечений как захвата, так и потери электрона. Так как величина среднего заряда иона \bar{q} определяется из усреднения по заряду (1.6) в пределах ширины равновесного зарядового распределения, осцилляции на зависимости \bar{q} от Z_t слабее, чем на зависимости сечений потери и захвата одного электрона, и уменьшаются в случае тяжелых ионов, для которых ширина зарядового распределения больше.

Экспериментальные данные (рис. 3) показывают, что с увеличением энергии столкновения E амплитуда осцилляций среднего заряда \bar{q} ускоренного иона в зависимости от Z_t уменьшается. Заметное уменьшение среднего заряда иона \bar{q} в диапазоне значений Z_t от 26 до 29 объясняется нерегулярным характером заполнения $3d$ -оболочки атомов.

При быстрых столкновениях колебания среднего заряда иона \bar{q} сравнимы с экспериментальной погрешностью (рис. 4). Объясняется этот эффект медленным изменением энергии связи электронов заполненных внутренних оболочек атомов. Из рис. 4 также видно, что средний заряд в твердых мишенях больше, чем средний заряд в газах.

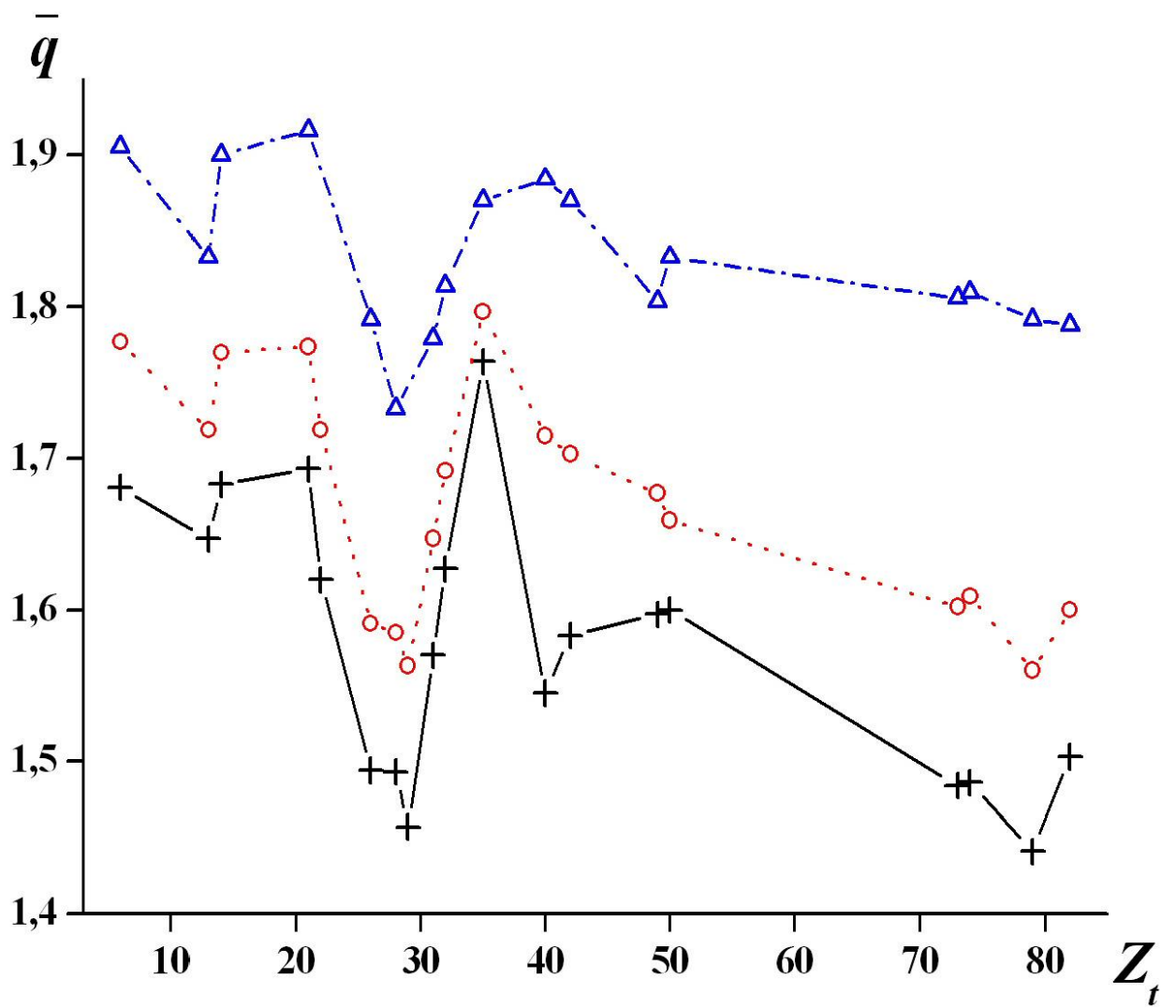


Рис. 3. Экспериментальная зависимость [96] среднего заряда ускоренных ионов гелия от заряда ядра атома мишени при разной энергии E : (+) – 0.8 МэВ; (o) – 1 МэВ; (Δ) – 1.5 МэВ.

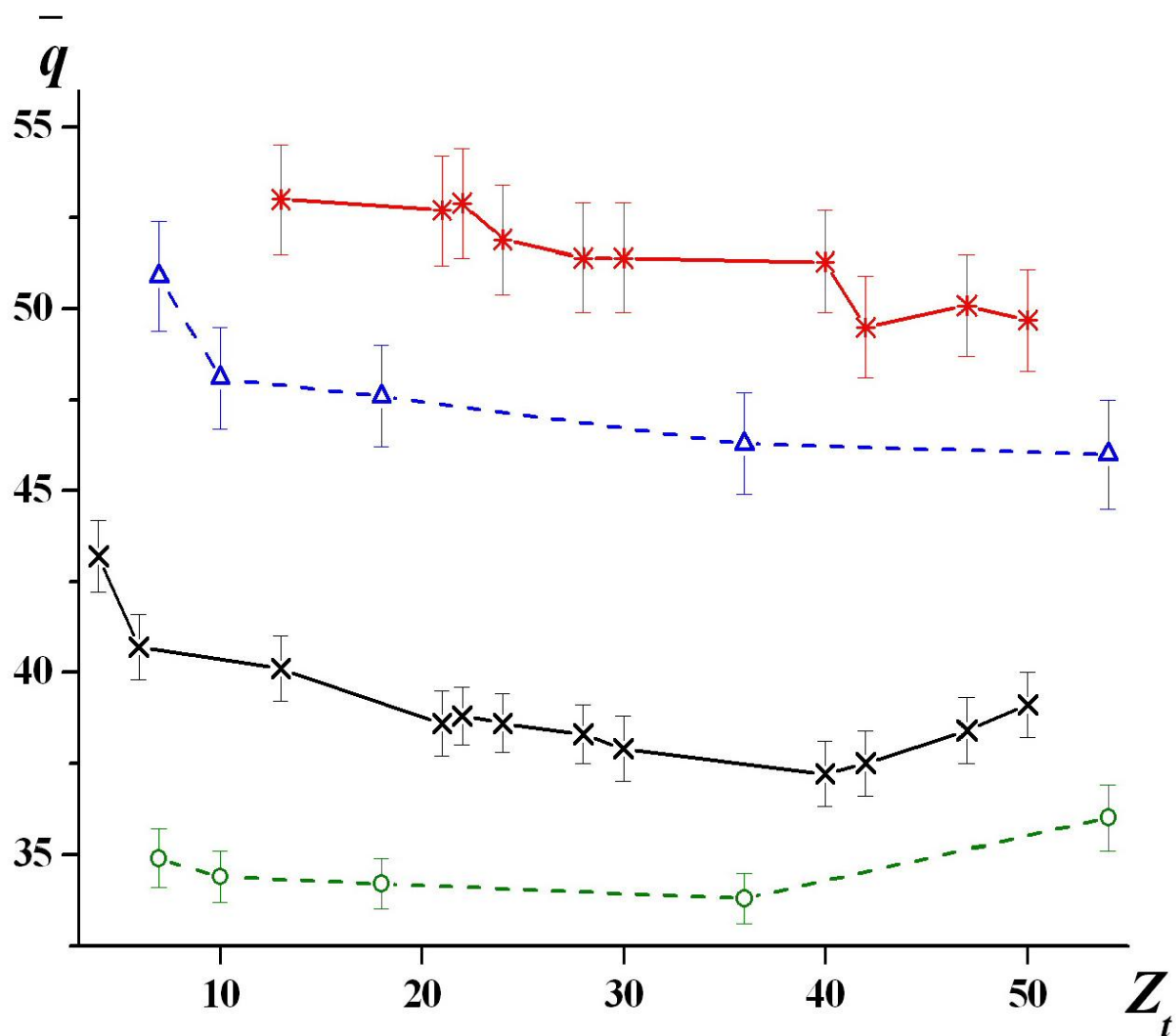


Рис. 4. Экспериментальная зависимость [97] среднего заряда ускоренных ионов урана от заряда ядра атома мишени в газовых и твердых мишенях: (o) – $E = 3.6$ МэВ/нуклон в газах; (\times) – $E = 3.6$ МэВ/нуклон в твердых мишенях; (Δ) – $E = 7.9$ МэВ/нуклон в газах; (*) – $E = 7.9$ МэВ/нуклон в твердых мишенях.

В экспериментальных работах по потерям энергии ионов [3] тоже отмечается немонотонная зависимость неупругих потерь энергии ионов S_e при изменении заряда ядра атома мишени Z_t . Осцилляции неупругих (электронных) потерь энергии S_e наблюдались в области значений энергии, в которой скорость столкновения близка к скорости валентных электронов [3], причем амплитуда этих осцилляций уменьшалась с увеличением скорости столкновения V . Немонотонная зависимость неупругих потерь энергии и пробега ионов от Z наиболее заметна в случае легких ионов при небольших скоростях V [98].

1.7. Эффект плотности в зарядовых распределениях ускоренных ионов

Уже в первых экспериментах по зарядовым распределениям осколков деления [22] были обнаружены отличия среднего заряда ионов в твердой и газообразной средах [99]. Это указывало на существенное влияние плотности мишени на зарядовые распределения ускоренных ионов [97, 100–104]. Первое теоретическое объяснение этого эффекта [26] было основано на экспериментально установленном увеличении среднего заряда ионов в конденсированной среде. Результаты измерений показывают, что средний заряд ионов в твердой мишени больше, чем в газе во всем диапазоне значений энергии. С увеличением энергии E различие величин среднего заряда в газообразной и твердой мишенях (эффект плотности) уменьшается. Изменение зарядового распределения в пучке ионов внутри твердой мишени связано с увеличением сечения потери электрона и уменьшением сечения захвата электронов [26], что подтвердилось в экспериментах по прохождению различных ускоренных ионов через целлулоид [100] и графит [103]. В газе взаимодействие иона и атома сводится к однократному столкновению двух частиц, и величина сечения отражает вероятность этого процесса. При рассмотрении взаимодействия ускоренного иона с атомами мишени твердой среды надо учитывать, что изменяются как свойства иона в пучке, так и свойства атома мишени. В твердой мишени из-за небольших межатомных расстояний ион может взаимодействовать одновременно с несколькими атомами. В

теоретических моделях описания таких столкновений надо учитывать нарушение приближения парных столкновений, что приводит к необходимости учета взаимодействия ускоренного иона не с одним, а с группой (цепочкой или плоскостью) атомов. Кроме того, поскольку время между столкновениями иона и атомов твердой мишени может быть меньше, чем время распада возбужденных состояний иона, при последующем столкновении ион может быть не в основном, а в возбужденном состоянии. Следовательно, в твердом веществе вероятность потери ускоренным ионом одного из своих электронов больше, а вероятность захвата электрона мишени меньше, чем в газе при той же энергии E [103]. Это увеличивает средний заряд иона в пучке [32].

С точки зрения математики сечения перезарядки – это коэффициенты, определяемые из уравнения перезарядки [29]. Они могут быть введены как для газовой, так и для твердой мишени, но физический смысл этих величин различен. В случае твердой мишени правильнее говорить об эффективных сечениях, которые по физическому смыслу отличаются от привычных величин, введенных в квантовой механике для описания взаимодействия иона с изолированным атомом. Эффективные сечения можно рассматривать как результат усреднения по возбужденным состояниям взаимодействующего со средой иона. Однако вопрос о том, сколько и какие возбужденные состояния необходимо учитывать, остается открытым. Большинство авторов считает, что можно ограничиться рассмотрением тех возбужденных состояний, для которых средний размер электронных оболочек не превышает среднее расстояние между атомами среды.

Зависимость зарядовых фракций легких ионов от энергии E при отражении от поверхности твердой мишени качественно соответствует аналогичной зависимости зарядовых фракций в газах [4, 105]. Применимость представлений о захвате и потере электрона в процессе парных столкновений к твердой мишени рассматривалась в нескольких работах [106–108]. Использование измеренных в газах величин сечений

захвата и потери электрона позволило получить хорошее совпадение с экспериментальными данными для доли атомов водорода в пучке протонов с энергией 0.1–2 МэВ, прошедшем через графитовую фольгу [107]. В этой теоретической работе твердая мишень рассматривалась как плотный газ, а формирование зарядового распределения прошедших через вещество ускоренных ионов описывалось процессами захвата и потери электронов в парных соударениях ионов с атомами мишени. Таким образом, для скоростей ионов порядка или больше скоростей атомных электронов из-за динамического характера экранирования можно пользоваться оценками сечений захвата и потери электронов, определенными в газах.

Отличия зарядовых распределений в газах и твердой мишени не сводятся только к разнице величин сечений перезарядки в газе и твердой мишени. Если скорость частиц меньше скорости Ферми, вопрос о применимости сечений захвата и потери электронов к описанию зарядовых фракций нельзя считать окончательно выясненным. В разреженном газе при замедлении иона до скорости, меньшей скорости его валентного электрона, нейтральная фракция в зарядовом распределении ионов становится доминирующей. Внутри твердой мишени облако электронов, двигаясь за ионом, экранирует его [107], что приводит к уменьшению количества разрешенных уровней энергии в атоме. В частности, для атома водорода внутри металла имеется только один уровень с энергией связи около 1 эВ [109]. В этом случае с большой вероятностью атом водорода, попавший в металл, после остановки будет сразу ионизирован при столкновении с электронами проводимости [106]. Потенциальная яма, в которой находится электрон, становится более узкой, и электрон замедлившегося иона переходит в зону проводимости. Исключения из этого правила есть [4], но их немного. Объясняется этот эффект тем, что условие зарядового равновесия в пучке ионов внутри твердой мишени включает баланс не только между захватом и потерей электронов, но и между процессами возбуждения и распада

метастабильных состояний иона и атомов мишени. Так, например, формирование нейтральной фракции в пучке протонов возможно в твердой мишени только на короткое время [4], пока протон не замедлился до остановки, или при вылете протонов за пределы твердой мишени, где нет электронного газа.

Другое отличие твердой мишени от газа при формировании зарядового распределения ионов в пучке заключается во влиянии поверхностных эффектов на зарядовое распределение ионов. Распределения ионов по заряду внутри и за пределами твердой мишени могут различаться [99]. При вылете с поверхности кулоновское поле иона увлекает за собой часть электронов, некоторые из них могут быть захвачены ионом [7]. Этот процесс аналогичен нейтрализации в пучке протонов и ионов гелия при их отражении от металлической поверхности [106, 110]. Особое значение в этом процессе имеют концентрации примесей на поверхности мишени.

Влияние поверхностных эффектов с помощью сравнения зарядовых распределений ионов экспериментально исследовали в [111], где был измерен средний заряд в пучках ионов азота N^{7+} и кислорода O^{7+} , прошедших со скоростью $V = 8 \times 10^8$ см/с через одну и две целлулоидные пленки одинаковой суммарной толщины. В области значений энергии, в которой средний неравновесный заряд ускоренных ионов уменьшается с увеличением толщины мишени, было получено, что в эксперименте с одним слоем неравновесный средний заряд на 5–7% больше, чем в случае двухслойной пленки. Следовательно, замена одного слоя мишени двумя приводит в этой области значений энергии к усилению перезарядки ионов на поверхности и уменьшению среднего неравновесного заряда ионов.

Экспериментальные данные показывают, что средний заряд ускоренных ионов в твердой мишени превышает средний заряд ионов в газах во всем исследуемом диапазоне значений энергии E (рис. 5). Наибольшее отличие \bar{q} в газообразных и твердых мишенях приходится на область 0.03–1 МэВ/нуклон, в которой сечения перезарядки быстро

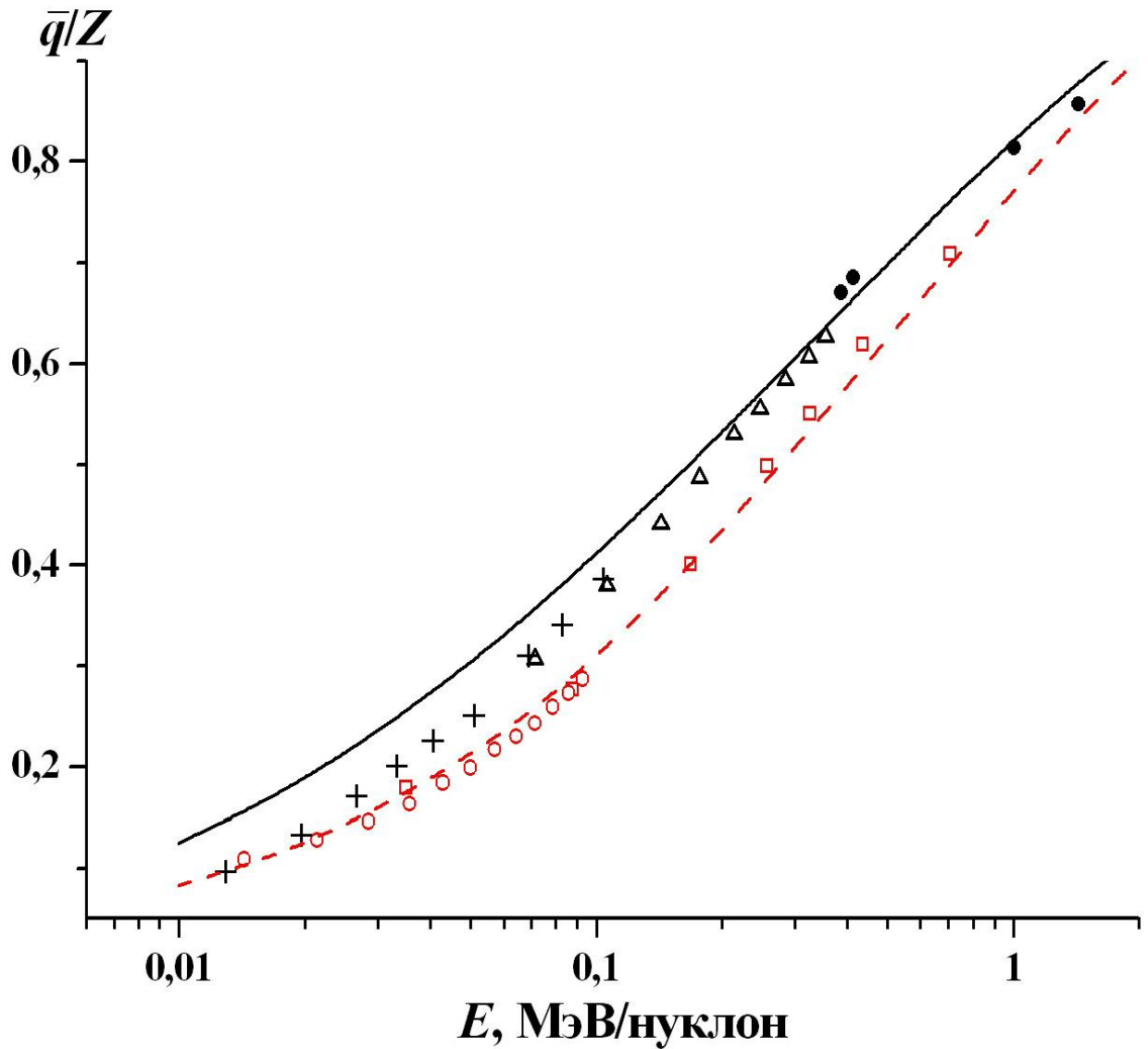


Рис. 5. Зависимость отношения среднего заряда ускоренного иона \bar{q} к заряду ядра иона Z от энергии ионов E . Экспериментальные данные обозначены символами: (\square) – [112]; (o) – [113] для пучков ионов азота в азоте; (\bullet) – [39]; ($+$) – [114]; (Δ) – [115] для пучков ионов азота в углероде. Пунктирная линия – результат расчетов среднего заряда ускоренного иона \bar{q} на основе эмпирической формулы (1.10) для пучков ионов азота в азоте. Сплошная линия – результат расчетов среднего заряда ускоренного иона \bar{q} на основе эмпирической формулы (1.11) для пучков ионов азота в углероде.

изменяются в зависимости от энергии. Эмпирические оценки (1.10), (1.11) в среднем описывают эту особенность \bar{q} , вызванную эффектом плотности. Отметим также, что согласие эмпирической оценки \bar{q} с экспериментальными данными в области значений энергии $E < 0.1$ МэВ/нуклон для газов заметно лучше, чем для твердой мишени. В области $E > 10$ МэВ/нуклон разница отношений \bar{q}/Z для газообразной и твердой мишеней становится меньше 1%, и влияние эффекта плотности на зарядовые распределения в пучках ускоренных ионов можно не учитывать.

Один из способов теоретического учета эффекта плотности в сечениях перезарядки был предложен в серии работ [78, 116–118]. При захвате одного электрона ионом в плотной среде суммирование сечений захвата электрона по конечным состояниям рассеянного иона ограничивалось условием, когда размер электронной оболочки возбужденного иона соизмерим с расстоянием между атомами мишени. Отметим, что это ограничение определяется свойствами изолированного иона в возбужденном состоянии и не связано с его скоростью. В итоге было установлено, что вычисленное сечение захвата электрона легкими ионами в области значений энергии E от 4 до 6 МэВ/нуклон уменьшается при увеличении плотности среды в 2–3 раза [116] из-за уменьшения количества возбужденных состояний. При расчете сечения потери одного электрона, наоборот, дополнительно учитывались каналы реакции, в которых ион переходит сначала в одно из возбужденных состояний, а затем, если вероятность радиационного распада небольшая, происходит потеря электрона из возбужденного состояния. В этом случае вычисленное сечение потери ионом электрона увеличивалось в 1.5 раза [116] с увеличением плотности мишени. Этот теоретический подход к описанию влияния эффекта плотности мишени на распределения ионов в пучке по заряду точнее эмпирического метода, поскольку сечения перезарядки в твердой среде, зарядовые фракции ионов и их средний заряд зависят от плотности мишени. В пределе, когда плотность мишени

уменьшается до нуля, сечения, а значит и равновесные зарядовые фракции, стремятся к соответствующим значениям в газе [116]. К сложности использования этого метода надо отнести необходимость его настройки для каждого набора параметров q , Z , Z_i и E , которая включает оценку количества возбужденных состояний ускоренного иона, а также вычисление сечений их возбуждения и распада.

Для оценки зарядовых распределений в пучках ионов в газах и твердой среде имеется несколько компьютерных программ. При вычислении равновесных и неравновесных зарядовых фракций быстрых ионов с $Z - q \leq 28$ могут быть использованы программы ETASNA [119] и GLOBAL [120]. Эти программы основаны на оценке сечений потери и захвата электрона ионами. Применимость этих программ для описания зарядовых распределений ионов ограничена областью значений энергии $E \geq 10$ МэВ/нуклон в случае программы ETASNA [119] и $E \geq 30$ МэВ/нуклон в случае программы GLOBAL [120]. Надо отметить, что результаты расчетов зарядовых распределений ускоренных ионов по программе ETASNA дают удовлетворительное согласие с экспериментальными данными и в более широкой области значений энергии. Эта программа, например, использовалась для вычисления зарядовых распределений в пучках ионов углерода в углероде при $E = 2$ МэВ/нуклон [121, 122].

1.8. Методы оценки потерь энергии ускоренных ионов

Величины потерь энергии, которые часто также называют тормозной способностью вещества, определяются как отношение средней энергии, теряемой частицей на единице длины ее пути, к плотности мишени. Исследования потерь энергии кроме накопления и систематизации экспериментальных данных включали в себя также формулировку и обоснование различных теоретических моделей, а также эмпирическую оценку на основе полученных экспериментальных и теоретических закономерностей, которая позволила существенно расширить диапазон исследования.

В общем случае столкновения многоэлектронных ионов и атомов или молекул среды возникает проблема описания взаимодействия многих тел с вытекающими отсюда трудностями расчета. До сих пор не существует достаточно полной теории, которая правильно описывает потери энергии ионов во всем диапазоне значений энергии ионов. При энергии меньше нескольких кэВ основную роль в процессах потери энергии играет упругое рассеяние частицы на атоме как целом. С ростом энергии E вклад упругих процессов в потери энергии уменьшается. В области значений энергии от нескольких кэВ до сотен МэВ в потере энергии наиболее существенным становится процесс неупругого взаимодействия быстрой частицы с электронами атомов мишени. В случае тяжелых заряженных частиц при $E \geq 100$ МэВ/нуклон важную роль начинают играть ядерные взаимодействия, на которые при еще большей энергии приходится основная доля потерь энергии. Вклад каждого из указанных процессов в суммарную величину потерь энергии зависит от энергии и заряда ядра иона и свойств материала мишени. При теоретическом рассмотрении потерь энергии предполагалось, что разные механизмы потерь действуют независимо.

При экспериментальных исследованиях потерь энергии ускоренных ионов, прошедших через вещество, измеряется сумма потерь при упругих и всех неупругих столкновениях ионов в веществе. Последние связаны с потерями энергии при ионизации и возбуждения атомов мишени, а также в процессах захвата и потери ионами электронов. Зависимость неупругих потерь энергии ионов S_e от скорости или энергии иона – это гладкая функция с максимумом при энергии E_S , при которой скорость столкновения приблизительно равна скорости валентных электронов в атоме среды.

Неупругие потери энергии S_e быстрых ионов удовлетворительно описываются формулой Бете–Блоха [123, 124], которая получена в первом борновском приближении для случая движения быстрой частицы определенного заряда через газ свободных электронов,

с интегрированием по всем возбужденным состояниям и состояниям непрерывного спектра атома мишени. С учетом релятивистских поправок и полуэмпирических соотношений эта формула в широком интервале значений энергии E представляется в виде [7, 125]:

$$S_e = \frac{4\pi Z^2}{mV^2} Z_t \left[\ln \frac{2mV^2}{I(1-V^2/c^2)} - \frac{V^2}{c^2} - \frac{C_t}{Z_t} - \delta_t \right], \quad (1.31)$$

где m – масса электрона, I – средняя энергия возбуждения атома мишени, c – скорость света, C_t/Z_t – оболочечная поправка, учитывающая неполное участие электронов внутренних оболочек атома мишени в торможении, δ_t – поправка, характеризующая поляризацию среды. Величина I не является постоянной и осциллирует при изменении Z_t [126]. Экспериментальные исследования показали, что неупругие потери энергии S_e ускоренных протонов и дейтронов, имеющих одинаковые скорости, в пределах точности эксперимента совпадают. Из-за процессов потери и захвата электрона ионом формулу (1.31) при $E \leq E_S$ можно применять лишь условно. В этой области значений энергии величины Z и Z_t не являются хорошими параметрами в (1.31), так как начинают проявляться особенности строения электронных оболочек сталкивающихся частиц, что приводит к немонотонной зависимости S_e от Z и Z_t .

Для описания неупругих потерь энергии в области $E \leq E_S$ были использованы теории Фирсова [127] и Лидхарда [128, 129], которые основаны на модели атома Томаса–Ферми. В теории Линхарда замедление бесструктурной заряженной частицы рассматривалось как результат ее взаимодействия с однородным газом свободных электронов [130]. При движении ускоренного иона в среде создается электрическое поле, которое взаимодействует с атомами мишени. Это взаимодействие с помощью уравнения Пуассона описывается функцией диэлектрической проницаемости среды. Движущая заряженная частица теряет свою энергию в любой среде, диэлектрическая проницаемость

которой комплексна, т.е. не только в металлах, но и в диэлектриках и полупроводниках.

Выражение для S_e в этом случае записывалось в виде [3, 129]:

$$S_e = 8\pi a_0^2 Z_t^{1/6} \left[\frac{ZZ_t}{(Z^{2/3} + Z_t^{2/3})^{3/2}} \right] mV V_0. \quad (1.32)$$

Развитие формализма функции диэлектрической проницаемости позволило расширить область применимости модели однородного ферми-газа свободных электронов на область промежуточных значений энергии [131–133], в которой пропорциональность $S_e \sim V$ нарушается. В этом случае при описании неупругих потерь энергии ускоренных ионов в металле учитывали рассеяние и нелинейное экранирование электронов движущимся ионом, что позволило описать осцилляции S_e от Z [3].

Модель Фирсова [127] основана на предположении о непрерывном изменении заряда медленного ($E \leq E_S$) тяжелого иона при его торможении в среде. В этом подходе выражение для неупругих потерь энергии S_e проще:

$$S_e = 2.3 \pi a_0^2 (Z + Z_t) mV V_0 \text{ для } Z_t/4 \leq Z \leq 4Z_t. \quad (1.33)$$

В моделях Лидхарда (1.32) и Фирсова (1.33) эффекты, связанные с особенностями электронной структуры атома, не воспроизводятся. При расчетах по формулам (1.32) и (1.33) зависимость S_e от Z и Z_t монотонная и только в среднем описывает экспериментальные результаты. Обнаруженное в экспериментах нарушение аддитивности S_e для некоторых молекул и составляющих молекулу атомов в приближениях (1.32) и (1.33) не учитывается. Для описания эффекта осцилляции S_e от Z и Z_t формулы (1.32) и (1.33) модифицировали [5, 134, 135] с использованием для атома мишени вместо модели Томаса–Ферми более сложной модели Хартри–Фока и ряда других приближений.

Компиляция экспериментальных данных [15, 136] о потерях энергии ускоренных ионов дала возможность проанализировать наличие и погрешность измеренных величин потерь энергии для исследуемой пары ион–атом мишени. Учитывая разнообразие состава

и плотности многокомпонентной мишени, а также широкий диапазон значений энергии и зарядов ядер Z ионов, эти экспериментальные данные, представленные в виде таблиц и графиков, не исчерпывают все многообразие вариантов ион–состав мишени. Для оценки потерь энергии в случае конкретного варианта ион–мишень кроме экспериментальных данных потребовались теоретические и эмпирические оценки S_e , которые предназначены для того, чтобы внести поправки в экспериментальную зависимость с учетом настройки на конкретный состав мишени и параметры иона и описать $S_e(E)$ в широкой области значений энергии. Особое внимание уделялось области вблизи максимума потерь энергии $E \approx E_S$, в которой необходимо согласовать зависимости (1.31) и (1.32), (1.33) [125].

Другое направление в описании потерь энергии ускоренных ионов основано на теоретической оценке потенциала взаимодействия иона с атомами. Здесь имеется несколько подходов, основанных, как правило, на модели атома Томаса–Ферми [6]. При исследовании упругих потерь энергии основополагающей стала работа Й. Линдхарда [137], в которой на основе упругого потенциала взаимодействия рассеяния иона с изолированным атомом мишени, с упорядоченной цепочкой и плоскостью атомов были описаны особенности ориентационных эффектов при прохождении пучков ионов через кристаллы. Потери энергии ионов вычисляли в приближении упругого и неупругого потенциального рассеяния для газов и твердых неупорядоченных [138], а также кристаллических [139–141] мишеней. В этом подходе ускоренный ион рассматривается как бесструктурная частица с эффективным зарядом, а неупругий потенциал взаимодействия учитывает ионизацию и возбуждение атома мишени, но не процессы потери и захвата электронов ионом. Важное преимущество этого теоретического направления состоит в том, что оно дало возможность вычислить угловое распределение рассеянного иона, что необходимо при моделировании транспорта иона в среде методом Монте-Карло [142, 143].

В настоящее время используют несколько компьютерных программ для оценки потери энергии ускоренных ионов в газах и некристаллической твердой мишени. Программы отличаются областью применимости и позволяют в широком диапазоне изменения E получить упругие и неупругие потери энергии, но не потери энергии ионов, обусловленные отдельными неупругими процессами – ионизацией, возбуждением атома мишени и перезарядкой иона. Зависимость потерь энергии от заряда иона в этих программах учитывается в модели экранированного потенциала с помощью эмпирических соотношений для среднего равновесного заряда на основе модели атома Томаса–Ферми в [144] или (1.10) и (1.11) в [138].

Наиболее общим по своим возможностям является компьютерный программный комплекс SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) [145], с помощью которого можно вычислить потери энергии ионов с зарядами ядер $Z = 1-92$ и энергией E от 10 эВ до 2 ГэВ в газах и твердой мишени с атомными номерами Z_t от 1 до 92. Потери энергии ионов оцениваются на основе эмпирических оценок [125] и теоретических расчетов потерь энергии в процессе упругих столкновений. Используя SRIM, можно вычислить отдельно упругие и неупругие потери энергии ионов в многокомпонентной мишени с учетом поправки на нарушение аддитивности, а также пробеги ионов. Учитывается, что зависимость потерь энергии от Z_t может быть немонотонной. Этот программный комплекс не позволяет рассчитать зарядовые распределения ионов и характеристики неравновесных процессов в условиях, когда толщина мишени настолько мала, что ион испытывает только несколько столкновений. SRIM включает в себя блок TRIM (Transport of Ion in Matter) [146, 147], позволяющий методом Монте-Карло проводить расчет углового и энергетического распределения ионов, прошедших слой газообразной или твердой некристаллической мишени, а также распределение ионов, отраженных от поверхности.

Программа CASP [138] оценивает неупругие потери энергии ионов по сдвигу фаз рассеяния в приближении парных столкновений. Заряд ускоренного иона описывается соотношением (1.10) или (1.11). Отдельно учитывается вклад в потери энергии взаимодействия иона с электронами разных оболочек атома мишени. Наряду со средним зарядом иона проводится оценка равновесных зарядовых фракций.

Программа PASS [144] вычисляет поправки к закону Бете–Блоха для потерь энергии ионов. Средний заряд ускоренного иона описывается на основе модели атома Томаса–Ферми. Текста программы [144] в открытом доступе нет, но есть подробные таблицы [3] результатов расчета потерь энергии для ионов с $3 \leq Z \leq 18$ и $Z = 26$ в широком диапазоне изменения параметров Z_i ($1 \leq Z_i \leq 92$) и E ($25 \text{ кэВ/нуклон} \leq E \leq 1 \text{ ГэВ/нуклон}$).

Оценка вклада отдельных процессов в неупругие потери энергии ионов важна для объяснения некоторых особенностей величины потерь энергии [3], например, соотношения неупругих потерь энергии в газе и в твердой мишени [148]. Сложность анализа соотношения между потерями энергии ионов в различных неупругих процессах связана с недостатком информации о сечениях. Потери энергии ускоренных ионов, приходящиеся на единицу плотности мишени, слабо зависят от ее агрегатного состояния [145, 149]. С другой стороны, потери энергии быстрых ионов на ионизацию и возбуждение атома мишени в соответствии с первым порядком теории возмущений пропорциональны квадрату среднего заряда иона, а заметное увеличение среднего заряда иона в твердой мишени по сравнению с газами подтверждается экспериментально [32]. Это противоречие до сих пор не получило объяснения.

В расчетах потерь энергии в процессах перезарядки ионов $S_{q\pm 1}$ в газах [149] и целлюлоиде [149, 150] были использованы экспериментальные равновесные зарядовые фракции, а также сечения потери и захвата электрона быстрыми ионами. Потери энергии ионов в процессах перезарядки записывались в виде:

$$S_{q\pm 1} = \sum_q F_q (\sigma_{q,q+1} + \sigma_{q,q-1}) \left(\frac{mV^2}{2} + |\varepsilon_q| \right), \quad (1.34)$$

где ε_q – энергия связи валентного электрона в ионе с зарядом q . Для теоретической оценки $S_{q\pm 1}$ в многокомпонентной мишени требуется обобщение этой модели.

Итак, в исследованиях потерь энергии ионов можно выделить несколько этапов. На первом этапе были измерения. Затем была выполнена компиляция и систематизация [15, 136] экспериментальных данных в виде таблиц и рисунков. Далее формулировались основные теоретические модели, описывающие экспериментальные закономерности. Получить теоретическую модель потерь энергии ионов во всем диапазоне значений их энергии не удалось, поэтому теоретические модели формулировались отдельно для области быстрых (1.31) и медленных (1.32), (1.33) столкновений. На следующем этапе потребовалось расширить описание потерь энергии ионов на всю область значений энергии при условии согласия полученных теоретических оценок с имеющимися экспериментальными данными. Эта работа на основе эмпирического метода была выполнена Дж. Зиглером [125]. И наконец, была написана компьютерная программа SRIM [145], которая, используя данные [125], позволила получить оценки потерь энергии для произвольных ускоренных ионов и составов многокомпонентной мишени. Это способствовало использованию данных о потерях энергии для различных научно-технических приложений. Следует отметить, что указанная схема может быть применима к исследованиям сечений потери и захвата электрона, где также накоплен большой объем экспериментальных данных и сформулированы основные теоретические модели, описывающие закономерности изменения сечений.

1.9. Энергетические, угловые и зарядовые распределения

ионов, отраженных от поверхности

Энергетическое распределение отраженных от поверхности ионов зависит от энергии падающих ионов E_0 , от угла скольжения α и от угла рассеяния θ . Большие углы падения и рассеяния используются в методе Резерфордского обратного рассеяния для определения состава и структуры твердой мишени [151, 152].

В пределе малых углов скольжения, когда величина α составляет доли градуса и перпендикулярная составляющая скорости иона небольшая, в энергетическом распределении отраженных ионов появляется так называемый “поверхностный” пик [4]. В этом случае ион взаимодействует только с поверхностными слоями мишени [153, 154], в которых испытывает только несколько соударений. Зарядовое распределение ионов в области “поверхностного” пика не успевает установиться [105], и распределение по энергии отраженных ионов зависит от заряда q_0 , падающего на поверхность иона.

В случае быстрых ионов при углах скольжения больше нескольких градусов взаимодействие ионов с мишенью происходит не только с поверхностными, но и с более глубокими слоями вещества [155–157]. Энергетическое распределение отраженных поверхностью ионов не зависит от q_0 , а диапазон значений энергии таких ионов широкий ($0 \leq E \leq E_0$). В этом распределении по энергии есть ионы, которые потеряли почти всю свою энергию, а количество рассеянных ионов, потерявших лишь небольшую часть своей энергии $E \sim E_0$, незначительно.

Строгое теоретическое описание взаимодействия ускоренного иона при рассеянии поверхностью является сложной задачей. Компьютерное моделирование движения налетающего иона в среде обычно осуществляется методом Монте-Карло [142, 143], в котором рассматривается движение иона с энергией E в гомогенной среде. При

замедлении ион может взаимодействовать как с одним, так и с несколькими атомами среды. Взаимодействие иона с атомами мишени рассматривалось в приближении парных столкновений, которое в случае столкновений протонов с металлами применимо в области $E > 10$ эВ [143]. При каждом столкновении ион теряет только небольшую часть своей энергии $\Delta E \ll E$. Моделирование транспорта ускоренного иона в среде предусматривает несколько этапов. Пусть известны энергия E и направление движения иона. Сначала определяется точка следующего столкновения. Для этого используется экспоненциальное распределение пробегов частиц до следующего столкновения. Средняя длина пробега в этом распределении зависит от плотности среды и полного сечения взаимодействия частицы с ней. Для каждого столкновения вычисляется потеря энергии иона и переданный атому мишени импульс. Затем по дифференциальному сечению определяется направление движения рассеянного иона, и вычисления повторяются. Если ион покидает среду, регистрируется его энергия E и направление вылета (θ, φ), где φ – угол между плоскостью падения и плоскостью рассеяния. Усреднение по большому числу историй позволяет определить энергетическое и угловое распределение отраженных и прошедших через среду ионов.

Традиционный метод моделирования движения иона в среде заключается в выборе потенциала взаимодействия между ионом и атомом среды [7]. По этому потенциалу, который может учитывать как упругие, так и неупругие процессы взаимодействия иона с атомом, определяются полное и дифференциальное сечения рассеяния. Диапазон прицельных параметров при ионно-атомном столкновении ограничен со стороны больших значений средним межатомным расстоянием [146], что исключает предельно малые углы рассеяния.

При рассеянии поверхностью ионы могут иметь разное не только энергетическое, но и зарядовое распределение. Зарядовая фракция отраженных частиц $F_q(E, \theta)$ – это

отношение числа частиц с зарядом q к полному числу частиц, отраженных в том же направлении [4]. Величина $F_q(E, \theta)$ зависит от энергии отраженных частиц E и угла рассеяния θ , а ее интегрирование по θ определяет зарядовые фракции всего отраженного пучка [105]. Нейтральная и заряженная компоненты в пучке отраженных частиц имеют разное энергетическое распределение [158, 159]. Если измерения проводятся при разных значениях E/q , из энергетического распределения всех частиц можно выделить распределение, соответствующее ионам с определенным зарядом $q \geq 1$ [160, 161].

Зависимость зарядовых фракций в пучке отраженных ионов от угла рассеяния исследовали преимущественно при скорости иона, близкой к скорости электронов в атоме среды [4, 162]. Причины этого эффекта могут быть как кинематические, когда взаимодействие отраженных ионов с поверхностью приводит к их перераспределению по углу рассеяния и энергии, так и динамические, когда в результате взаимодействия отраженный поверхностью ион теряет или захватывает электроны. Нейтрализацию медленных протонов можно рассматривать как резонансный переход электрона из зоны проводимости металла в связанное состояние атома водорода [106]. Вероятность этого процесса тем больше, чем больше перекрытие волновых функций электрона в начальном и конечном состояниях, т.е. чем ближе уровни электрона в металле и в отраженном поверхностью атоме. Учет этого механизма приводит к квазипериодической зависимости вероятности нейтрализации протона от угла вылета [162]. Надо отметить, что величины зарядовых фракций, отраженных от поверхности ионов, могут быть чувствительны даже к небольшим поверхностным загрязнениям мишени [163].

При малых углах рассеяния следует дополнительно учитывать возможность изменения кинематики рассеянной частицы за счет ее взаимодействия с поверхностью [162]. Если отраженный поверхностью ион рассеивается на небольшие углы, то его взаимодействие с электронами мишени может изменить угол рассеяния. Этот эффект

приводит к перераспределению рассеянных поверхностью ионов и изменению их зарядового распределения при постоянном угле рассеяния. С увеличением энергии отраженных ионов влияние поверхностных эффектов уменьшается. Исследование зарядового распределения молекулы H_2^+ при столкновении с поверхностью [164] показало, что зависимость доли атомов в пучке отраженных частиц от угла рассеяния при $E_0 = 500\text{--}700$ кэВ и $\alpha = 0.5^\circ$ слабая.

В результате многократных столкновений в ионном пучке устанавливается равновесное зарядовое распределение, и $F_q(E, \theta)$ не зависят от энергии E_0 и заряда q_0 падающих на поверхность частиц [163]. Влияние массы падающих частиц на положительные зарядовые фракции не выходит за пределы погрешности измерений [165]. Данные о влиянии углов рассеяния на зарядовое распределение отраженных частиц противоречивые. Если в одних случаях доля положительных ионов увеличивается по мере увеличения угла вылета [165], то в других случаях положительная фракция практически не зависит от угла рассеяния [4].

ГЛАВА 2

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ

2.1. Сечение потери электрона с учетом возбужденных состояний

атома мишени

Теоретические расчеты сечения потери электрона быстрыми ионами и атомами основаны на трех приближениях: борновском приближении [166, 167]; приближении самосогласованного поля для учета корреляций электронов в налетающем ионе и атоме мишени; суммировании по всем состояниям атома мишени.

Сечение потери одного электрона в процессе быстрых столкновений уменьшается при увеличении энергии столкновения E как $1/E$ [25], так как потенциал взаимодействия электрона налетающего иона с атомом мишени короткодействующий. В этом отличие процесса потери электрона ионом от процесса ионизации атома заряженными частицами, в котором электрон атома мишени взаимодействует с заряженной частицей на больших расстояниях, и сечение ионизации атома уменьшается с увеличением энергии как $\sigma_{q,q+1} \sim \ln(E)/E$ [166]. В случае столкновений быстрых атомов и ионов с небольшим зарядом q сечение потери электрона при энергии от нескольких до десятков МэВ/нуклон можно представить в виде:

$$\sigma_{q,q+1} = A_q(Z, Z_t) / E, \quad (2.1)$$

где $A_q(Z, Z_t)$ – коэффициент, определяющий асимптотическую зависимость сечения потери электрона $\sigma_{q,q+1}$ от Z и Z_t . Релятивистские эффекты приводят к увеличению значения сечения $\sigma_{q,q+1}$ [168] и ослаблению его зависимости от энергии E , что ограничивает область применения (2.1). В случае небольших q соотношение (2.1) выполняется для энергии, не превышающей 100 МэВ/нуклон. Универсальная зависимость $\sigma_{q,q+1}$ от E (2.1) приводит к тому, что в достаточно широком интервале значений энергии вся информация о зависимости сечения от параметров q , Z и Z_t содержится в коэффициенте $A_q(Z, Z_t)$. Так как

налетающая частица может потерять электрон любой оболочки, то сечение (2.1) представляется в виде суммы:

$$\sigma_{q,q+1} = \sum_{\nu\lambda} \sigma_{q,q+1}^{\nu\lambda} = \sum_{\nu\lambda} A_q^{\nu\lambda}(Z, Z_t) / E, \quad (2.2)$$

где ν и λ – главное квантовое число и орбитальный момент, характеризующие электроны оболочки налетающей частицы соответственно, $\sigma_{q,q+1}^{\nu\lambda}$ – сечение потери электрона $\nu\lambda$ -оболочки, а $A_q^{\nu\lambda}(Z, Z_t)$ – коэффициент, определяющий асимптотическую зависимость $\sigma_{q,q+1}^{\nu\lambda}$ от Z и Z_t . В результате, из (2.1) получаем:

$$A_q(Z, Z_t) = \sum_{\nu\lambda} A_q^{\nu\lambda}(Z, Z_t). \quad (2.3)$$

Для исследования зависимости сечения потери электрона быстрыми ионами $\sigma_{q,q+1}$ от параметров Z и Z_t был разработан метод расчета $A_q(Z, Z_t)$ в случае произвольных q , Z и Z_t [169, 170]. Эффективный заряд атома мишени $q_t(K)$ (1.22) вычислялся двумя методами: с использованием правила сумм (1.25) и методом, когда кроме первых двух слагаемых в (1.22) учитывались слагаемые $(1sn'l', n' \leq 5, l' \leq 2)$ [171, 172]. Коэффициенты $A_q(Z, Z_t)$ и $A_q^{\nu\lambda}(Z, Z_t)$ определялись из результатов расчета сечения потери электрона в случае столкновений атомов и ионов с зарядами ядер $Z = 1-18$ в водороде ($Z_t = 1$), гелии ($Z_t = 2$), азоте ($Z_t = 7$), неоне ($Z_t = 10$) и аргоне ($Z_t = 18$). Энергия столкновений E выбиралась достаточно большой, чтобы $\sigma_{q,q+1}$ с точностью до нескольких процентов удовлетворяло соотношению (2.1): $E \geq 10$ МэВ/нуклон для $q = 0, 1$ и $E \geq 30$ МэВ/нуклон для $q \geq 2$.

Результаты расчета сечений потери одного электрона ионами бора B^{q+} в гелии (рис. 6), за исключением одной точки для B^{2+} , согласуются с экспериментальными данными. При увеличении q энергия связи электрона в налетающем ионе увеличивается, и максимум сечений сдвигается в область более высокой энергии. Различия двух вариантов теории при большой энергии уменьшаются с уменьшением q , и для B^0 результаты расчета

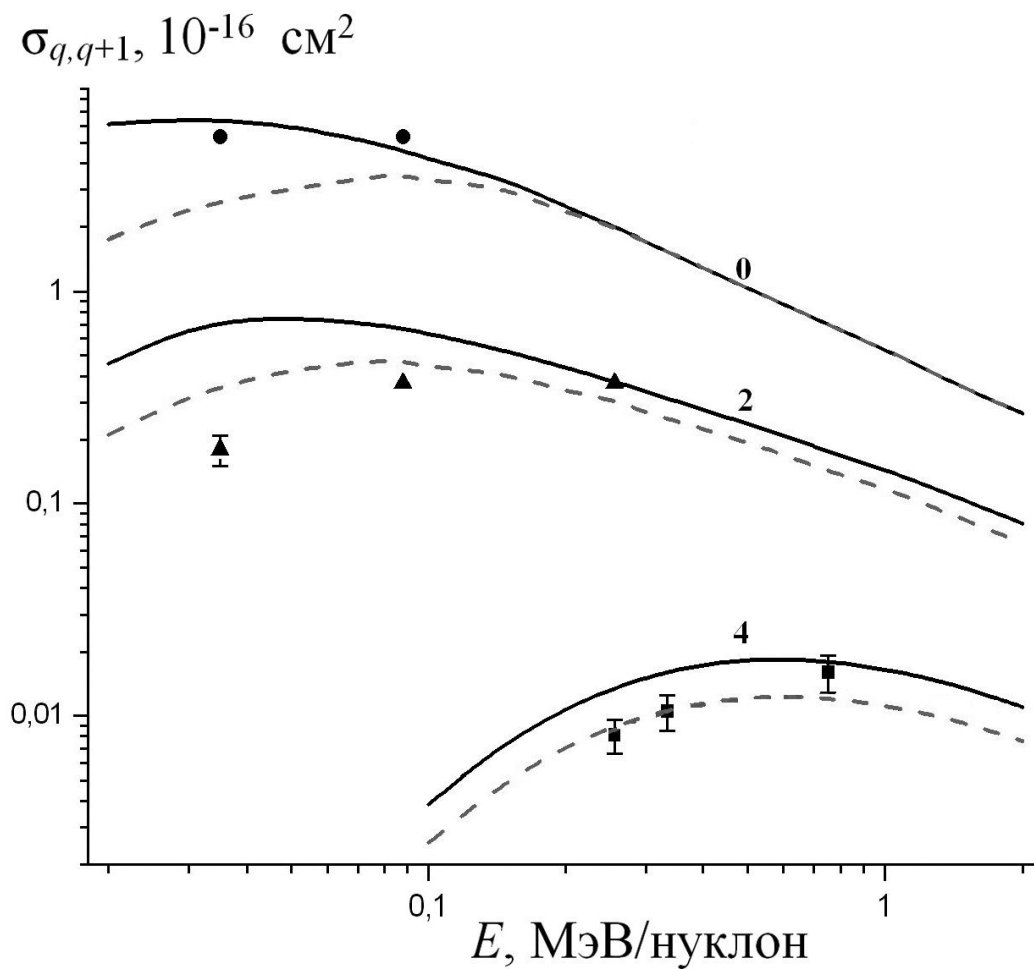


Рис. 6. Сечение потери одного электрона ионами бора B^{q+} в гелии. Около кривых указан начальный заряд ионов q . Сплошные и пунктирные кривые – результаты расчетов с использованием, соответственно, правила сумм и учета конечного числа дискретных ($1snl$, $n \leq 5$, $l \leq 2$) состояний и непрерывного спектра атома гелия после столкновения. Экспериментальные данные: (\bullet) – B^0 ; (\blacktriangle) – B^{2+} ; (\blacksquare) – B^{4+} из [173].

с $q_i(K)$ (1.25) и (1.22) совпадают. Объясняется это тем, что область малых переданных импульсов для ионизации p -электрона более значима, чем для s -электрона.

В случае быстрых столкновений вычисленные сечения потери электрона ионами азота N^{q+} при любых q согласуются с экспериментальными данными (рис. 7). Количественные различия сечений потери электрона ионами N^{4+} при небольшой энергии связаны с нарушением приближения плоских волн. В этой области значений энергии скорость налетающего иона, скорость электрона на внешней оболочке этого иона и скорость электрона атома мишени близки по величине, и при малых межъядерных расстояниях необходим учет молекулярных эффектов. В случае столкновений ионов N^{6+} с атомом гелия различие скоростей электронов налетающего иона и атома мишени возрастает, что уменьшает значимость молекулярных эффектов и приводит к удовлетворительному согласию результатов расчета с экспериментальными данными.

В рассмотренной теоретической модели потери электрона быстрыми ионами несколько каналов возбуждения атома мишени в (1.19) учитываются в явном виде [172], что отличает ее от традиционного правила сумм (1.25), которое приближенно учитывает все каналы реакции, но выполняется только при малых переданных импульсах. Расчеты сечений при столкновениях ионов с атомом гелия, выполненные с использованием правила сумм, дают завышенные значения теоретических сечений во всей области значений энергии столкновения. Большая часть экспериментальных сечений находится в диапазоне значений, рассчитанных с использованием двух вариантов теории. Для ионов с небольшим зарядом q получено хорошее согласие с экспериментальными данными во всем энергетическом диапазоне. С увеличением заряда налетающего иона и небольшой энергии столкновения наблюдаются количественные отличия результатов расчета от экспериментальных сечений, что объясняется нарушением приближения плоских волн.

Результаты расчета коэффициента $A_q(Z, Z_t)$ при столкновении He^+ и He^0 в различных средах показывают (рис. 8), что зависимость $A_q(Z, Z_t)$ от Z_t гладкая.

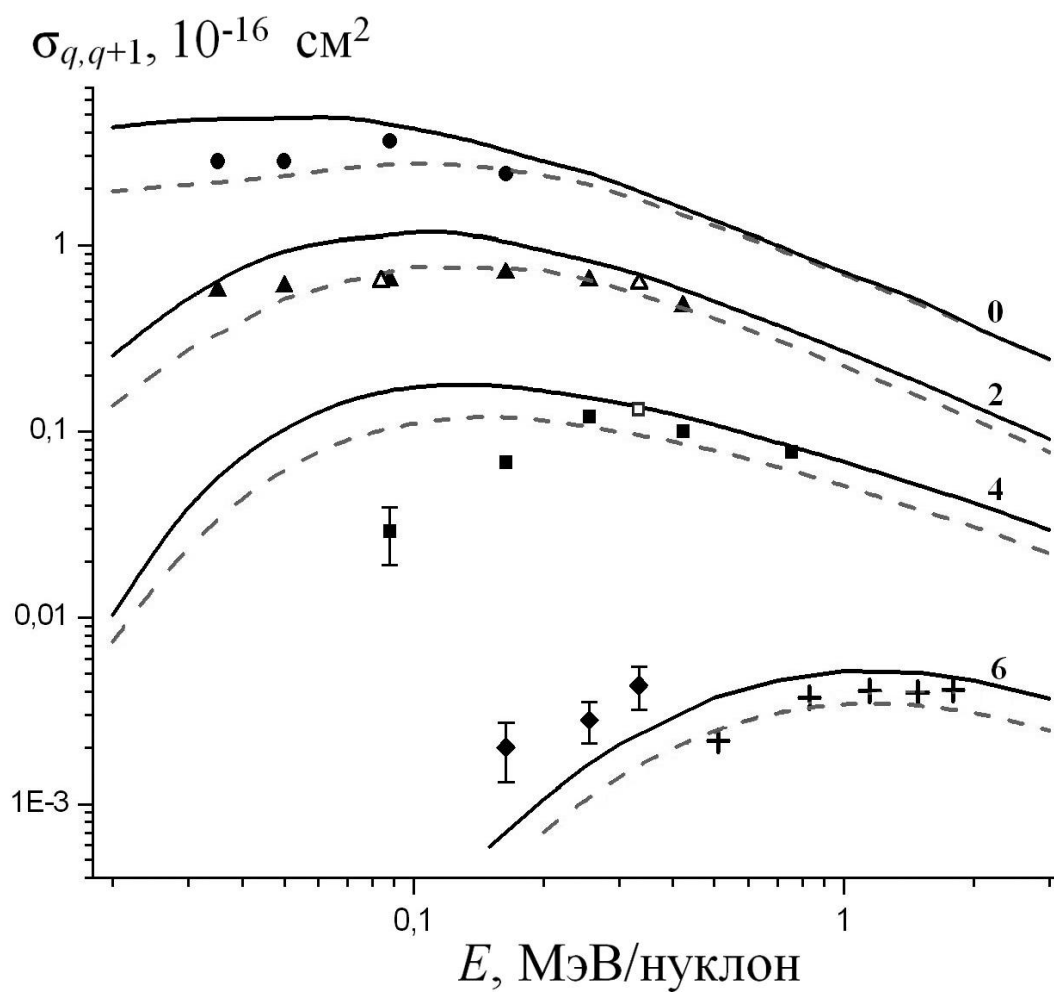


Рис. 7. Сечение потери одного электрона ионами азота N^{q+} в гелии. Обозначения те же, что на рис. 6. Экспериментальные данные: (\bullet) – N^0 ; (\blacktriangle) – N^{2+} ; (\blacksquare) – N^{4+} ; (\blacklozenge) – N^{6+} из [30, 173]; (\triangle) – N^{2+} ; (\square) – N^{4+} из [89]; (+) – N^{6+} из [174].

Коэффициент $A_q(Z, Z_t)$ с увеличением Z_t монотонно возрастает вследствие увеличения вероятности взаимодействия электрона налетающей частицы с атомом мишени при увеличении количества электронов в нем. Если при небольших Z_t ($Z_t = 1-7$) увеличение $A_q(Z, Z_t)$ происходит почти линейно, то с дальнейшим ростом Z_t ($Z_t = 10, 18$) увеличение $A_q(Z, Z_t)$ замедляется, что приводит к отклонению от линейной зависимости. Приведенные результаты расчетов находятся в хорошем согласии с результатами, извлеченными из экспериментальных данных по $\sigma_{q,q+1}$ и результатов расчетов других авторов.

На рис. 9 приводятся результаты расчета коэффициента $A_q(Z, Z_t)$, определяющего асимптотическую зависимость сечения потери одного электрона в зависимости от заряда ядра налетающего атома и двухзарядного иона. С увеличением Z коэффициент $A_q(Z, Z_t)$ возрастает медленнее. При фиксированном заряде q эти результаты образуют семейство гладких непересекающихся линий, соответствующих различным атомам мишени. Это может быть использовано при оценке сечения потери электрона быстрыми ионами для определенной пары ион–атом в случае отсутствия экспериментальных данных.

Чтобы объяснить причины гладкой зависимости коэффициента $A_q(Z, Z_t)$ от Z , на рис. 10 в случае столкновений атомов с атомами гелия показан вклад различных оболочек налетающего атома с учетом количества электронов на них. Результаты расчетов для $Z_t = \text{const}$ показали, что основной вклад в сумму (2.3) дают коэффициенты $A_q^{vl}(Z, Z_t)$, соответствующие оболочкам с небольшой энергией связи электрона. Коэффициент $A_q^{vl}(Z, Z_t)$ возрастает при увеличении Z пропорционально количеству электронов этой оболочки и достигает максимума, когда оболочка заполняется на 100%. Дальнейшее увеличение Z приводит к уменьшению вклада заполненной оболочки в сумму (2.3). Причина гладкой зависимости $A_q(Z, Z_t)$ от Z (рис. 9) в том, что вначале заполнения новой

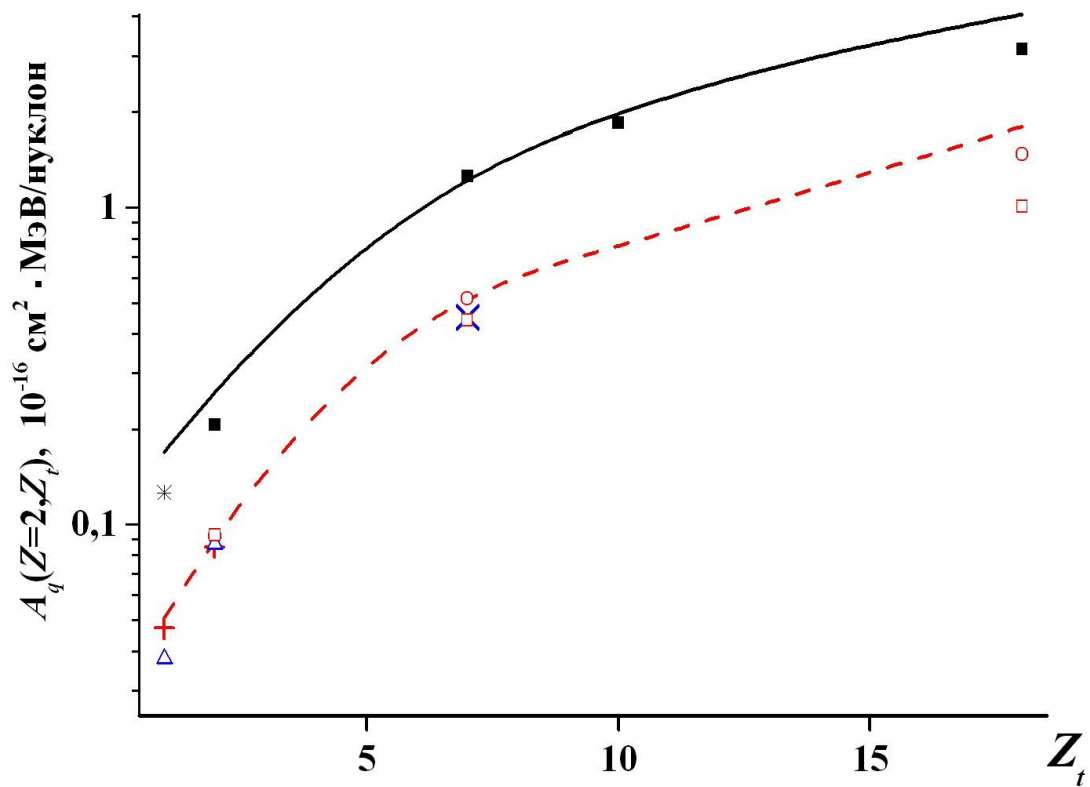


Рис. 8. Результаты расчета коэффициента $A_q(Z, Z_t)$, определяющего асимптотическую зависимость сечения потери одного электрона при столкновениях атомов He^0 (сплошная линия) и ионов He^+ (пунктир), в зависимости от заряда ядра атома мишени Z_t . Значения $A_q(Z, Z_t)$, соответствующие экспериментальным данным $\sigma_{q,q+1}$: (\square) – He^+ [89]; (\circ) – He^+ [175]; (\triangle) – He^+ [176]; (\blacksquare) – He^0 [68]; соответствующие результатам расчетов $\sigma_{q,q+1}$ других авторов: ($+$) – He^+ [58]; (\times) – He^+ [59]; ($*$) – He^0 [60].

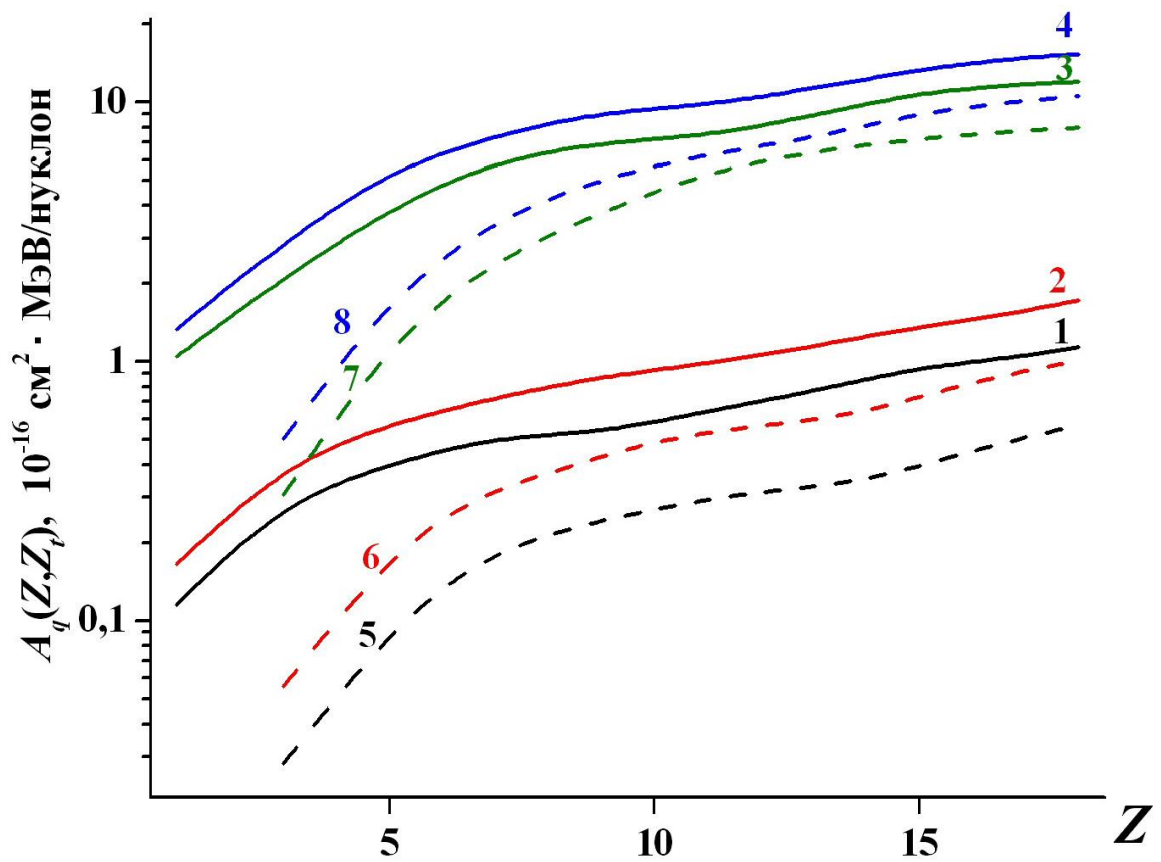


Рис. 9. Результаты расчета коэффициента $A_q(Z, Z_t)$, определяющего асимптотическую зависимость сечения потери одного электрона, в зависимости от заряда ядра налетающего иона Z . Сплошные линии – результаты расчета для налетающих атомов ($q = 0$): 1 – в водороде ($Z_t = 1$); 2 – в гелии ($Z_t = 2$); 3 – в азоте ($Z_t = 7$); 4 – в неоне ($Z_t = 10$). Пунктирные линии – результаты расчета для двухзарядных ионов ($q = 2$): 5 – в водороде ($Z_t = 1$); 6 – в гелии ($Z_t = 2$); 7 – в азоте ($Z_t = 7$); 8 – в неоне ($Z_t = 10$).

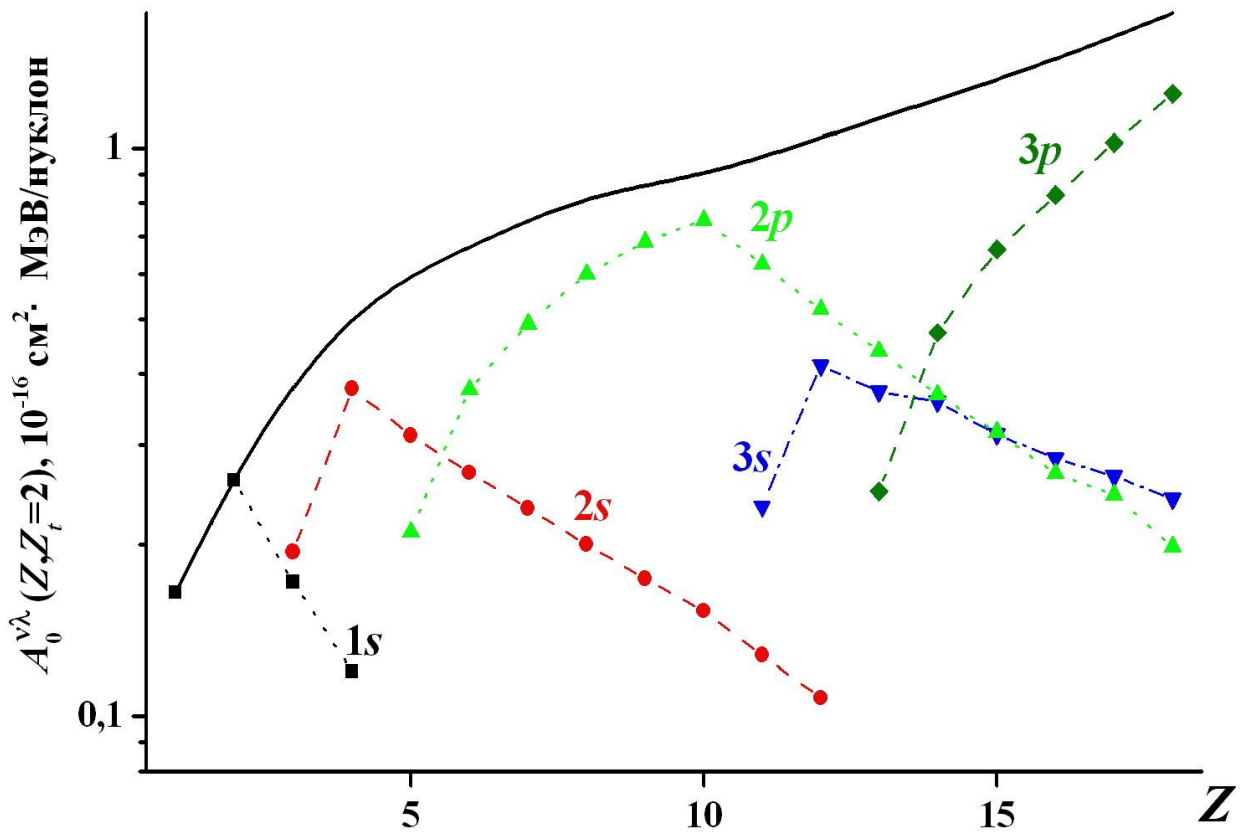


Рис. 10. Результаты расчета коэффициента $A_q^{v\lambda}(Z, Z_t)$, определяющего асимптотическую зависимость сечения потери одного электрона $v\lambda$ -оболочки налетающей частицы при столкновении ионов ($q = 1$) в гелии ($Z_t = 2$). Сплошная линия – сумма по всем оболочкам, т.е. $A_0(Z, Z_t = 2)$.

валентной оболочки ее вклад резко не увеличивается. Он остается того же порядка или даже меньше, чем вклад уже заполненной оболочки. Отметим, что есть область значений заряда ядра иона Z , в которой потеря электрона определяется не только валентной оболочкой. Например, при $Z = 14, 15$ потеря электрона $2p$ -оболочки (шесть электронов) может не только превосходить вклад $3s$ -оболочки (два электрона), но и быть того же порядка, что и вклад $3p$ -оболочки. Именно эта особенность и обеспечивает плавность изменения $A_q(Z, Z_t)$ в этой области Z .

Предложенный метод расчетов сечения потери электрона быстрыми ионами позволил теоретически исследовать зависимость $\sigma_{q,q+1}$ от заряда ядра налетающей частицы Z и заряда ядра атома мишени Z_t . Результаты расчетов для ионов ($q \leq 3$) показали, что в области значений энергии столкновения E , где сечение потери электрона изменяется по закону $1/E$, сечение $\sigma_{q,q+1}$ монотонно увеличивается с увеличением Z и Z_t . Полученная гладкая и монотонная зависимость $\sigma_{q,q+1}$ от Z и Z_t является теоретическим обоснованием возможности интерполяции и экстраполяции по этим параметрам сечения потери электрона в процессе быстрых столкновений.

2.2. Сечение захвата электрона с учетом кулоновского взаимодействия тяжелых частиц

В случае быстрых столкновений амплитуда перехода при захвате быстрым ионом одного электрона представляется в виде [177, 178]:

$$f_{\text{cap}} = \langle \exp(i\vec{K}_f \vec{R}) \psi_{nLS}(\vec{y}) F(\xi, \vec{R}) \left| \frac{q}{y} \right| \exp(i\vec{K}_i \vec{R}) \psi_{\nu\lambda\mu}(\vec{x}) \rangle, \quad (2.4)$$

$$F(\xi, \vec{R}) = \exp\{i\xi \ln(VR + \vec{V}\vec{R})\}, \quad \xi = (q-1)/V, \quad (2.5)$$

где \vec{x} , \vec{y} характеризуют положение активного электрона относительно ядра атома мишени и налетающего иона соответственно; $\vec{R} = \vec{y} - \vec{x}$ – межъядерное расстояние; \vec{K}_i ,

\vec{K}_f – импульс налетающей и рассеянной частицы соответственно, $\psi_{\nu\lambda\mu}(\vec{x})$ – волновая функция активного электрона в атоме мишени с главным квантовым числом ν , орбитальным моментом λ и проекцией этого момента μ ; $\Psi_{nLS}(\vec{y})$ – волновая функция активного электрона рассеянной частицы в состоянии, которое характеризуется квантовыми числами nLS . Амплитуда (2.4) отличается от амплитуды в ОБК-приближении (1.29) множителем $F(\xi, \vec{R})$, который при $q \neq 1$ учитывает кулоновское взаимодействие ионов в конечном состоянии. В пределе $\xi \rightarrow 0$, из определения (2.5) получаем $F(\xi, \vec{R}) \rightarrow 1$, и амплитуды с учетом (2.4) и без учета (1.29) кулоновского взаимодействия частиц в конечном состоянии совпадают.

В задаче описания дифференциального по углу рассеяния сечения захвата приближение (2.4) получило название кулоновское приближение Бринкмана–Крамерса (КБК) [179]. Матричный элемент (2.4) можно записать в виде:

$$f_{\text{cap}} \sim i^{l-\lambda} q \int dy y \varphi_{nl}(Z, y) j_l(Ky) \int dx x^2 \varphi_{\nu\lambda}(Z, x) j_\lambda(Kx) \Phi_{l\lambda}(\xi, y, x), \quad (2.6)$$

где $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x)$ – результат интегрирования в (2.4) по угловым переменным активного электрона ($\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) \rightarrow 1$ при $\xi \rightarrow 0$ для любых l и λ); $\vec{K} = \vec{K}_i - \vec{K}_f$ – переданный импульс; $\varphi_{\nu\lambda}(Z, x)$ – радиальная часть волновой функции активного электрона атома мишени; $\varphi_{nl}(Z, y)$ – радиальная часть волновой функции активного электрона рассеянного иона в состоянии, которое характеризуется квантовыми числами n и l ; $j_l(Ky)$, $j_\lambda(Kx)$ – сферические функции Бесселя.

Сечение захвата электрона вычисляется интегрированием амплитуды (2.4) по переданному импульсу, суммированием по конечным состояниям рассеянной частицы и усреднением по всем начальным состояниям активного электрона атома мишени:

$$\sigma_{q, q-1} = \sum_{\nu\lambda\mu} \sum_{nLS} \frac{N_s}{(2\lambda + 1)} \int_{K_{\min}}^{\infty} |f_{\text{cap}}|^2 \frac{d\vec{K}}{8\pi^2 V^2}. \quad (2.7)$$

В соответствии с законами сохранения энергии и импульса минимальное значение переданного импульса K_{\min} определяется соотношением [51]:

$$K_{\min} = (\varepsilon_f - \varepsilon_i)/V + V/2, \quad (2.8)$$

где ε_i , ε_f – энергия связи активного электрона атома мишени и рассеянного иона соответственно.

Коэффициент N_S в (2.7) является вероятностью образования рассеянной частицы в состоянии с квантовым числом S . Если налетает ион с заполненной внешней электронной оболочкой ($N_e = 2, 4, 10\dots$), то состояние рассеянной частицы характеризуется $S = 1/2$ независимо от спина активного электрона, и тогда $N_S = 1$. Для налетающего иона с незаполненной внешней электронной оболочкой ($N_e = 1, 3, 5, 6\dots$) возможно образование рассеянной частицы в двух различных спиновых состояниях в зависимости от проекции спина активного электрона. В этом случае с учетом усреднения в (2.8) по всем спиновым переменным активного электрона в начальном состоянии имеем $N_S = 0.5$.

Для организации вычисления интеграла (2.6) с учетом взаимодействия в конечном состоянии осуществляли три варианта расчетов: аналитический расчет с $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) = 1$; численный расчет с $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) = 1$; численный расчет с $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) \neq 1$. Первые два варианта необходимы, чтобы подобрать сетку по переменным y и x , которая обеспечивает требуемую точность численного интегрирования. Считается, что функция $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) \neq 1$ не меняет условия сходимости интегралов в (2.6). Тогда численный расчет с $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x) \neq 1$ на той же сетке позволяет учесть взаимодействие заряженных частиц в конечном состоянии. Отметим, что функция $\Phi_{l\lambda}(\xi, y, x)$ не зависит от переданного импульса K , что позволяет оптимизировать численное интегрирование по K в (2.7) с учетом кулоновского взаимодействия ионов в конечном состоянии.

Результаты расчета $\sigma_{q,q-1}$ при столкновении ионов кислорода O^{4+} с атомом аргона (рис. 11) показывают, что взаимодействие в конечном состоянии более чем на порядок

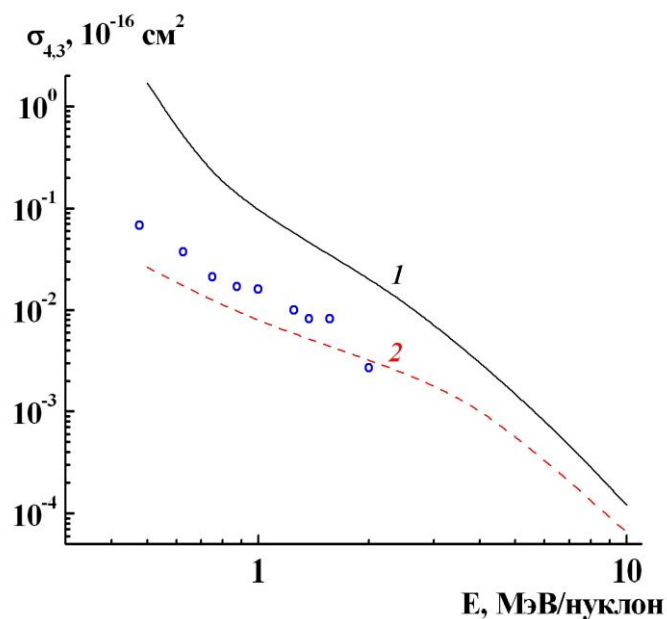


Рис. 11. Сечение захвата электрона $\sigma_{4,3}$ при столкновении ионов кислорода O^{4+} с атомом аргона. Результаты расчетов: 1 – без учета кулоновского взаимодействия рассеянных ионов; 2 – с учетом кулоновского взаимодействия рассеянных ионов. Экспериментальные данные – (o) [180].

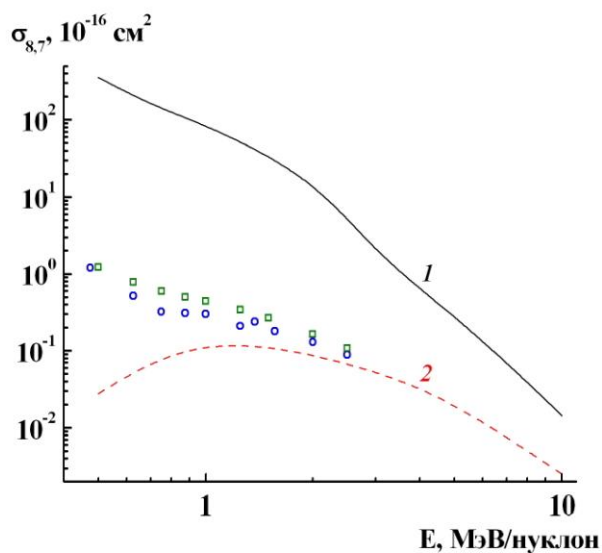


Рис. 12. Сечение захвата электрона $\sigma_{8,7}$ при столкновении ионов кислорода O^{8+} с атомом аргона. Экспериментальные данные: (o) – [180]; (□) – [181]. Остальные обозначения те же, что на рис. 11.

уменьшает $\sigma_{q,q-1}$ по сравнению с результатами расчетов в ОБК-приближении. В сумме (2.7) учитывали состояния рассеянного иона ($n \leq 5$, $l \leq 2$). Отличия теоретического сечения, полученного в ОБК-приближении, от экспериментальных данных ранее не связывали с влиянием кулоновского взаимодействия в конечном состоянии. Этим фактором пренебрегали по аналогии с процессами однократной ионизации и возбуждения атомов быстрыми ионами. Проведенные расчеты показывают, что эффект влияния взаимодействия в конечном состоянии на $\sigma_{q,q-1}$ значительный. Кулоновское взаимодействие выталкивает рассеянный ион из области взаимодействия, уменьшая его время, а поскольку основной вклад в (2.4) дает область малых R , сечение $\sigma_{q,q-1}$ уменьшается. Увеличение заряда налетающего иона q (рис. 12) приводит и к увеличению расхождения двух вариантов теории. Зависимости от энергии сечений, полученных в ОБК-приближении и эксперименте, различаются (рис. 11, 12), т.е. их отношение зависит от E . Для варианта теории с учетом взаимодействия в конечном состоянии зависимость сечения от энергии близка к экспериментальной.

Выполненные расчеты позволили определить коэффициент, количественно характеризующий отличие теоретического и экспериментального сечений $\sigma_{q,q-1}$, и проанализировать соотношение теории и эксперимента в широкой области q , Z , Z_t . В случае столкновений с атомами, имеющими небольшое количество электронов ($Z_t \leq 2$), теоретическое сечение, как правило, завышено по сравнению с экспериментальными данными (табл. 1, 2). Для столкновений ионов с многоэлектронным атомом ($Z_t \geq 7$), наоборот, вычисленное сечение захвата электрона, как правило, меньше экспериментального. Важно отметить, что отношение теоретических и экспериментальных сечений слабо зависит от Z_t в случае многоэлектронной мишени ($Z_t \geq 7$), что позволяет проводить эмпирические оценки сечения $\sigma_{q,q-1}$.

Таблица 1. Отношение теоретического и экспериментального сечений захвата одного электрона ионами гелия, лития, углерода и азота в области значений энергии столкновения $E \geq 0.85$ МэВ/нуклон (экспериментальные данные [174, 175, 180–186]; расчет с учетом взаимодействия заряженных частиц в конечном состоянии проводился с учетом захвата электрона во все состояния с квантовыми числами в диапазоне $n \leq 5, l \leq 2$)

Ион	Атом мишени							
	H	He	O	N	Ne	Ar	Kr	Xe
He ²⁺	2.5±0.7	2.1±0.5	–	0.9±0.3	1.7±0.6	0.9±0.2	1.5±0.3	1.4±0.4
Li ²⁺	–	2.4±0.1	–	1.3±0.4	–	1.5±0.4	1.4±0.4	–
Li ³⁺	–	3.2±0.1	–	1.6±0.4	–	0.82±0.20	0.45±0.20	–
C ³⁺	0.56±0.20	0.82±0.10	0.75±0.40	0.83±0.10	1.20±0.15	1.28±0.15	2.00±0.60	2.90±1.40
C ⁴⁺	0.28±0.04	0.57±0.15	0.33±0.02	0.33±0.01	0.43±0.10	0.47±0.10	0.45±0.20	0.85±0.50
C ⁵⁺	–	2.2±0.1	0.47±0.07	0.47±0.07	0.76±0.06	1.45±0.10	1.30±0.40	1.40±0.10
C ⁶⁺	3.8±1.8	3.9±0.5	0.31±0.10	0.59±0.03	0.38±0.10	0.90±0.10	0.78±0.20	0.41±0.07
N ⁶⁺	–	5.0±1.3	–	0.89±0.20	–	0.85±0.20	–	–
N ⁷⁺	–	4.2±0.1	–	0.67±0.08	0.42±0.03	0.90±0.10	0.86±0.10	0.35±0.06

Таблица 2. Отношение теоретического и экспериментального сечений захвата одного электрона ионами кислорода и фтора в области значений энергии столкновения $E \geq 0.85$ МэВ/нуклон (экспериментальные данные [174, 175, 180–188]; расчет с учетом взаимодействия заряженных частиц в конечном состоянии проводился с учетом захвата электрона во все состояния с квантовыми числами в диапазоне $n \leq 5, l \leq 2$)

Ион	Атом мишени		
	He	N	Ar
O ³⁺	1.05±0.20	1.40±0.50	–
O ⁴⁺	0.15±0.03	0.40±0.08	0.68±0.05
O ⁵⁺	0.86±0.06	0.35±0.10	0.34±0.10
O ⁶⁺	2.0±0.6	0.14±0.06	0.17±0.07
O ⁷⁺	14.0±2.0	0.66±0.06	0.70±0.10
O ⁸⁺	7.0±1.0	0.73±0.05	0.75±0.05
F ⁴⁺	–	0.28±0.03	0.89±0.09
F ⁵⁺	–	0.13±0.01	0.30±0.07
F ⁶⁺	–	0.13±0.06	0.22±0.02
F ⁷⁺	–	0.65±0.02	0.13±0.03
F ⁸⁺	6.7±0.1	0.38±0.02	0.45±0.03
F ⁹⁺	12.0±2.0	0.63±0.05	0.64±0.10

2.3. Вклад возбужденных состояний быстрого иона в сечение захвата электрона

Исследование вклада возбужденных состояний быстрого иона в полное сечение захвата (2.7) было проведено на примере захвата электрона ядром ($q = Z$):



где n, l – главные квантовое и орбитальное числа электрона в возбужденном состоянии водородоподобного иона. Сечение захвата электрона (2.7) в этом случае ($L = l$) можно представить в виде суммы:

$$\sigma_{q,q-1} = \sigma_{q,q-1}^{1s} + \sigma_{q,q-1}^{\text{ex}}, \quad (2.10)$$

где $\sigma_{q,q-1}^{1s}$ – сечение захвата в основное состояние водородоподобного иона, а

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}} = \sum_{n \geq 2} \sum_{l=n-1} \sigma_{q,q-1}^{nl} \quad (2.11)$$

– сумма сечений захвата во все возбужденные состояния с $n \geq 2$.

В случае столкновений ядер ($q = Z$) с атомом гелия были проведены расчеты сечения захвата электрона (2.9) в ОБК-приближении для возбужденных состояний водородоподобных ионов с $n < 10$. Результаты расчетов показали [189–191], что для каждого значения Z есть область значений энергии ионов, где выполняется условие:

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}} / \sigma_{q,q-1} \leq 0.01 \text{ при } E \geq E_{n=1}(Z). \quad (2.12)$$

В области значений энергии $E \geq E_{n=1}(Z)$ в сумме (2.9) можно ограничиться первым слагаемым, и не учитывать вклад процессов захвата электрона в возбужденные состояния (2.11). Условно также можно считать, что если отношение слагаемых в (2.10) удовлетворяет условию:

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}} / \sigma_{q,q-1} \leq 0.10 \text{ при } E \geq E_{n=1}^*(Z), \quad (2.13)$$

то в расчетах сечения (2.10) в области значений энергии $E_{n=1}^*(Z) \leq E < E_{n=1}(Z)$ ограничить сумму в (2.10) первым слагаемым еще можно, но в сечение захвата $\sigma_{q,q-1}$ уже необходимо вносить поправку с учетом процессов захвата электрона в возбужденные состояния водородоподобного иона. Результаты определения нижней границы области значений энергии (2.12) и (2.13), которые на рис. 13 обозначены кривыми 1 и 2 соответственно, показывают, что $E_{n=1}^*(Z) < E_{n=1}(Z)$ для любых Z . Вклад возбужденных состояний в сечение захвата электрона (2.10) увеличивается с уменьшением энергии ионов E . Для расширения области применимости теории к расчетам сечения захвата электрона быстрыми ионами необходимо увеличение числа учитываемых возбужденных состояний иона в (2.7).

Выделим в сумме (2.11) слагаемые, соответствующие возбужденным состояниям в диапазоне квантовых чисел активного электрона $n \leq 5$ и $l \leq 2$:

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}} = \sum_{2 \leq n \leq 5} \sum_{l \leq 2} \sigma_{q,q-1}^{nl} + \sigma_{q,q-1}^{\text{ex}*}, \quad (2.14)$$

где $\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}*}$ – сумма сечений захвата электрона быстрым ионом во все остальные возбужденные состояния. Нижняя граница области значений энергии ионов E , где в расчетах сечения (2.7) можно воспользоваться приближением

$$\sigma_{q,q-1} = \sigma_{q,q-1}^{1s} + \sum_{2 \leq n \leq 5} \sum_{l \leq 2} \sigma_{q,q-1}^{nl}, \quad (2.15)$$

по аналогии с (2.12) определяется соотношением:

$$\sigma_{q,q-1}^{\text{ex}*} / \sigma_{q,q-1} \leq 0.01 \text{ при } E \geq E_{n=5}(Z). \quad (2.16)$$

Результаты расчетов (кривая 3 на рис. 1) показывают, что учет низших возбужденных состояний в сумме (2.7) позволяет существенно расширить область применения используемой теоретической модели. В области значений энергии $E_{n=5}^* \leq E \leq E_{n=5}(Z)$, где величина $E_{n=5}^*$ определяется из соотношения:

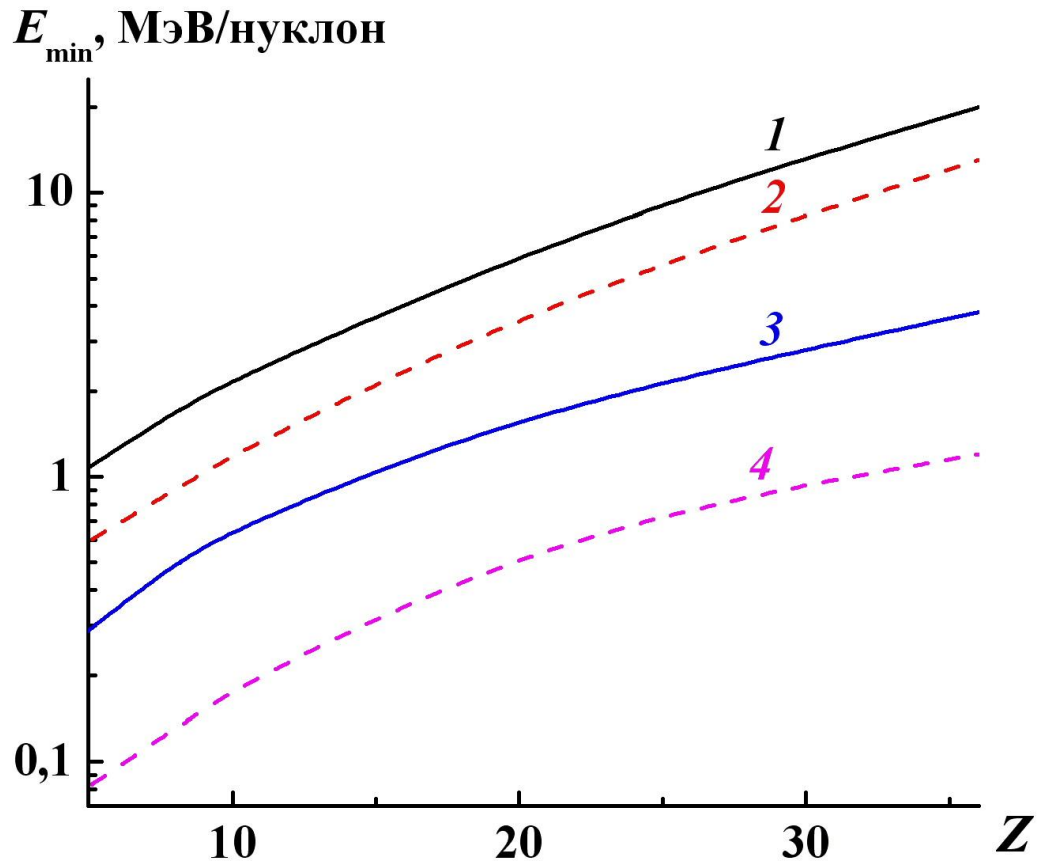


Рис. 13. Нижняя граница области значений энергии ионов E , где в расчетах сечения захвата электрона быстрым ионом (2.11) в сумме по возбужденным состояниям рассеянной частицы можно ограничиться несколькими состояниями. Результаты расчетов: 1 – $E_{n=1}(Z)$ (2.12); 2 – $E_{n=1}^*(Z)$ (2.13); 3 – $E_{n=5}(Z)$ (2.16); 4 – $E_{n=5}^*(Z)$ (2.17).

$$\sigma_{q,q-1}^{ex*} / \sigma_{q,q-1} \leq 0.10 \text{ при } E \geq E_{n=5}^*(Z), \quad (2.17)$$

использование приближения (2.15) для расчетов сечения захвата электрона быстрым ионом (2.7) в газах еще возможно, но на значение полученного теоретического сечения надо вносить поправку с учетом слагаемых, соответствующих возбужденным состояниям с $n > 5$.

2.4. Волновые функции возбужденных состояний атомов и ионов с зарядом ядра $Z \leq 18$

Представим численное решение радиального уравнения Хартри–Фока [80] в виде функции $\varphi_{nl}(x)$, где n – главное квантовое число электрона, l – его орбитальный момент, а x – радиальная переменная. Функция $\varphi_{nl}(x)$ должна удовлетворять условиям ортогональности:

$$\langle \varphi_{nl}(x) | \varphi_{n'l}(x) \rangle = \delta_{nn'}. \quad (2.18)$$

Из-за погрешности численного решения уравнения Хартри–Фока это равенство выполняется только приближенно:

$$\langle \varphi_{nl}(x) | \varphi_{n'l}(x) \rangle = \eta_{nl,n'l}, \quad (2.19)$$

где $|\eta_{nl,n'l}| \ll 1$ для $n' > n$ и $\eta_{nl,n'l} = 1$ для $n' = n$.

Задача аппроксимации функции $\varphi_{nl}(x)$ состоит в том, чтобы найти функцию $\psi_{nl}(x)$, которая выражается через аналитические функции с наименьшей погрешностью Δ_{nl}

$$\Delta_{nl} = \int dx x^2 | \varphi_{nl}(x) - \psi_{nl}(x) |^2 \quad (2.20)$$

и как можно лучше удовлетворяет условиям ортогональности:

$$\langle \psi_{nl}(x) | \psi_{n'l}(x) \rangle = \xi_{nl,n'l}, \quad (2.21)$$

где $|\xi_{nl,n'l}| \ll 1$ для $n' > n$ и $\xi_{nl,n'l} = 1$ для $n' = n$. Для этого можно использовать разложение $\psi_{nl}(r)$ по базису:

$$\psi_{nl}(x) = \sum_i C_i(nl) S_{n,l}(\alpha_i, x), \quad (2.22)$$

где $S_{nl}(\alpha, x) = x^{n-1} \exp(-\alpha x)$, а $C_i(nl)$ – коэффициенты разложения.

Рассмотрим далее в качестве примера аппроксимацию численного решения уравнения Хартри–Фока для M_1 -оболочки атома или иона, у которого более 10 электронов. Сначала находятся параметры функции соответствующей минимальной энергии при данном l :

$$\psi_{1s}(x) = \sum_i C_i(1s) S_{n_i l}(\alpha_i, x), \quad (2.23)$$

где параметры $C_i(1s)$, n_i , α_i вычисляются из минимума функционала (2.20) с функциями $\phi_{1s}(x)$ и $\psi_{1s}(x)$. Далее в качестве пробной функции для аппроксимации $\phi_{2s}(x)$ выбираем функцию

$$\psi_{2s}(x) = \sum_j C_j(2s) S_{n_j l}(\alpha_j, x) - \langle \sum_j C_j(2s) S_{n_j l}(\alpha_j, x') \mid \psi_{1s}(x') \rangle \psi_{1s}(x), \quad (2.24)$$

которая по построению удовлетворяет условию ортогональности:

$$\langle \psi_{2s}(x) \mid \psi_{1s}(x) \rangle = 0. \quad (2.25)$$

Параметры $C_j(2s)$, n_j , α_j в (2.24) определяются из минимума функционала (2.20) с функциями $\phi_{2s}(x)$ и $\psi_{2s}(x)$. Теперь в качестве пробной функции для аппроксимации $\phi_{3s}(r)$ выбираем функцию

$$\begin{aligned} \psi_{3s}(x) = & \sum_k C_k(3s) S_{n_k l}(\alpha_k, x) - \langle \sum_k C_k(3s) S_{n_k l}(\alpha_k, x') \mid \psi_{1s}(x') \rangle \psi_{1s}(x) \\ & - \langle \sum_k C_k(3s) S_{n_k l}(\alpha_k, x') \mid \psi_{2s}(x') \rangle \psi_{2s}(x), \end{aligned} \quad (2.26)$$

которая удовлетворяет условиям ортогональности:

$$\langle \psi_{3s}(x) \mid \psi_{1s}(x) \rangle = 0, \quad \langle \psi_{3s}(x) \mid \psi_{2s}(x) \rangle = 0. \quad (2.27)$$

Параметры $C_k(3s)$, n_k , α_k в (2.26) определяются из минимума функционала (2.20) с функциями $\phi_{3s}(x)$ и $\psi_{3s}(x)$.

Преимущество этого метода аппроксимации состоит в том, что получается совокупность ортонормированных функций. Однако округление коэффициентов C_j в (2.24) и C_k в (2.26) приводит к выполнению (2.27) только с некоторой погрешностью $\xi_n \neq 0$. Недостаток этого метода в том, что погрешность аппроксимации Δ_{nl} быстро растет с увеличением n . Увеличение количества оболочек атома или иона приводит к возрастанию количества дополнительных условий, накладываемых на пробную функцию. В разложениях (2.23), (2.24), (2.26) существует сильная корреляция между параметрами $C_i(nl)$ и α_i . Вариация одного из параметров в этих разложениях приводит к изменению всех $C_i(nl)$ и α_i , что затрудняет нахождение минимума многопараметрической функции. Кроме того, интегралы перекрытия в (2.24) и (2.26), которые также зависят от варьируемых параметров, становятся сильным возмущением. Такая “обратная связь” также существенно затрудняет вариацию функционала (2.20) и приводит к увеличению погрешности Δ_{nl} . Вариация параметров $C_k(3s)$ и α_k в (2.26) должна не только уменьшать отклонение первого слагаемого в (2.26) от $\varphi_{3s}(x)$, но и уменьшать интегралы перекрытия (2.27), чтобы они оставались поправками к первому слагаемому в (2.26). Этот метод аппроксимации использовался ранее [81–85] для описания основного состояния атомов и ионов и не применялся к возбужденным состояниям.

Предложенный метод аналитической аппроксимации волновых функций возбужденных состояний [192] состоит в том, чтобы отказаться от выбора пробной функции с учетом условий (2.18) и за счет этого уменьшить Δ_{nl} . Если погрешности Δ_{nl} будут достаточно маленькими, то условия ортогональности (2.21) будут выполняться с погрешностью, близкой к погрешности численного решения (2.19):

$$|\xi_{nl,n'l}| \rightarrow |\eta_{nl,n'l}|. \quad (2.28)$$

В случае аппроксимации волновой функции M_1 -оболочки пробная функция для K -оболочки будет иметь тот же вид (2.23), а для следующих по энергии состояний пробные функции выбираются в виде:

$$\Psi_{2s}(x) = \sum_j C_j(2s) S_{n_j l}(\alpha_j, x); \quad \Psi_{3s}(x) = \sum_k C_k(3s) S_{n_k l}(\alpha_k, x). \quad (2.29)$$

Так как на функции (2.29) не накладываются никакие дополнительные условия, то можно достичь настолько малой величины Δ_{2s} и Δ_{3s} , что будут удовлетворяться условия (2.21).

Результаты расчетов (табл. 3) волновых функций атомов ($N_e = Z$) в основном состоянии показывают, что погрешность аналитической аппроксимации (2.23) предложенным методом [193] меньше, чем для волновых функций, полученных традиционным методом [82], и в большинстве случаев совпадает с погрешностью волновых функций [83].

На основе предложенного метода были рассчитаны волновые функции более 150 атомов и ионов с зарядом ядра $2 \leq Z \leq 18$ и количеством электронов N_e ($2 \leq N_e \leq 18$). Кроме основного учитывались также состояния с одним возбужденным валентным электроном, когда нет вакансий во внутренних оболочках. Рассматривались возбужденные состояния $2s$ для $Z = 2$, $2p$ для $Z \leq 4$, $3s$ для $Z \leq 10$, $3p$ для $Z \leq 12$, а также состояния $3d$, $4s$, $4p$, $4d$, $5s$, $5p$, $5d$ для $Z \leq 18$. Для атомов и ионов с одним валентным электроном ($N_e = 3, 11, 13$) значение спина, которое характеризует возбужденное состояние, остается тем же, что и в основном состоянии. В остальных случаях в возбужденном состоянии учитываются два возможных значения спина. Точность аппроксимации Δ_{nl} в расчетах достигала величины $\Delta_{1s} \leq 3 \times 10^{-10}$, $\Delta_{nl} \leq 10^{-9}$ для $n = 2$ и $\Delta_{nl} \leq 3 \times 10^{-9}$ для $n \geq 3$. Такая точность Δ_{nl} является достаточной для выполнения условия (2.28). В результате было получено [193] более 14000 волновых функций:

$$N_{wf} = N_Z (N_{ex} N_{nl} + N_{nl} - 1), \quad (2.30)$$

где N_{wf} – количество волновых функций, N_Z – количество атомов и положительных ионов ($N_Z = 18 - N_e + 1$), N_{nl} – максимальное количество оболочек, N_{ex} – количество рассмотренных возбужденных состояний. Значения N_{nl} , N_{ex} и N_{wf} приведены в табл. 4. Результаты этих расчетов в форме таблиц представлены в интернете в свободном доступе

[193]. Там же есть программа, позволяющая пользователю выбрать из базы накопленных результатов необходимую волновую функцию для ее применения в расчетах матричных элементов.

Считается, что в твердой мишени сумму в сечении захвата электрона быстрым ионом по возбужденным состояниям можно ограничить, когда размер атома или иона в возбужденном состоянии превышает расстояние между атомами мишени. Это дополнительное условие для твердой мишени позволяет расширить область применимости приближения (2.15). Среднее расстояние между атомами в твердой мишени при комнатной температуре составляет несколько атомных единиц и возрастает от 3.5–4.0 ат. ед. для легких материалов ($Z_t = 6$) до 5 ат. ед. (для $Z_t > 40$). Средний размер изолированного атома или иона в возбужденном состоянии, которое характеризуется квантовыми числами n и l , вычисляется с помощью соотношения:

$$\langle x \rangle_{nl} = \langle \psi_{nl}(x) | x | \psi_{nl}(x) \rangle. \quad (2.31)$$

С увеличением орбитального квантового числа l средний размер возбужденного атома или иона (2.31) увеличивается. Следовательно, сравнение $\langle x \rangle_{5s}$ и среднего расстояния между атомами в твердой мишени позволяет качественно проанализировать применимость приближения (2.15) для твердой мишени. Результаты расчетов (рис. 14) показывают, что для любых ионов и атома бора приближение (2.15) является достаточным при расчетах сечения захвата электрона быстрыми ионами в твердой мишени. Размер ионов и атомов с одним из электронов в $5s$ -состоянии превышает среднее расстояние между атомами в твердой мишени для ионов неона ($Z = 10$) при $N_e \geq 4$ и для ионов аргона ($Z = 18$) при $N_e \geq 14$.

Таблица 3. Значение интегралов перекрытия волновых функций различных атомов с зарядом ядра Z в основном состоянии для численного решения уравнения Хартри–Фока $\eta_{nl,n'l}$ (2.19) и для волновых функций в виде разложения по аналитическим функциям $\xi_{nl,n'l}$ (2.21)

Z	$\eta_{2s,3s}$ [80]	$\xi_{2s,3s}$			$\eta_{2p,3p}$ [80]	$\xi_{2p,3p}$		
		[193]	[82]	[83]		[193]	[82]	[83]
11	3.2×10^{-8}	1.5×10^{-6}	4.5×10^{-6}	7.0×10^{-7}				
12	4.4×10^{-8}	1.8×10^{-7}	2.4×10^{-6}	1.0×10^{-7}				
13	5.6×10^{-8}	1.7×10^{-7}	5.1×10^{-6}	1.5×10^{-7}	1.3×10^{-12}	2.0×10^{-6}	8.6×10^{-6}	1.0×10^{-6}
14	8.8×10^{-8}	3.1×10^{-7}	2.5×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.7×10^{-12}	6.4×10^{-8}	4.6×10^{-6}	7.3×10^{-7}
15	7.3×10^{-8}	1.2×10^{-6}	3.7×10^{-6}	8.9×10^{-7}	2.1×10^{-12}	2.6×10^{-7}	1.1×10^{-6}	8.5×10^{-7}
16	8.1×10^{-8}	6.2×10^{-7}	7.1×10^{-6}	8.2×10^{-7}	2.4×10^{-12}	1.5×10^{-7}	3.7×10^{-6}	3.6×10^{-7}
17	8.7×10^{-8}	2.3×10^{-8}	7.7×10^{-6}	6.8×10^{-7}	2.7×10^{-12}	1.0×10^{-7}	5.8×10^{-6}	5.2×10^{-7}
18	9.2×10^{-8}	2.3×10^{-7}	1.5×10^{-6}	1.0×10^{-6}	2.9×10^{-12}	4.4×10^{-7}	3.1×10^{-6}	4.6×10^{-7}

Таблица 4. Зависимость количества атомов и положительных ионов N_Z , параметров N_{nl} и N_{ex} , количества полученных волновых функций N_{wf} от количества электронов N_e

N_e	N_Z	N_{nl}	N_{ex}	N_{wf}
2	17	2	22	765
3	16	2	10	336
4	15	3	21	975
5	14	3	9	406
6	13	4	42	2223
7	12	4	42	2052
8	11	4	20	913
9	10	4	42	1710
10	9	4	42	1539
11	8	4	8	280
12	7	5	15	553
13	6	5	7	234
14	5	6	30	925
15	4	6	30	740
16	3	6	14	267
17	2	6	30	370
18	1	6	30	185

Сумма

153

14473

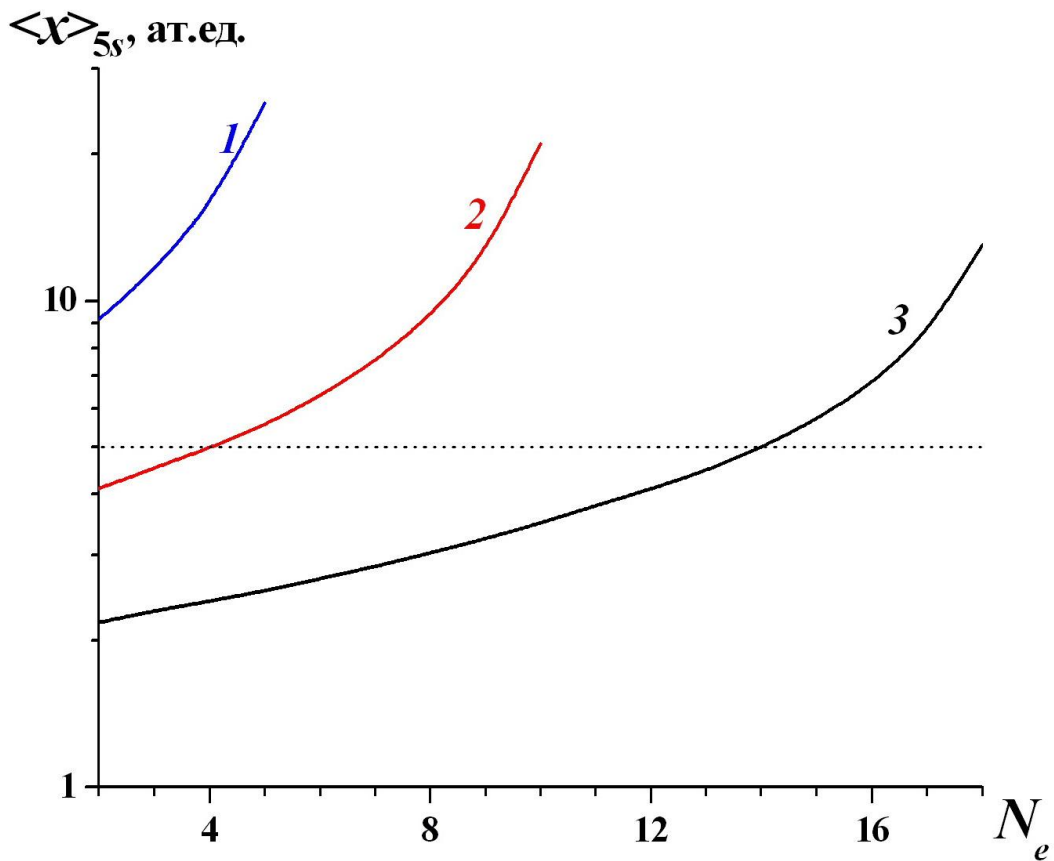


Рис. 14. Зависимость среднего размера атомов и ионов, когда один из валентных электронов находится в $5s$ -состоянии, от количества электронов. Результаты расчетов для атомов и ионов: 1 – бора ($Z = 5$); 2 – неона ($Z = 10$); 3 – аргона ($Z = 18$). Пунктиром обозначено максимальное расстояние между атомами в твердой мишени при комнатной температуре.

2.5. Результаты, способствующие развитию квантово-механических методов расчета сечений перезарядки

Рассмотренные в этой главе методы относятся к газовым мишеням, когда расстояние между атомами значительно превышает размеры возбужденных атомов и ионов.

Теоретическое описание потери электрона быстрыми ионами и атомами традиционно основано на борновском приближении, приближении Хартри–Фока для учета корреляций электронов в ионе и атоме мишени и суммировании по всем состояниям атома мишени. Для описания сечения потери электрона быстрыми ионами и атомами была предложена модификация этой модели, в которой несколько каналов возбуждения и ионизация атома мишени учтены в явном виде. В этом состоит отличие предложенной теоретической модели от традиционной, в которой использовалось правило сумм. Оно выполняется только при малых переданных импульсах. В случае быстрых ионов с небольшим зарядом q согласие вычисленных сечений $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ с экспериментальными данными улучшается в широком диапазоне значений энергии по сравнению с результатами традиционной модели.

Для анализа зависимости сечения потери электрона быстрыми ионами $\sigma_{q,q+1}$ от Z и Z_t был разработан метод расчета коэффициента $A_q(Z,Z_t)$, который характеризует зависимость сечения от энергии E . Анализ результатов расчета позволил установить, что величина $A_q(Z,Z_t)$ монотонно возрастает с увеличением Z_t и Z . Полученная монотонная зависимость $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ от Z и Z_t является теоретическим обоснованием возможности интерполяции и экстраполяции сечения $\sigma_{q,q+1}$ по этим параметрам.

В методе искаженных волн предполагается, что ион движется по прямолинейной траектории, и кулоновское взаимодействие между ионом и ионом остатка атома мишени приводит лишь к появлению фазового множителя в амплитуде захвата электрона быстрым ионом, который не влияет на величину сечения. Приближение прямолинейных траекторий

при движении рассеянного иона используется обычно в процессах, в которых основной вклад в сечение дают малые углы рассеяния и большие прицельные параметры (ионизация и возбуждение атома мишени быстрыми ионами). Это приближение не учитывает специфики процесса захвата электрона быстрым ионом, в котором основной вклад в амплитуду дают малые межъядерные расстояния R и малые прицельные параметры. Предложенная теоретическая модель описания процесса захвата электрона быстрым ионом и проведенный анализ результатов расчета показали, что имеет место эффект влияния взаимодействия ионов в конечном состоянии на сечение захвата электрона. Он приводит к существенному уменьшению величины $\sigma_{q,q-1}$ по сравнению с результатами расчета без учета влияния этого взаимодействия. Кулоновский потенциал взаимодействия иона с остовом атома мишени выталкивает ион из области малых межъядерных расстояний ($R \sim 1$ ат. ед.) и уменьшает вероятность захвата ионом одного из электронов атома мишени. Результаты расчетов с учетом кулоновского взаимодействия тяжелых частиц показали, что зависимость от энергии сечения захвата электрона быстрым ионом совпадает с зависимостью от энергии экспериментального сечения.

Анализ результатов расчета показал, что при вычислении сечения захвата электрона ионами с $Z \geq 5$ необходимо учитывать захват электрона в возбужденные состояния иона. Условия сходимости суммы по возбужденным состояниям быстрого иона зависят от энергии E и заряда ядра Z иона. Вклад в полное сечение возбужденных состояний с большим значением n уменьшается с увеличением E . В случае сечения захвата ионом электрона наблюдается симметричная картина на разных концах энергетического диапазона. При медленных столкновениях и использовании метода сильной связи каналов достаточно приближения двух – трех состояний. С ростом скорости столкновения количество базисных состояний увеличивается, и когда E превышает десятки кэВ/нуклон, погрешность вычислений методом сильной связи каналов возрастет. Аналогичная ситуация на другом конце энергетического диапазона. В пределе

большой энергии захват электрона происходит преимущественно в основное состояние быстрого иона. При уменьшении энергии быстрого иона необходимо учитывать сначала низшие, а затем и все более высокие возбужденные уровни. Одна из трудностей в теоретическом описании сечения захвата электрона в диапазоне значений энергии 0.1 – 1.0 МэВ/нуклон связана с большим количеством возбужденных состояний иона в этой области. Полученные в диссертации результаты определили область значений энергии, в которой при расчетах сечения захвата электрона быстрым ионом можно ограничиться возбужденными состояниями с главным квантовым числом электрона n в диапазоне $n \leq 5$.

При проведении квантово-механических расчетов сечения захвата электрона в возбужденное состояние быстрого иона были получены аналитические волновые функции возбужденных состояний атомов и ионов, у которых количество электронов N_e больше двух ($N_e \geq 2$). Ранее при аппроксимации численного решения уравнения Хартри–Фока для волновых функций основного состояния атомов и ионов использовался ортогональный базис, в котором каждая из базисных функций задавалась в виде суммы не более трех слагаемых. Этот метод непригоден для описания волновых функций возбужденных состояний из-за большой погрешности аппроксимации Δ_{nl} . Для описания возбужденных состояний был предложен другой метод. Базисные функции, по которым проводится разложение волновых функций с одинаковым l , определяли независимо друг от друга, что позволило уменьшить погрешность Δ_{nl} более чем на два порядка. В этом случае условия ортогональности волновых функций с одинаковым значением l удовлетворяются за счет достигнутой малости Δ_{nl} и свойства ортогональности численного решения уравнения Хартри–Фока. На основе предложенного метода были получены аналитические волновые функции более 150 возбужденных атомов и ионов с зарядами ядер $Z \leq 18$ и количеством электронов N_e ($2 \leq N_e \leq 18$).

ГЛАВА 3

ОПИСАНИЯ СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ

3.1. Экспериментальные данные о сечениях перезарядки

Опубликовано большое количество работ, посвященных экспериментальным и теоретическим данным о сечениях перезарядки и параметрах зарядовых распределений ускоренных ионов в различных материалах. Часть этих данных были собраны в серии обзоров [30–36], которые дополняют друг друга. Главный акцент в этих публикациях был сделан на легкие ионы, и данных по ионам с $Z \geq 5$ немного. Отсутствуют данные последних лет, которые можно найти только в оригинальных публикациях. Экспериментальные сечения обычно представляли в виде таблиц, без графического сравнения между собой, или наоборот, исключительно только в виде графиков [31]. Эти недостатки объясняются объективными причинами, связанными с ограничением публикаций по форме и объему. Сравнение результатов расчетов с использованием различных квантово-механических моделей проведено с экспериментальными данными в нескольких обзорах [30, 52, 61, 62, 70, 71, 73] и выполнено, как правило, в виде графиков.

Развитие компьютерных технологий позволяет сегодня объединить все данные о зарядовых распределениях ускоренных ионов в единую информационную базу данных, которая позволяет организовать быстрый поиск информации, ее наглядное представление, сравнение и анализ. Обычно измерения зарядовых распределений ускоренных ионов на одной экспериментальной установке проводятся в небольшом диапазоне значений энергии столкновения. Использование экспериментальных данных разных авторов позволяет описать зарядовые распределения ионов в более широком диапазоне. При

сравнении результатов расчета с экспериментальными данным удается выделить область применимости различных теоретических моделей.

В результате компиляции всех имеющихся в распоряжении экспериментальных и теоретических данных о сечениях перезарядки, а также экспериментальных данных о зарядовых фракциях и параметрах равновесного зарядового распределения ускоренных ионов была создана информационная база данных [194, 195]. Эта база данных представляет собой более 3000 связанных между собой html-страниц, на которых отдельно представлена информация о сечениях перезарядки и параметрах равновесного зарядового распределения ускоренных ионов. Организован быстрый поиск информации – по параметрам иона Z , q и атома мишени Z_t , а также по дате публикации и по работам определенного автора. Все сечения перезарядки приведены в одних единицах, но указаны и единицы оригинальной публикации. Экспериментальные и теоретические данные более 700 работ из обзоров и из оригинальных статей представлены в виде более 9000 таблиц и 700 рисунков. Под таблицей здесь понимаются табулированные сечения $\sigma_{q,q'}$ или параметры равновесного зарядового распределения как функции энергии. Таблица может содержать от одного до нескольких десятков значений E .

Данные представлены для ускоренных ионов с зарядом q ($-1 \leq q \leq Z$), зарядом ядра Z ($1 \leq Z \leq 92$) и атомов мишени с зарядом ядра Z_t ($1 \leq Z_t \leq 83$). Доля информации о сечениях перезарядки и равновесных зарядовых распределениях в инертных газах ($Z_t = 2, 10, 18, 36, 54$), в водороде ($Z_t = 1$), азоте ($Z_t = 7$) и кислороде ($Z_t = 8$) составляет более 95% данных для всех газовых мишеней. Остальные данные в газах относятся, как правило, к медленным ($E \leq 0.03$ МэВ/нуклон) ионам с небольшим зарядом ($q \leq 2$). Данные о параметрах равновесных зарядовых распределений ионов в твердой мишени распределены по Z_t более равномерно. В диапазоне ($4 \leq Z_t \leq 83$) имеется информация о почти трех десятках различных мишеней. Для ионов от бора до аргона ($5 \leq Z \leq 18$)

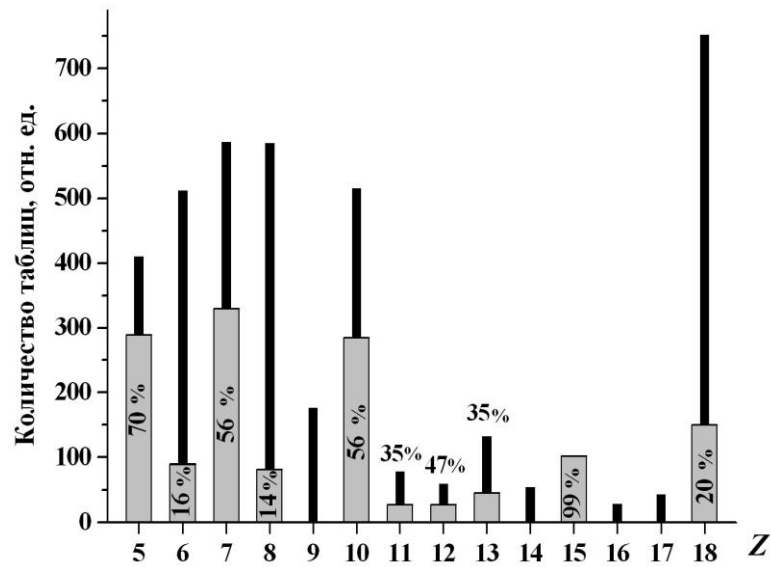


Рис. 15. Количество таблиц, содержащих данные обо всех сечениях потери и захвата одного или нескольких электронов $\sigma_{q,q'}$ для ускоренных ионов с зарядом ядра Z . Узкие черные столбцы – общее количество данных о публикациях всех авторов [195], широкие серые столбцы – о публикациях НИИЯФ МГУ [196], цифры – доля данных о сечениях перезарядки, измеренных в НИИЯФ МГУ для ионов с зарядом ядер Z .

существенную часть экспериментальных данных составляют сечения перезарядки, измеренные в НИИЯФ МГУ [196]. Для ускоренных ионов бора ($Z = 5$), азота ($Z = 7$), неона ($Z = 10$) и фосфора ($Z = 15$) количество измеренных в НИИЯФ МГУ сечений перезарядки превышает 50% всех имеющихся в литературе [195]. В статистике, представленной на рис. 15, учтены все сечения потери и захвата одного $\sigma_{q,q\pm 1}$, двух $\sigma_{q,q\pm 2}$ и более электронов в газах с зарядом ядер атома мишени $Z_t \leq 54$. Созданная информационная база данных позволила организовать быстрый поиск информации, ее наглядное представление, сравнение и анализ [197–200].

3.2. Основные приближения при оценке сечений перезарядки

Точное описание сечений взаимодействия произвольного ускоренного иона с произвольным атомом в широком диапазоне значений энергии возможно только в частных случаях, когда зависимость сечений от энергии при разных параметрах, характеризующих сталкивающиеся частицы, подобна. Например, сечение ионизации атома быстрыми бесструктурными ионами, которое в первом борновском приближении [201] пропорционально q^2 . Для сечений потери $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ и захвата $\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ электрона ионом таких законов подобия нет. Сечение перезарядки – функция одной переменной E и трех параметров q, Z, Z_t . Даже небольшое изменение одного из параметров может изменить характер зависимости сечения от E .

Для описания зависимости сечений перезарядки ионами с $Z \geq 5$ используют несколько приближений.

1. $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ – непрерывная функция от E, q, Z и Z_t .
 2. $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ в зависимости от E – функция, которая имеет не более одного максимума.
- Вид этой функции может быть описан несколькими параметрами, значения которых медленно изменяются в зависимости от q, Z, Z_t и определяются из экспериментальных сечений и теоретических оценок.

3. $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ в зависимости от Z_t может быть немонотонной функцией из-за оболочечной структуры иона и атома мишени.

4. Для оценки $\sigma_{q,q\pm 2}(E,Z,Z_t)$ используют экспериментальные значения отношения $\sigma_{q,q\pm 2}(E,Z,Z_t)/\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ для ионов азота в газах, а влиянием потери и захвата трех и более электронов при одном столкновении на формирование зарядового распределения пренебрегают из-за малости отношения $\sigma_{q,q\pm 3}(E,Z,Z_t)/\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$.

Эти приближения позволяют рассматривать сечение перезарядки как непрерывную функцию четырех переменных, описывающую имеющиеся экспериментальные данные, и использовать ее для экстраполяции сечений в области параметров ускоренных ионов E, q, Z, Z_t , для которой экспериментальных данных нет.

3.3. Сечение потери одного электрона в газах

Сечение потери одного электрона $\sigma_{q,q+1}$ представляется в виде функции E с максимумом при энергии E_q . Величина E_q соответствует энергии, при которой скорость столкновения V равна скорости электрона на валентной оболочке налетающего иона. Отсюда следует, что E_q не зависит от заряда атома мишени Z_t и определяется энергией связи валентного электрона налетающего иона. С возрастанием q энергия связи электрона в ионе увеличивается, величина E_q растет, а максимум сечения $\sigma_{q,q+1}(E)$ сдвигается в область большей энергии E . Если сравнить изменение энергии связи электрона в ионах с одинаковым q , но разным Z , то это изменение приводит к относительному изменению скорости валентного электрона всего на 5–10%. Следовательно, имеет место зависимость E_q от заряда ядра ускоренного иона, но эта зависимость слабая и на фоне широкого максимума сечения $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ почти не проявляется.

Обозначим сечение $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ при $E = E_q$ как $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z,Z_t)$. Анализ экспериментальных данных показал, что если сечение $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ перевести в приведенные переменные и в качестве аргумента использовать E/E_q , а значение функции

разделить на $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$, то это отношение при $E \geq E_q$ слабо зависит от q, Z, Z_t . Тогда в области значений энергии $E \geq E_q$ сечение потери одного электрона можно представить в виде:

$$\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t) \times f(E/E_q) \text{ при } E \geq E_q, \quad (3.1)$$

$$f(E/E_q) \rightarrow 1 \text{ при } E \rightarrow E_q; \quad f(E/E_q) \rightarrow E_q/E \text{ при } E \rightarrow \infty. \quad (3.2)$$

где $f(E/E_q) \leq 1$ – безразмерная функция, которая слабо зависит от q, Z, Z_t .

В области медленных столкновений $E \leq E_q$ сечение $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ аппроксимируется степенной функцией с безразмерным параметром $b(E) \geq 0$:

$$\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t) \times (E/E_q)^{b(E)} \text{ при } E \leq E_q, \quad (3.3)$$

$$b(E) \rightarrow 0 \text{ при } E \rightarrow E_q; \quad b(E) \rightarrow \beta \text{ при } E \rightarrow 0. \quad (3.4)$$

Параметр $b(E)$ в промежуточной области вычисляется из непрерывности производной $d\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)/dE$.

В области значений энергии $E < E_q$, где скорость столкновения меньше скорости теряемого ионом электрона, электрон движется в поле двух центров – ионного остатка с зарядом $q+1$ и атома с зарядом ядра Z_t . Присутствие $(Z - q - 1)$ электронов, экранирующих поле ядра иона, можно рассматривать как возмущение в этой составной системе. Поэтому можно считать, что параметр β , который определяет зависимость $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ при $E < E_q$, в случае ионов с $Z \geq 5$ зависит только от q и Z_t и не зависит от числа пассивных электронов иона, т.е. от Z :

$$\beta = \beta(q, Z_t). \quad (3.5)$$

Чем больше q и Z_t , тем быстрее уменьшается $\sigma_{q,q+1}$ с уменьшением E и тем больше величина $\beta(q, Z_t)$. Результаты оценки этого параметра приведены на рис. 16. Параметр β увеличивается для любых q при увеличении Z_t . Чем больше Z_t , тем сложнее составной системе из иона и атома мишени при разлете потерять один из электронов. Этот процесс

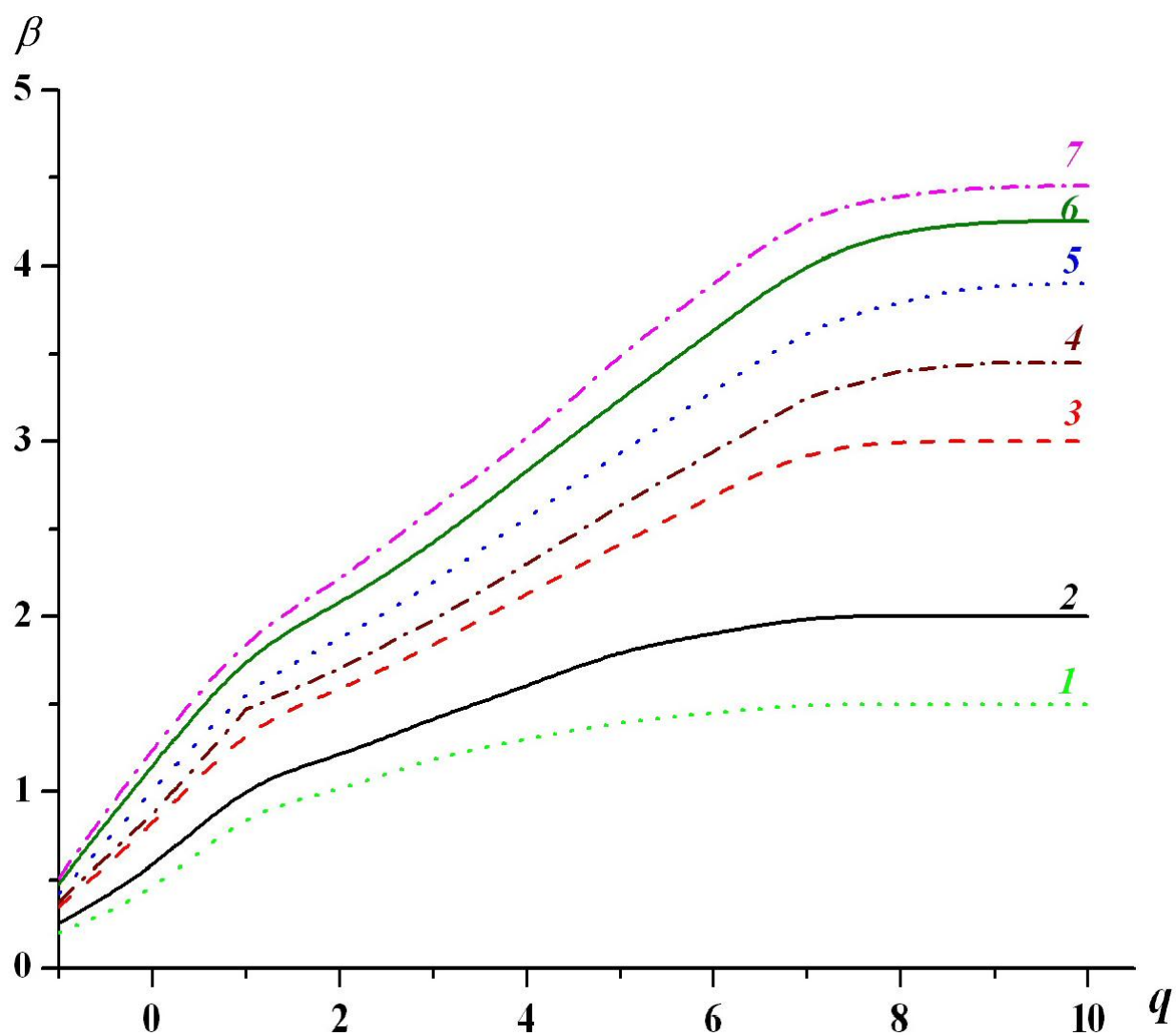


Рис. 16. Параметр $\beta(q, Z_t)$, характеризующий зависимость сечения потери одного электрона от энергии при $E < E_q$ в процессе столкновений ускоренных ионов X^{q+} с атомом: 1 – водорода ($Z_t = 1$); 2 – гелия ($Z_t = 2$); 3 – азота ($Z_t = 7$); 4 – неона ($Z_t = 10$); 5 – аргона ($Z_t = 18$); 6 – криптона ($Z_t = 36$); 7 – ксенона ($Z_t = 54$).

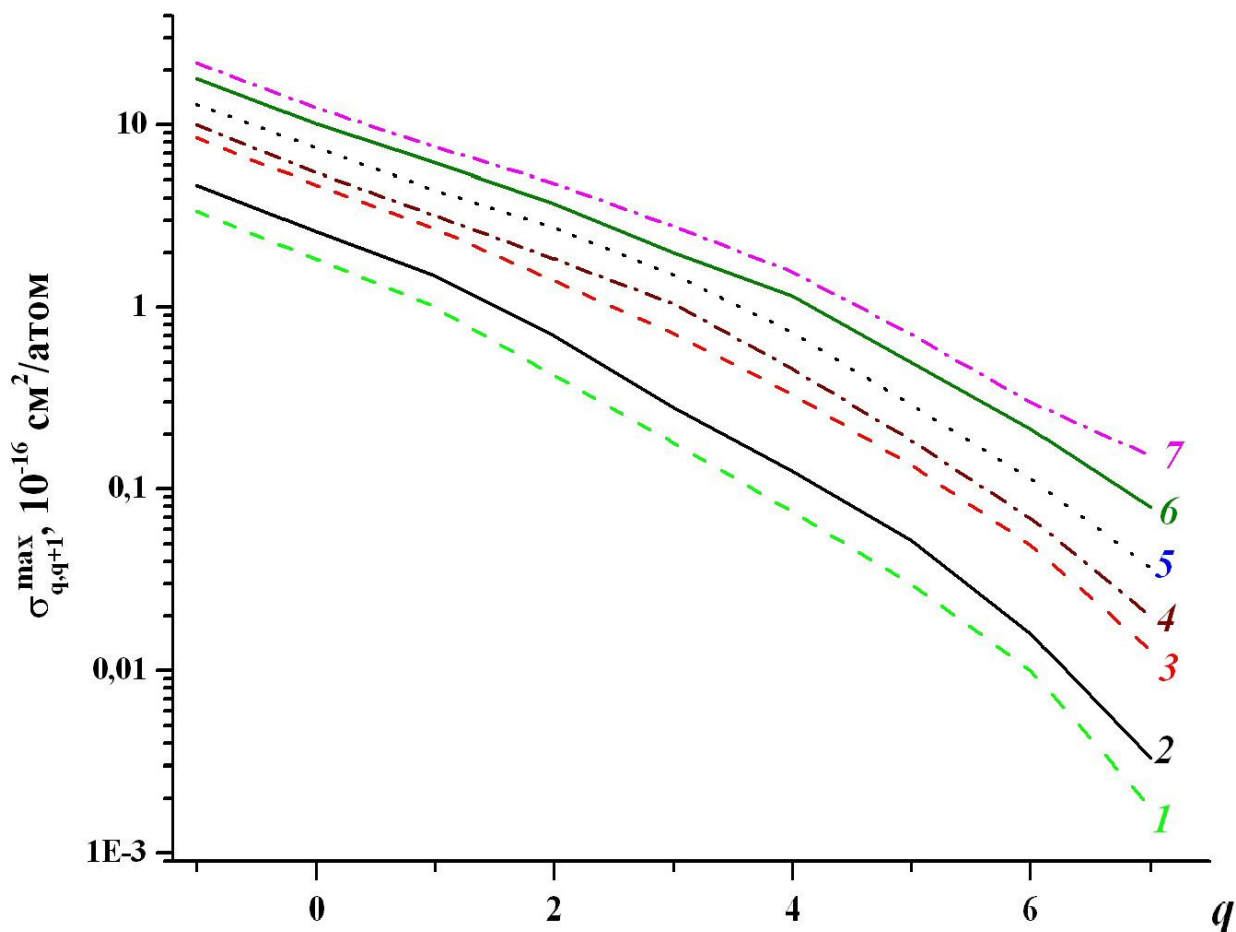


Рис. 17. Зависимость параметра $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$, характеризующего максимум сечения потери одного электрона ускоренными ионами кислорода O^{q+} , от заряда иона q при столкновении ионов с различными атомами: 1 – водорода ($Z_t = 1$); 2 – гелия ($Z_t = 2$); 3 – азота ($Z_t = 7$); 4 – неона ($Z_t = 10$); 5 – аргона ($Z_t = 18$); 6 – криптона ($Z_t = 36$); 7 – ксенона ($Z_t = 54$).

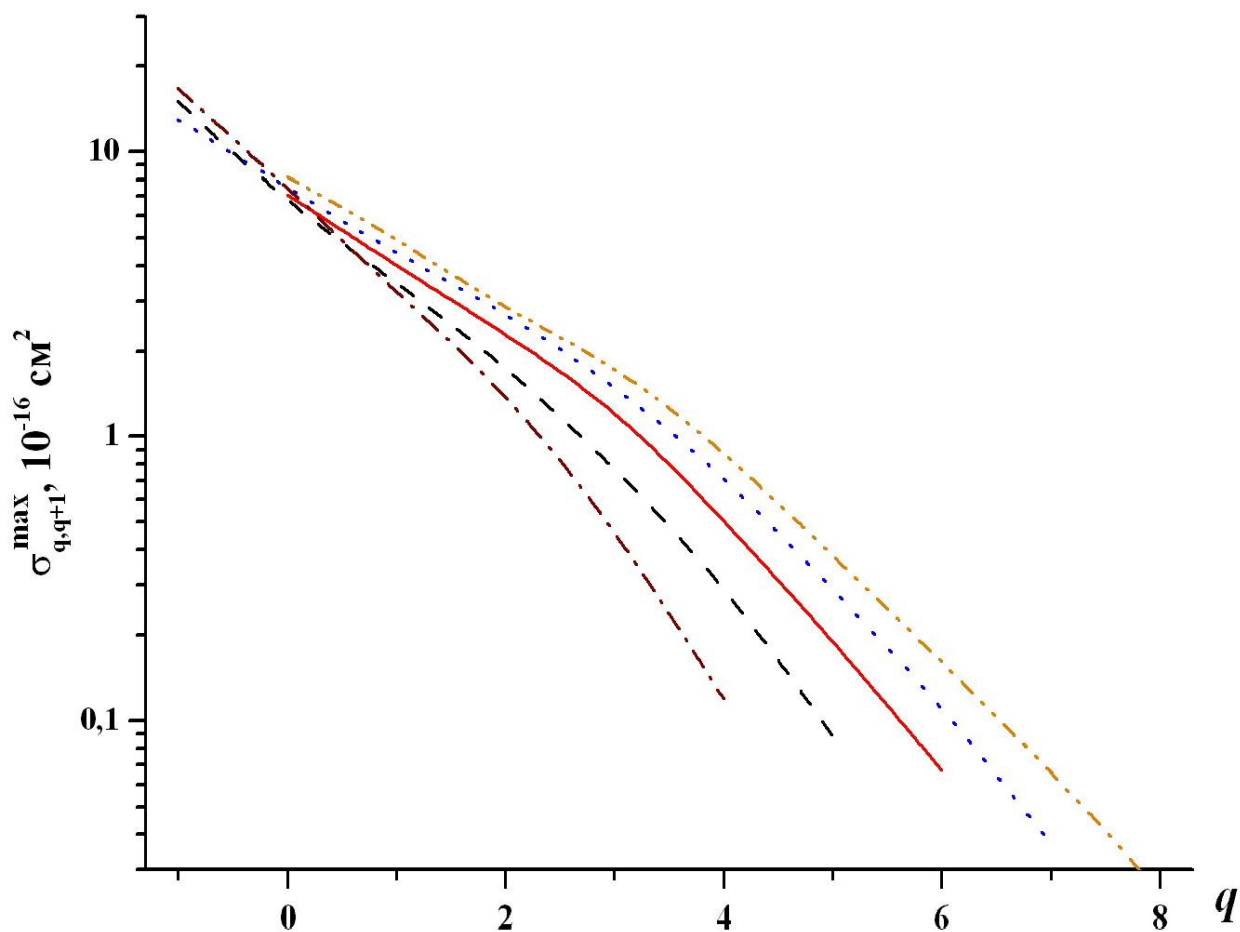


Рис. 18. Зависимость параметра $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$, характеризующего максимум сечения потери одного электрона различными ускоренными ионами при столкновении с атомом аргона ($Z_t = 18$), от заряда иона q : штрихпунктирная линия – ионы бора B^{q+} ($Z = 5$); штриховая линия – ионы углерода C^{q+} ($Z = 6$); сплошная линия – ионы азота N^{q+} ($Z = 7$); пунктирная линия – ионы кислорода O^{q+} ($Z = 8$); двойная штрихпунктирная линия – ионы неона Ne^{q+} ($Z = 10$).

можно рассматривать как распад заряженной квазимолекулы, где основным фактором являются заряды двух центров, а не общее количество быстрых электронов на одном из них. С увеличением q наблюдается (рис. 16) насыщение на зависимости $\beta(q, Z_t)$, и $\beta(q, Z_t) \rightarrow \text{const}$ при $q \geq 8$.

Параметр, характеризующий максимум сечения $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$, зависит от всех трех параметров q, Z, Z_t . Зависимость $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$ для ускоренных ионов азота ($Z = 7$) показывает (рис. 17), что сечение уменьшается с увеличением q :

$$d\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t) / dq < 0. \quad (3.6)$$

Чем больше q , тем больше энергия связи электрона, и тем сложнее ускоренному иону потерять этот электрон при столкновении. С другой стороны, чем больше электронов у атома мишени (больше Z_t), тем больше частиц, с которыми происходит взаимодействие быстрого иона, и тем больше $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$:

$$d\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t) / dZ_t > 0. \quad (3.7)$$

Из зависимости $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$ при $Z_t = \text{const}$ следует (рис. 18), что для $q = \text{const}$ максимальное сечение потери водородоподобного иона меньше, чем сечение потери электрона в поле многоэлектронного иона. Чем больше у ускоренного иона электронов ($Z - q$), тем легче ему потерять один из них в столкновении. Различия сечений для ионов с разным Z при $q = \text{const}$ становятся больше с увеличением q .

Итак, проведенная оценка сечения $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ основана на приближении, в котором зависимость $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ от E может быть описана параметрами $E_q, \sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t), \beta(q, Z_t)$, которые являются непрерывными и медленно меняющимися функциями от q, Z и Z_t .

3.4. Сечение захвата одного электрона в газах

Зависимость сечения захвата одного электрона ускоренным ионом можно представить в виде быстро убывающей функции со слабо выраженным максимумом при энергии $E' \approx 10$ кэВ/нуклон. Увеличение сечения захвата при увеличении E в области медленных столкновений ($E < E'$) настолько слабое, что на фоне дальнейшего быстрого спада эту зависимость при $E \leq E'$ можно аппроксимировать константой $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$. Сечение $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ при $E \geq E'$ можно представить степенной функцией с безразмерным параметром $a(E) \leq 0$:

$$\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) = \sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t) \times (E/E')^{a(E)} \text{ при } E \geq E', \quad (3.8)$$

$$a(E) \rightarrow 0 \text{ при } E \rightarrow E'; a(E) \rightarrow \alpha \text{ при } E \rightarrow \infty. \quad (3.9)$$

Экспериментально [202, 203] и теоретически [67] была получена величина $\alpha = -5.5$ для процесса столкновения протонов ($Z = 1$) с атомом водорода ($Z_t = 1$). Если у атома мишени несколько оболочек, то по мере увеличения скорости столкновения ускоренный налетающий ион будет захватывать электроны из все более глубоких оболочек атома мишени, где энергия связи и скорость электрона больше (рис. 1). Это приводит к тому, что в случае многоэлектронных атомов зависимость сечения захвата от энергии становится более слабой. Расчеты сечения захвата электрона в приближении (1.29), (2.15) показали, что параметр $|\alpha|$ в случае сечения захвата электрона ионами с $Z \geq 5$ не зависит от q, Z :

$$\alpha = \alpha(Z_t), \quad (3.10)$$

и $|\alpha|$ уменьшается с увеличением Z_t (табл. 5). Величина $|\alpha| \approx 4.5$ для $Z_t = 1, 2$ меньше, чем теоретическая оценка $|\alpha| \approx 5.5$ для столкновений протонов с атомом водорода. Это показывает, что в случае легких ионов $Z \leq 3$ параметр α в (3.8), (3.9) зависит как от Z_t , так и от Z . Эмпирическая оценка параметра α для любых ионов (включая и легкие $Z \leq 3$) при столкновениях с атомом водорода дает значение $|\alpha| = 4.8$ [204], что также доказывает, что сечение захвата электрона быстрыми легкими ионами ($Z \leq 3$) уменьшается с увеличением

Таблица 5. Зависимость параметра α (3.9), характеризующего зависимость сечения захвата одного электрона быстрыми ускоренными ионами от энергии, от заряда ядра Z_t атома мишени

Z_t	α
1	-4.50 ± 0.10
2	-4.50 ± 0.10
7	-3.50 ± 0.10
10	-3.25 ± 0.10
18	-3.00 ± 0.10
36	-2.85 ± 0.10
54	-2.85 ± 0.10

энергии E быстрее, чем более тяжелыми ионами ($Z \geq 5$). Проведенные расчеты параметра $|\alpha|$ для ионов с зарядом ядра $Z \geq 5$ показали, что с точностью 2–3.5% можно использовать приближение (3.10).

Сечение захвата электрона $\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ при увеличении энергии столкновения E убывает быстрее ($|\alpha| > 1$), чем сечение потери одного электрона $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ (3.1), (3.2).

Есть область значений энергии, в которой отличие этих сечений небольшое:

$$\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t) \approx \sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t) \quad \text{при } E \approx E'' \quad (3.11)$$

При энергии $E \approx E''$ ускоренный ион с равной вероятностью может как потерять, так и захватить один из электронов, и $\bar{q} \approx q$ [198].

Максимальное сечение $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z,Z_t)$ зависит от всех трех параметров. Зависимость $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z,Z_t)$ для ускоренных ионов кислорода ($Z = 8$) показывает (рис. 19), что сечение захвата электрона ионом увеличивается с ростом q . Чем больше заряд ускоренного иона q , тем сильнее взаимодействие иона с атомом и тем легче иону захватить один из электронов при столкновении:

$$d\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z,Z_t) / dq > 0, \quad (3.12)$$

что качественно отличается от (3.6). Отметим также, что с увеличением количества электронов у атома мишени (увеличением Z_t) вероятность захвата одного из электронов возрастает:

$$d\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z,Z_t) / dZ_t > 0. \quad (3.13)$$

Эта особенность (рис. 19) аналогична зависимости (3.7) (рис. 17). Исключением из этого правила является только то, что сечение захвата электрона при столкновении с атомом водорода ($Z_t = 1$) больше, чем сечение захвата при столкновении с атомом гелия ($Z_t = 2$). В том и другом случае у атома мишени только K -электроны, но энергия связи в атоме гелия почти в два раза больше, чем в атоме водорода. Если представить зависимость сечения

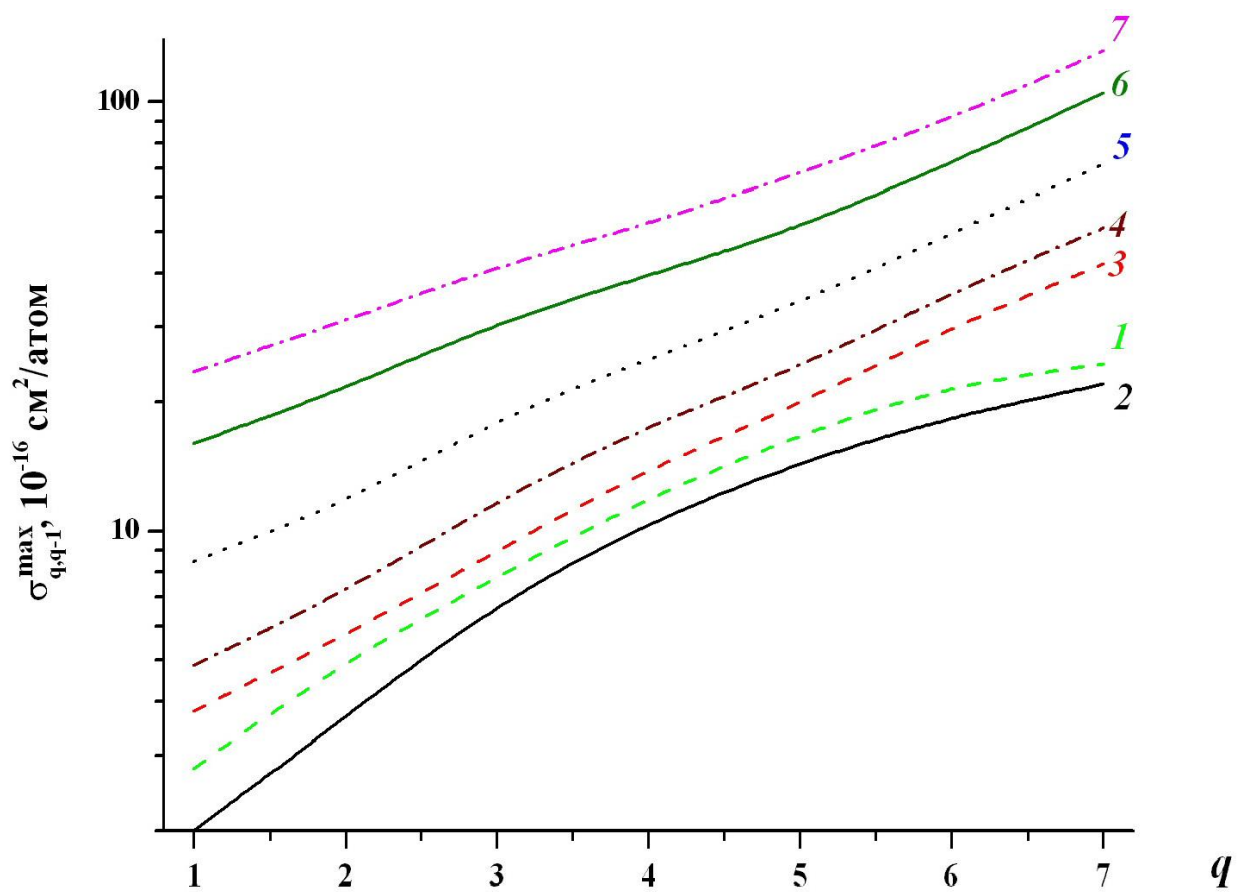


Рис. 19. Зависимость параметра $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$, характеризующего максимум сечения захвата одного электрона ускоренными ионами азота N^{q+} , от заряда иона q в случае столкновений с различными атомами: 1 – водорода ($Z_t = 1$); 2 – гелия ($Z_t = 2$); 3 – азота ($Z_t = 7$); 4 – неона ($Z_t = 10$); 5 – аргона ($Z_t = 18$); 6 – криптона ($Z_t = 36$); 7 – ксенона ($Z_t = 54$).

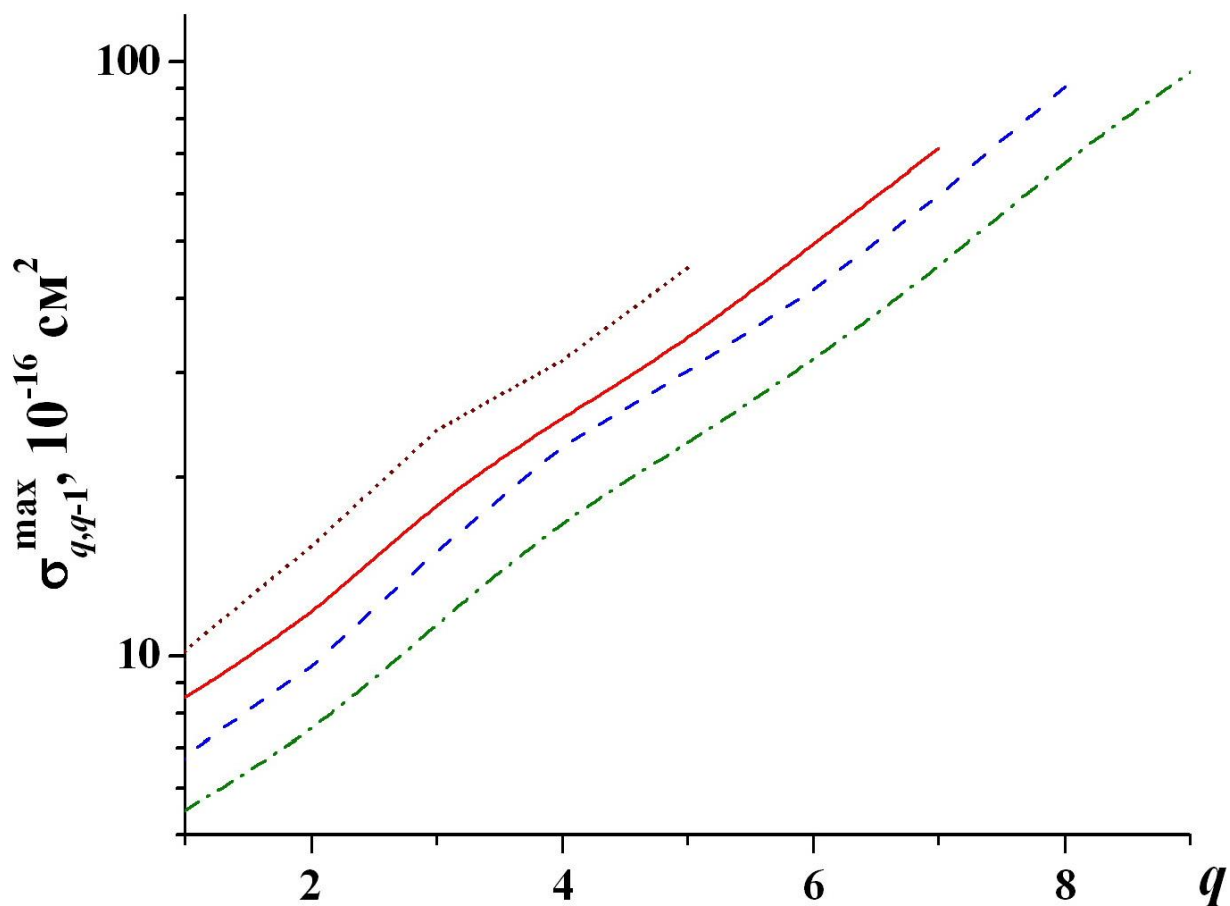


Рис. 20. Зависимость параметра $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$, характеризующего максимум сечения захвата одного электрона различными ускоренными ионами при столкновении с атомом аргона ($Z_t = 18$), от заряда иона q : пунктирная линия – ионы бора B^{q+} ($Z = 5$); сплошная линия – ионы азота N^{q+} ($Z = 7$); штриховая линия – ионы кислорода O^{q+} ($Z = 8$); штрихпунктирная линия – ионы неона Ne^{q+} ($Z = 10$).

$\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ при $Z_t = \text{const}$, то можно увидеть другую закономерность. При одном и том же значении q максимальное сечение захвата $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ для ядра иона ($q = Z$) больше, чем для иона с электронами, когда $q < Z$ (рис. 20). Пассивные электроны ускоренного иона уменьшают вероятность захвата, и значение $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ снижается. В этом качественное отличие сечения захвата от сечения потери электрона, когда присутствие пассивных электронов, наоборот, увеличивает сечение. Отметим также, что отличия сечений, связанные с разным количеством $(Z - q)$ пассивных электронов ускоренного иона, в случае захвата электрона (рис. 20) существенно меньше, чем в случае потери электрона (рис. 18).

Таким образом, для оценки сечения $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ можно использовать приближение, в котором зависимость $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ от E описывается параметрами $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ и $\alpha(Z_t)$, которые являются непрерывными и медленно изменяющимися функциями от q , Z и Z_t .

3.5. Влияние процессов потери и захвата двух электронов на распределение ионов в пучке по зарядам

Величины сечений с участием двух электронов в одном столкновении $\sigma_{q,q\pm 2}$ позволяют уточнить информацию о равновесных и неравновесных зарядовых фракциях и параметрах зарядового распределения ионов в пучке.

Сечение процессов перезарядки с участием нескольких электронов $\sigma_{q,q\pm k}$ в одном столкновении меньше, чем сечение с участием только одного электрона $\sigma_{q,q\pm 1}$ [195, 196]:

$$\sigma_{q,q\pm k} / \sigma_{q,q\pm 1} < 1 \quad (k \geq 2), \quad (3.14)$$

где k – число электронов, участвующих в одном столкновении, или кратность процесса. В процессах потери электронов вероятность потерять при этом же столкновении второй электрон уменьшается, так как второй электрон имеет большую по сравнению с первым электроном энергию связи. В процессах захвата электронов уменьшение q приводит к

уменьшению потенциала ионно-атомного взаимодействия и уменьшению вероятности захвата второго электрона в этом же столкновении. Обычно, исходя из соотношения (3.14), при описании зарядовых распределений ионов в пучке ограничиваются рассмотрением процессов потери и захвата ионом только одного электрона, пренебрегая влиянием кратных процессов, которые описываются сечениями $\sigma_{q,q\pm k}$ при $k \geq 2$. Область значений энергии, в которой для уточнения равновесного зарядового распределения ионов в пучке необходимо учитывать процессы потери и захвата нескольких электронов, мало исследовалась.

Экспериментальные данные [31, 196] показывают, что существует область значений энергии E , в которой отношение $\sigma_{q,q+2}/\sigma_{q,q+1}$ достигает величины 0.6–0.7, в то время как отношение $\sigma_{q,q-2}/\sigma_{q,q-1}$ не превышает 0.3–0.4. Объясняется это тем, что быстрый ускоренный ион может потерять электрон внутренней оболочки. Тогда при релаксации возбужденного состояния иона и вылете оже-электрона ион потеряет при одном столкновении не один, а два электрона. Отношение $\sigma_{q,q+2}/\sigma_{q,q+1}$ возрастет за счет увеличения $\sigma_{q,q+2}$ и уменьшения $\sigma_{q,q+1}$. Медленное убывание отношения $\sigma_{q,q+k}/\sigma_{q,q+1}$ с увеличением k приводит к тому, что измерения позволяют получить информацию о сечении $\sigma_{q,q+k}$ для k в диапазоне $2 \leq k \leq 10$ [205, 206]. Отношение $\sigma_{q,q-k}/\sigma_{q,q-1}$ при увеличении k убывает быстрее, известны экспериментальные данные о сечении $\sigma_{q,q-k}$ только для $k \leq 4$ [195]. Учет кратных процессов может изменить соотношение между вероятностью потери и захвата электрона и, соответственно, значения параметров, характеризующих равновесное и неравновесное зарядовые распределения ионов в пучке.

Из-за уменьшения отношения (3.14) с увеличением кратности k можно сделать вывод о том, что влияние процессов с $k \geq 3$ на зарядовые распределения ионов в пучке должно быть меньше, чем процессов с участием двух электронов $k = 2$. Тогда для оценки поправки, которую вносят кратные процессы в параметры зарядового распределения

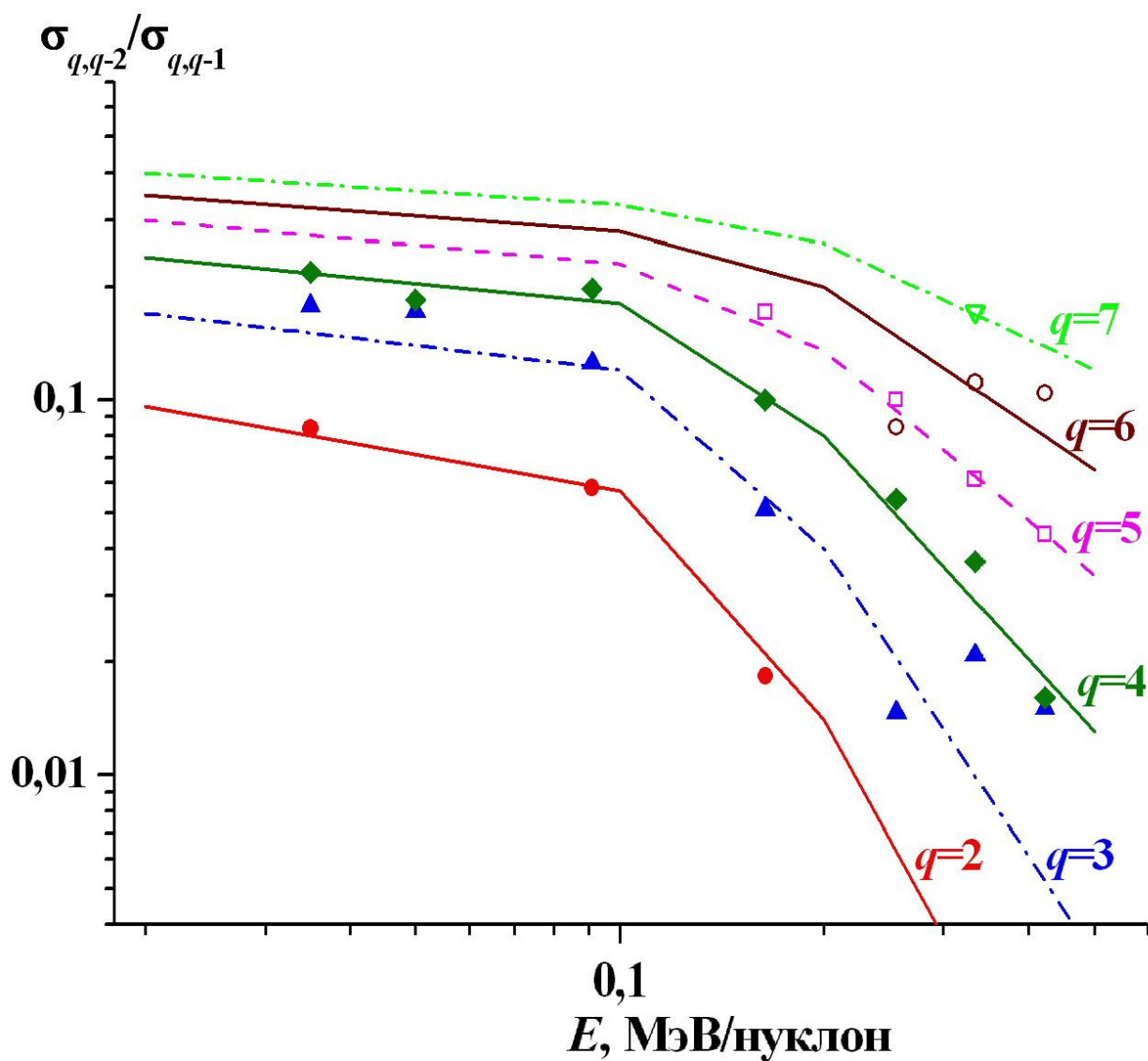


Рис. 21. Отношение сечений $\sigma_{q,q-2}(E,Z,Z_t)/\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ для ускоренных ионов N^{q+} в азоте. Символы – экспериментальные данные [196]. Сплошные, пунктирные и штрихпунктирные линии – результаты оценки. Значения q указаны возле линий.

ускоренных ионов в мишени, достаточно ограничиться процессами захвата и потери двух электронов.

Сечение захвата ионом электрона атома мишени $\sigma_{q,q-1}$ уменьшается с увеличением энергии E (3.8) и возрастает с увеличением q (рис. 19). Экспериментальные данные для ускоренных ионов азота N^{q+} в азоте (рис. 21) показывают, что для отношения $\sigma_{q,q-2}/\sigma_{q,q-1}$ выполняются такие же закономерности. Это означает, что $\sigma_{q,q-2}$ убывает с увеличением E и возрастает с увеличением q быстрее, чем $\sigma_{q,q-1}$. В области значений энергии $E < 0.1$ МэВ/нуклон, где средний заряд ионов азота N^{q+} небольшой ($\bar{q} \leq 3$), захват двух электронов может изменить параметры зарядового распределения. Об этом свидетельствует достаточно большая величина отношения $\sigma_{3,1}/\sigma_{3,2} \sim 0.2$. В области $0.2 \leq E \leq 0.7$ МэВ/нуклон, в которой основной вклад в зарядовое распределение ускоренных ионов азота N^{q+} дают зарядовые фракции F_q ($3 \leq q \leq 5$), отношение $\sigma_{q,q-2}/\sigma_{q,q-1}$ уменьшается ($\sigma_{5,3}/\sigma_{5,4} < 0.1$), и влияние процесса захвата двух электронов на зарядовое распределение ионов в пучке становится слабее. В случае быстрых столкновений $E > 1$ МэВ/нуклон отношение $\sigma_{q,q-2}/\sigma_{q,q-1}$ остается небольшим даже для ядра иона $q = Z$.

Зависимость сечения $\sigma_{q,q+1}$ от энергии E имеет максимум при $E = E_q$ (3.1). Максимум отношения $\sigma_{q,q+2}/\sigma_{q,q+1}$ достигается при энергии $E = E_q^*$ (рис. 22). Максимум отношения $\sigma_{q,q+2}/\sigma_{q,q+1}$ означает более быстрое по сравнению с $\sigma_{q,q+1}$ уменьшение $\sigma_{q,q+2}$ в пределе быстрых ($E \gg E_q^*$) и медленных ($E \ll E_q^*$) столкновений. Величина E_q^* определяется энергией связи двух активных электронов, и поэтому $E_q^* > E_q$. Поскольку с увеличением энергии E средний заряд иона возрастает, отношение $\sigma_{q,q+2}/\sigma_{q,q+1}$ и влияние процессов потери двух электронов на зарядовое распределение быстрых ускоренных ионов в пучке уменьшается.

По величине отношения $\sigma_{q,q\pm 2}/\sigma_{q,q\pm 1}$ еще нельзя судить о том, насколько изменятся параметры, характеризующие зарядовое распределение ионов в пучке, и в какой области

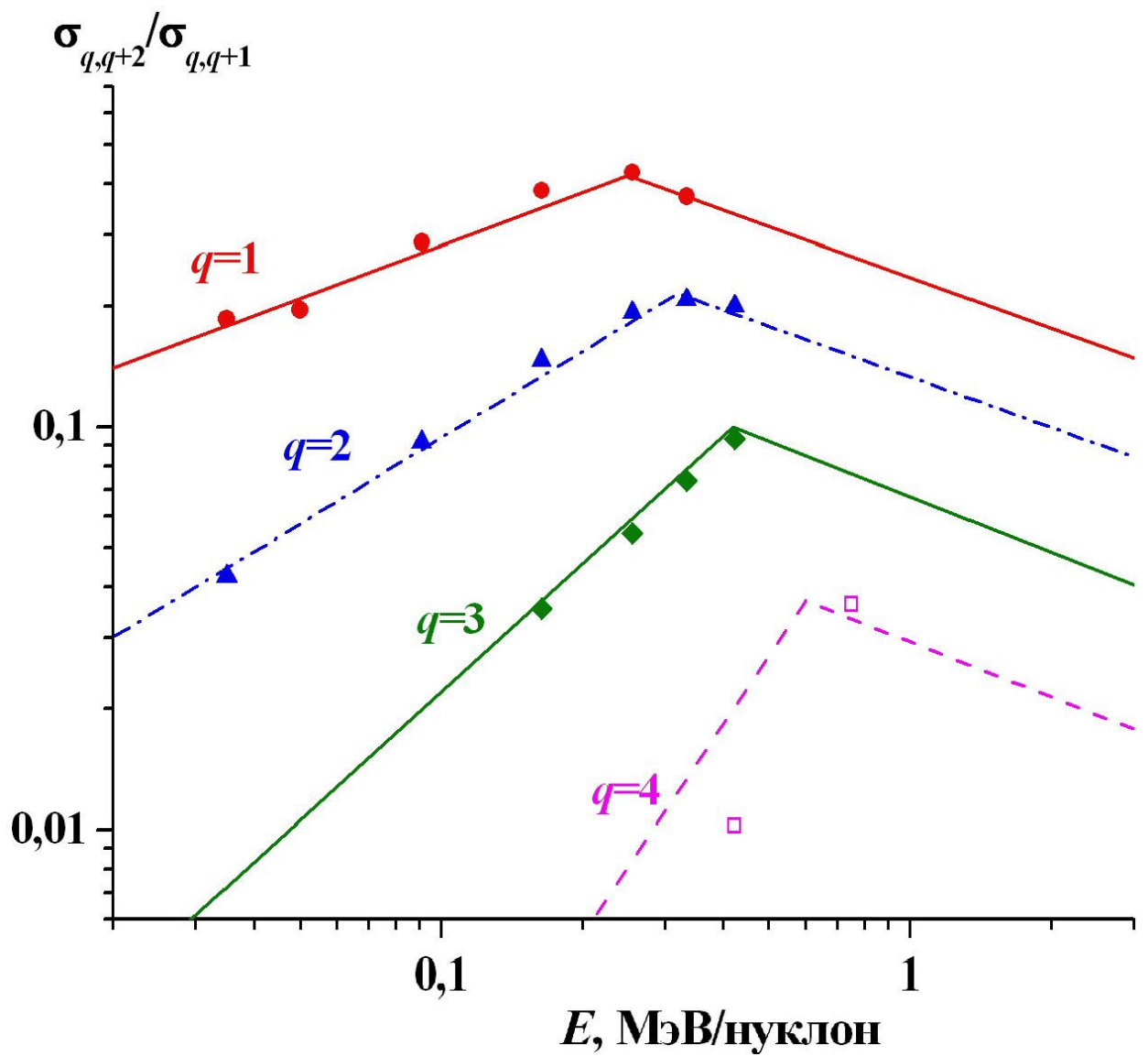


Рис. 22. Отношение сечений $\sigma_{q,q+2}(E,Z,Z_t)/\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ для ускоренных ионов N^{q+} в азоте. Символы – экспериментальные данные [196]. Сплошные, пунктирные и штрихпунктирные линии – результаты оценки. Значения q указаны возле линий.

значений энергии необходимо учитывать процессы захвата и потери двух электронов. Требуется расчеты зарядовых распределений ускоренных ионов и сравнение результатов вычислений с имеющимися экспериментальными данными.

Результаты расчетов параметров равновесного зарядового распределения ионов в пучке [207] проводились с учетом ($\sigma_{q,q\pm 2} \neq 0$) и без учета ($\sigma_{q,q\pm 2} = 0$) процессов захвата и потери двух электронов. Эти процессы, увеличивая и уменьшая заряд ускоренного иона, действуют в разных направлениях. Результаты показали, что величина \bar{q}/Z в расчетах с $\sigma_{q,q\pm 2} \neq 0$ и $\sigma_{q,q\pm 2} = 0$ изменяется менее чем на 1%. Параметр d (1.6) изменяется сильнее, и эти изменения зависят от области значений энергии, заряда ядра иона Z и заряда ядра атома мишени Z_t .

Зависимость ширины равновесного зарядового распределения d ускоренных ионов бора в углероде (рис. 23) показывает, что d – медленно изменяющаяся функция в области значений энергии $0.01 \leq E \leq 1$ МэВ/нуклон. Уменьшение d в случае медленных столкновений ($E \leq 0.01$ МэВ/нуклон) объясняется нейтрализацией ионов в пределе малых скоростей. В случае быстрых столкновений ($E > 1$ МэВ/нуклон) ширина зарядового распределения ионов в пучке уменьшается из-за “обдирки” иона. Учет процессов захвата и потери двух электронов увеличивает ширину равновесного зарядового распределения ускоренных ионов. Эти уточнения заметно улучшают согласие результатов расчета с экспериментальными данными в области $E \leq 0.3$ МэВ/нуклон. Расчеты параметра d по программе ETASNA [119] согласуются с экспериментальными данными только в случае быстрых столкновений. Оценка ширины зарядового распределения по программе CASP5 [138] дает результаты, близкие к экспериментальным данным в области $0.01 \leq E \leq 1$ МэВ/нуклон, но за пределами этой области согласие ухудшается.

В целях исследования влияния процессов потери и захвата двух электронов на ширину равновесного зарядового распределения ионов в пучке были проведены расчеты разности $\Delta d = d - d'$, где d и d' – параметры, рассчитанные с учетом и без учета

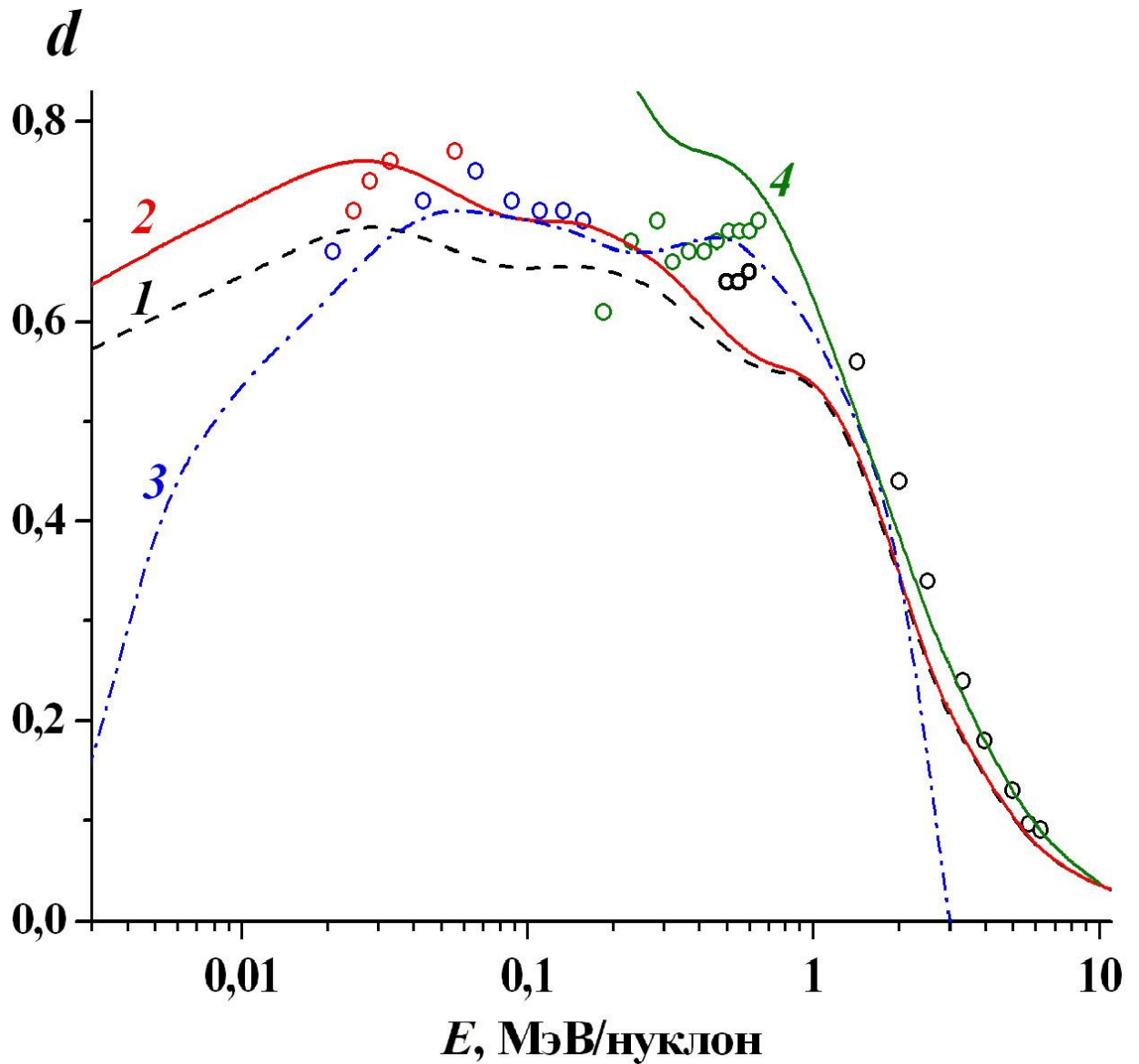


Рис. 23. Зависимость ширины зарядового распределения d ускоренных ионов бора в углероде от энергии ионов: 1 – без учета $\sigma_{q,q\pm 2}$; 2 – с учетом $\sigma_{q,q\pm 2}$; 3 – результаты расчета по программе CASP5 [138]; 4 – результаты расчета по программе ETASNA [119], о – экспериментальные данные разных авторов [195].

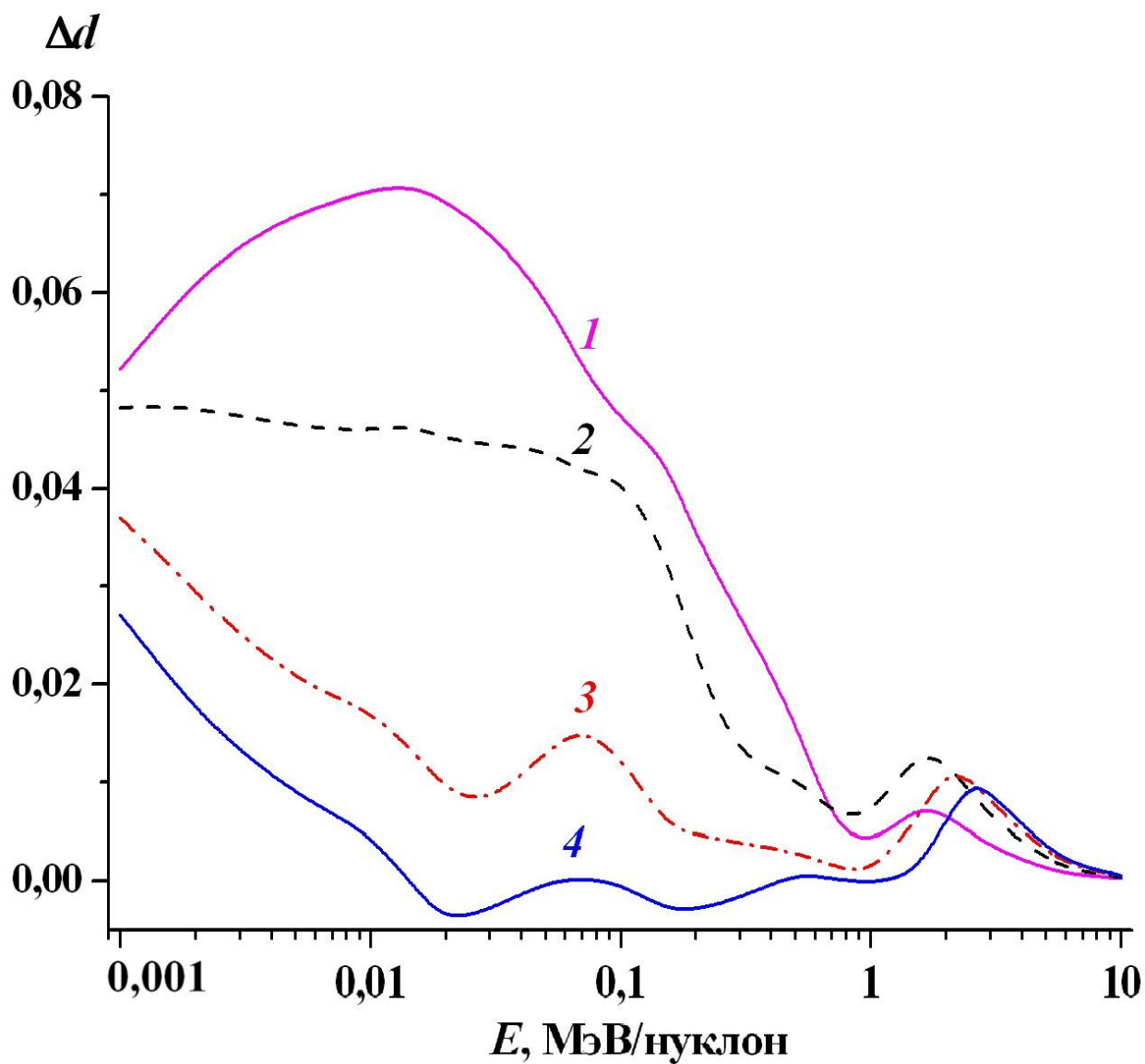


Рис. 24. Зависимость изменения ширины равновесного зарядового распределения Δd от энергии ускоренных ионов при учете вклада процессов захвата и потери двух электронов в углероде для ионов: 1 – бора; 2 – углерода; 3 – кислорода; 4 – неона.

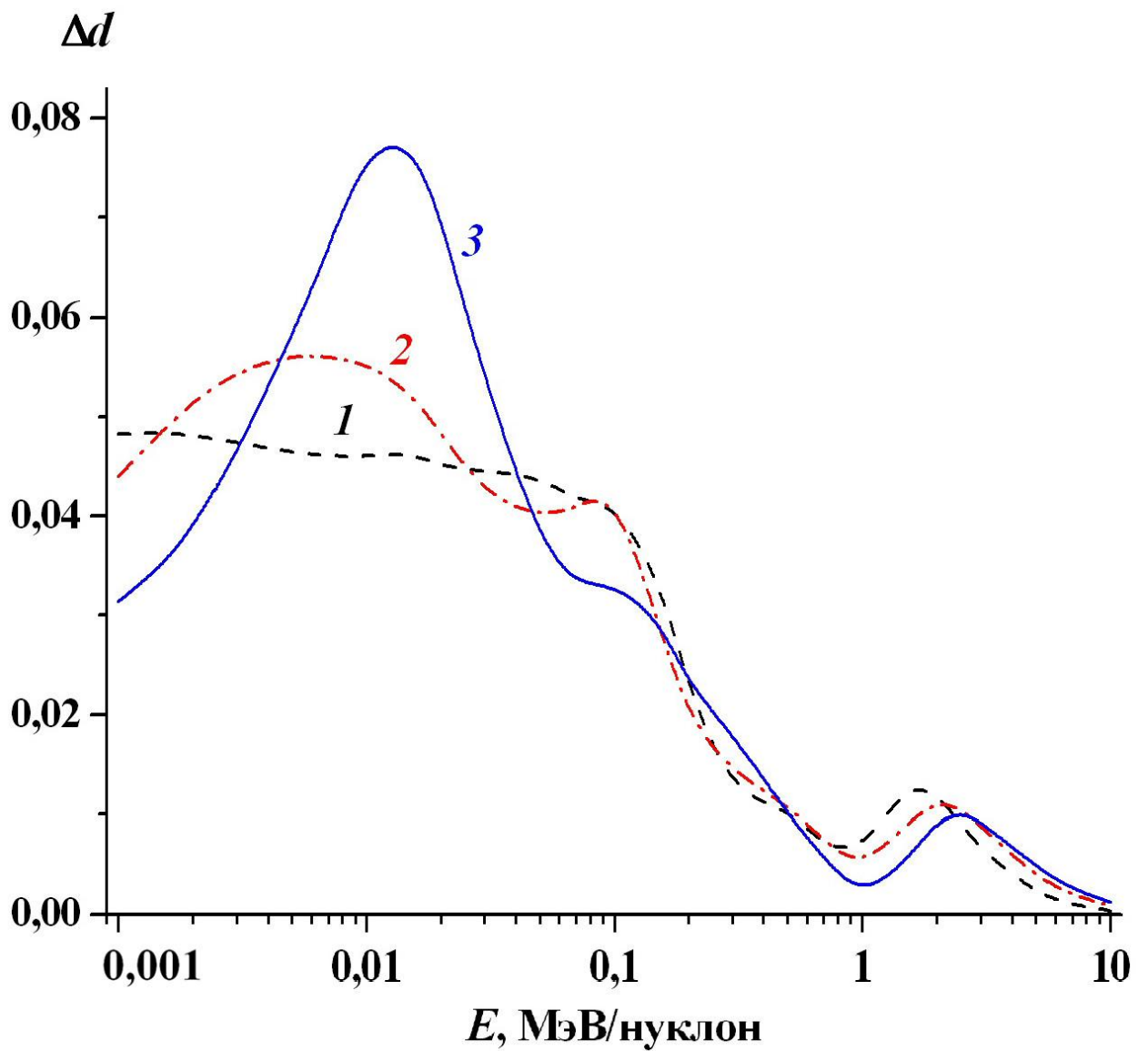


Рис. 25. Зависимость изменения ширины равновесного зарядового распределения Δd от энергии ускоренных ионов при учете вклада процессов захвата и потери двух электронов для ионов углерода в различных средах: 1 – в углероде; 2 – в алюминии; 3 – в никеле.

$\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_t)$ соответственно. Изменение ширины равновесного зарядового распределения ионов в пучке Δd при учете процессов захвата и потери двух электронов различными ускоренными ионами в углероде (рис. 24) показывает, что в случае быстрых столкновений $E > 1$ МэВ/нуклон кратные процессы мало изменяют ширину зарядового распределения. Это объясняется убыванием отношения (3.14) при увеличении E . В случае более медленных столкновений $E < 1$ МэВ/нуклон кратные процессы приводят к уширению зарядового распределения ($\Delta d > 0$). С уменьшением Z эти изменения увеличиваются, и для ионов бора с энергией $E \approx 0.02$ МэВ/нуклон отношение $\Delta d/d$ достигает 7–8%. С увеличением Z_t изменение ширины равновесного зарядового распределения ионов в пучке за счет учета процессов захвата и потери ионом двух электронов возрастает (рис. 25). Уширение равновесного зарядового распределения за счет процессов потери и захвата двух электронов наиболее существенно в области $E < 0.3$ МэВ/нуклон (рис. 24 и 25). В случае быстрых столкновений $E > 1$ МэВ/нуклон процессы потери и захвата двух электронов мало изменяют параметры зарядового распределения (1.6), что объясняется убыванием отношения (3.14) при увеличении E .

3.6. Сечения потери и захвата электронов в твердой мишени

Для оценки сечений потери и захвата электрона в твердой однокомпонентной мишени $\sigma_{q,q\pm 1}^s(E, Z, Z_t)$ вводится коэффициент $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \geq 1$ [208–211], на который умножаются все сечения потери и делятся все сечения захвата электрона в газах:

$$\sigma_{q,q+1}^s(E, Z, Z_t, C_{g-s}) = \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t) \times C_{g-s}(E, Z, Z_t), \quad (3.15)$$

$$\sigma_{q,q-1}^s(E, Z, Z_t, C_{g-s}) = \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) / C_{g-s}(E, Z, Z_t). \quad (3.16)$$

В этом приближении сечения перезарядки ускоренных ионов в твердом веществе отличаются от сечений в газах только масштабным множителем $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$, который не зависит от заряда иона q . В случае быстрых столкновений различие средних зарядов иона в твердой и газообразной мишенях уменьшается (рис. 5), и в пределе $E \rightarrow \infty$ средний заряд

иона в твердой мишени, как и в газах, равен заряду ядра иона Z [41, 42]. В области быстрых столкновений отличия между сечениями перезарядки в твердой и газообразной мишенях становятся меньше, и коэффициент, учитывающий эффект плотности, $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ удовлетворяет соотношению:

$$C_{g-s}(E, Z, Z_t) \rightarrow 1 \text{ при } E \rightarrow \infty. \quad (3.17)$$

Введение одинакового по величине масштабного множителя для сечений потери (3.15) и захвата (3.16) одного электрона [208–211] является некоторым упрощением. На основе экспериментальных данных [103] было получено, что для ускоренных ионов углерода в углероде при $E = 3$ МэВ/нуклон поправка в сечения при замене газа твердым веществом составляет $C_{g-s} \approx 1.6$ для сечения $\sigma_{5,6}$, а для сечения $\sigma_{6,5}$ $C_{g-s} \approx 1.2$. Учесть эту разницу в сечениях перезарядки и обобщить приближения (3.15) и (3.16) сложно из-за недостатка экспериментальных сечений для твердой мишени. В случае, когда вводятся два независимых между собой коэффициента – один для сечения потери электрона (3.15), а другой для сечения захвата электрона (3.16) – они сильно коррелируют между собой, и эта корреляция мешает однозначному определению их величины. С другой стороны, если на основе экспериментальных данных во всем диапазоне энергии зафиксировать отношение между коэффициентами, учитывающими эффект плотности, проявляющийся в сечениях потери и захвата электрона, и добавить в (3.15) или в (3.16) дополнительный множитель, учитывающий эту разницу, то нарушится предельное соотношение (3.17). Таким образом, введение одинакового коэффициента в оба уравнения (3.15) и (3.16) необходимо для однозначного определения величины $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ и для выполнения асимптотического свойства (3.17).

Зависимость от энергии E сечений потери (3.15) и захвата (3.16) электрона в твердой мишени имеет качественно тот же характер, что и зависимость сечений перезарядки в газах (3.1), (3.3), (3.8). Изменения сечений в твердой мишени по сравнению

с сечениями в газах только количественные, относятся к области промежуточного значения энергии.

Из системы уравнений (1.5) с сечениями (3.15), (3.16) вычисляются зарядовые фракции $F_q^s(E, Z, Z_t, C_{g-s})$ и средний равновесный заряд ускоренных ионов в пучке

$$\bar{q}^s(E, Z, Z_t, C_{g-s}) = \sum_q q F_q^s(E, C_{g-s}) \quad (3.18)$$

в твердом однокомпонентном веществе, состоящем из атомов с зарядом ядра Z_t . Значение $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ вычисляется из минимума:

$$\min \left[\bar{q}^s(C_{g-s}) - \bar{q}^{\text{solid}} \right], \quad (3.19)$$

где \bar{q}^{solid} – средний равновесный заряд ускоренных ионов в твердой мишени (1.11).

Вычисленное значение коэффициента $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ в зависимости от энергии представляет собой пик в диапазоне от 0.1 до 0.2 МэВ/нуклон. Максимальное значение $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ в этой области увеличивается с ростом заряда ядра иона Z , и для разных атомов мишени составляет от 2.7 до 3.0 для ионов неона (рис. 26) и от 9.0 до 13.0 для ионов аргона (рис. 27). Зависимость коэффициента $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ от энергии качественно объясняется зависимостью разности средних зарядов ускоренных ионов в твердой и газообразной мишенях:

$$\Delta q_{g-s} = \bar{q}^{\text{solid}} - \bar{q}^{\text{gas}}, \quad (3.20)$$

где \bar{q}^{solid} , \bar{q}^{gas} – средний заряд иона в твердой (1.11) и газообразной (1.10) мишенях соответственно. Изменение среднего заряда в пучке ионов при замене газа твердой мишенью (3.20) ($\Delta q_{g-s} \geq 1$) характеризует влияние эффекта плотности на сечения потери (3.15) и захвата (3.16) электрона. Разность (3.20) увеличивается с возрастанием Z и достигает максимального значения в той же области значений энергии от 0.1 до 0.2 МэВ/нуклон (рис. 28). Для быстрых столкновений удовлетворяется условие:

$$\Delta q_{g-s} \rightarrow 0 \text{ при } E > 10 \text{ МэВ/нуклон}, \quad (3.21)$$

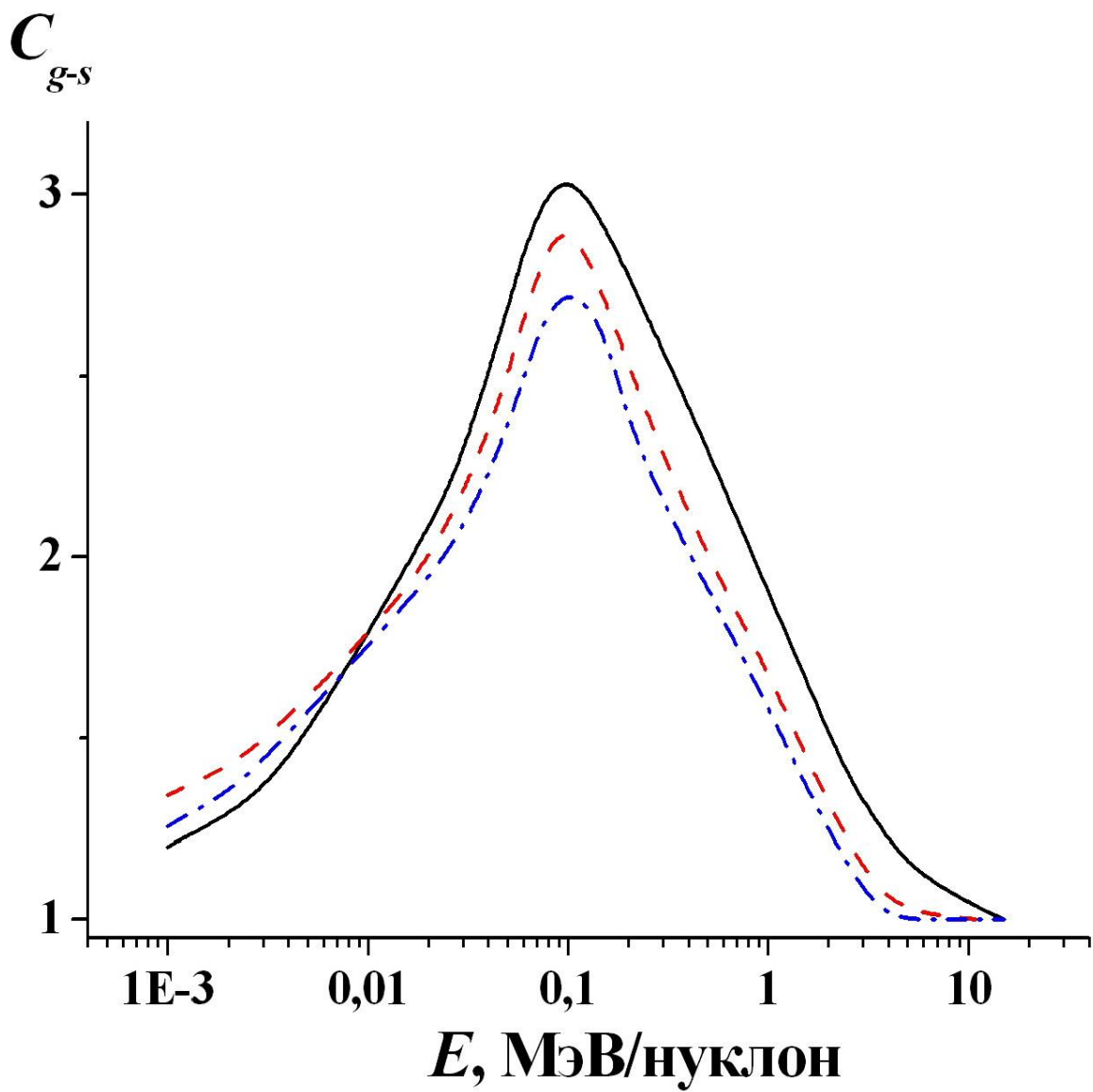


Рис. 26. Зависимость от энергии коэффициента, учитывающего эффект плотности, для ускоренных ионов неона ($Z = 10$). Результаты расчетов в различных средах: сплошная линия – в углероде ($Z_t = 6$); пунктирная – в никеле ($Z_t = 28$); штрихпунктирная – в золоте ($Z_t = 79$).

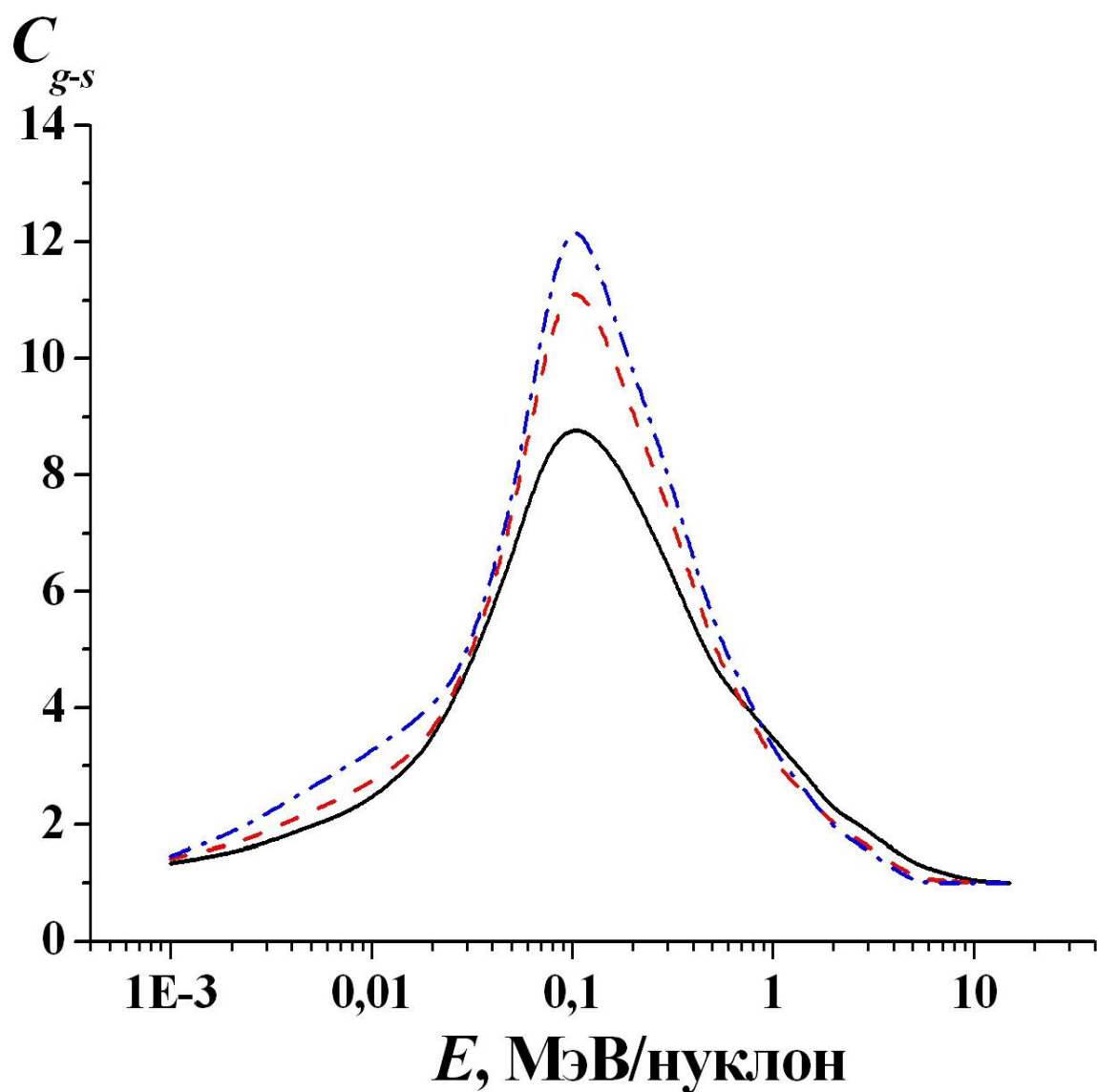


Рис. 27. Зависимость от энергии коэффициента, учитывающего эффект плотности, для ускоренных ионов аргона ($Z = 18$). Результаты расчетов в различных средах: сплошная линия – в углероде ($Z_t = 6$); пунктирная – в никеле ($Z_t = 28$); штрихпунктирная – в золоте ($Z_t = 79$).

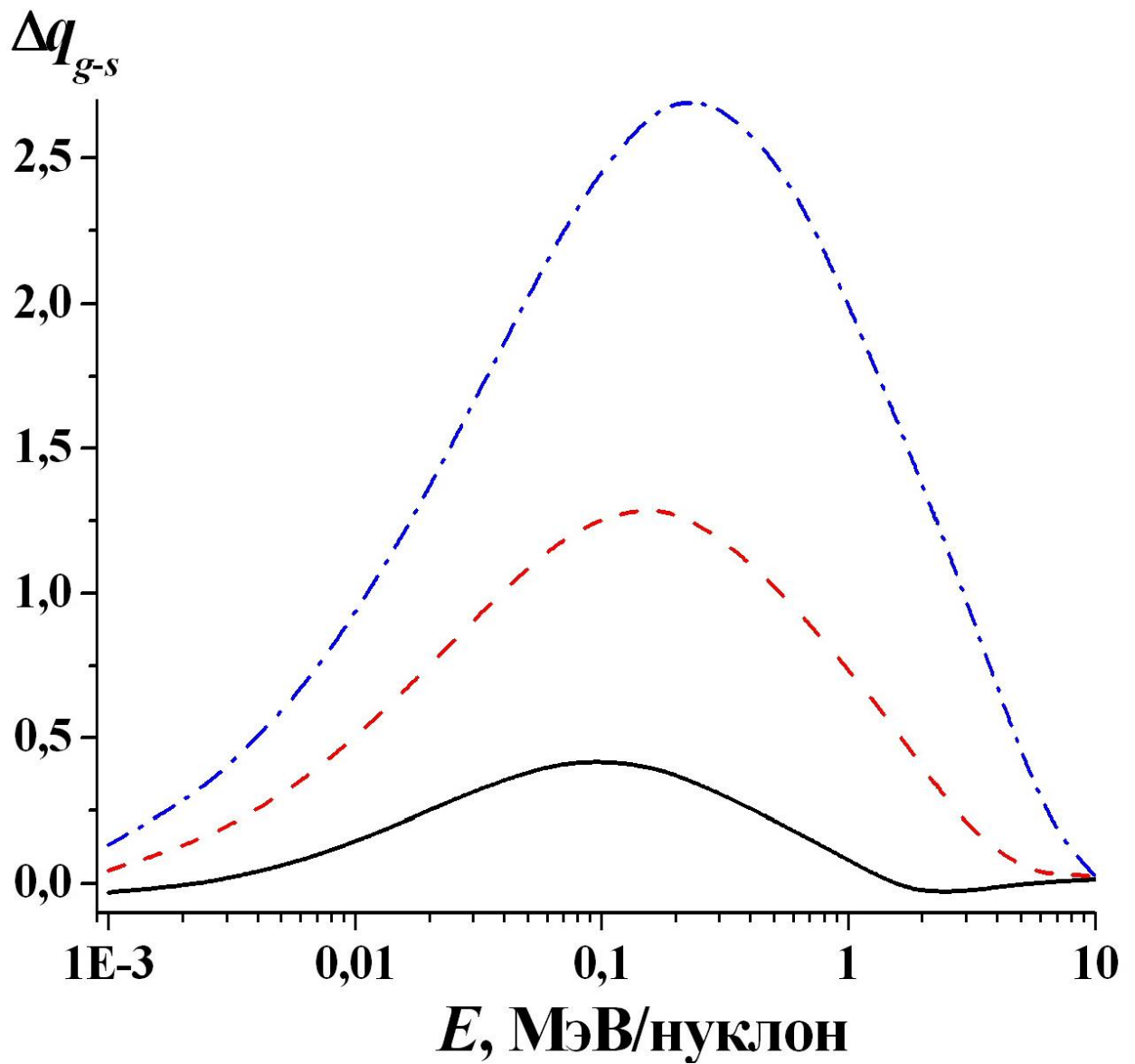


Рис. 28. Зависимость от энергии разности средних зарядов ускоренных ионов (3.20) в углероде ($Z_t = 6$). Результаты расчетов: сплошная линия – ионы углерода ($Z = 6$); пунктирная – ионы неона ($Z = 10$); штрихпунктирная – ионы аргона ($Z = 18$).

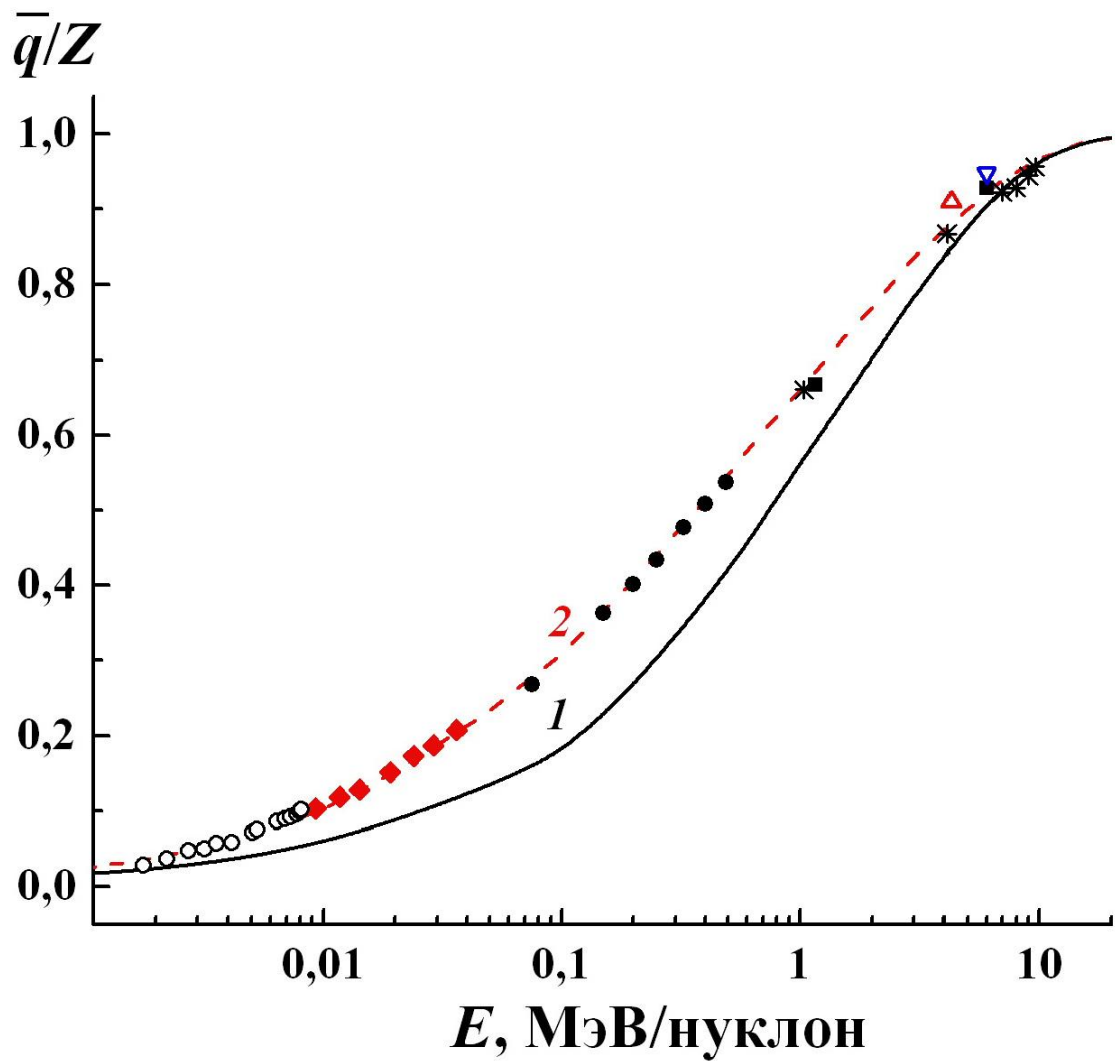


Рис. 29. Зависимость среднего заряда ускоренных ионов аргона ($Z = 18$) в углероде ($Z_t = 6$). Результаты расчетов: 1 – без учета поправки на эффект плотности; 2 – с учетом поправки на эффект плотности. Экспериментальные данные: (◆) [114]; (△) [117]; (■) [212]; (○) [213]; (*) [214]; (●) [215]; (▽) [216].

из которого следует соотношение (3.17).

Средний заряд ускоренных ионов аргона в углероде, вычисленный без поправки на эффект плотности ($C_{g-s} = 1$), во всем энергетическом диапазоне заметно меньше экспериментального (рис. 29). Наибольшие отличия заметны в области энергии ионов $E \approx 0.1$ МэВ/нуклон. Учет в расчетах эффекта плотности $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \geq 1$ в (3.15) и (3.16) приводит к хорошему согласию вычисленных результатов и экспериментальных данных.

Если для одной из равновесных зарядовых фракций q есть экспериментальные данные $F_q^{\text{exp}}(E)$, то при определении $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ вместо (3.19) можно использовать другой критерий [210, 211]:

$$\min[F_q^s(E, C_{g-s}) - F_q^{\text{exp}}(E)]. \quad (3.22)$$

Тогда, используя (3.22), сначала находят величину $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$, затем вычисляют сечения (3.15) и (3.16), из которых с помощью уравнений перезарядки (1.5) определяют остальные равновесные зарядовые фракции ионов в пучке.

Результаты расчетов равновесных зарядовых фракций ускоренных ионов азота в графите (рис. 30) демонстрируют необходимость учета эффекта плотности. Максимум зависимости равновесной зарядовой фракции $F_q^s(E)$ от энергии E достигается, когда заряд иона q близок к среднему равновесному заряду ($q \approx \bar{q}$). Учет эффекта плотности в равновесных зарядовых распределениях ионов приводит к тому, что максимум функции $F_q^s(E)$ достигается в твердой мишени при более медленных столкновениях, чем в газе. Ускоренный ион в твердой мишени теряет больше электронов, и его заряд в пучке по сравнению с газами возрастает. Использование в соотношении (3.22) экспериментальных зарядовых фракций F_q^{exp} для $q = 1$ и $q = 3$ дает одинаковый в пределах нескольких процентов результат, что соответствует предположению о независимости коэффициента $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ в (3.15) и (3.16) от заряда ускоренного иона q .

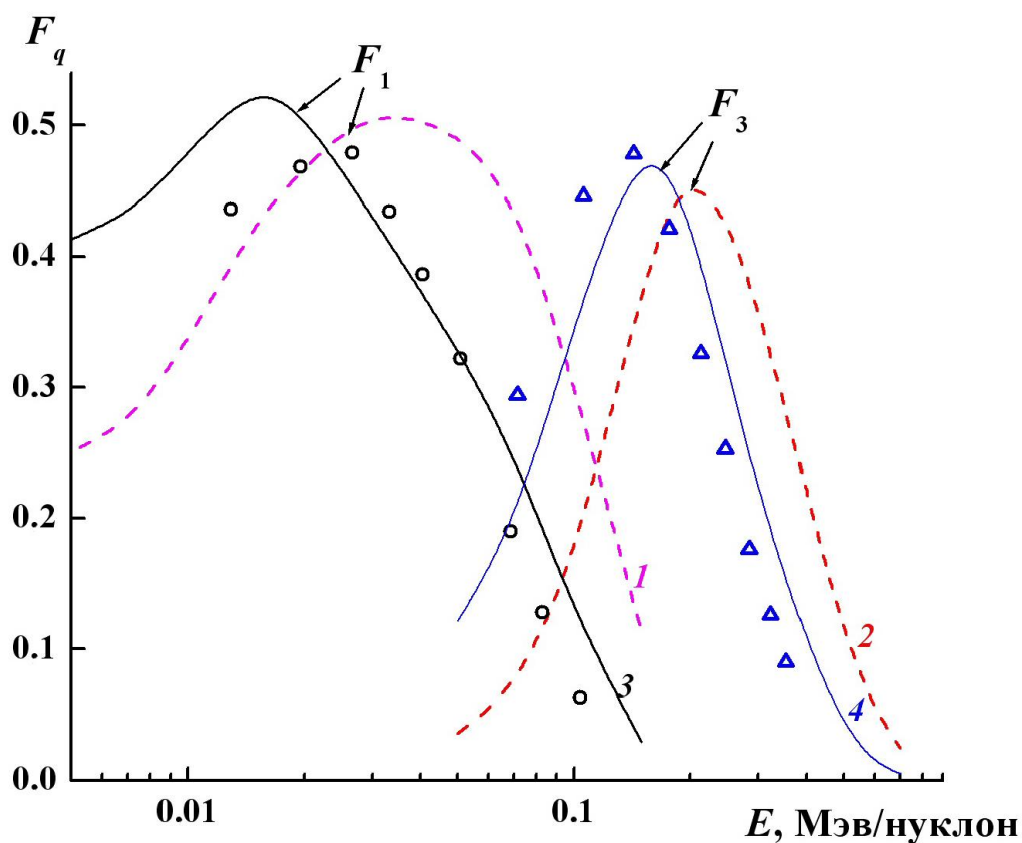


Рис. 30. Относительное количество ускоренных ионов N^+ и N^{3+} в равновесном зарядовом распределении в углероде. Результаты расчетов без учета поправки на эффект плотности: 1 – ионы N^+ ; 2 – ионы N^{3+} . Оценки с учетом поправки на эффект плотности с помощью соотношения (3.22): 3 – ионы N^+ ; 4 – ионы N^{3+} . Экспериментальные данные: (o) – ионы N^+ [114]; Δ – ионы N^{3+} [115].

В случае многокомпонентной мишени вместо эмпирического значения среднего заряда иона в однокомпонентном материале $\overline{q}^{\text{solid}}$ в формуле (3.19) используется экспериментальное значение среднего заряда или эмпирическая оценка среднего заряда быстрого иона из отношения неупругих потерь энергии (1.12). Если материал мишени состоит преимущественно из элементов с близкими значениями Z_t , можно считать, что коэффициент C_{g-s} слабо зависит от Z_t :

$$C_{g-s}(E, Z, Z_t) \approx C_{g-s}^{\text{cel}}(E, Z), \quad (3.23)$$

и тогда в соответствии с принципом аддитивности для сечений перезарядки в многокомпонентной твердой мишени получаем:

$$\begin{aligned} \sigma_{q,q+1}^{\text{cel}}(E, Z) &= \sum_j \rho_j \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t^j) / \sum_j \rho_j \times C_{g-s}^{\text{cel}}(E, Z), \\ \sigma_{q,q-1}^{\text{cel}}(E, Z) &= \sum_j \rho_j \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t^j) / \sum_j \rho_j / C_{g-s}^{\text{cel}}(E, Z), \end{aligned} \quad (3.24)$$

где индекс j относится к атомам, входящим в состав мишени, ρ_j – плотность каждого сорта атомов мишени. Используя величины сечений (3.24), из системы уравнений (1.5) можно вычислить равновесные зарядовые фракции $F_q^{\text{cel}}(E, Z)$ и средний равновесный заряд ускоренных ионов в пучке, проходящем через многокомпонентную мишень:

$$\overline{q}^{\text{cel}}(E, Z, C_{g-s}) = \sum_q q F_q^{\text{cel}}(E, Z). \quad (3.25)$$

Если известно экспериментальное значение среднего равновесного заряда ускоренных ионов в многокомпонентной мишени $q_{\text{exp}}^{\text{cel}}(E, Z)$, то значение $C_{g-s}^{\text{cel}}(E, Z)$ для этого материала вычисляется из минимума:

$$\min\{\overline{q}^{\text{cel}}(C_{g-s}) - q_{\text{exp}}^{\text{cel}}(E)\}. \quad (3.26)$$

Сравнение вычисленного среднего равновесного заряда ускоренных ионов азота в целлулоиде (3.23) с экспериментальными данными (рис. 31) показывает значительные количественные отличия в расчетах с учетом и без учета поправки на эффект плотности. Учет этого эффекта приводит к заметному улучшению результатов расчета на основе

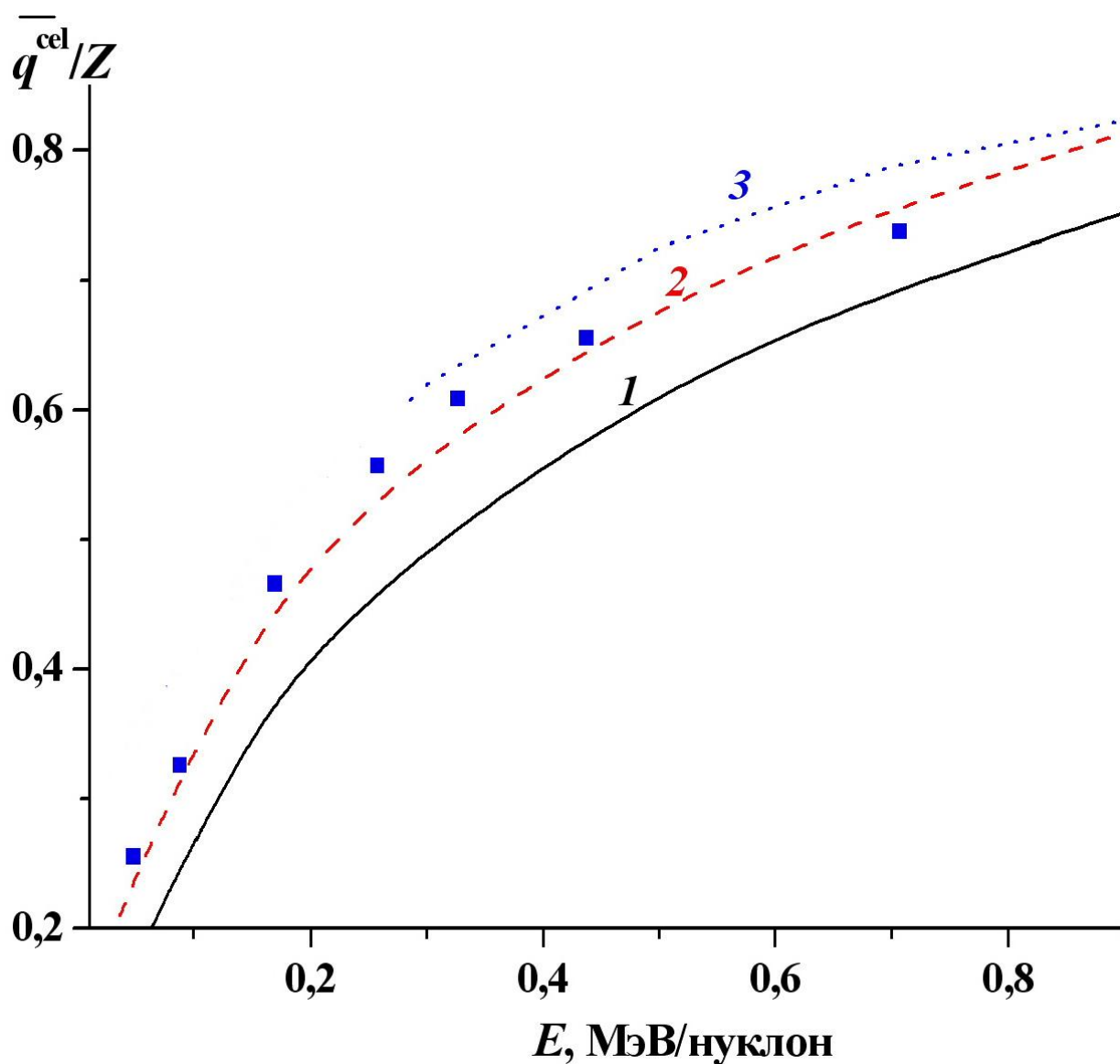


Рис. 31. Зависимость среднего равновесного заряда ускоренных ионов азота ($Z = 7$) в целлулоиде от энергии. Результаты расчета: 1 – без учета поправки на эффект плотности; 2 – с поправкой на эффект плотности (3.26); 3 – результаты расчета $q_{\text{exp}}^{\text{cel}}(E, Z)$ по программе SRIM-2013 (1.12). Экспериментальные данные (■) из [112].

сечений (3.24) и экспериментальных данных. На рисунке также указан средний заряд ускоренных ионов (1.12) в предположении, что потери энергии ионов в веществе пропорциональны квадрату среднего заряда. Это приближение применимо, если энергия ионов E больше энергии, соответствующей максимуму потерь энергии E_S (для ионов азота в целлулоиде $E_S \approx 0.4$ МэВ/нуклон).

Предложенный метод позволяет вычислить зарядовые фракции ускоренных ионов в твердой мишени, состоящей как из атомов одного сорта, так и из смеси различных элементов. В расчетах используются сечения перезарядки в газах $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ и экспериментальная зависимость среднего равновесного заряда иона или одна из равновесных зарядовых фракций. Расчеты показали, что разница значений средних равновесных зарядов ионов ускоренных ионов азота в целлулоиде, вычисленных с помощью экспериментальных зарядовых фракций (3.20) и экспериментального среднего заряда (3.24), составляет менее 1%, что объясняется близкими значениями $C_{g-s}(E,Z,Z_t)$ для элементов, входящих в состав мишени.

3.7. Интерполяция сечений в газах для произвольного заряда ядра атома мишени

Для оценки сечений в газе при промежуточных значениях заряда ядра атома мишени Z_t применяется интерполяция [208–211]:

$$\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t) = \sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{t1}) + A_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t) [\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{t2}) - \sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{t1})]$$

для $Z_{t1} < Z_t < Z_{t2}$, (3.27)

где Z_{t1} и Z_{t2} – заряды ядра атома мишени ($Z_{t1} < Z_{t2} = 2, 7, 10, 18, 36, 54$), наиболее близкие к значению Z_t , $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{t1})$ и $\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{t2})$ – экспериментальные величины сечений, а $A_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_t)$ – безразмерный коэффициент. Правило сумм (1.25), учитывающее вклад возбужденных состояний атома мишени в сечение потери электрона быстрым ионом, приводит к тому, что зависимость сечения $\sigma_{q,q+1}$ от Z_t – монотонная функция. В этом

случае коэффициент интерполяции не зависит от энергии E и заряда ядра Z иона и представляется в виде:

$$A_{q,q+1}(E,Z,Z_t) = (Z_t - Z_{t1}) / (Z_{t2} - Z_{t1}). \quad (3.28)$$

При определении коэффициентов интерполяции для сечения захвата одного электрона $A_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ учитывается, что зависимость $\sigma_{q,q-1}$ от Z_t может быть немонотонной вследствие оболочечной электронной структуры атомов [68]. В связи с этим при оценке $A_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ используют расчеты, основанные на приближениях, учитывающих оболочечную структуру атома мишени (ОБК, первое борновское приближение или приближение искаженных волн CDW). Тогда коэффициент интерполяции в случае сечения захвата электрона быстрым ионом $\sigma_{q,q+1}$ представляется в виде:

$$A_{q,q-1}(E,Z,Z_t) = \frac{\sigma_{q,q-1}^{\text{ОБК}}(E,Z,Z_t) - \sigma_{q,q-1}^{\text{ОБК}}(E,Z,Z_{t1})}{\sigma_{q,q-1}^{\text{ОБК}}(E,Z,Z_{t2}) - \sigma_{q,q-1}^{\text{ОБК}}(E,Z,Z_{t1})} \text{ при } E \geq 1 \text{ МэВ/нуклон}, \quad (3.29)$$

где $\sigma_{q,q-1}^{\text{ОБК}}(E,Z,Z_t)$ – сечение захвата одного электрона, вычисленное в приближении Оппенгеймера–Бринкмана–Крамерса. Так как коэффициент интерполяции (3.29) зависит от отношения сечений, вычисленных в одинаковых приближениях, то погрешности расчета, связанные с выбором теоретической модели и отличием теоретических и экспериментальных сечений, на величину $A_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ влияют слабо. В области значений энергии, где нарушаются теоретические модели, используемые для расчета сечения захвата электрона быстрыми ионами, применяется линейная интерполяция:

$$A_{q,q-1}(E,Z,Z_t) = (Z_t - Z_{t1}) / (Z_{t2} - Z_{t1}) \text{ при } E \leq 0.1 \text{ МэВ/нуклон}. \quad (3.30)$$

В области энергии от 0.1 до 1.0 МэВ/нуклон коэффициент интерполяции $A_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ считается непрерывной и медленно изменяющейся функцией заряда ядра атома мишени.

При интерполяции сечений перезарядки в твердой мишени удобно сначала получить коэффициенты C_{g-s} для ближайших значений Z_t , соответствующих сечениям в инертных газах ($Z_t = 2, 10, 18, 36, 54$). В этом случае зависимость C_{g-s} от Z_t – плавно

изменяющаяся функция, так как эмпирический средний заряд в газах (1.10) и в твердой мишени (1.11) не учитывает оболочечную структуру атома мишени и плавно зависит от Z_t . И только после этого следует провести интерполяцию сечений перезарядки (3.27) в твердой мишени для выбранного значения Z_t . Если поменять местами последовательность применения процедур, т.е. получить сначала сечения перезарядки в газе при выбранном Z_t и только затем учитывать эффект плотности, то коэффициент, учитывающий эффект плотности для сечений перезарядки в твердой мишени $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ становится осциллирующей функцией заряда ядра атома мишени Z_t [208, 211].

3.8. Компьютерная программа расчета сечений перезарядки ускоренных

ИОНОВ

Для вычисления сечений перезарядки ускоренных ионов с использованием предложенных в диссертации методов была написана компьютерная программа [217]. Программа Charge-Changing Cross Sections (CCCS) предназначена для расчетов равновесных зарядовых распределений в пучке ионов с зарядом ядра Z ($5 \leq Z \leq 18$) и энергией от 0.01 до 20 МэВ/нуклон в многокомпонентной газообразной или твердой мишени, состоящей из атомов с зарядом ядра Z_t ($Z_t \leq 99$). Программа вычисляет сечения потери и захвата одного $\sigma_{q, q \pm 1}(E, Z, Z_t)$ и двух $\sigma_{q, q \pm 2}(E, Z, Z_t)$ электронов и делает поправку на плотность для сечений перезарядки в твердой среде. Программа также вычисляет равновесные зарядовые фракции F_q , средний равновесный заряд, параметры ширины d и асимметрии s равновесного зарядового распределения (1.6) в ионном пучке, а также потери энергии ускоренного иона в процессе перезарядки.

В случае мишени, состоящей из нескольких элементов, используется свойство аддитивности:

$$\sigma_{q,k}(E, Z) = \sum_j \sigma_{q,k}(E, Z, Z_t^j) \rho_j / \rho , \quad (3.31)$$

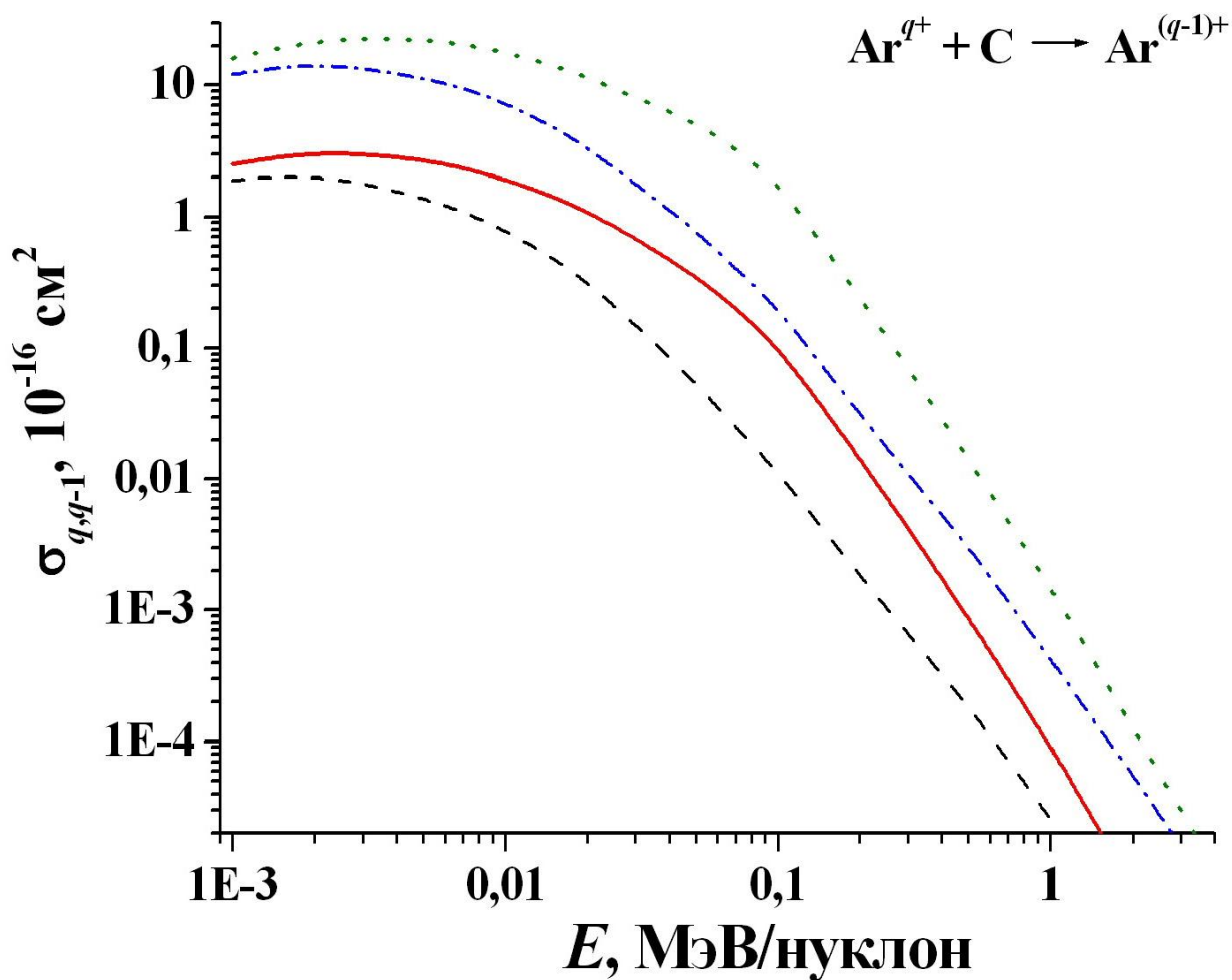


Рис. 32. Результаты расчета сечения захвата одного электрона ускоренными ионами аргона Ar^{q+} в углероде с учетом поправки на эффект плотности: пунктирная линия – ионы Ar^{+} ; штрихпунктирная – ионы Ar^{5+} . Результаты расчетов без учета поправки на эффект плотности сечения захвата одного электрона ионами аргона Ar^{q+} в углероде: сплошная линия – ионы Ar^{+} ; линия, обозначенная точками, – ионы Ar^{5+} .

где ρ_j – плотность атомов мишени с зарядом ядра Z_t^j в единицах атом/см³, $\rho = \sum_j \rho_j$.

Для ускоренных ионов с зарядом ядра $Z \leq 18$ процессы перезарядки важны в области значений энергии $E \leq 20$ МэВ/нуклон. Чтобы исключить погрешности, связанные с этим ограничением и предусмотреть возможность использования в будущем этой программы для ионов с зарядом ядра $Z > 18$, в программе CCCS была выполнена экстраполяция всех сечений до 100 МэВ/нуклон.

При учете эффекта плотности сечение захвата одного электрона уменьшается (3.16) во всем диапазоне значений энергии (рис. 32). Когда эффект плотности не учитывается, для сечения захвата одного электрона можно указать две области энергии. В области медленных столкновений ($E < 0.1$ МэВ/нуклон), в которой $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \approx \text{const}$, захват электрона происходит в поле двух кулоновских центров. В области быстрых столкновений ($E > 0.1$ МэВ/нуклон) сечение $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ уменьшается при увеличении энергии на несколько порядков. Учет эффекта плотности с помощью коэффициента $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$, который достигает максимального значения при $E \approx 0.1$ МэВ/нуклон (рис. 26 и 27), приводит к изменению зависимости сечения $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ от энергии. Эта зависимость по-прежнему монотонная, и дополнительные минимумы не формируются, но более быстрое уменьшение $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ с увеличением энергии в твердой мишени начинается при энергии, меньшей, чем в газе. Таким образом, в случае сечения захвата одного электрона в твердой мишени уже нельзя строго разделить весь диапазон значений энергии на области медленных, где $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \approx \text{const}$, и быстрых столкновений. С увеличением энергии отличия сечений $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$, вычисленных с учетом и без учета эффекта плотности, уменьшаются, что объясняется асимптотическим свойством (3.17). Указанные закономерности сохраняются с увеличением заряда ускоренного иона q . Более того, так как в предложенной теоретической модели коэффициент $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ не зависит от q , соотношение между величинами сечений для ионов с разными зарядами q не

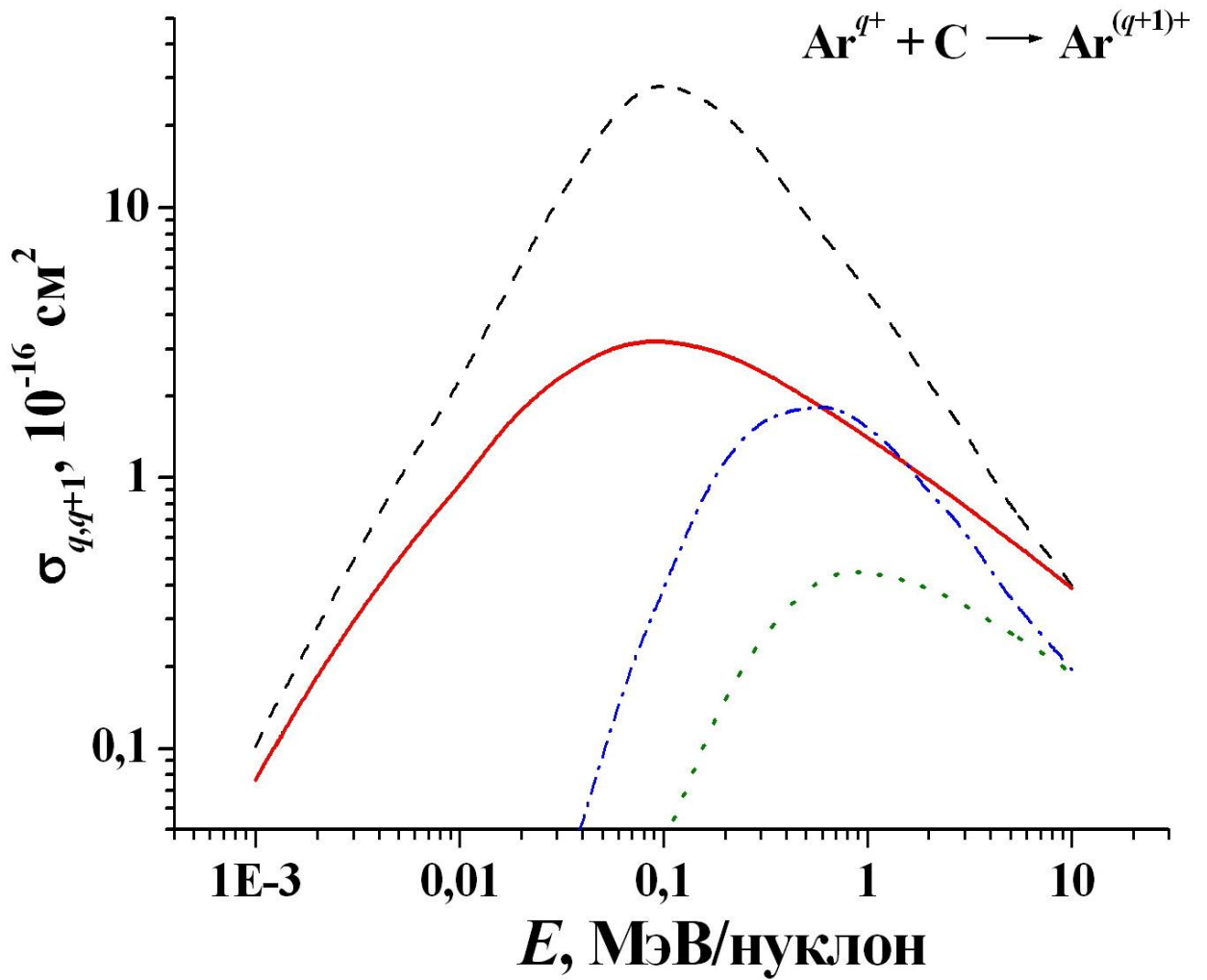


Рис. 33. Результаты расчета сечения потери одного электрона ускоренными ионами аргона Ar^{q+} в углероде с учетом поправки на эффект плотности: пунктирная линия – ионы Ar^+ ; штрихпунктирная – ионы Ar^{5+} . Результаты расчетов без учета поправки на эффект плотности сечения захвата одного электрона ионами аргона Ar^{q+} в углероде: сплошная линия – ионы Ar^+ ; линия, обозначенная точками, – ионы Ar^{5+} .

меняется, т.е. отношение $\sigma_{5,4}/\sigma_{1,0}$ на рис. 32 в твердой мишени будет при любом значении E таким же, как в газе при этой энергии.

При учете эффекта плотности сечение потери одного электрона увеличивается (3.15) во всем диапазоне значений энергии (рис. 33). Максимум сечения $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ становится более выраженным и при $q \geq 3$ смещается в сторону меньшего значения энергии. Этот сдвиг можно интерпретировать как уменьшение энергии связи активного электрона в ионе за счет влияния возбужденных состояний иона. Ион до следующего столкновения с атомом мишени не успевает вернуться в основное состояние, а энергия связи в возбужденном состоянии меньше, чем в основном. Сечение $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ (рис. 33) имеет такие же свойства, как и сечение $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ (рис. 32). С увеличением энергии E различия сечений $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$, вычисленных с учетом и без учета эффекта плотности, уменьшаются (3.17). Также сохраняются соотношения для сечений ионов с разными зарядами q , и отношение $\sigma_{5,6}/\sigma_{1,2}$ (рис. 33) одинаковое для газов и твердой мишени при любом значении энергии.

Для проведения расчетов по программе CCCS пользователь во входном файле “cccs.inp” указывает заряд ядра и энергию ускоренного иона, а также состав, агрегатное состояние и плотность мишени. Если материал мишени состоит из атомов одного сорта, то в файле “cccs.inp” указываются значения трех параметров, разделенные пробелами:

$$\text{izp izt kcgs},$$

где izp – заряд ядра ускоренного иона Z , izt – заряд ядра атома мишени Z_t , $\text{kcgs} = 0$ для газовой мишени, и $\text{kcgs} = 1$ для твердой мишени (формат входных данных I5, I5, I5). В этом случае из таблицы химических элементов Менделеева берется значение плотности при нормальных условиях. Например, файл “cccs.inp” для ускоренных ионов углерода в кислороде O_2 записывается в виде:

$$6 \ 8 \ 0.$$

Если материал мишени состоит из атомов нескольких сортов, тогда файл входных параметров представляется в следующем виде:

```
izp 0 kcs  
izt(1) ro(1)  
izt(2) ro(2)  
.....  
izt(jmax) ro(jmax)  
  
blank line  
  
dgcm3,
```

где $izt(j)$, $ro(j)$ – заряд ядра атомов мишени Z_i^j и соответствующие им атомные фракции ρ_j / ρ в относительных единицах (формат входных данных I5, E12.4 или I5, F8.4), $dgcm3$ – плотность мишени [$\text{г}/\text{см}^3$] (формат входных данных F8.4). Так, для ускоренных ионов азота в целлулоиде ($\text{H}_8\text{C}_6\text{N}_2\text{O}_9$) файл “cccs.inp” записывается в виде:

```
7 0 1  
1 8.0  
6 6.0  
7 2.0  
8 9.0
```

(пустая строка в качестве разделителя)

1.4 (значение плотности материала в единицах [$\text{г}/\text{см}^3$]).

Результаты расчетов записываются в несколько файлов:

“cccs.out” – все результаты расчета в одном файле;

“cccs_l1.out” – сечения потери одного электрона [10^{-16} см^2];

“cccs_c1.out” – сечения захвата одного электрона [10^{-16} см^2];

“cccs_l2.out” – сечения потери двух электронов [10^{-16} см^2];

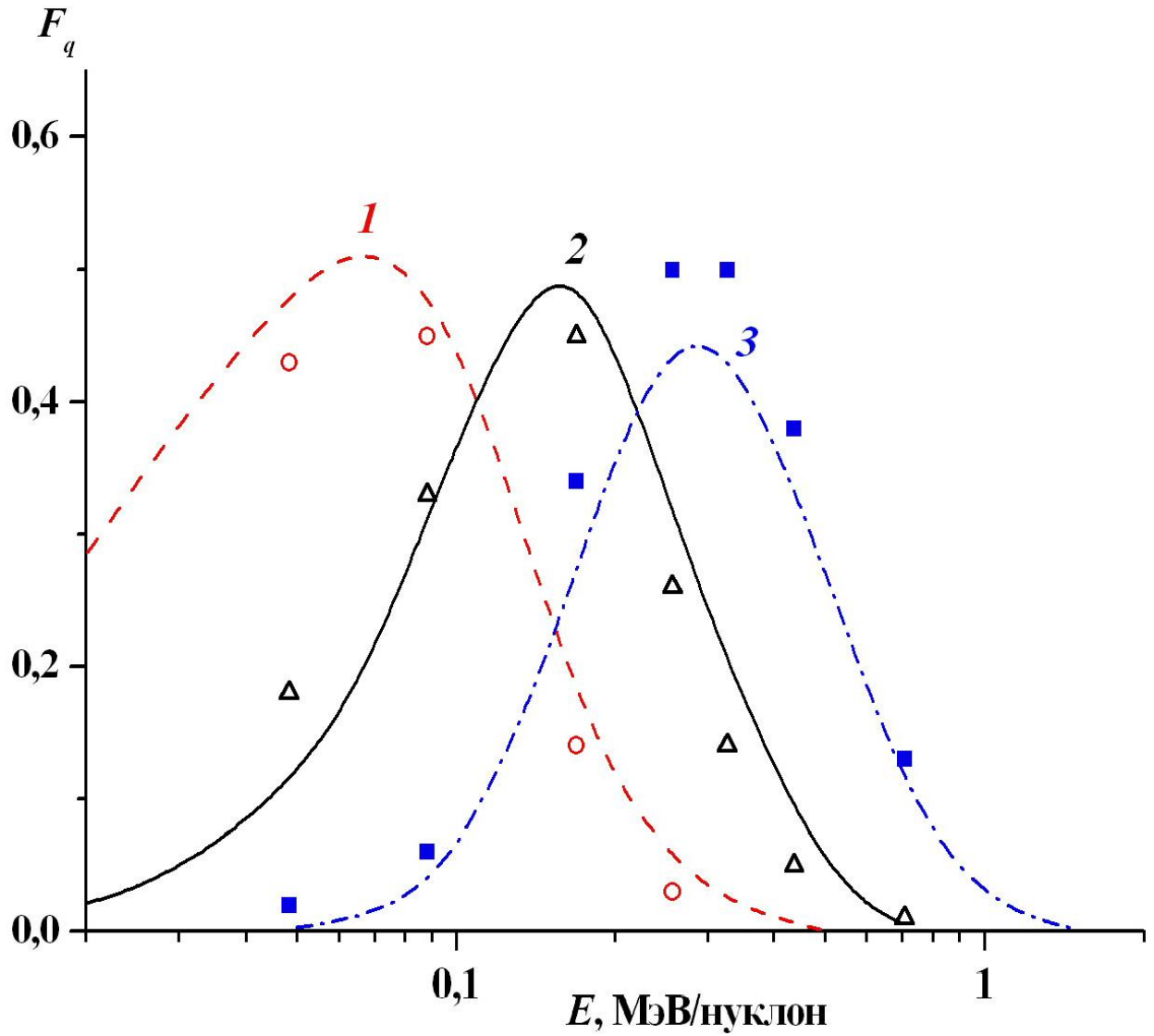


Рис. 34. Зависимость от энергии равновесных зарядовых фракций F_q^{cel} в пучке ионов азота ($Z = 7$) в целлулоиде. Линии – результаты расчетов с учетом поправки на эффект плотности: 1 – $q = 3$; 2 – $q = 4$; 3 – $q = 5$. Экспериментальные данные из [196]: (o), (Δ), (\blacksquare) – для $q = 3, 4, 5$ соответственно.

“cccs_c2.out” – сечения захвата двух электронов [10^{-16} см²];

“cccs_fr.out” – равновесные зарядовые фракции;

“cccs_qw.out” – средний заряд, ширина и асимметрия зарядового распределения;

“cccs_de.out” – потери энергии в процессе перезарядки [эВ/Å].

Текст программы CCCS – на языке FORTRAN77, ее краткое описание и примеры использования размещены в сайте НИИЯФ МГУ [217] в свободном доступе.

В качестве примера использования программы на рис. 34 приводятся результаты расчетов равновесных зарядовых фракций в пучке ионов азота в целлулоиде, которые вычислялись с учетом поправки на эффект плотности. Результаты расчета показывают согласие с имеющимися экспериментальными данными. Зарядовая фракция $F_q^{\text{cel}}(E, Z)$ для $1 \leq q \leq 6$ с ростом E сначала увеличивается и достигает своего максимума, когда ион с зарядом q может с равной вероятностью как потерять, так и захватить один из электронов (при $\sigma_{q,q-1}^{\text{cel}}(E, Z) = \sigma_{q,q+1}^{\text{cel}}(E, Z)$) [198], а затем быстро уменьшается. При энергии $E > 5$ МэВ/нуклон ион азота в целлулоиде теряет все свои электроны.

3.9. Результаты, полученные методом расчета сечений перезарядки

Предложенный для расчетов сечений перезарядки метод основан на экспериментальных данных о сечениях перезарядки в газах, на теоретических оценках зависимости этих сечений от энергии E , заряда q и заряда ядра Z ускоренного иона, заряда ядра атома мишени Z_t , а также на корректировке сечений перезарядки в твердой мишени с учетом поправки на эффект плотности.

В результате проведенной компиляции всех экспериментальных данных о сечениях перезарядки ускоренных ионов, о равновесных зарядовых фракциях F_q и параметрах равновесного зарядового распределения в ионных пучках была создана информационная база данных, которая позволила организовать быстрый поиск информации, ее наглядное представление, сравнение и анализ.

Теоретические оценки проводились в предположении, что сечения потери $\sigma_{q,q+1}(E,Z,Z_t)$ и захвата $\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ одного электрона являются непрерывными функциями. На зависимостях сечений от E, q, Z имеется не более одного максимума. Считается также, что сечение захвата одного электрона $\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ в зависимости от заряда ядра атома мишени Z_t вследствие оболочечной структуры атома мишени может иметь несколько максимумов. Величины $\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$ (3.1), $\beta(q, Z_t)$ (3.5) и $\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ (3.8) определялись из экспериментальных данных, а функция $f(E/E_q)$ (3.1), параметр $\alpha(Z_t)$ (3.10) и коэффициенты интерполяции сечений $\sigma_{q,q-1}(E,Z,Z_t)$ по переменной Z_t (3.29) вычислялись на основе квантово-механических моделей.

Экспериментальные данные для ускоренных ионов азота в газах использовались для оценки сечений потери и захвата двух электронов быстрыми ионами. В случае быстрых столкновений $E > 1$ МэВ/нуклон кратные процессы мало изменяют параметры зарядового распределения ионов в пучке, что объясняется убыванием отношения $\sigma_{q,q\pm k}/\sigma_{q,q\pm 1}$ при увеличении энергии. В диапазоне значений энергии $E < 1$ МэВ/нуклон кратные процессы приводят к уширению зарядового распределения, которое может достигать 8–10%. Учет этих процессов улучшает согласие результатов расчета с экспериментальными данными в этой области значений энергии.

Влияние эффекта плотности на величину сечений перезарядки ускоренных ионов в твердом веществе $\sigma_{q,q\pm 1}^s(E, Z, Z_t)$ описывается коэффициентом $C_{g \rightarrow s}(E, Z, Z_t) \geq 1$, на который умножаются все сечения потери и делятся все сечения захвата электрона в газах. Этот коэффициент не зависит от заряда иона q , т.е. отличие сечений перезарядки в газах и твердой мишени сводится к масштабному множителю, который при $E = \text{const}$ качественно не меняет зависимость сечений перезарядки от q . Коэффициент $C_{g \rightarrow s}(E, Z, Z_t)$ вычисляется с использованием экспериментальных значений среднего заряда ускоренных ионов или одной из равновесных зарядовых фракций в твердой мишени. Если экспериментальных

данных для выбранной пары ион–атом мишени нет, используется эмпирическое значение среднего заряда ионов в твердой мишени. Результаты расчетов показали, что $C_{g-s}(E, Z, Z_t)$ является непрерывной и медленно меняющейся функцией энергии E . В случае быстрых столкновений ($E > 10$ МэВ/нуклон) влияние эффекта плотности на сечения перезарядки ионов уменьшается, и $C_{g-s}(E, Z, Z_t) \rightarrow 1$. Предложенная модель учета эффекта плотности позволила вычислить сечения перезарядки ускоренных ионов в твердой мишени и описать увеличение среднего заряда ионов в пучке во всем исследуемом энергетическом диапазоне. Показано, что учет эффекта плотности для ускоренных ионов с зарядом $q \geq 3$ приводит к сдвигу максимума сечения потери одного электрона в сторону меньшего значения энергии. Это объясняется уменьшением энергии связи активного электрона в ионе за счет влияния возбужденных состояний.

Создана программа Charge-Changing Cross Sections (CCCS), которая вычисляет сечения потери и захвата одного и двух электронов ускоренными ионами с зарядом ядра Z ($5 \leq Z \leq 18$) и энергией от 0.01 до 20 МэВ/нуклон в многокомпонентной газообразной или твердой мишени, параметры равновесного зарядового распределения в ионном пучке, а также потери энергии ускоренных ионов от процессов перезарядки.

ГЛАВА 4

ОПИСАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОХОЖДЕНИЯ ИОНОВ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО И ИХ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ПОВЕРХНОСТИ

4.1. Толщина мишени для установления равновесного зарядового распределения

Если толщина мишени достаточно большая, то в пучке ионов с энергией E устанавливается равновесное зарядовое распределение, параметры которого не зависят от начального заряда иона q_0 и толщины мишени t . Оценки равновесной толщины мишени, необходимой для установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов T (1.4) на основе экспериментальных данных в углероде и целлулоиде [111, 218] показали, что T зависит от скорости, а зависимость T от q_0 имеет минимум при приближении начального заряда к равновесному значению [218, 219].

Распределение по заряду в пучке ионов, которые прошли слой вещества толщиной t , описывается системой дифференциальных уравнений (1.1). Если толщина мишени небольшая и зарядовое распределение ускоренных ионов не успевает установиться, то зарядовые фракции ионов $\Phi_q(t)$ зависят как от толщины слоя t , так и от начального заряда иона q_0 . Средний заряд $\bar{Q}(t)$ и ширина неравновесного зарядового распределения $D(t)$ в ионном пучке определяются как:

$$\bar{Q}(t) = \sum_q q \Phi_q(t), \quad (4.1)$$

$$[D(t)]^2 = \sum_q [q - \bar{Q}(t)]^2 \Phi_q(t), \quad (4.2)$$

и при $t \geq T$ достигают своих равновесных значений \bar{q} и d соответственно.

Рассмотрим два условия установления зарядового равновесия: $\bar{Q}(t) \rightarrow \bar{q}$ и $D(t) \rightarrow d$. В первом случае равновесие считается установившимся при выполнении условия [111]:

$$|\bar{Q}(t) - \bar{q}|/\bar{q} = \delta \text{ при } t = T_q, \quad (4.3)$$

где безразмерная величина δ не превышает несколько процентов. Средний заряд $\bar{Q}(t)$ монотонно убывает при $q_0 > \bar{q}$, когда ускоренный ион при установлении зарядового равновесия захватывает электроны, и монотонно возрастает при $q_0 < \bar{q}$, когда ускоренный ион теряет электроны. Если начальный заряд q_0 близок к равновесному ($|q_0 - \bar{q}|/\bar{q} \leq \delta$), то $T_q \rightarrow 0$ [111].

При рассмотрении равновесной толщины зарядового распределения в ионном пучке по отклонению параметра $D(t)$ от равновесного значения d аналогично (4.3) можно записать:

$$|D(t) - d|/d = \delta \text{ при } t = T_d. \quad (4.4)$$

При небольшом отличии q_0 от \bar{q} ширина неравновесного зарядового распределения $D(t)$ – монотонно возрастающая функция. При значительном отличии q_0 от \bar{q} функция $D(t)$ может быть немонотонной. Например, для $q_0 \approx 0$, $\bar{q} \approx Z$ или $q_0 \approx Z$, $\bar{q} \approx 0$ функция $D(t)$ сначала возрастает и достигает своего максимума, а затем убывает до значения d . В этом случае для определения T_d (4.4) добавляется дополнительное условие малости производной $dD(t)/dt$.

Равновесные толщины мишени для установления зарядового распределения, которые вычисляются по среднему заряду T_q и по ширине распределения T_d , могут отличаться [111]. Равновесное зарядовое распределение ускоренных ионов считается установившимся, когда оба параметра $\bar{Q}(t)$ и $D(t)$ отличаются от своих равновесных значений \bar{q} и d не более чем на несколько процентов [220, 221]. Определим толщину мишени, необходимую для установления зарядового равновесия ускоренных ионов в виде:

$$T_{qd} = \max(T_q, T_d). \quad (4.5)$$

Тогда равновесное зарядовое распределение для иона с начальным зарядом q_0 устанавливается при $t \geq T_{qd}$. Величина T_{qd} зависит от энергии, Z , Z_i и q_0 . Затем определим T_{\max} как максимальное значение T_{qd} (4.5), когда $0 \leq q_0 \leq Z$. При $t \geq T_{\max}$ равновесное зарядовое распределение устанавливается при любом q_0 . Толщина мишени T_{\max} зависит от энергии, заряда ядра иона и заряда ядра атома мишени. При расчетах толщины мишени, необходимой для установления равновесного распределения ускоренных ионов, в (4.3) и (4.4) было использовано значение $\delta = 0.03$.

Сравнение результатов расчета среднего заряда $\bar{Q}(t)$ для ускоренных ионов неона в углероде с экспериментальными данными, полученными на основе [222] (рис. 35), показывает, что предложенный метод позволяет описать тенденцию изменения среднего заряда ионов в зависимости от толщины мишени. Различный характер поведения кривых для $q_0 < \bar{q}$ и $q_0 > \bar{q}$ объясняется тем, что в первом случае ускоренный ион теряет свои электроны и средний заряд $\bar{Q}(t)$ увеличивается. Во втором случае ускоренный ион захватывает электроны, и средний заряд $\bar{Q}(t)$ уменьшается. В случае ускоренных ионов неона при $E = 0.7$ МэВ/нуклон было получено, что $T_q = 4.1$ мкг/см² для $q_0 = 6$, $T_q = 1.5$ мкг/см² для $q_0 = 7$, и $T_q = 6.2$ мкг/см² для $q_0 = 8$. В случае ускоренных ионов неона с энергией $E = 2$ МэВ/нуклон вычисленный средний равновесный заряд $\bar{q} = 8.67$ совпадает с эмпирическим значением $\bar{q} = 8.66$ (1.11) и превышает экспериментальный средний равновесный заряд $\bar{q} = 8.50$ [222] на 2%. Для ионов неона с энергией $E = 2$ МэВ/нуклон получено, что $T_q = 9.0$ мкг/см² при $q_0 = 8$, $T_q = 0.82$ мкг/см² при $q_0 = 9$ и $T_q = 13.8$ мкг/см² при $q_0 = 10$. С увеличением энергии ускоренных ионов Ne^{8+} толщина T_q увеличивается, т.е. при достаточно большой разности $|q_0 - \bar{q}|$ равновесное зарядовое распределение ионов в пучке устанавливается медленнее. Эта особенность выражается наиболее сильно для зарядовой компоненты $q_0 = Z$, потому что сечение потери электронов K -оболочки ионов

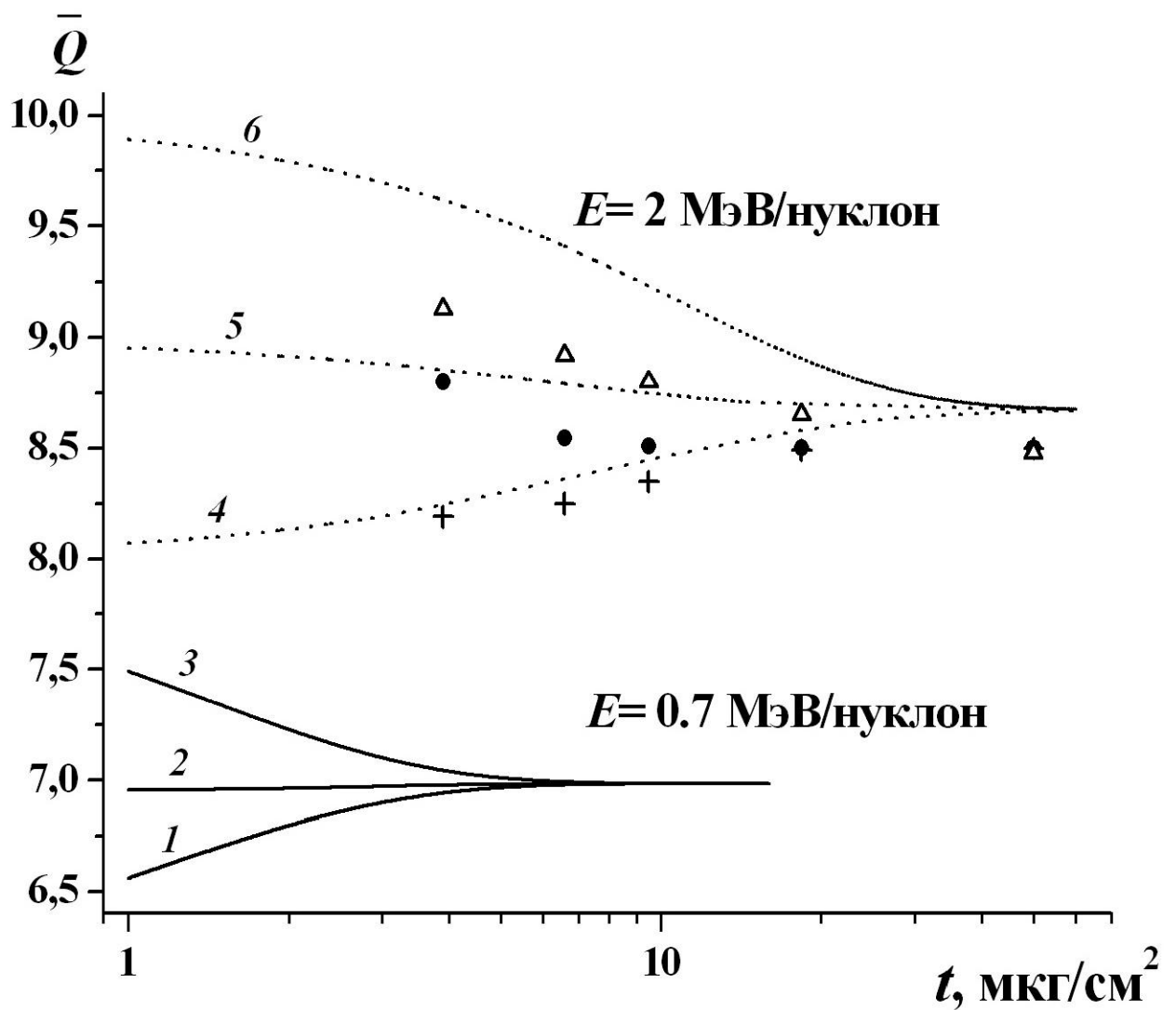


Рис. 35. Зависимость неравновесного среднего заряда ускоренных ионов неона от толщины углеродной мишени. Сплошные линии – результаты расчетов для ионов с энергией $E = 0.7$ МэВ/нуклон: 1 – $q_0 = 6$; 2 – $q_0 = 7$; 3 – $q_0 = 8$. Пунктирные линии – результаты расчетов для ускоренных ионов с энергией $E = 2$ МэВ/нуклон: 4 – $q_0 = 8$; 5 – $q_0 = 9$; 6 – $q_0 = 10$. Символы – экспериментальные данные для ускоренных ионов с энергией $E = 2$ МэВ/нуклон [222]: (+) – $q_0 = 8$; (•) – $q_0 = 9$; (Δ) – $q_0 = 10$.

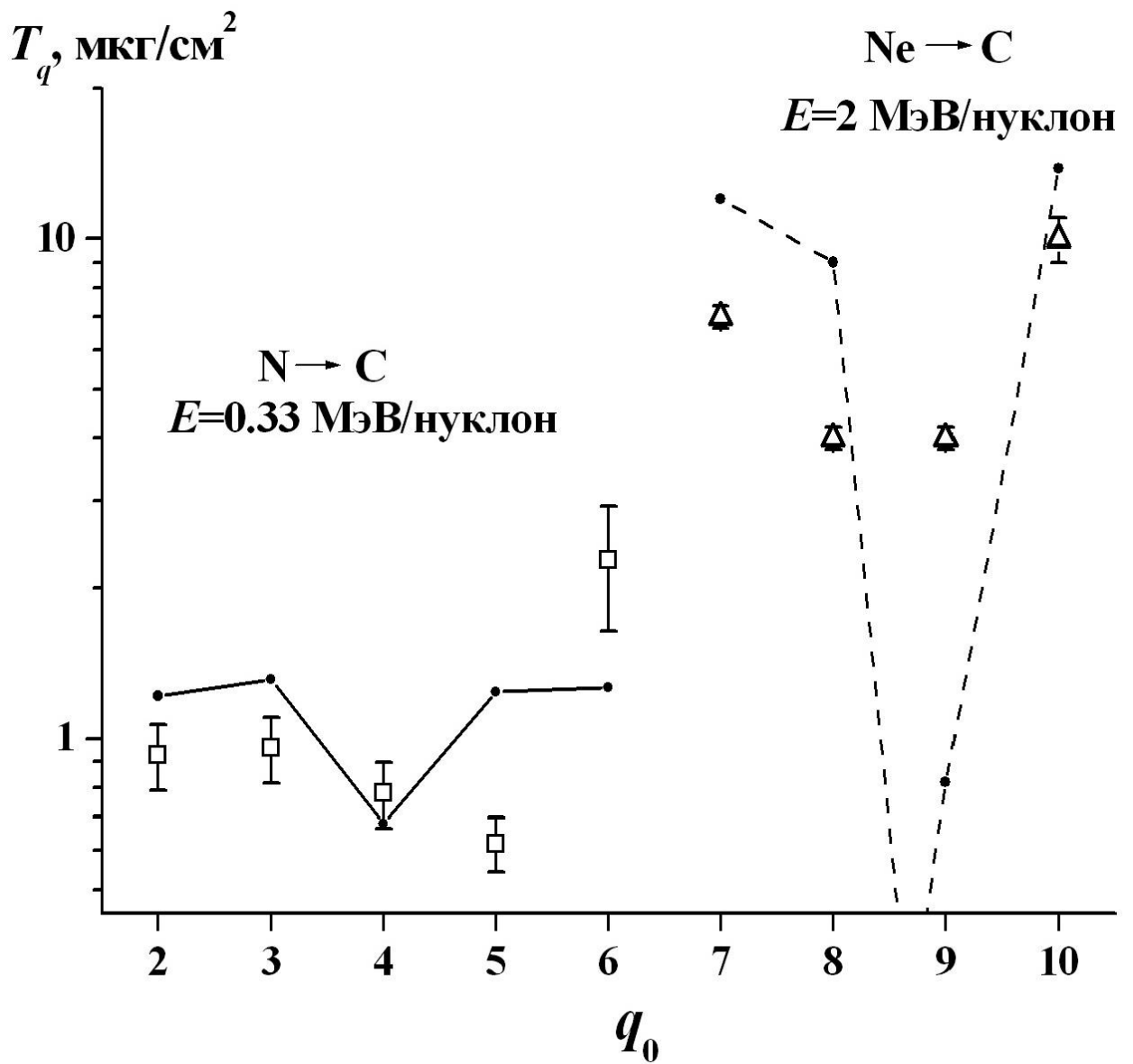


Рис. 36. Зависимость толщины мишени T_q , необходимой для установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов азота и неона в углероде, от начального заряда иона q_0 . Линии – результаты расчетов, символы – экспериментальные данные (\square) [111] и (Δ) [222].

Ne^{q+} ($q \geq 8$) значительно меньше, чем L -оболочки Ne^{q+} ($q < 8$). Полученный характер формирования зарядового равновесия ионов в пучке соответствует экспериментальным и теоретическим результатам для других ускоренных ионов в углероде [121, 122, 222, 223].

Равновесная толщина мишени из углерода T_q в случае ускоренных ионов азота и неона (рис. 36) достигает своего минимального значения при $q_0 \approx \bar{q}$. Для любого начального заряда ионов q_0 зарядовые фракции $\Phi_q(t)$, у которых величина q близка к \bar{q} , достигают равновесного значения F_q быстрее, чем зарядовые фракции $\Phi_q(t)$, у которых q сильно отличается от \bar{q} . Для рассматриваемых ионов экспериментальные и расчетные зависимости T_q от q_0 являются асимметричными. Указанные особенности формирования равновесного зарядового распределения ионов в пучке отмечались и в случае других ускоренных ионов и мишеней [111].

Для анализа поведения равновесной толщины вещества в области $q_0 \approx \bar{q}$ результаты расчета T_q удобно представить в виде зависимости T_q от разности $\bar{q} - q_0$, чтобы показать асимметрию, о которой упоминалось выше. В этом представлении равновесная толщина мишени T_q , соответствующая одной и той же энергии E , но разным q_0 , зависит от $\bar{q} - q_0$ (рис. 37). Асимметрия зависимости T_q от разности $\bar{q} - q_0$ приводит к тому, что при одинаковом по величине отклонении $|\bar{q} - q_0|$ значение T_q для $\bar{q} - q_0 < 0$ меньше, чем T_q для $\bar{q} - q_0 > 0$. Например, для ускоренных ионов неона с $q_0 = 8$ равновесная толщина для $\bar{q} = q_0 + 1$ превышает T_q при $\bar{q} = q_0 - 1$ в пять раз. Результаты расчетов (рис. 37) показывают, что при одинаковой разности $|\bar{q} - q_0|$ равновесная толщина T_q возрастает с увеличением q_0 . Особенность $T_q \rightarrow 0$ при $\bar{q} \rightarrow q_0$ проявляется для всех значений q_0 , но в разной области значений энергии. Равновесный заряд ионов в пучке

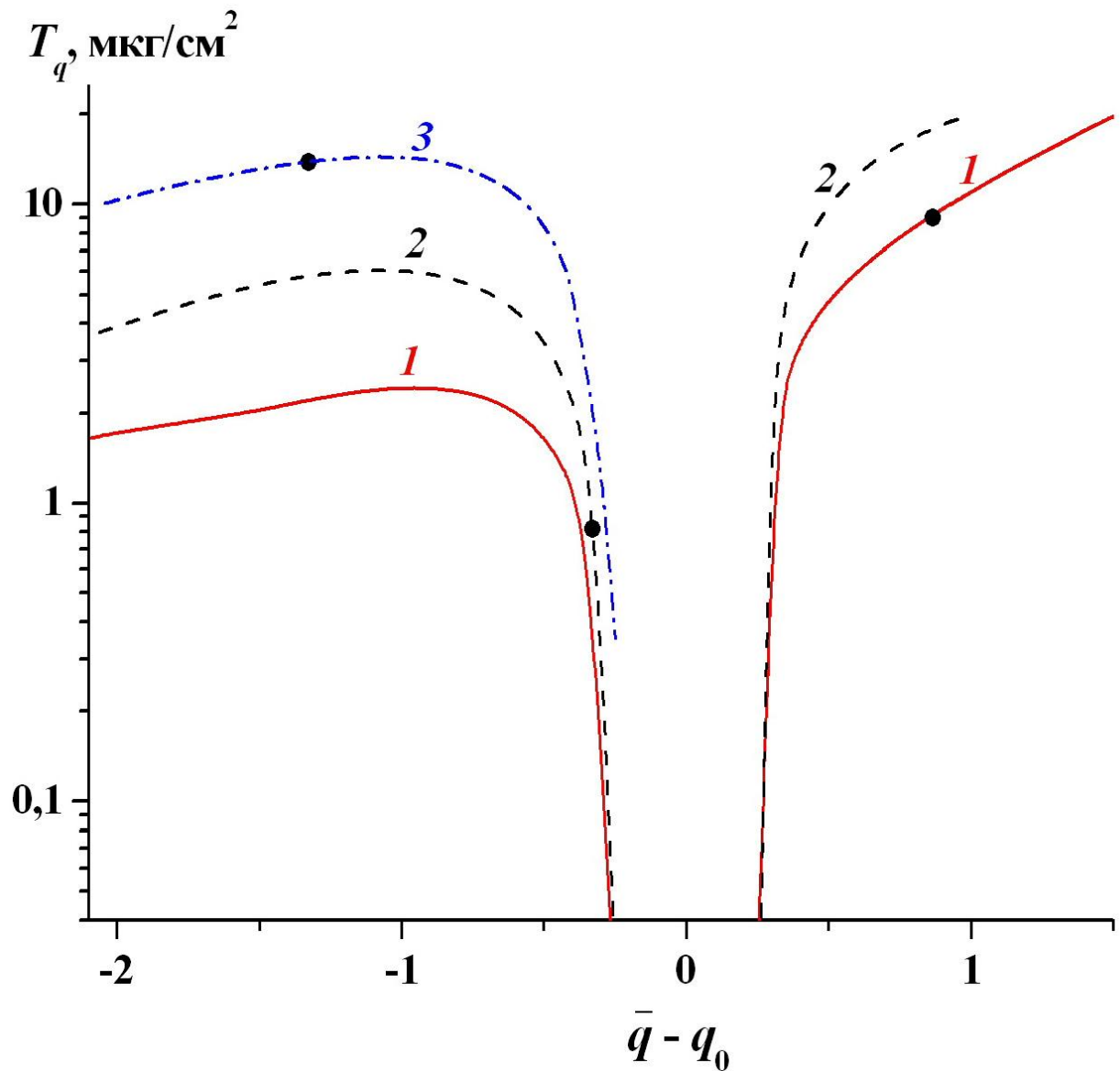


Рис. 37. Зависимость толщины мишени T_q , необходимой для установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов Ne^{9+} в углероде, от разности $\bar{q} - q_0$. Результаты расчетов: 1 - $q_0 = 8$; 2 - $q_0 = 9$; 3 - $q_0 = 10$. Символы (•) соответствуют результатам расчетов для ионов неона с энергией $E = 2$ МэВ/нуклон.

\bar{q} зависит от энергии ионов E и становится равным q_0 при энергии $E = E^*$, тогда $T_q \rightarrow 0$ для $E \rightarrow E^*$. Например, для ускоренных ионов неона в углероде $\bar{q} = 7$, когда $E^* \approx 0.7$ МэВ/нуклон; $\bar{q} = 8$, когда $E^* \approx 1.25$ МэВ/нуклон; $\bar{q} = 9$, когда $E^* \approx 2.5$ МэВ/нуклон. Асимметрия зависимости T_q от разности $\bar{q} - q_0$ объясняется увеличением \bar{q} и уменьшением сечений перезарядки при увеличении энергии E .

Соотношение между T_q и T_d определяет последовательность установления зарядового равновесия. На рис. 38 приведены результаты расчетов этих величин для ускоренных ионов Ne^{9+} в углероде. Равновесная толщина мишени T_d меньше, чем T_q в области значений энергии $E < 1.5$ МэВ/нуклон ($\bar{q} < 8.219$) и $E > 2.8$ МэВ/нуклон ($\bar{q} > 9.118$). В этом случае ширина неравновесного распределения в пучке ионов по заряду сначала возрастает, а затем достигает d при $T = T_d$. По мере того как толщина t дальше увеличивается, средний заряд продолжает меняться до тех пор, пока не достигнет равновесного значения при $T = T_q$. В другом диапазоне энергии ($1.5 \leq E < 2.8$ МэВ/нуклон) равновесная толщина мишени T_d больше, чем T_q , и последовательность процессов меняется. Сначала средний заряд ускоренных ионов достигает равновесного значения при $t = T_q$, а затем только при $t = T_d$ устанавливается равновесное зарядовое распределение в пучке ионов. Особенность в расчетах T_q наблюдается для $E \approx 2.2$ МэВ/нуклон, где $q_0 \approx \bar{q}$. Здесь средний заряд $\bar{Q}(t)$ во время формирования равновесного зарядового распределения остается неизменным ($\bar{Q}(t) \approx \bar{q}$), и при увеличении толщины мишени t изменяется только ширина зарядового распределения $D(t)$.

При дальнейшем анализе формирования зарядового равновесия в пучке ускоренных ионов удобно использовать величину T_{qd} (4.5), которая в отличие от T_q не имеет особенности при $q_0 \approx \bar{q}$ и медленно изменяется с увеличением q_0 и E . В области энергии $E > 0.1$ МэВ/нуклон для любого q_0 толщина $T_{qd} = \max(T_q, T_d)$ увеличивается при увеличе-

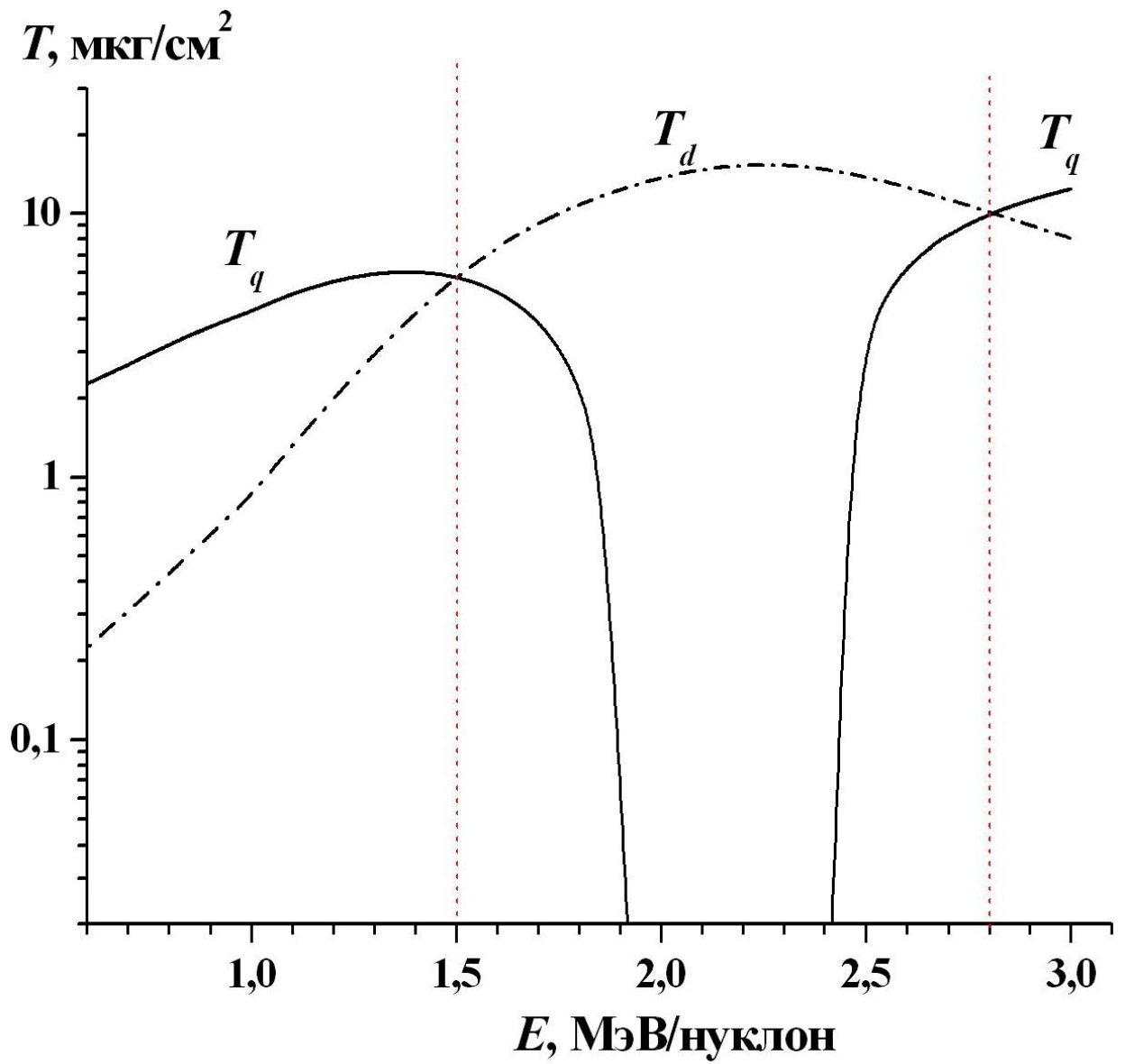


Рис. 38. Зависимость толщины мишени, необходимой для установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов неона Ne^{9+} в углероде, от энергии ионов. Результаты расчетов: T_q и T_d .

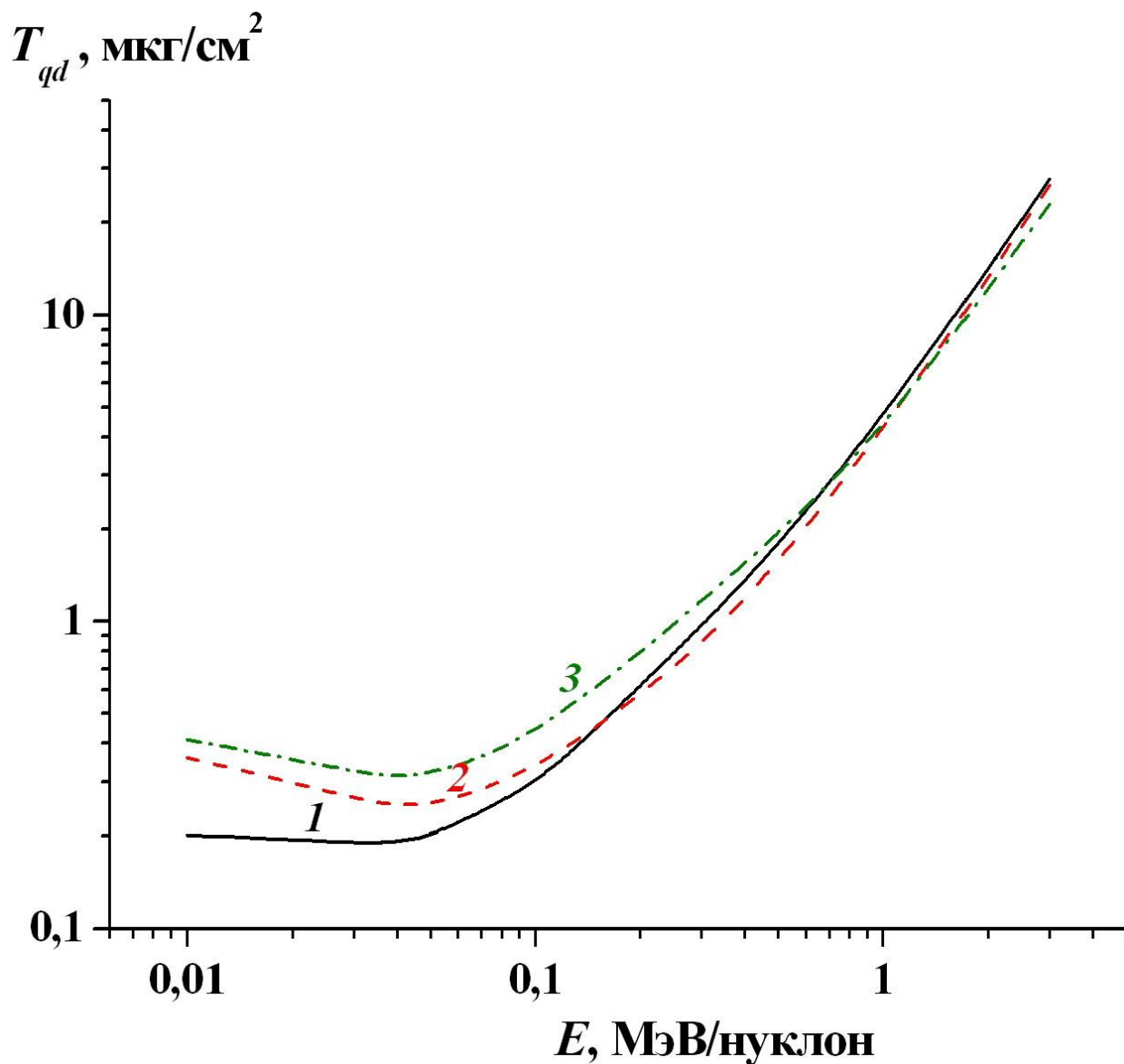


Рис. 39. Зависимость толщины мишени, необходимой для установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов неона в углероде, от энергии и начального заряда ионов. Линии соответствуют результатам расчетов: 1 – $q_0 = 0$; 2 – $q_0 = 5$; 3 – $q_0 = 10$.

нии E (рис. 39). Различие равновесных толщин мишени ускоренных ионов с различным q_0 важно учитывать в области значений энергии $E < 0.5$ МэВ/нуклон. Например, для ускоренных ионов неона с $E = 0.01$ МэВ/нуклон ($\bar{q} \approx 1.3$) толщина T_{qd} при $q_0 = Z$ превышает T_{qd} при $q_0 = 0$ в два раза вследствие увеличения разности $|\bar{q} - q_0|$. Это отличие для ионов с разными начальными зарядами q_0 уменьшается с увеличением энергии E , и им можно пренебречь в области значений энергии $E > 1$ МэВ/нуклон.

Результаты расчета толщины мишени T_{\max} , которая определяется как максимальное значение T_{qd} при $0 \leq q_0 \leq Z$, представлены на рис. 40. Эта величина в углероде зависит только от заряда ядра иона Z и энергии E . В случае ускоренных ионов азота и неона толщина мишени для формирования равновесного зарядового распределения T_{\max} остается постоянной в области значений энергии $E < 0.1$ МэВ/нуклон и увеличивается в области $E \geq 0.1$ МэВ/нуклон. Толщина мишени T_{\max} в случае ускоренных ионов неона ($Z = 10$) в углероде в 1.5–2 раза больше, чем в случае ионов азота ($Z = 7$), так как количество зарядовых состояний для ионов неона больше и диапазон разности $|\bar{q} - q_0|$ увеличивается.

Увеличение T_{qd} (рис. 39) и T_{\max} (рис. 40) в области энергии $E \geq 0.1$ МэВ/нуклон объясняется зависимостью сечений перезарядки от энергии. Основной вклад в формирование зарядового равновесия в пучке ускоренных ионов при фиксированной энергии вносят зарядовые фракции с зарядом в интервале $\bar{q} - 1 \leq q \leq \bar{q} + 1$. В этой области энергии и зарядов q выполняется соотношение между сечениями перезарядки $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$ [198] при $E \approx E''$ (3.11), и вероятности захвата и потери электрона ионом приблизительно равны. Результаты расчетов (табл. 6) показывают, что значения сечений $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$ монотонно уменьшаются с увеличением E'' . Этот эффект приводит к уменьшению вероятности взаимодействия с изменением заряда ускоренного иона и, следовательно, к увеличению расстояния между точками, где происходят столкновения

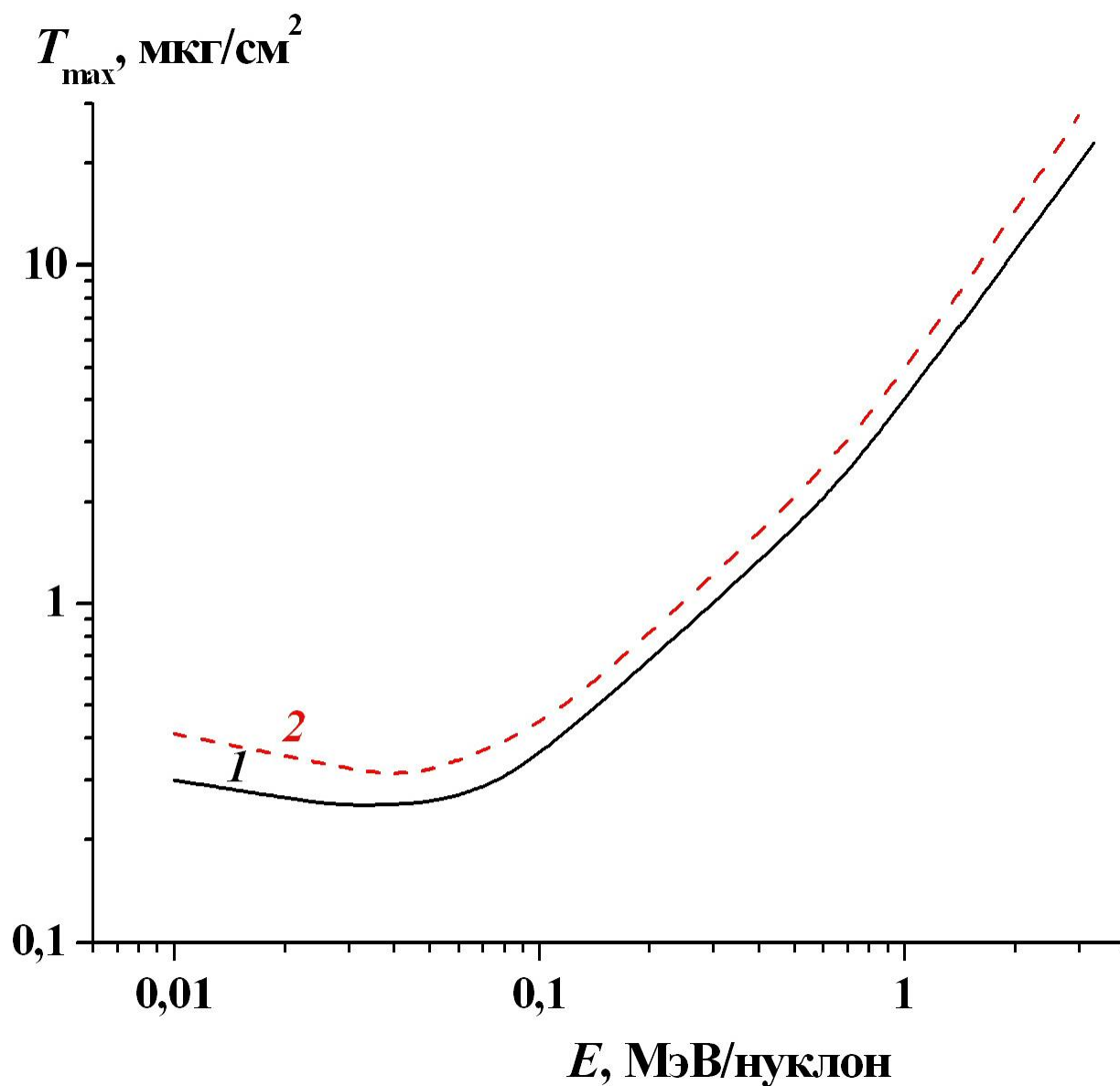


Рис. 40. Зависимость от энергии ионов толщины мишени, необходимой для установления равновесного зарядового распределения T_{\max} (максимальная толщина T_{qd} при $0 \leq q_0 \leq Z$) в пучке ускоренных ионов в углеродной мишени. Линии соответствуют результатам расчета: 1 – ионы азота ($Z = 7$); 2 – ионы неона ($Z = 10$).

Таблица 6. Результаты расчета среднего равновесного заряда \bar{q} , сечения потери $\sigma_{q,q+1}$ и захвата $\sigma_{q,q-1}$ электрона ускоренными ионами неона в углероде

E , МэВ/нуклон	\bar{q}	$\sigma_{q,q+1}, \sigma_{q,q-1}, 10^{-16} \text{ см}^2$
0.011	1.178	$\sigma_{1,2} = \sigma_{1,0} = 1.685$
0.028	2.129	$\sigma_{2,3} = \sigma_{2,1} = 1.526$
0.065	3.139	$\sigma_{3,4} = \sigma_{3,2} = 1.029$
0.132	4.159	$\sigma_{4,5} = \sigma_{4,3} = 0.554$
0.238	5.147	$\sigma_{5,6} = \sigma_{5,4} = 0.290$
0.434	6.162	$\sigma_{6,7} = \sigma_{6,5} = 0.133$
0.767	7.141	$\sigma_{7,8} = \sigma_{7,6} = 0.0592$
1.376	8.168	$\sigma_{8,9} = \sigma_{8,7} = 0.0215$
3.105	9.232	$\sigma_{9,10} = \sigma_{9,8} = 0.0031$

ионов и атомов мишени, в которых заряд иона изменяется. Следовательно, толщина мишени, необходимая для установления равновесного распределения в пучке ионов по заряду, возрастает с увеличением энергии E .

4.2. Эмпирическое описание равновесного зарядового распределения в пучке ускоренных ионов

Для описания ширины зарядового распределения в пучке ускоренных ионов, прошедших через вещество, предлагается использовать в параметризации d не скорость или энергию иона, а отношение \bar{q}/Z . Область определения функции $d(\bar{q}/Z)$ ограничена ($0 \leq \bar{q}/Z \leq 1$), что удобно для ее аппроксимации. Куполообразная зависимость $d(\bar{q}/Z)$ описывается функцией [224, 225]:

$$d(\bar{q}/Z) = C \{1 - \exp[-(\bar{q}/Z)^\gamma]\} \{1 - \exp[-(1 - \bar{q}/Z)^\beta]\}, \quad (4.6)$$

где безразмерный параметр C характеризует высоту “плато” в области промежуточного значения энергии, а безразмерные параметры γ и β характеризуют уменьшение d в случае медленных ($\bar{q}/Z \rightarrow 0$) и быстрых ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$) столкновений соответственно:

$$d \sim (\bar{q}/Z)^\gamma \text{ при } \bar{q}/Z \rightarrow 0, \quad (4.7)$$

$$d \sim (1 - \bar{q}/Z)^\beta \text{ при } \bar{q}/Z \rightarrow 1. \quad (4.8)$$

Зависимость от энергии E в (4.6) учитывается величиной среднего равновесного заряда $\bar{q}(Z, Z_t, E)$. Ширины равновесного зарядового распределения в пучке ионов (4.6) в газе и в твердой среде различаются вследствие отличий величин $\gamma, \beta, C, \bar{q}(Z, Z_t, E)$.

В общем случае результат аппроксимации экспериментальной зависимости функцией трех параметров (γ, β, C) при корреляции между ними может давать не единственное решение. Такая корреляция есть между γ и C , а также между β и C . Для однозначности определения значений параметров в (4.6) предполагается, что γ и β зависят только от агрегатного состояния вещества и не зависят от Z и Z_t . Значения γ и β в (4.6)

определялись для всех имеющихся данных ($Z \leq 92$) отдельно в газах ($Z_t = 2, 7, 18, 36$) и в твердой мишени ($Z_t = 6, 13, 47, 79$). Значения параметра C вычислялись после аппроксимации экспериментальной зависимости $d(\bar{q}/Z)$ соотношением (4.6) при фиксированных Z и Z_t . На основе анализа имеющихся экспериментальных данных были получены значения параметров C , γ и β . Установлено, что параметр C возрастает с увеличением Z и Z_t в твердой (рис. 41) и в газообразной (рис. 42) средах. Пренебрегая осцилляциями, связанными с оболочечной структурой атома мишени и ограничиваясь линейной зависимостью C от Z и Z_t , получили, что для твердой среды:

$$\gamma = 0.23, \beta = 0.32, C = 2.66939 - 0.0098 \times Z_t + 0.05802 \times Z + 0.00048 \times Z \times Z_t; \quad (4.9)$$

а для газа:

$$\gamma = 0.40, \beta = 0.75, C = 3.01904 - 0.01821 \times Z_t + 0.07817 \times Z + 0.00132 \times Z \times Z_t. \quad (4.10)$$

Применимость этих соотношений за пределами используемого диапазона Z_t (т.е. $Z_t > 79$ для твердой среды и $Z_t > 36$ для газов) не рассматривалась. Соотношение (4.6), (4.9) и (4.10) по сравнению с выражением (1.13) из [40] – более точные, так как получены на основе интерполяции данных отдельно в газах и в твердой среде, а также с учетом зависимости ширины зарядового распределения ускоренных ионов от заряда ядра атома мишени Z_t . Если учитывать зависимости $\gamma(Z, Z_t)$, $\beta(Z, Z_t)$, то соотношение (4.6) позволяет достичь лучшего согласия с экспериментальными данными. Однако за счет корреляций между параметрами γ и C и между β и C зависимости параметров в (4.6) от Z и становятся немонокотонными, что усложняет их интерполяцию.

Зависимость параметра ширины зарядового распределения d ускоренных ионов аргона в углероде (рис. 43) показывает, что $d(\bar{q}/Z)$ – медленно изменяющаяся функция при средних \bar{q}/Z . Уменьшение d при $\bar{q}/Z \rightarrow 0$ (4.7) объясняется нейтрализацией ионов в пределе малых скоростей. В случае быстрых столкновений ширина зарядового распределения уменьшается при $\bar{q}/Z \rightarrow 1$ (4.8) из-за полной “обдирки” иона. В обоих

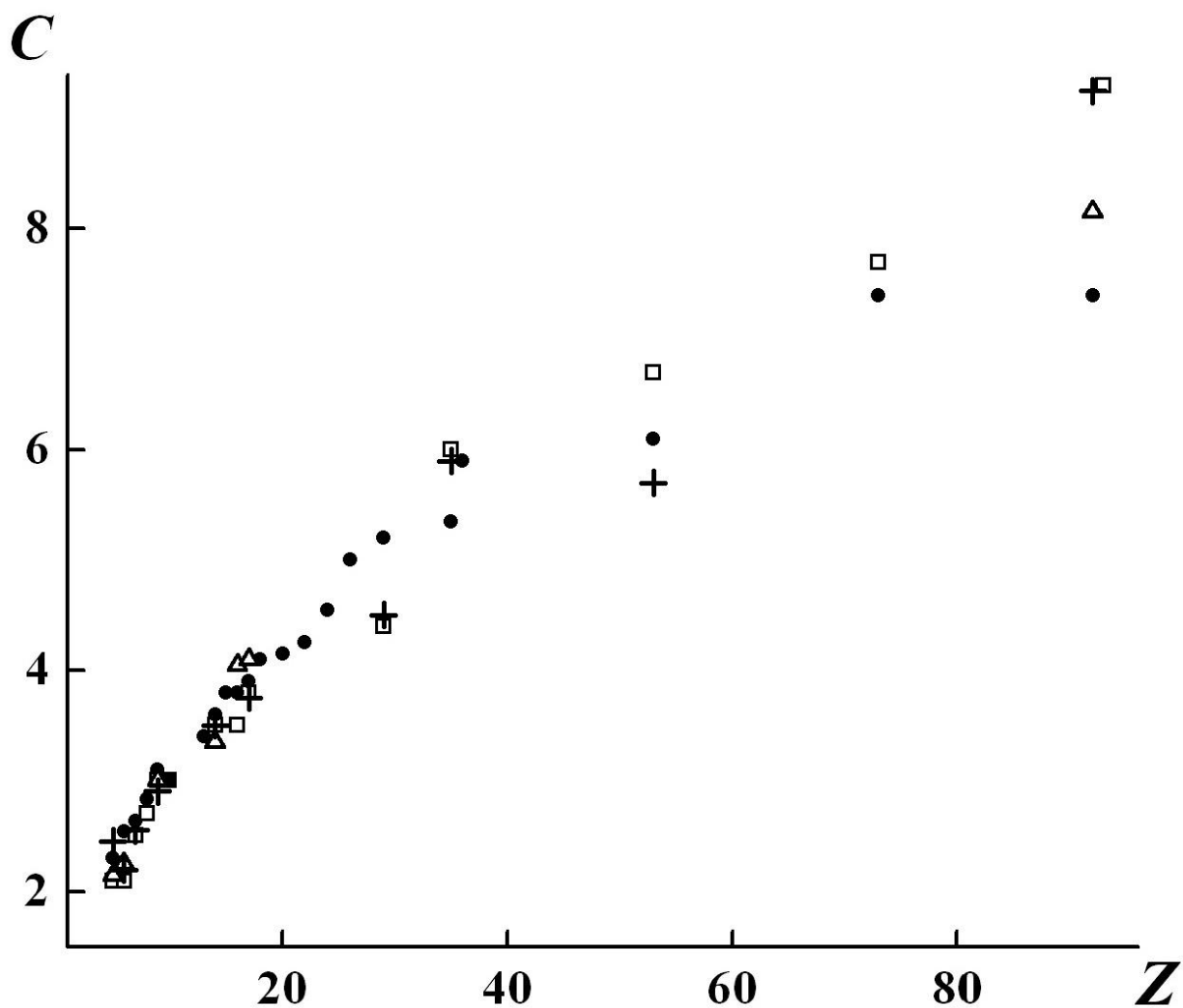


Рис. 41. Параметр C (4.6) в твердой среде на основе экспериментальных данных [195] в углероде (●), алюминии (Δ), серебре (+), золоте (□).

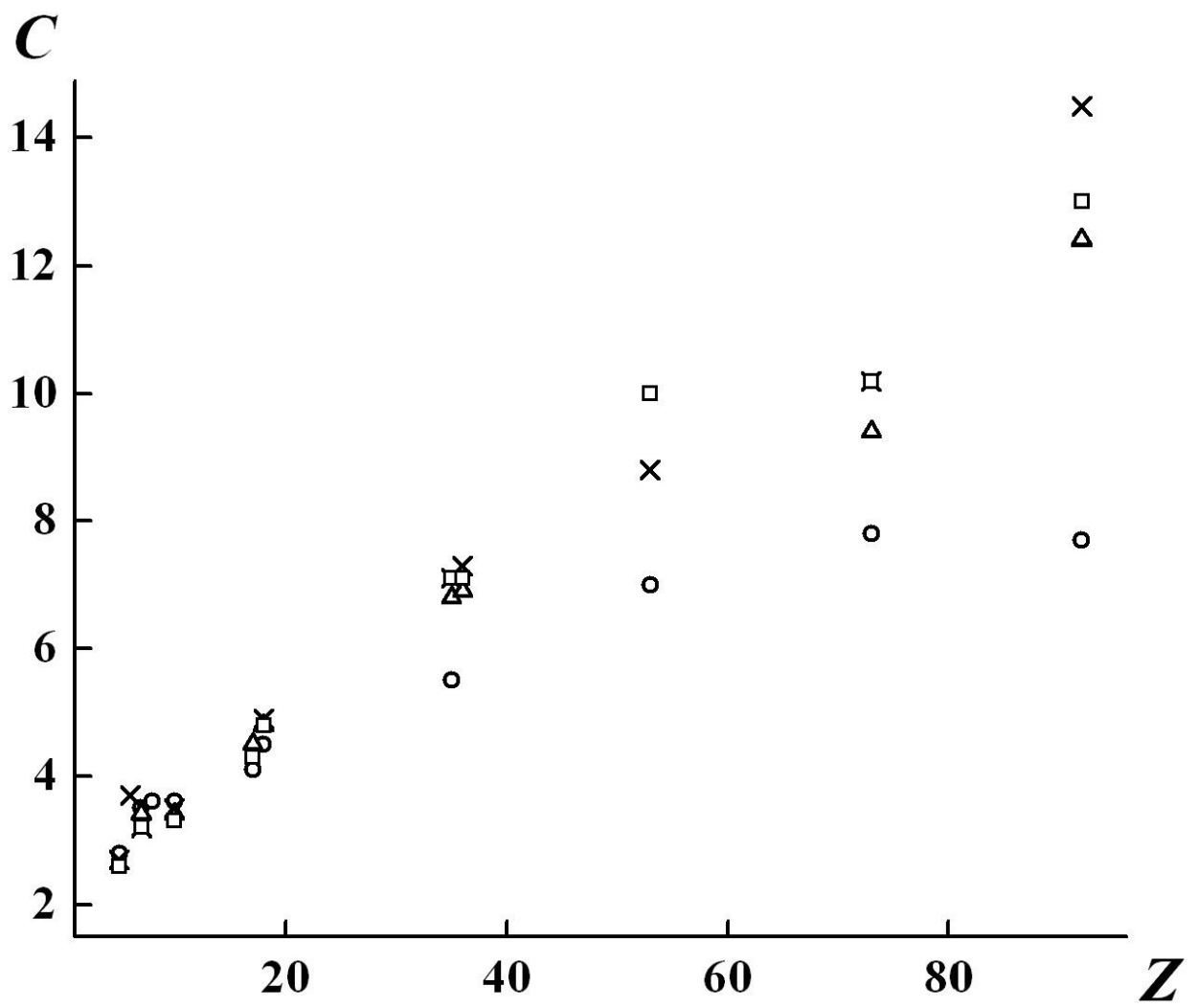


Рис. 42. Параметр C (4.6) в газах на основе экспериментальных данных [195] в гелии (o), азоте (Δ), аргоне (X), криптонне (\square).

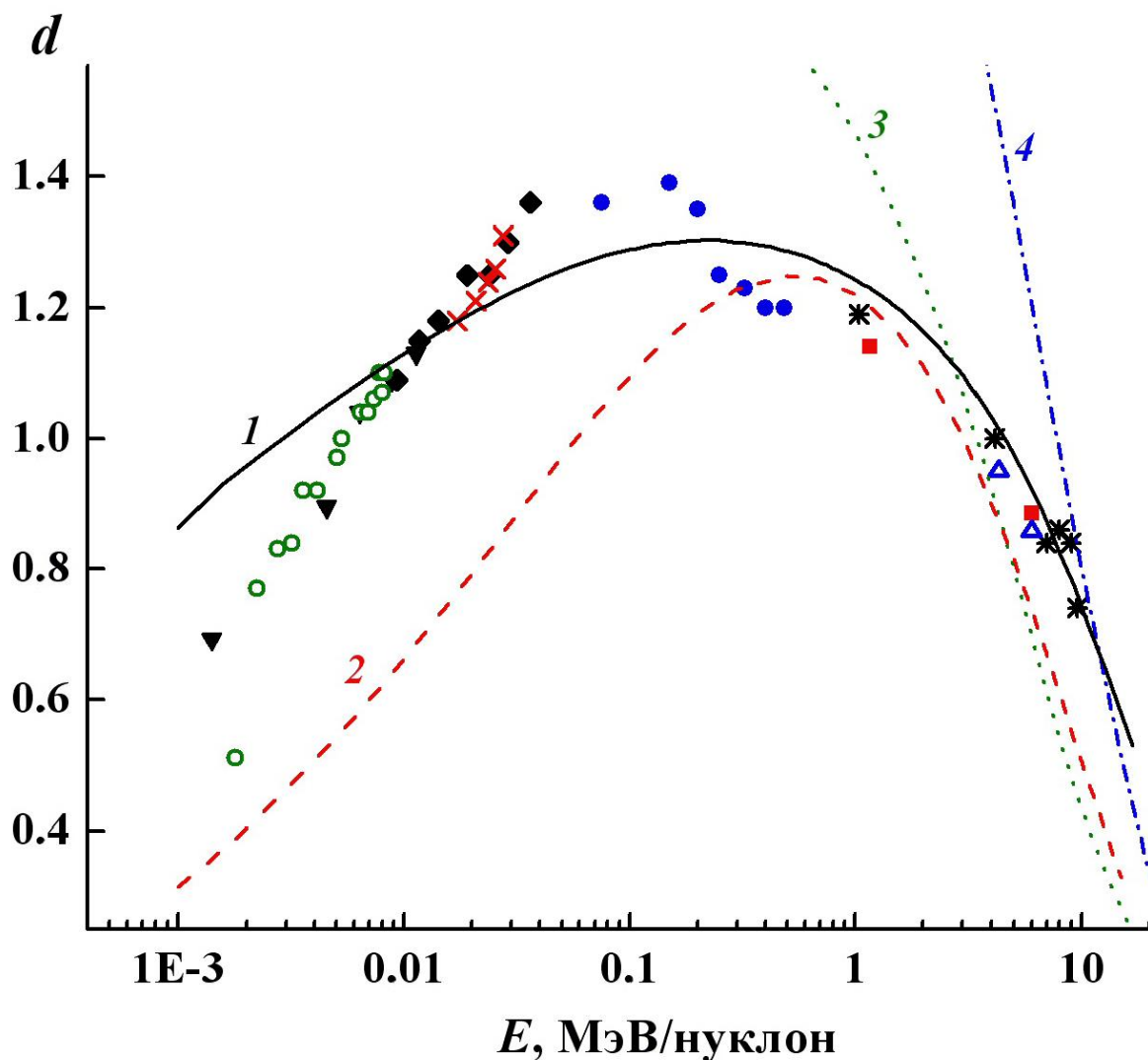


Рис. 43. Ширина равновесного зарядового распределения ускоренных ионов аргона в углероде. Экспериментальные данные: (\blacklozenge) [114]; (\blacktriangledown) [226]; (\blacksquare) [212]; (o) [213]; (*) [214]; (\bullet) [215]; (\times) [227]; (\triangle) [117]. Теоретические оценки: 1 – (4.6); 2 – (1.13) [40]; 3 – [119]; 4 – [36].

предельных случаях равновесное зарядовое распределение в ионном пучке вырождено ($d \rightarrow 0$), так как ион находится только в одном из состояний – $\bar{q} \approx 0$ или $\bar{q} \approx Z$. Аппроксимация $d(\bar{q}/Z)$ соотношением (4.6) удовлетворительно описывает экспериментальные данные во всем диапазоне значений E . Оценка параметра ширины равновесного зарядового распределения (1.13) качественно воспроизводит экспериментальную зависимость $d(E)$, но в 1.5–2 раза занижает величину d при медленных столкновениях. Расчет по программе ЕТАСНА [119] и оценка параметра d [36] согласуются с экспериментальными данными только в случае быстрых столкновений ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$).

Зависимость параметра $s(\bar{q}/Z)$, характеризующего асимметрию равновесного зарядового распределения (1.6) в пучке ускоренных ионов, описывается функцией [225]:

$$s(\bar{q}/Z) = A \exp[-\lambda_A (\bar{q}/Z)] - B \exp[-\lambda_B (1 - \bar{q}/Z)], \quad (4.11)$$

где безразмерные параметры A и λ_A характеризуют увеличение асимметрии $|s|$ в области медленных ($\bar{q}/Z \rightarrow 0$) столкновений, а параметры B и λ_B – в области быстрых ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$) столкновений. Зависимость от энергии E и Z_t в (4.11) учитывается величиной среднего заряда иона в равновесном зарядовом распределении $\bar{q}(Z, Z_t, E)$.

Параметры A , λ_A , B , λ_B в (4.11) вычислялись на основе всех имеющихся экспериментальных данных ($Z \leq 92$) отдельно в газах и в твердой среде. В расчетах предполагалось, что $s > 0$ при $\bar{q}/Z < 0.5$ и $s < 0$ при $\bar{q}/Z \geq 0.5$. Для твердой среды (рис. 44) были получены значения:

$$A = 3, \lambda_A = 25, B = 6, \lambda_B = 50; \quad (4.12)$$

а для газов (рис. 45):

$$A = 2, \lambda_A = 20, B = 7, \lambda_B = 45. \quad (4.13)$$

Соотношение (4.11) удовлетворительно описывает экспериментальные данные во всем диапазоне равновесных зарядов (рис. 44, 45). В области $0.3 < \bar{q}/Z < 0.7$ асимметрия равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в твердой среде и газах почти одинаковая, а распределение близко к симметричному $s \rightarrow 0$. В области $\bar{q}/Z < 0.2$ и $\bar{q}/Z > 0.8$ асимметрия с учетом знака параметра s в твердой среде больше, чем в газах, поскольку величина параметра A больше в (4.12), а параметра B – в (4.13). Это связано с увеличением сечения потери и уменьшением сечения захвата электрона в твердой среде по сравнению с газами.

Полученные соотношения для параметров ширины d и асимметрии s равновесного зарядового распределения в пучке ускоренных ионов применимы в широком диапазоне изменения величин E , Z и Z_t и удовлетворительно описывают имеющиеся экспериментальные данные (табл. 7–34). Различие параметров равновесного зарядового равновесия ускоренных ионов в графите, полученных в разных экспериментах (табл. 7, 9, 14), составляет около 2% для \bar{q} , 5% для d и 50% для s . Выражение для среднего заряда ионов в пучке как в газах (1.10), так и твердой мишени (1.11) не учитывает особенности сечений захвата и потери электрона, связанные с оболочечной структурой иона и атома мишени (рис. 2), и описывает экспериментальные данные только приближенно. В этих целях используют плавную зависимость от V , Z и Z_t . Следовательно, полученные соотношения для d (4.6) и s (4.11), в которых фигурирует величина \bar{q} , также не учитывают этих особенностей.

Результаты расчетов параметра d для ускоренных ионов от бора до аргона (табл. 7–34) показали удовлетворительное согласие с экспериментальными данными во всем диапазоне значений энергии $E \geq 0.25$ МэВ/нуклон. В случае быстрых столкновений $E \geq 0.5$ МэВ/нуклон вычисленная ширина равновесного зарядового распределения d

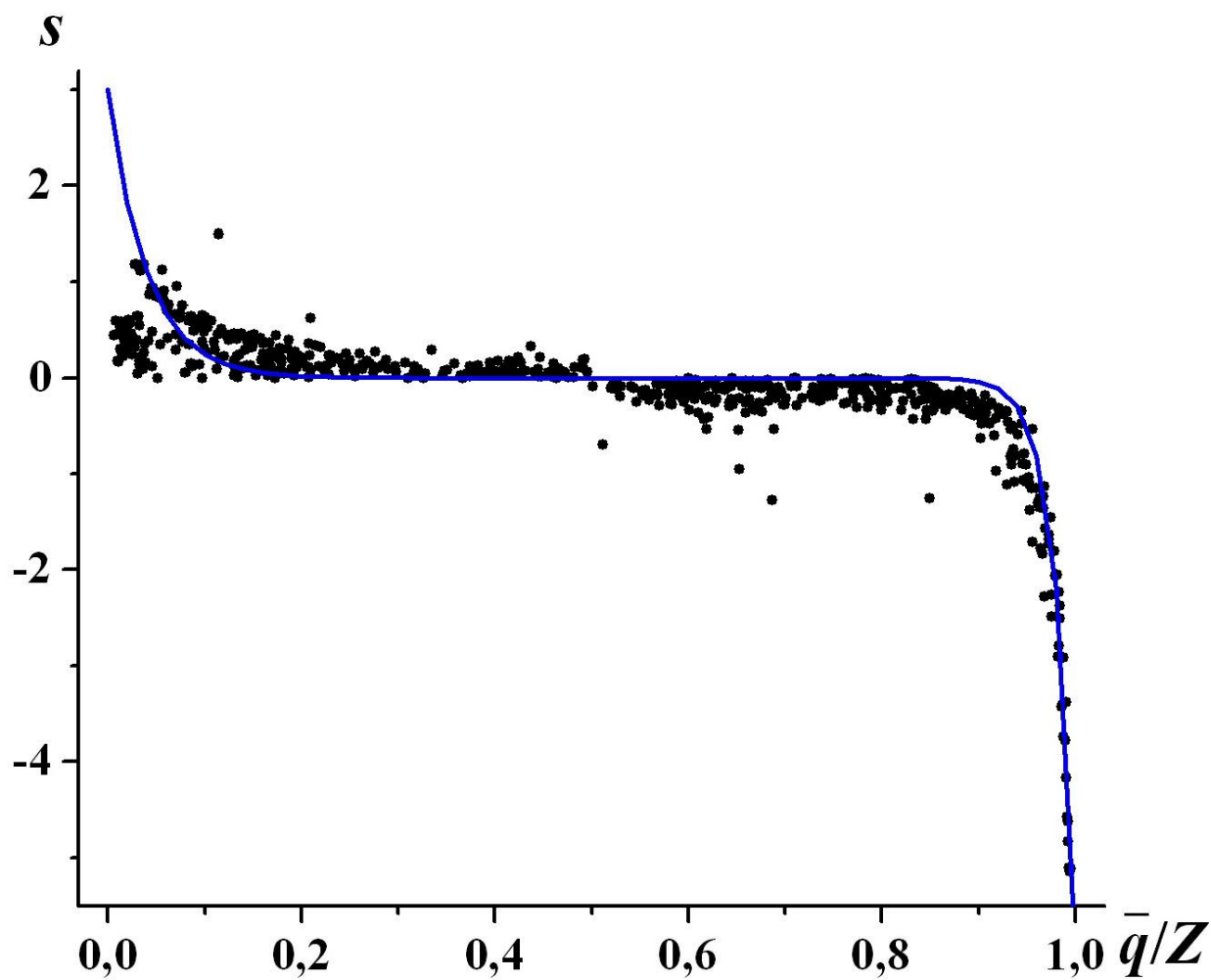


Рис. 44. Зависимость параметра асимметрии равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в твердой среде: точки (●) – экспериментальные данные для ионов ($Z = 5-92$) в углероде, алюминии, никеле, серебре, и золоте; линия – результат аппроксимации (4.11) с параметрами (4.12).

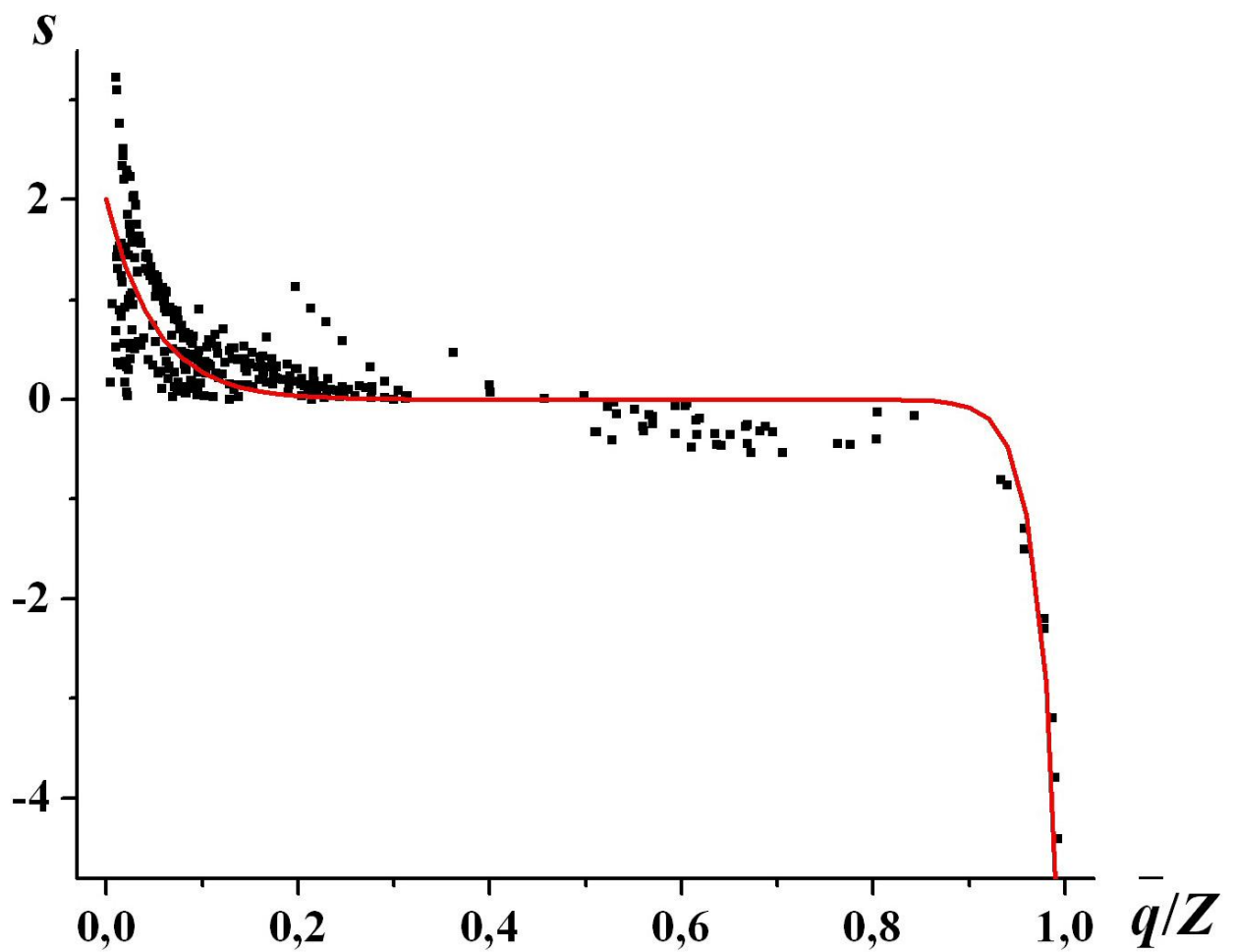


Рис. 45. Зависимость параметра асимметрии равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в газах: точки (■) – экспериментальные данные для ионов ($Z = 5-92$) в гелии, азоте, неоне, аргоне, криптоне и ксеноне; линия – результат аппроксимации (4.11) с параметрами (4.13).

совпадает с экспериментальной, но при $E = 0.25$ МэВ/нуклон (табл. 7–12) она на 15–20% превышает экспериментальные значения.

В области значений энергии $0.25 \leq E < 1.5$ МэВ/нуклон (табл. 7–20) вычисленное эмпирическим методом равновесное зарядовое распределений ускоренных ионов в графите почти симметричное ($|s| < 0.01$) из-за двух экспоненциальных факторов, входящих в (4.11). Сложность оценки асимметрии зарядового распределения ионов в этой области связана с большой погрешностью экспериментальных данных. Небольшие вариации величины зарядовых фракций на краях распределения, которые в эксперименте измеряются с меньшей точностью, могут привести к значительному изменению величины и знака параметра s .

Главный недостаток эмпирического метода оценки равновесного зарядового распределений в том, что он не дает значений равновесных зарядовых фракций F_q . Программа ETASNA [119] предназначена для оценки равновесных и неравновесных зарядовых распределений быстрых ионов $E \geq 10$ МэВ/нуклон, но возможность ее использования в случае более медленных столкновений требует специального исследования. Результаты, представленные в табл. 7–20, показывают, что параметр d , вычисленный по этой программе, более чем на 15–20% превышает экспериментальное значение для ускоренных ионов с энергией $E < 1.5$ МэВ/нуклон в углероде (рис. 23 для ионов бора и рис. 43 для ионов аргона). Анализ результатов расчетов для других мишеней показал, что с увеличением Z_t отличия вычисленного по программе ETASNA параметра d от экспериментальных значений становится больше. Для удовлетворительного описания равновесных зарядовых распределений в пучках ионов в серебре ($Z_t = 47$) программу ETASNA можно использовать в области значений энергии $E \geq 4$ МэВ/нуклон для ионов углерода и $E \geq 9$ МэВ/нуклон для ионов аргона.

Результаты расчетов равновесного зарядового распределения в пучках ускоренных ионов в углероде по программам CCCS [217] и CASP5 [138] удовлетворительно

согласуются между собой и с экспериментальными данными в области $0.25 \leq E \leq 6.0$ МэВ/нуклон. В этой области значений энергии нет оснований считать, что одна из этих программ оказывается предпочтительней. Правильнее в вычислениях использовать обе программы, считая разницу полученных величин погрешностью теоретического расчета. В области быстрых ($E > 6.0$ МэВ/нуклон) и медленных ($E \leq 0.1$ МэВ/нуклон) столкновений оценки равновесных зарядовых распределений в пучках ускоренных ионов по программе CCCS [217] заметно ближе к экспериментальным данным (рис. 23). Главное преимущество программы CCCS по сравнению с другими теоретическими подходами состоит в том, что она вычисляет не только зарядовые фракции ионов в среде (как ETASNA [119] или CASP5 [138]), но и сечения перезарядки ионов.

Таблица 7. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов углерода ($Z = 6$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (кроме экспериментальных данных представлены также зарядовые фракции, вычисленные по программам CCCS [217], ETASNA [119], CASP5 [138], и результаты расчетов среднего заряда иона \bar{q} (1.11), ширины зарядового распределения d (4.6), параметра асимметрии s (4.11))

Параметр	Эксперимент			CCCS [217]	CASP5 [138]	ETASNA [119]	Эмпирическая модель
	[115]	[228]	[229]				
\bar{q}/Z	0.565	0.565	0.570	0.599	0.577	0.622	0.597
d	0.693	0.650	0.680	0.698	0.739	0.940	0.922
s	-0.180	0.030	-0.072	-0.122	0.013	-0.371	0.0
F_1	0.003	0.0	0.0	0.0	0.0	0.014	—
F_2	0.080	0.062	0.075	0.043	0.082	0.076	—
F_3	0.470	0.516	0.470	0.386	0.439	0.261	—
F_4	0.415	0.394	0.420	0.495	0.412	0.461	—
F_5	0.032	0.028	0.035	0.076	0.067	0.166	—
F_6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.017	—

Таблица 8. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов азота ($Z = 7$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [115]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ETASNA [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.555	0.574	0.545	0.589	0.573
d	0.762	0.711	0.797	0.984	0.947
s	-0.170	-0.081	-0.193	-0.531	0.0
F_1	0.001	0.0	0.0	0.009	—
F_2	0.028	0.012	0.045	0.048	—
F_3	0.253	0.198	0.291	0.172	—
F_4	0.518	0.561	0.466	0.363	—
F_5	0.194	0.219	0.198	0.361	—
F_6	0.006	0.010	0.0	0.040	—

Таблица 9. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кислорода ($Z = 8$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент		CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
	[115]	[230]				
\bar{q}/Z	0.556	0.565	0.555	0.532	0.537	0.552
d	0.840	0.872	0.730	0.901	1.193	0.971
s	-0.130	-0.160	-0.088	-0.075	-0.344	0.0
F_2	0.010	0.008	0.003	0.022	0.055	–
F_3	0.104	0.099	0.080	0.169	0.157	–
F_4	0.407	0.377	0.448	0.419	0.286	–
F_5	0.386	0.392	0.416	0.314	0.311	–
F_6	0.092	0.121	0.053	0.076	0.158	–
F_7	0.001	0.002	0.001	0.0	0.007	–

Таблица 10. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов неона ($Z = 10$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
	[115]				
\bar{q}/Z	0.541	0.523	0.516	0.497	0.519
d	0.926	0.736	0.981	1.427	1.015
s	-0.090	-0.107	-0.051	-0.237	0.0
F_3	0.019	0.008	0.042	0.105	–
F_4	0.133	0.134	0.201	0.206	–
F_5	0.377	0.508	0.389	0.272	–
F_6	0.369	0.324	0.282	0.231	–
F_7	0.094	0.026	0.085	0.115	–
F_8	0.008	0.0	0.0	0.026	–

Таблица 11. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов серы ($Z = 16$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [230]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.461	0.454	0.483	0.468	0.454
d	1.070	0.780	1.129	1.713	1.138
s	0.096	0.005	-0.059	-0.376	0.0
F_3	0.0003	0.0	0.0	0.013	—
F_4	0.0021	0.0	0.0	0.026	—
F_5	0.025	0.007	0.023	0.045	—
F_6	0.172	0.136	0.112	0.162	—
F_7	0.355	0.481	0.284	0.238	—
F_8	0.303	0.330	0.337	0.236	—
F_9	0.119	0.044	0.188	0.162	—
F_{10}	0.022	0.001	0.056	0.077	—
F_{11}	0.0015	0.0	0.0	0.025	—

Таблица 12. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E = 0.25$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [215]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.434	0.440	0.484	0.441	0.439
d	1.250	0.812	1.148	1.950	1.178
s	-0.200	0.044	-0.062	-0.630	0.0
F_4	0.006	0.0	0.0	0.034	—
F_5	0.032	0.001	0.0	0.060	—
F_6	0.104	0.028	0.026	0.089	—
F_7	0.234	0.268	0.117	0.115	—
F_8	0.338	0.484	0.282	0.264	—
F_9	0.214	0.200	0.330	0.222	—
F_{10}	0.061	0.019	0.187	0.126	—
F_{11}	0.010	0.0	0.058	0.049	—
F_{12}	0.001	0.0	0.0	0.013	—

Таблица 13. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов бора ($Z = 5$) с энергией $E = 0.50$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [228]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.746	0.771	0.746	0.769	0.764
d	0.640	0.613	0.694	0.771	0.830
s	0.214	-0.212	-0.079	-0.140	0.0
F_2	0.0046	0.011	0.028	0.027	—
F_3	0.3660	0.237	0.330	0.301	—
F_4	0.5285	0.638	0.528	0.472	—
F_5	0.1009	0.115	0.114	0.200	—

Таблица 14. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов углерода ($Z = 6$) с энергией $E = 0.50$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент		CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
	[228]	[229]				
\bar{q}/Z	0.697	0.693	0.731	0.708	0.749	0.728
d	0.630	0.650	0.669	0.694	0.796	0.870
s	0.222	0.038	-0.196	0.080	-0.073	0.0
F_2	0.0	0.005	0.002	0.0	0.006	—
F_3	0.1047	0.120	0.075	0.123	0.075	—
F_4	0.6212	0.605	0.481	0.534	0.432	—
F_5	0.2587	0.255	0.418	0.318	0.390	—
F_6	0.0154	0.015	0.024	0.025	0.097	—

Таблица 15. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов серы ($Z = 16$) с энергией $E = 0.531$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [231]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.567	0.575	0.583	0.602	0.574
d	1.130	0.822	1.147	1.558	1.118
s	-0.060	-0.041	0.051	-0.129	0.0
F_6	0.00997	0.0	0.0	0.018	—
F_7	0.0698	0.0143	0.054	0.063	—
F_8	0.219	0.167	0.180	0.145	—
F_9	0.349	0.466	0.328	0.229	—
F_{10}	0.259	0.308	0.288	0.248	—
F_{11}	0.0827	0.043	0.122	0.181	—
F_{12}	0.00997	0.001	0.028	0.085	—
F_{13}	0.00045	0.0	0.0	0.024	—

Таблица 16. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E = 0.488$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [215]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.537	0.544	0.563	0.584	0.542
d	1.200	0.848	1.180	1.619	1.164
s	-0.011	-0.058	0.093	-0.163	0.0
F_6	0.003	0.0	0.0	0.007	—
F_7	0.026	0.003	0.0	0.015	—
F_8	0.133	0.052	0.086	0.073	—
F_9	0.282	0.300	0.215	0.160	—
F_{10}	0.315	0.457	0.326	0.235	—
F_{11}	0.184	0.175	0.252	0.237	—
F_{12}	0.050	0.014	0.100	0.164	—
F_{13}	0.008	0.0	0.022	0.077	—

Таблица 17. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кислорода

($Z = 8$) с энергией $E = 0.82$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [232]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.751	0.764	0.770	0.792	0.762
d	0.744	0.681	0.698	0.819	0.884
s	-0.060	-0.168	-0.029	-0.148	0.0
F_4	0.020	0.008	0.0	0.013	—
F_5	0.196	0.151	0.216	0.112	—
F_6	0.557	0.568	0.524	0.470	—
F_7	0.210	0.267	0.259	0.338	—
F_8	0.017	0.007	0.0	0.067	—

Таблица 18. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов алюминия

($Z = 13$) с энергией $E = 0.82$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [233]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.686	0.682	0.686	0.730	0.678
d	1.080	0.776	1.041	1.286	1.022
s	-0.163	-0.106	0.021	-0.096	0.0
F_4	0.000033	0.0	0.0	0.0	—
F_5	0.0008	0.0	0.0	0.002	—
F_6	0.0122	0.001	0.0	0.011	—
F_7	0.080	0.032	0.090	0.045	—
F_8	0.259	0.266	0.261	0.129	—
F_9	0.374	0.512	0.367	0.242	—
F_{10}	0.212	0.180	0.220	0.304	—
F_{11}	0.063	0.009	0.063	0.209	—
F_{12}	0.0023	0.0	0.0	0.042	—

Таблица 19. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов серы ($Z = 16$) с энергией $E = 0.82$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [231]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.631	0.648	0.650	0.683	0.644
d	1.140	0.810	1.140	1.468	1.093
s	-0.088	-0.045	0.029	-0.232	0.0
F_6	0.0008	0.0	0.0	0.002	—
F_7	0.0100	0.0	0.0	0.010	—
F_8	0.0601	0.008	0.046	0.041	—
F_9	0.205	0.117	0.167	0.113	—
F_{10}	0.351	0.441	0.324	0.211	—
F_{11}	0.265	0.369	0.300	0.267	—
F_{12}	0.0951	0.063	0.132	0.220	—
F_{13}	0.0120	0.002	0.031	0.111	—
F_{14}	0.0007	0.0	0.0	0.027	—

Таблица 20. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кислорода ($Z = 8$) с энергией $E = 1.24$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [232]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.811	0.840	0.821	0.831	0.832
d	0.750	0.640	0.750	0.845	0.824
s	-0.050	-0.286	-0.036	-0.268	-0.001
F_5	0.075	0.025	0.065	0.068	—
F_6	0.442	0.307	0.393	0.351	—
F_7	0.402	0.590	0.448	0.425	—
F_8	0.081	0.078	0.094	0.150	—

Таблица 21. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов углерода ($Z = 6$) с энергией $E = 2.65$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.966	0.973	0.954	0.973	0.973
d	0.424	0.375	0.448	0.400	0.508
s	-1.840	-1.949	-0.997	-2.251	-1.526
F_4	0.0093 ± 0.0001	0.002	0.0	0.009	–
F_5	0.1838 ± 0.0004	0.159	0.277	0.153	–
F_6	0.8069 ± 0.0005	0.839	0.723	0.840	–

Таблица 22. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кислорода ($Z = 8$) с энергией $E = 2.65$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.933	0.940	0.917	0.945	0.938
d	0.630	0.552	0.600	0.610	0.654
s	-0.820	-0.592	0.286	-1.140	-0.269
F_5	0.0024 ± 0.0001	0.0	0.0	0.003	–
F_6	0.0668 ± 0.0012	0.027	0.067	0.054	–
F_7	0.3935 ± 0.0014	0.423	0.519	0.330	–
F_8	0.5374 ± 0.0024	0.551	0.413	0.614	–

Таблица 23. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов неона ($Z = 10$) с энергией $E = 2.65$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.907	0.905	0.905	0.926	0.905
d	0.764	0.645	0.717	0.749	0.754
s	-0.431	-0.215	-0.324	-0.760	-0.052
F_7	0.0189 ± 0.0002	0.007	0.014	0.014	–
F_8	0.1965 ± 0.0016	0.162	0.196	0.141	–
F_9	0.4769 ± 0.0016	0.604	0.527	0.433	–
F_{10}	0.3065 ± 0.0028	0.227	0.264	0.414	–

Таблица 24. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кремния ($Z = 14$) с энергией $E = 2.65$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.874	0.857	0.857	0.909	0.851
d	0.925	0.790	0.807	0.948	0.899
s	-0.262	-0.085	-0.350	-0.564	-0.004
F_9	0.0035 ± 0.0006	0.001	0.0	0.002	–
F_{10}	0.0326 ± 0.0022	0.022	0.036	0.014	–
F_{11}	0.1403 ± 0.0030	0.229	0.218	0.081	–
F_{12}	0.4436 ± 0.0040	0.495	0.468	0.282	–
F_{13}	0.3026 ± 0.0041	0.238	0.274	0.408	–
F_{14}	0.0774 ± 0.0025	0.016	0.004	0.213	–

Таблица 25. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов углерода ($Z = 6$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.991	0.991	0.998	0.995	0.995
d	0.225	0.224	0.104	0.226	0.324
s	-4.168	-4.076	-9.377	-4.488	-4.557
F_4	0.0006 ± 0.0001	0.0	0.0	0.001	–
F_5	0.0512 ± 0.0004	0.052	0.011	0.050	–
F_6	0.9482 ± 0.0004	0.948	0.989	0.949	–

Таблица 26. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кислорода ($Z = 8$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.981	0.978	0.967	0.984	0.977
d	0.400	0.391	0.440	0.386	0.502
s	-2.059	-1.832	-1.077	-2.478	-1.938
F_6	0.0069 ± 0.0001	0.003	0.0	0.005	–
F_7	0.1591 ± 0.0018	0.173	0.263	0.142	–
F_8	0.8340 ± 0.0011	0.824	0.737	0.853	–

Таблица 27. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов неона ($Z = 10$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.963	0.955	0.950	0.971	0.956
d	0.559	0.554	0.546	0.519	0.621
s	-1.255	-0.715	-0.413	-1.581	-0.679
F_7	0.0011 ± 0.0001	0.0	0.0	0.001	–
F_8	0.0367 ± 0.0005	0.028	0.024	0.026	–
F_9	0.2912 ± 0.0040	0.396	0.446	0.246	–
F_{10}	0.6710 ± 0.0035	0.576	0.530	0.727	–

Таблица 28. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов магния ($Z = 12$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [117]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.949	0.936	0.936	0.963	0.935
d	0.713	0.673	0.655	0.630	0.714
s	-0.906	-0.418	-0.316	-1.228	-0.233
F_9	0.0111 ± 0.0002	0.005	0.0	0.003	–
F_{10}	0.1019 ± 0.0076	0.121	0.127	0.060	–
F_{11}	0.3752 ± 0.0024	0.506	0.523	0.331	–
F_{12}	0.5118 ± 0.0096	0.368	0.350	0.606	–

Таблица 29. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кремния

($Z = 14$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.941	0.919	0.920	0.959	0.915
d	0.770	0.738	0.781	0.704	0.791
s	-0.592	-0.281	-0.280	-1.076	-0.084
F_{10}	0.0010 ± 0.0001	0.001	0.0	0.001	–
F_{11}	0.0181 ± 0.0003	0.030	0.036	0.009	–
F_{12}	0.1666 ± 0.0027	0.254	0.269	0.094	–
F_{13}	0.4412 ± 0.0030	0.535	0.485	0.376	–
F_{14}	0.3732 ± 0.0032	0.180	0.210	0.521	–

Таблица 30. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов аргона

($Z = 18$) с энергией $E = 4.30$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [117]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.909	0.884	0.864	0.944	0.879
d	0.950	0.837	0.957	0.888	0.919
s	-0.293	-0.104	-0.011	-0.740	-0.014
F_{13}	0.0027 ± 0.0005	0.002	0.0	0.001	–
F_{14}	0.0260 ± 0.0009	0.039	0.037	0.007	–
F_{15}	0.1352 ± 0.0048	0.257	0.235	0.048	–
F_{16}	0.3836 ± 0.0010	0.477	0.447	0.214	–
F_{17}	0.3462 ± 0.0028	0.207	0.243	0.422	–
F_{18}	0.1063 ± 0.0030	0.018	0.038	0.308	–

Таблица 31. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов углерода ($Z = 6$) с энергией $E = 6.0$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.9833	0.9965	1.0	0.9987	0.9998
d	0.137	0.088	0.0	0.140	0.095
s	-7.080	-11.15	-	-7.253	-6.029
F_5	0.019	0.021	0.0	0.018	-
F_6	0.981	0.979	1.0	0.982	-

Таблица 32. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов неона ($Z = 10$) с энергией $E = 6.0$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [216]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.983	0.979	0.978	0.988	0.979
d	0.403	0.421	0.416	0.364	0.513
s	-2.129	-1.632	-1.338	-2.609	-2.082
F_8	0.009	0.005	0.0	0.006	-
F_9	0.153	0.201	0.222	0.127	-
F_{10}	0.838	0.794	0.778	0.869	-

Таблица 33. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов кремния ($Z = 14$) с энергией $E = 6.0$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [234]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.968	0.950	0.947	0.979	0.948
d	0.614	0.659	0.646	0.540	0.697
s	-0.823	-0.520	-0.312	-1.611	-0.460
F_{12}	0.058	0.102	0.112	0.031	–
F_{13}	0.330	0.490	0.514	0.255	–
F_{14}	0.612	0.408	0.374	0.714	–

Таблица 34. Равновесное зарядовое распределение в пучках ускоренных ионов аргона ($Z = 18$) с энергией $E = 6.0$ МэВ/нуклон в углероде ($Z_t = 6$) (обозначения как в табл. 7)

Параметр	Эксперимент [216]	CCCS [217]	CASP5 [138]	ЕТАСНА [119]	Эмпирическая модель
\bar{q}/Z	0.947	0.922	0.924	0.967	0.919
d	0.858	0.810	0.828	0.689	0.836
s	-0.823	-0.206	-0.101	-1.107	-0.104
F_{15}	0.0354	0.079	0.082	0.009	–
F_{16}	0.1901	0.358	0.346	0.083	–
F_{17}	0.4345	0.444	0.427	0.355	–
F_{18}	0.3332	0.119	0.145	0.553	–

4.3. Распределение по заряду отраженных от поверхности ионов

В общем случае доля отраженных от поверхности атомов ($q = 0$) зависит от угла скольжения α и угла рассеяния θ [235–237] и определяется отношением [238]:

$$F_0(E, \alpha, \theta) = J_0(E, \alpha, \theta) / J(E, \alpha, \theta), \quad (4.14)$$

где $J_0(E, \alpha, \theta)$ – количество отраженных поверхностью атомов, $J(E, \alpha, \theta)$ – количество всех отраженных частиц. Моделирование отражения ионов от поверхности проводилось методом Монте-Карло [239, 240] с оценкой зарядовых фракций на основе расчета сечений перезарядки [238]. В области быстрых столкновений ($E_0 > 100$ кэВ) глубина проникновения ускоренных ионов в мишень в несколько раз превышает глубину проникновения ускоренных ионов при падении по нормали к поверхности ($\alpha = 90^\circ$) с такой же перпендикулярной составляющей скорости [241]. В этом случае быстрый ион ($E_0 > 100$ кэВ) при небольших углах падения ($0.5^\circ < \alpha < 10^\circ$) теряет большую часть своей энергии, а пик в распределении по энергии отраженных от поверхности ионов отсутствует. В этой области значений энергии E_0 и углов скольжения α распределение по энергии отраженных от поверхности ионов представляется в виде широкого максимума в диапазоне $0 < E < E_0$. Максимум распределения $J(E, \alpha, \theta)$ от E достигается при энергии, которая зависит от углов α и θ [235–237]. Из-за большого числа столкновений, которое испытывает ион при отражении от поверхности, зарядовое распределение отраженных частиц становится равновесным, а величина зарядовых фракций для отраженных поверхностью частиц определяется соотношением сечений потери и захвата электрона при данной энергии E и не зависит от заряда q_0 налетающей частицы.

Зависимость доли атомов в отраженном от поверхности пучке от углов скольжения α и рассеяния θ связана с влиянием поверхностных эффектов на зарядовое распределение отраженных поверхностью ионов. При малых углах отражения ($\theta - \alpha$) ион значительное время находится вблизи поверхности. Взаимодействие иона с электронами и атомами

мишени может привести к перераспределению отраженных ионов по углам рассеяния θ , а также к захвату или потере одного из электронов ионом. Разделить эти особенности, связанные с поверхностными эффектами, сложно, так как регистрация отраженных ионов происходит на большом расстоянии от поверхности, а не в момент вылета иона из мишени.

Измерения энергетического распределения для всех рассеянных частиц с любым зарядом и отдельно для атомов позволили экспериментально определить зависимость нейтральной фракции $F_0(E, \alpha, \theta)$ от углов α и θ в широком диапазоне изменения значений энергии [238]. Уменьшение количества отраженных от поверхности атомов с увеличением энергии E объясняется уменьшением сечения захвата электрона однозарядными ($q = 1$) ионами по сравнению с сечением потери электрона атомами. Для экспериментального определения этой зависимости проводилось усреднение $F_0(E, \alpha, \theta)$ по θ

$$\langle F_0(E, \alpha) \rangle = \frac{1}{\Delta\theta} \int d\theta F_0(E, \alpha, \theta) \quad (4.15)$$

в диапазоне углов рассеяния $\Delta\theta = 3^\circ - 5^\circ$.

Результаты измерения (рис. 46) показывают, что при $\theta \geq 3^\circ$ величина F_0 зависит от θ в пределах экспериментальной погрешности во всем энергетическом диапазоне. В области значений $E < 150$ кэВ количество атомов в пучке рассеянных частиц при $\theta = 2^\circ$ заметно меньше, чем при $\theta \geq 3^\circ$, а в области $E \geq 150$ кэВ F_0 практически не зависит от угла рассеяния θ . Эта особенность связана с взаимодействием рассеянных ионов с электронами и атомами мишени. Если перпендикулярная составляющая скорости рассеянных частиц небольшая, взаимодействие с мишенью приводит к перераспределению частиц в рассеянном пучке, в результате которого количество ионов увеличивается при малых углах рассеяния, а относительное количество отраженных атомов уменьшается. Анализ результатов для разных α показал, что зависимость нейтральной

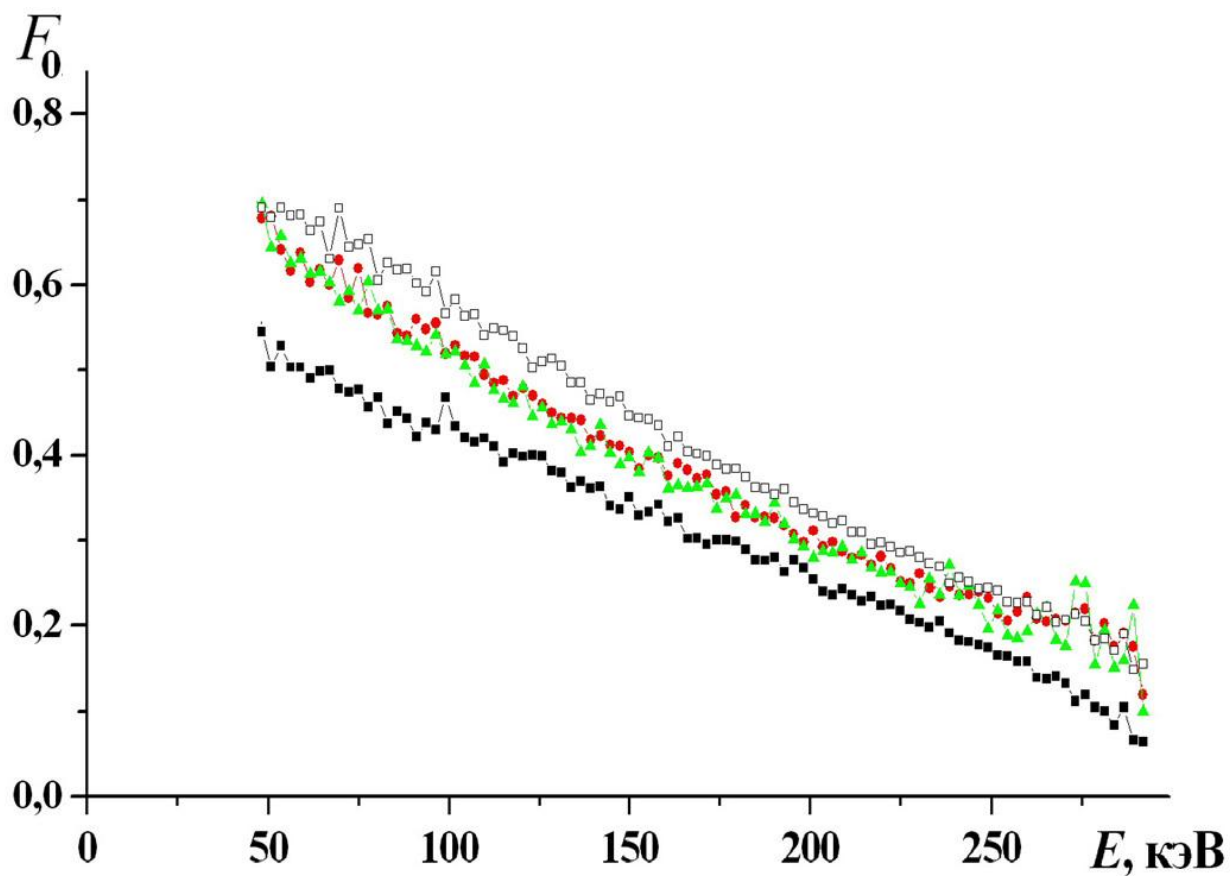


Рис. 46. Относительное количество атомов гелия, измеренное [208] при отражении от медной поверхности, в случае столкновений He^0 с энергией $E_0 = 300$ кэВ при угле скольжения $\alpha = 1^\circ$ и угле рассеяния θ : (■) 2° ; (●) 3° ; (▲) 5° ; (□) 6° .

равновесной фракции F_0 от угла рассеяния θ исчезает при угле скольжения $\alpha \geq 2^\circ$. Этот эффект влияния поверхности на зарядовые распределения рассеянных ионов гелия проявляется в той же области изменения α и скоростей рассеянных частиц, как и в экспериментах с протонами и атомами водорода [155]. Однако уменьшение F_0 при угле рассеяния $\theta = 2^\circ$ по сравнению со значениями в диапазоне углов $\theta \geq 3^\circ$ для атомов гелия заметно больше.

Предложенный в диссертации метод оценки зарядовых распределений ионов позволяет вычислить зарядовые распределения отраженных от поверхности ионов без учета поверхностных эффектов. Экспериментальная оценка области значений энергии E и углов рассеяния ($\theta - \alpha$), где начинает проявляться влияние поверхностных эффектов, важна для определения области применимости этого метода. Для каждого набора параметров (энергия E , заряд ядра иона Z , начальный заряд q_0 иона, состав мишени, углы падения α и рассеяния θ) область влияния поверхностных эффектов на зарядовые распределения отраженных от поверхности ионов разная и требует специального исследования.

Если в экспериментах по отражению ионов от поверхности или в теоретическом моделировании методом Монте-Карло получено энергетическое и угловое распределение частиц с любым зарядом $J(E, \alpha, \theta)$, то распределение отраженных ионов с определенным зарядом q вычисляется умножением исходного распределения на F_q [242, 243]. На рис. 47 представлена усредненная по углу рассеяния нейтральная фракция (4.15) при отражении от медной поверхности протонов [155] и атомов гелия. В области $E = 30\text{--}40$ кэВ/нуклон значение нейтральной фракции в экспериментах с атомами гелия близко к значениям в экспериментах с атомами водорода. С увеличением энергии E доля атомов гелия в рассеянном пучке оказывается значительно ниже, чем доля атомов водорода при той же скорости рассеянных частиц. Это связано с присутствием в

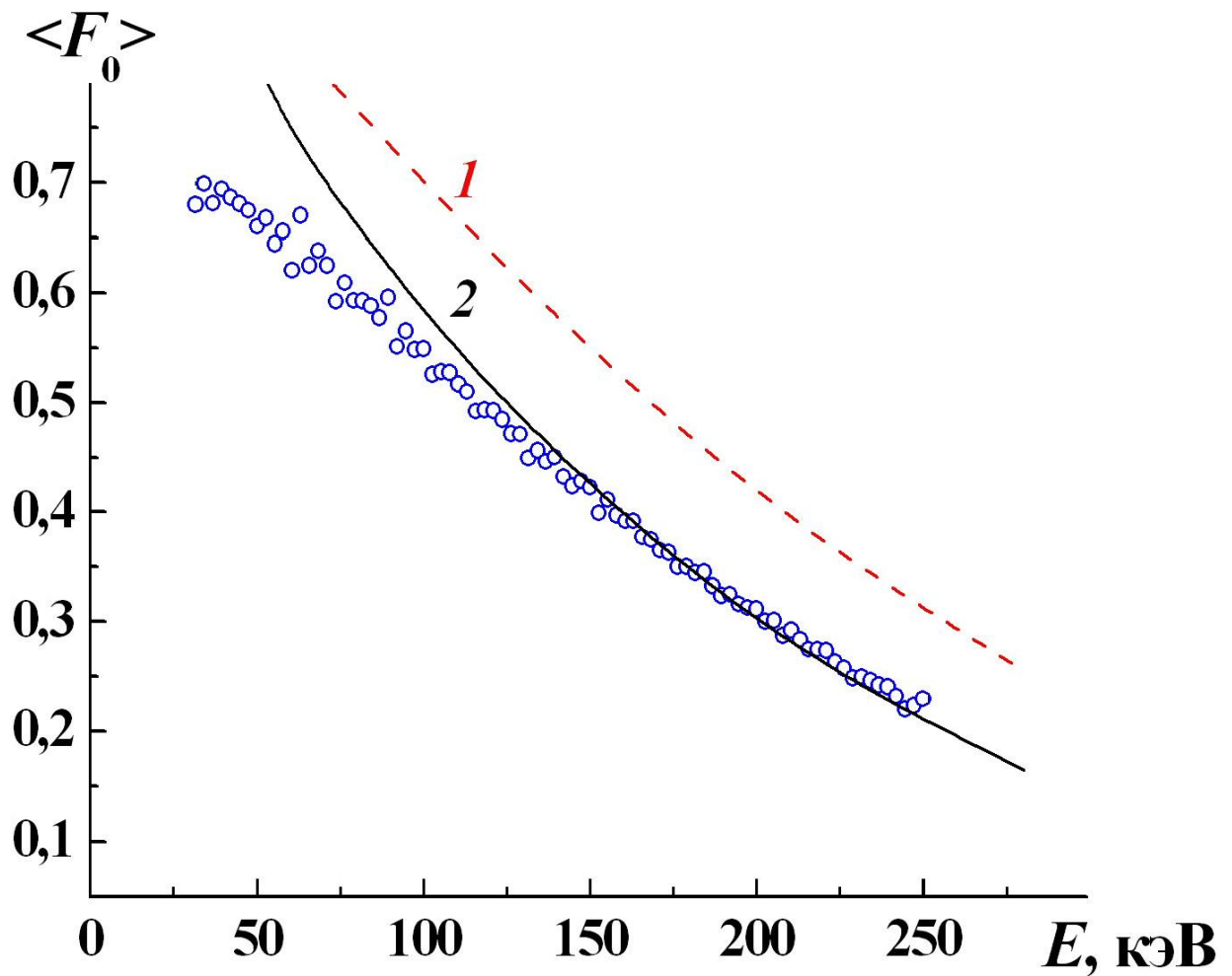


Рис. 47. Относительное количество атомов гелия, отраженных от медной поверхности при энергии $E_0 = 300$ кэВ и угле скольжения $\alpha = 1^\circ$. Экспериментальные данные [208] для падающих на поверхность пучков He^0 усреднены по углу рассеяния θ и обозначены кружками. Теоретические оценки: 1 – без учета эффекта плотности; 2 – с учетом эффекта плотности.

рассеянном пучке ионов He^{2+} , которые уменьшают долю ионов He^+ и вероятность образования атомов гелия. Отметим также, что величина нейтральной фракции (4.15) для падающих ионов He^+ и атомов He^0 совпадает в пределах экспериментальной погрешности во всем энергетическом диапазоне (рис. 47), т.е. зарядовое распределение отраженных поверхностью частиц не зависит от их начального заряда q_0 . Теоретические оценки, полученные без учета эффекта плотности, дают завышенное по сравнению с экспериментальными данными значение нейтральной фракции во всем диапазоне значений энергии E (рис. 47).

Метод расчета зарядовых распределений ионов на основе сечений перезарядки позволяет проводить оценку зарядового распределения быстрых ионов, отраженных от поверхности. Результаты расчетов на рис. 48 для отражения от медной поверхности ускоренных ионов азота N^+ с энергией $E_0 = 300$ кэВ указывают на значительные потери энергии ионов. Это позволяет считать, что вследствие большого количества столкновений ионов с атомами мишени в зарядовом распределении отраженных поверхностью частиц установилось равновесное распределение. Углы падения α и рассеяния θ достаточно велики, чтобы не учитывать взаимодействие отраженных ионов с поверхностью. Энергетическое распределение отраженных атомов N^0 оказывается куполообразным (рис. 48) с максимумом при $E = 75\text{--}80$ кэВ, а распределение отраженных ионов N^+ – с максимумом при $E = 120\text{--}140$ кэВ. Отметим, что доля ионов азота N^{q+} ($q \geq 2$) в этой области значений энергии составляет менее 1%. Так как энергетические распределения отраженных ионов N^+ и атомов азота N^0 широкие и частично перекрываются, то различие в положении их максимумов не проявляется на энергетическом распределении всех отраженных частиц [235], которое в пределах экспериментальной погрешности можно считать плавным.

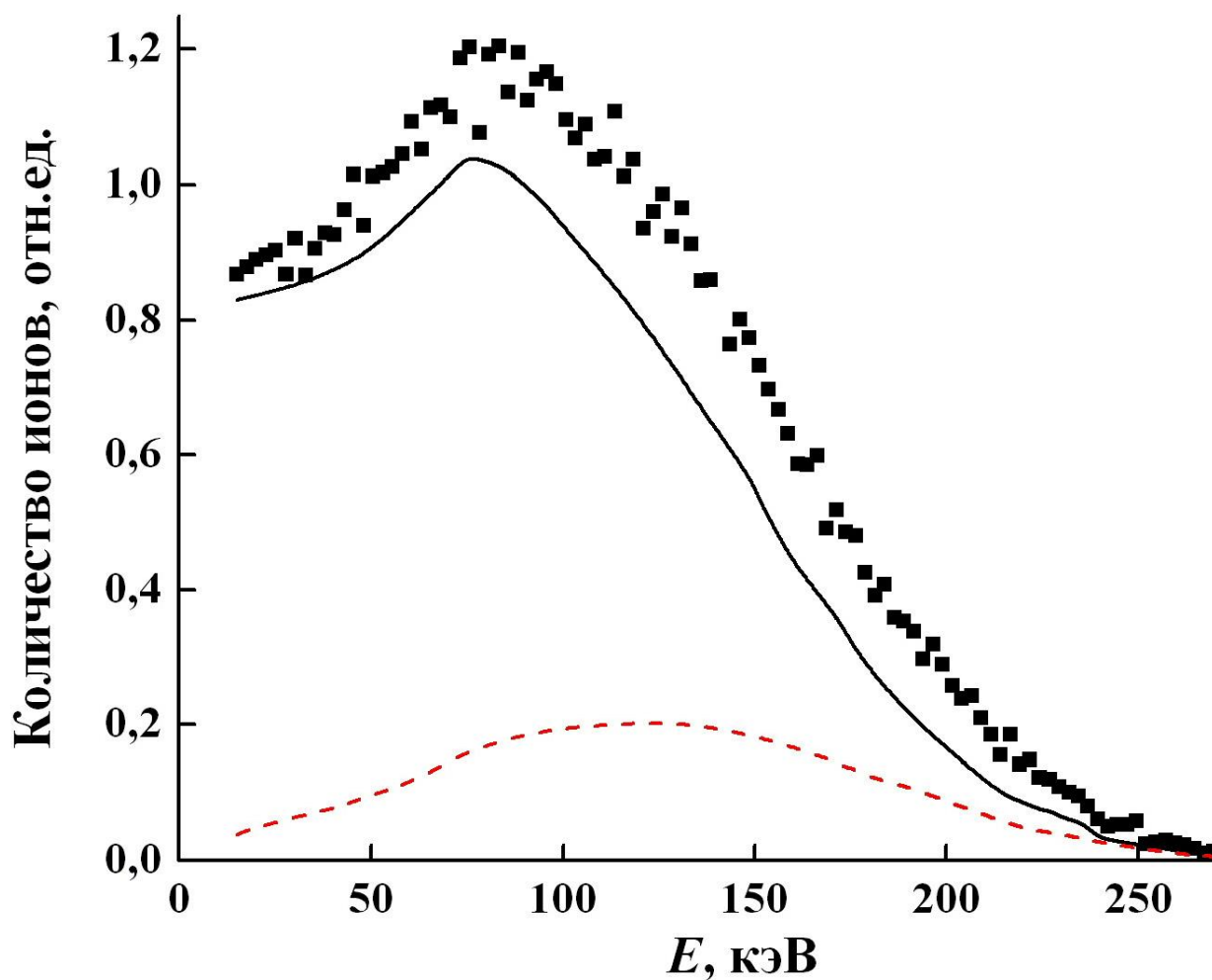


Рис. 48. Энергетическое распределение ионов и атомов азота, отраженных медной поверхностью, при энергии $E_0 = 300$ кэВ налетающих ионов азота N^+ , угле падения $\alpha = 4^\circ$ и угле рассеяния $\theta = 8^\circ$: (■) – экспериментальные данные для всех отраженных частиц [235]; сплошная и пунктирная линии – результаты расчета распределения отраженных атомов N^0 и ионов N^+ соответственно.

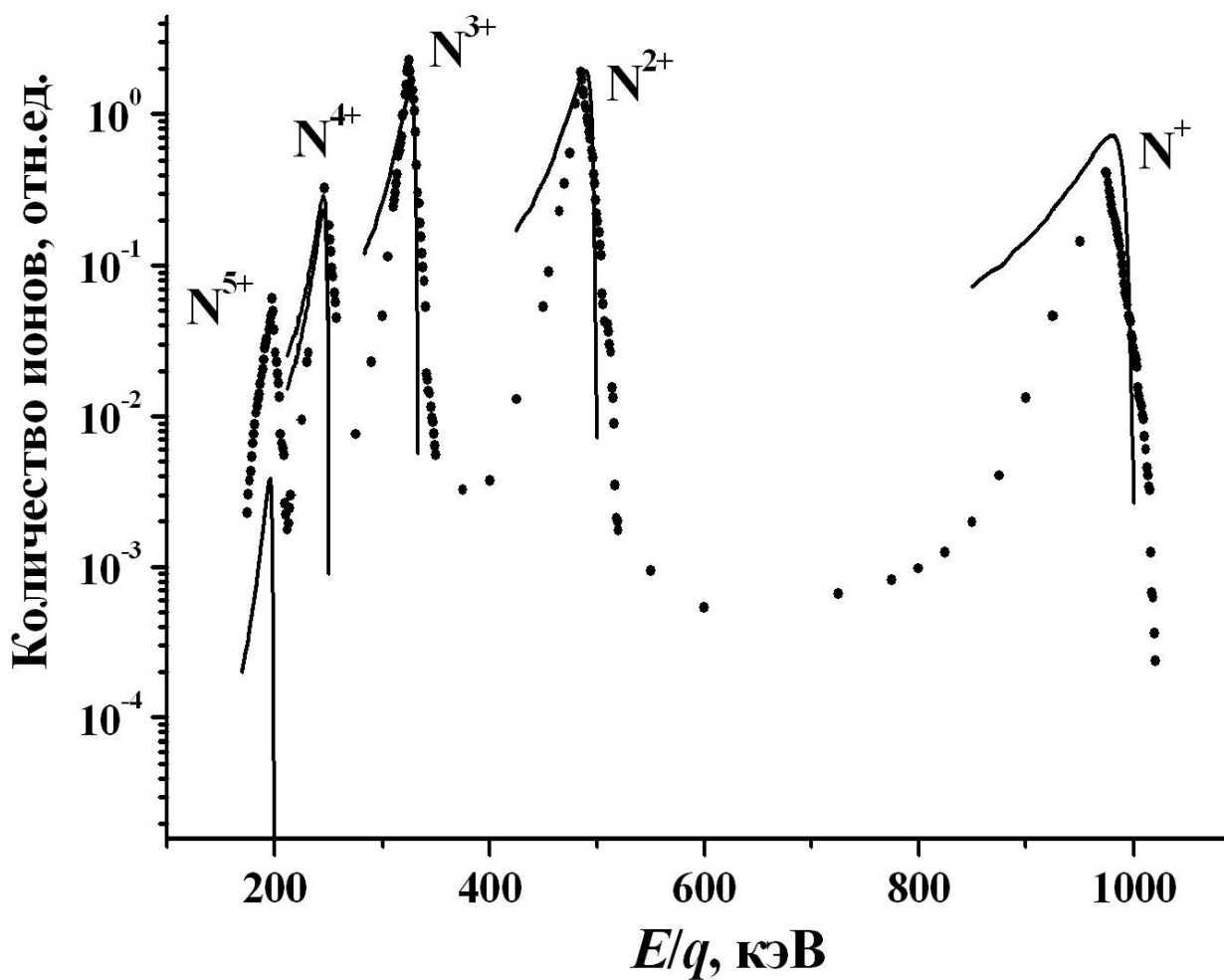


Рис. 49. Энергетическое распределение ускоренных ионов азота с энергией $E_0 = 1$ МэВ, отраженных от платиновой поверхности при угле скольжения $\alpha = 0.2^\circ$ и угле рассеяния $\theta = 1^\circ$, в зависимости от отношения E/q : сплошная линия – результат расчета; точки – экспериментальные данные [160].

Выделить в энергетическом распределении отраженных от поверхности ионов $J(E, \alpha, \theta)$ вклад ионов с определенным зарядом можно, если измерить зависимость количества отраженных поверхностью ионов от отношения E/q . В этом случае на зависимости количества частиц, отраженных поверхностью, появляются максимумы, соответствующие различным зарядам иона q [160, 161]. Форма максимумов для разных q похожа, но их амплитуда разная (рис. 49), она пропорциональна равновесной зарядовой фракции F_q в данной области значений энергии E . Проведенные расчеты позволили получить хорошее согласие между теоретическими и экспериментальными относительными величинами максимумов для ионов азота N^{q+} ($q = 1-4$). Количество отраженных ионов с уменьшением энергии уменьшается в расчетах медленнее, чем в эксперименте. Это связано с тем, что эксперимент проводился на монокристалле платины, а рассматриваемая теоретическая модель учитывает взаимодействие иона с аморфной мишенью.

4.4. Вклад процессов перезарядки в потери энергии ускоренных ионов

Полученные сечения перезарядки с учетом эффекта плотности позволяют проанализировать вклад процессов потери и захвата электронов в неупругие потери энергии ускоренных ионов и рассмотреть особенности неупругих потерь энергии, возникающие при замене газовой мишени твердой.

Потери энергии ионов S можно представить в виде суммы упругих S_n и неупругих S_e потерь энергии [145]:

$$S = S_n + S_e. \quad (4.16)$$

При рассмотрении неупругих потерь энергии S_e учитываются вклады трех процессов [244, 245]:

$$S_e = S_{q\pm 1} + S_i + S_{nl}, \quad (4.17)$$

$$S_{q\pm 1} = \sum_j \rho_j \sum_q F_q \left[\sigma_{q,q+1} \left(\frac{mV^2}{2} + |\varepsilon_q| \right) + \sigma_{q,q-1} \left(\frac{mV^2}{2} - |\varepsilon_{q-1}| \right) \right], \quad (4.18)$$

$$S_i = \sum_q F_q q^2 \sum_j \rho_j \sum_\lambda \sigma_\lambda^j [|\varepsilon_\lambda^j| + \langle E_\lambda^j \rangle], \quad (4.19)$$

$$S_{nl} = \sum_q F_q q^2 \sum_j \rho_j \sum_{nl} \sigma_{nl}^j |\varepsilon_{nl}^j|, \quad (4.20)$$

где $S_{q\pm 1}$ – потери энергии в процессах перезарядки ионов, S_i и S_{nl} – потери энергии в процессах ионизации и возбуждения атома мишени соответственно, m – масса электрона, $\sigma_{q,q\pm 1}^j$ – сечения потери и захвата одного электрона при столкновении иона с зарядом q и атома j -го элемента мишени, $\varepsilon_q, \varepsilon_{q-1}$ – энергия связи валентного электрона иона с зарядом q и $q-1$ соответственно, σ_λ^j и ε_λ^j – сечение и потенциал ионизации λ -оболочки атома ($\lambda = K1, L1, L2 \dots$) j -го элемента мишени протонами, $\langle E_\lambda^j \rangle$ – средняя энергия электрона E_e в непрерывном спектре при ионизации λ -оболочки атома j -го элемента мишени протонами:

$$\langle E_\lambda^j \rangle = \frac{1}{\sigma_\lambda^j} \int dE_e E_e (d\sigma_\lambda^j(E_e) / dE_e), \quad (4.21)$$

σ_{nl}^j и ε_{nl}^j – сечение и энергия возбуждения протонами атома j -го элемента мишени, n и l – квантовые числа ($0 \leq l \leq n$), характеризующие возбужденное состояние атома. В приближении (4.18) считается, что ион захватывает свободный электрон в основное состояние. Процесс захвата электрона в возбужденное состояние иона с последующим испусканием фотона или оже-электрона является дополнительным источником потерь энергии, который в сумму (4.18) не включается.

Представление неупругих потерь энергии в виде (4.17) является уточненным по сравнению с соотношением, введенным в [149]. Здесь учитывается различие энергии связи захватываемого и теряемого ионом электрона в (4.18) и принимается во внимание энергия испускаемого атомом мишени электрона $\langle E_\lambda^j \rangle$ в (4.19). Оценка потерь энергии в виде суммы (4.17) дает возможность представить неупругие потери энергии ускоренных

ионов в виде суммы как по оболочкам каждого элемента мишени, так и по заряду иона. Потери энергии ионов в пучке ускоренных ионов азота с энергией $E > 0.2$ МэВ/нуклон за счет упругих столкновений S_n не превышают 1% [145]. В случае процессов перезарядки в расчетах использовали сечения $\sigma_{q,q\pm 1}^j$ для твердой мишени, но пренебрегали потерей одного из электронов внутренних оболочек иона и захватом электрона в возбужденное состояние иона. Процессы ионизации и возбуждения атома мишени описываются в первом борновском приближении, в котором ион считается бесструктурной частицей. Предложенный метод позволяет представить неупругие потери энергии ионов в твердом многокомпонентном веществе в виде суммы потерь по каналам неупругого взаимодействия, по всем элементам, входящим в состав мишени и всем зарядам q быстрого иона.

Для процессов прохождения ионов азота через целлулоидную пленку было выполнено [244] сравнение (рис. 50) полученных теоретических расчетов, имеющихся экспериментальных данных [149] и результатов расчетов других авторов. Указаны также экспериментальные величины для ускоренных ионов азота в майларе [246, 247], который имеет состав, близкий к целлулоиду. Потери энергии достигают своего максимума в области $E \approx 0.4$ МэВ/нуклон и затем уменьшаются с увеличением E . Максимальное отличие экспериментальных данных, полученных для этих двух близких по составу материалов, составляет около 20%. В расчетах потерь энергии (4.18) учитывалась поправка на эффект плотности, который проявляется в сечениях перезарядки ионов. Для быстрых столкновений ($E > 10$ МэВ/нуклон) результаты расчета (4.17) и теоретические оценки по программам CASP (Convolution Approximation for Swift Particles) [138] и PASS [144] совпадают между собой и с эмпирической оценкой по программе SRIM [145]. При теоретических оценках [138, 144] не учитываются неупругие потери энергии в процессах перезарядки ионов, и поэтому их максимальные значения оказываются меньше эмпирических данных SRIM. Величина потерь энергии, вычисленная по формуле (4.17),

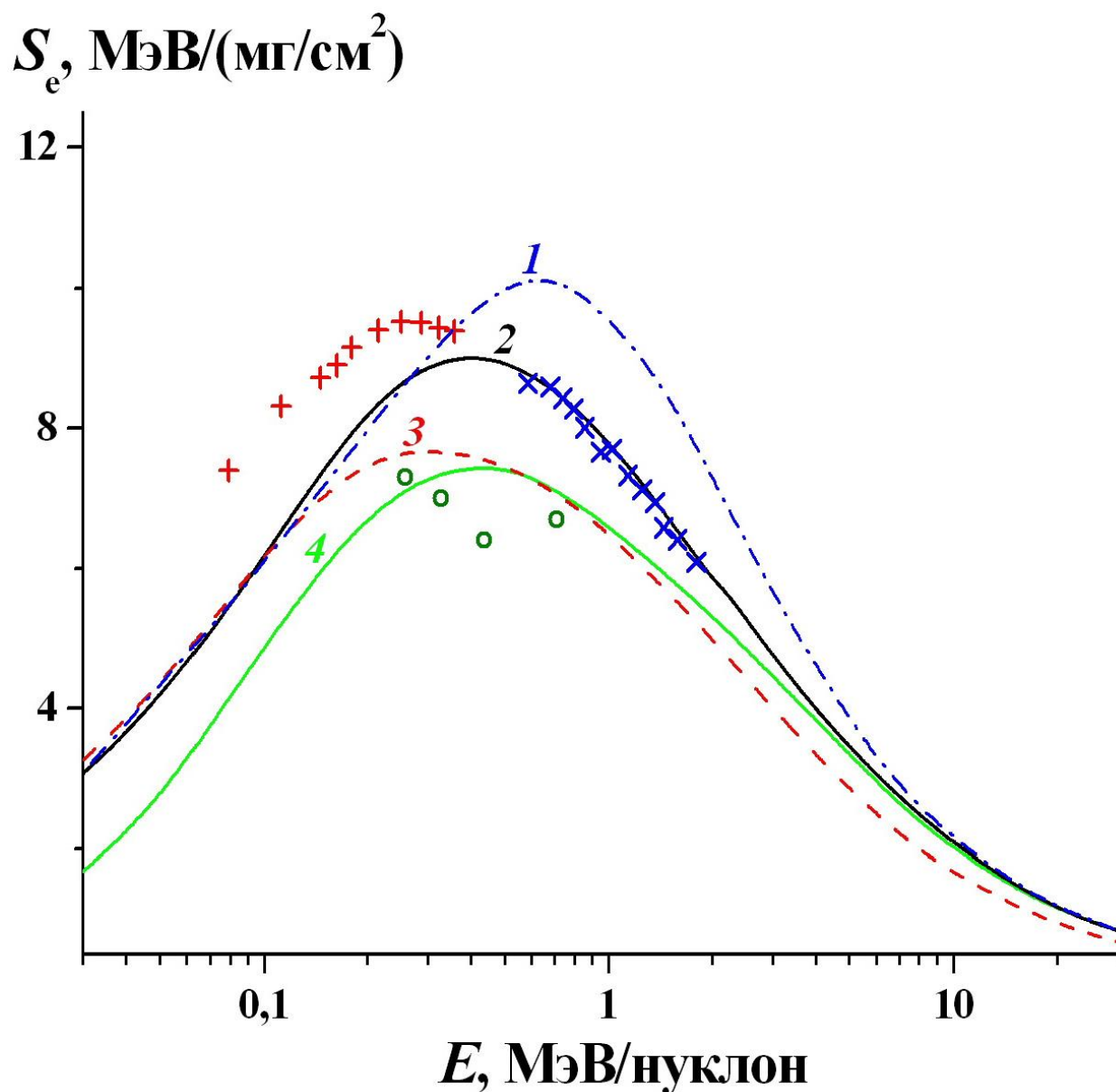


Рис. 50. Зависимость неупругих потерь энергии ускоренных ионов азота в целлюлоиде от энергии. Экспериментальные данные: (o) – для пучков ионов азота в целлюлоиде [149]; (+) (×) – для ионов азота в майларе (mylar) [246] и [247] соответственно. Результаты расчетов: 1 – потери энергии в процессах перезарядки иона (4.18), ионизации (4.19) и возбуждения (4.20) атома мишени; 2 – неупругие потери энергии, рассчитанные по программе SRIM [145]; 3 и 4 – потери энергии в процессах ионизации и возбуждения атома мишени, рассчитанные по программе CASP [138] и PASS [144] соответственно.

на 15–20% превышает максимальные значения SRIM, что соизмеримо с отличиями между экспериментальными результатами. Потери энергии (4.17), как и результаты расчета по CASP, быстро уменьшаются с уменьшением E и при $E < 0.1$ МэВ/нуклон становятся заметно ниже эмпирических данных. Это объясняется тем, что в уравнении (4.17) не учтены неупругие каналы с малыми потерями энергии (образование возбужденных состояний иона, двухступенчатые процессы и так далее).

На рис. 51 приведены результаты расчета потерь энергии ионов азота в целлулоиде в различных процессах. В области значений энергии $E > 0.1$ МэВ/нуклон неупругие потери энергии ионов S_e на порядок превышают вклад упругих потерь энергии ионов S_n в сумме (4.16). Основной вклад в неупругие потери энергии ионов S_e вносят процессы ионизации различных оболочек атома мишени, а вклад процессов перезарядки и возбуждения можно рассматривать как поправку. Потери энергии в процессах перезарядки $S_{q\pm 1}$ уменьшаются с увеличением энергии столкновения E быстрее, чем потери энергии в процессах ионизации (4.19) атома мишени. Связано это с тем, что с увеличением E увеличивается заряд иона q , и сечение потери электрона ионом быстро уменьшается, так как увеличивается энергия связи электрона. В случае процессов ионизации и возбуждения атома мишени, наоборот, чем больше заряд налетающего иона q , тем больше потери энергии $S_i \sim \bar{q}^{-2}$ (4.19), $S_{nl} \sim \bar{q}^{-2}$ (4.20), и только когда ион потеряет все электроны, сечения ионизации и возбуждения начинают уменьшаться с увеличением энергии. Оценка по программе SRIM показывает, что вкладом упругих потерь энергии в области $E > 0.1$ МэВ/нуклон можно пренебречь.

Вклад отдельных слагаемых в выражение (4.17) меняется с увеличением E и зависит от величины равновесных зарядовых фракций F_q . Значение F_q достигает максимума при $q \approx \bar{q}$ (рис. 30). В области значений энергии, в которой $q \approx \bar{q}$, ион с равной вероятностью может как потерять, так и захватить один электрон, и поэтому выполняется

$S_e, \text{МэВ}/(\text{мг}/\text{см}^2)$

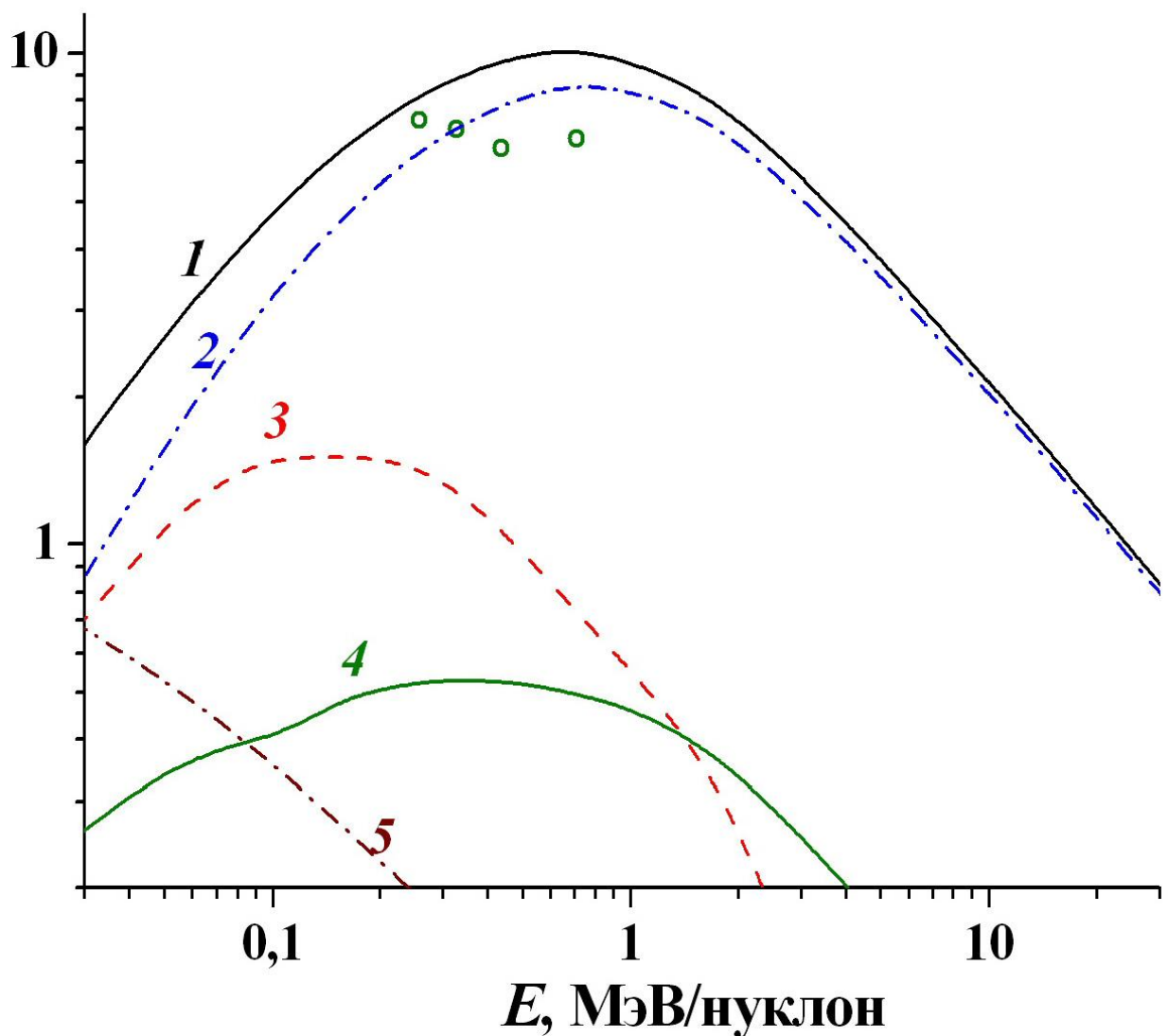


Рис. 51. Зависимость потерь энергии в пучках ускоренных ионов азота в целлулоиде от энергии. Результаты расчетов: 1 – сумма всех неупругих потерь энергии (совпадает с кривой 1 на рис. 50); 2 – потери энергии в процессах ионизации атома мишени (4.19); 3 – потери энергии в процессах перезарядки (4.18); 4 – потери энергии в процессах возбуждения атома мишени (4.20); 5 – потери энергии при упругом рассеянии, вычисленные по программе SRIM. Крестиками (x) обозначены экспериментальные данные для ускоренных ионов азота в целлулоиде [149].

соотношение $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$ [198]. В случае быстрых столкновений при $F_Z \approx 1$ в сумме (4.18) остается только слагаемое с $\sigma_{Z,Z-1}$, и потери энергии (4.18) быстро уменьшаются с увеличением энергии $S_{q\pm 1} \sim E^{-\eta}$, где $\eta \sim 3$.

В общем случае вклады в сумму (4.18) от процессов потери и захвата электрона различны. Так как сечение $\sigma_{q,q+1}$ уменьшается, а сечение $\sigma_{q,q-1}$, наоборот, увеличивается с возрастанием q , то при $q < \bar{q}$ выполняется соотношение $\sigma_{q,q+1} > \sigma_{q,q-1}$, и в сумме (4.18) доминируют слагаемые, связанные с процессами потери электрона. При $q > \bar{q}$, где $\sigma_{q,q+1} < \sigma_{q,q-1}$, ситуация изменяется на обратную. Отметим также, что процессы захвата электрона могут приводить как к увеличению (при $mV^2/2 > |\varepsilon_{q-1}|$), так и к уменьшению (при $mV^2/2 < |\varepsilon_{q-1}|$) потерь энергии ускоренного иона.

Потери энергии ускоренных ионов в процессах перезарядки в твердой мишени вычисляются с помощью сечений перезарядки и равновесных зарядовых фракций:

$$S_{q\pm 1}^s = \sum_q F_q^s \left[\sigma_{q,q+1}^s \left(\frac{mV^2}{2} + |\varepsilon_q| \right) + \sigma_{q,q-1}^s \left(\frac{mV^2}{2} - |\varepsilon_{q-1}| \right) \right], \quad (4.22)$$

где F_q^s , $\sigma_{q,q+1}^s$ и $\sigma_{q,q-1}^s$ – равновесные зарядовые фракции, сечения потери и захвата одного электрона в твердой мишени соответственно. В приближении (4.22) предполагается, что увеличение плотности мишени не изменяет энергию связи электрона в движущемся ионе. Изменение величины потерь энергии в твердых мишенях по сравнению с газами связано, с одной стороны, с увеличением $\sigma_{q,q+1}^s$ и уменьшением $\sigma_{q,q-1}^s$, а с другой стороны, со сдвигом равновесного зарядового распределения F_q^s в сторону больших q , что увеличивает вклад второго слагаемого в (4.22).

Результаты расчетов отношения $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ в различных твердых мишенях (рис. 52), показывают, что вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии зависит от энергии столкновения. Немонотонный характер этой зависимости определяется тем, что

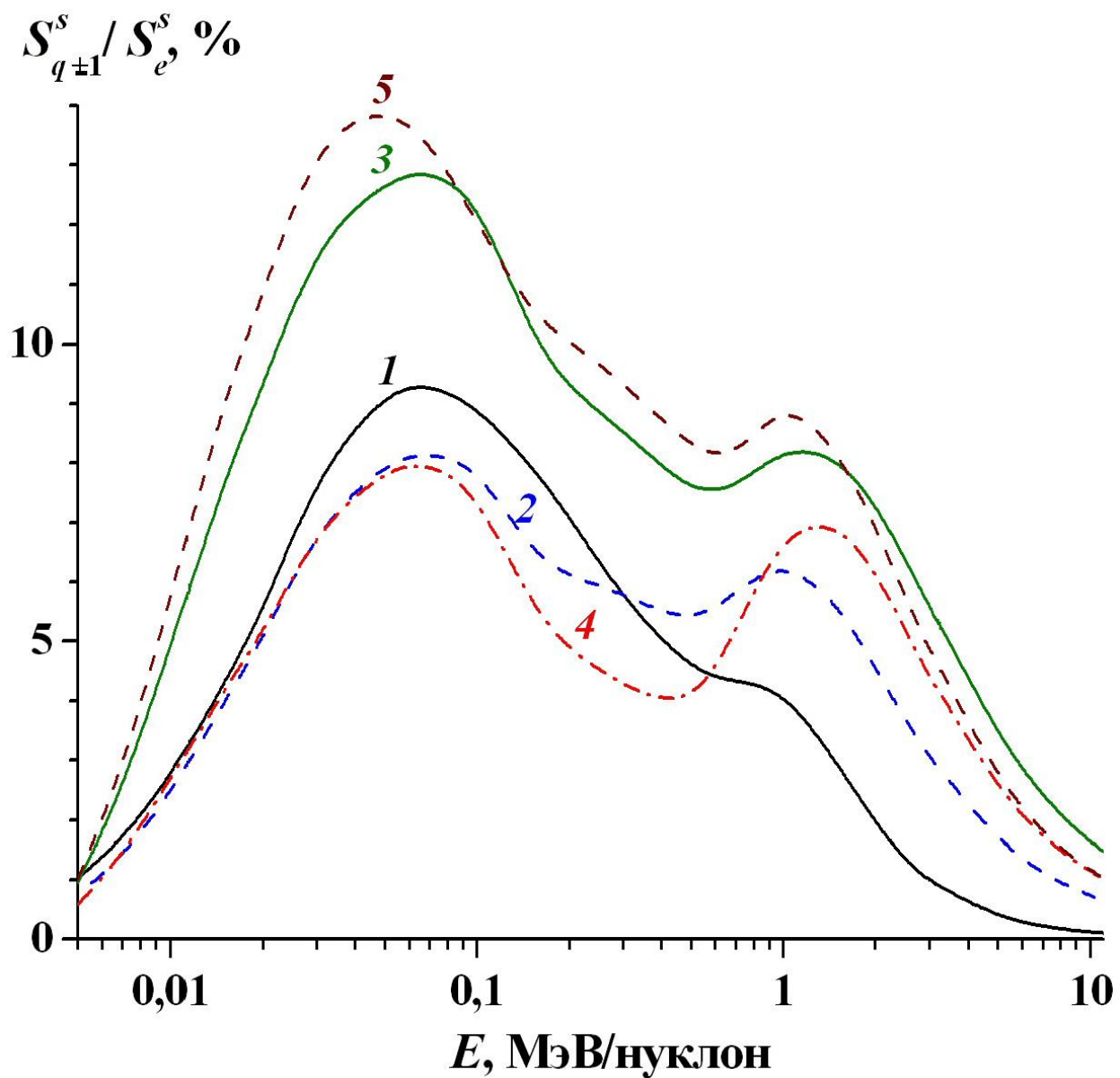


Рис. 52. Отношение потерь энергии в процессах перезарядки к сумме всех неупругих потерь энергии $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ для ускоренных ионов азота ($Z = 7$) в зависимости от энергии E для разных зарядов ядер мишени Z_t : 1 – 6; 2 – 13; 3 – 28; 4 – 42; 5 – 79.

величины F_q^s , $\sigma_{q,q+1}^s$ и $\sigma_{q,q-1}^s$ в сумме (4.22) по-разному зависят от E и q . Отношение $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ достигает своего максимального значения в области $30 \leq E \leq 100$ кэВ/нуклон. Этот энергетический диапазон, в котором влияние процессов перезарядки на неупругие потери энергии является значительным, слабо зависит от заряда ядер атомов мишени. Величина $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ зависит от Z_t немонотонно, но положение максимума функции $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ для разных мишеней от E не зависит. В случае быстрых столкновений, когда ион теряет почти все свои электроны ($E > 10$ МэВ/нуклон), влияние процессов перезарядки на потери энергии становится незначительным.

Вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии ионов возрастает с уменьшением Z (рис. 53). Максимальное значение функции $S_{q\pm 1}^s / S_e^s$ для ионов бора увеличивается примерно в два раза по сравнению с ионами неона и достигает 10–15%.

Представленный метод позволяет провести сравнительный анализ потерь энергии ионов в твердых мишенях и газах. Результаты расчетов по программе SRIM (кривая 1 на рис. 54) показывают, что суммарные неупругие потери энергии быстрых ионов ($E \geq 1$ МэВ/нуклон) в твердой мишени больше, чем в газе ($S_e^s > S_e$), но это превышение составляет не более 2–3%. В области энергии $E \leq 1$ МэВ/нуклон, наоборот $S_e^s < S_e$. Этот факт кажется парадоксальным, так как неупругие потери энергии должны быть пропорциональны квадрату среднего заряда иона (1.12) при $E > E_S$ ($E_S \approx 0.36$ МэВ/нуклон для ионов азота в углероде [145]), а средний заряда в пучке ионов в твердой мишени больше, чем в газе (рис. 28). Результаты расчетов на рис. 54 демонстрируют, что соотношение $S_e \sim q^{-2}$ (1.12) выполняется в углероде для ионов азота с энергией $E > 3$ МэВ/нуклон. Нарушение соотношения (1.12) в области энергии $0.36 < E < 3$ МэВ/нуклон частично объясняется изменением вклада потерь энергии иона в процессах перезарядки при переходе от газа (4.18) к твердой мишени (4.22). Во всем диапазоне E

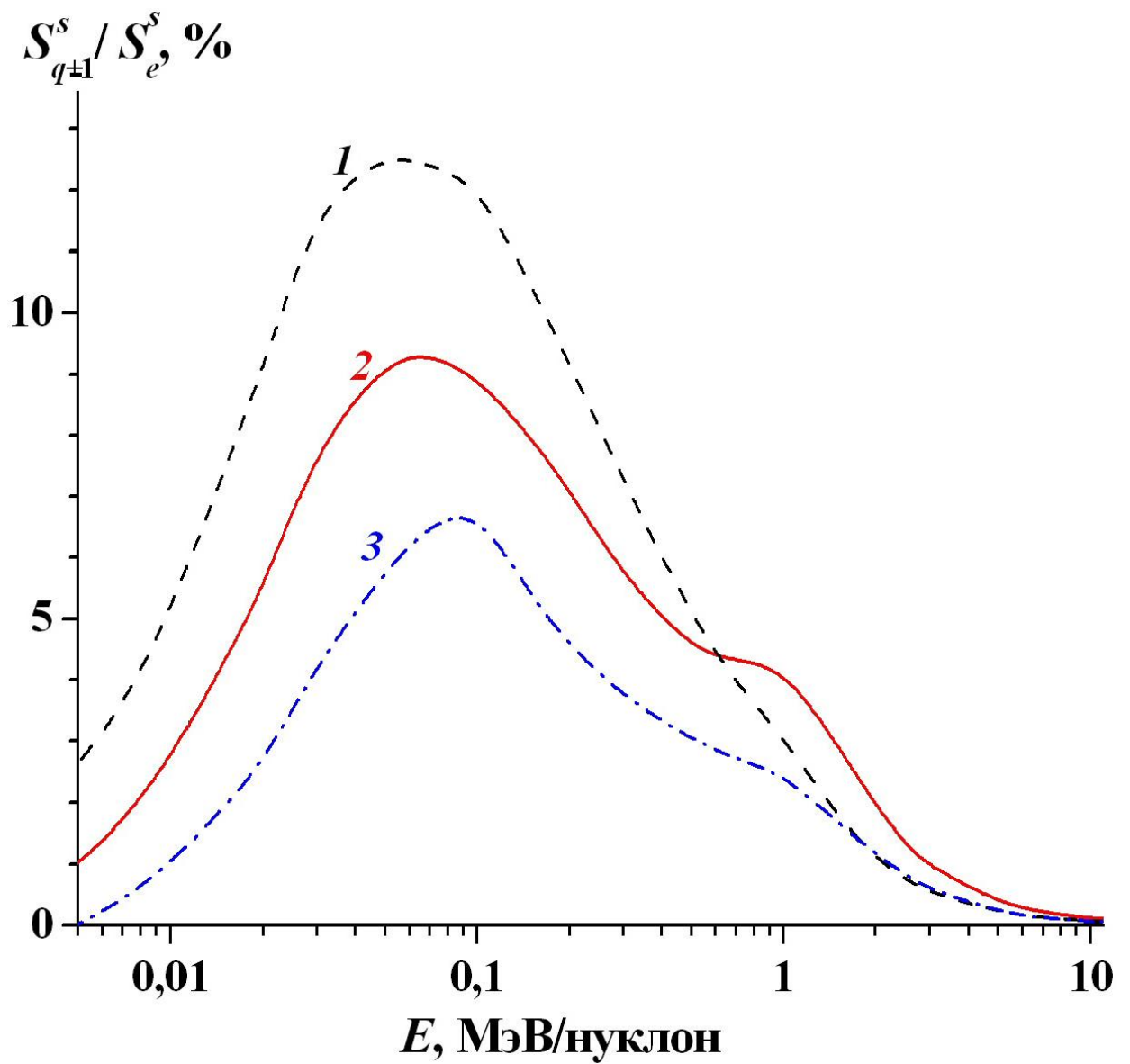


Рис. 53. Отношение потерь энергии ускоренных ионов в процессах перезарядки к сумме всех неупругих потерь энергии $S_{q\pm 1}^{\text{solid}} / S_e^{\text{solid}}$ в углероде ($Z_t = 6$) в зависимости от энергии E для разных зарядов ядер иона Z : 1 – 5; 2 – 7; 3 – 10.

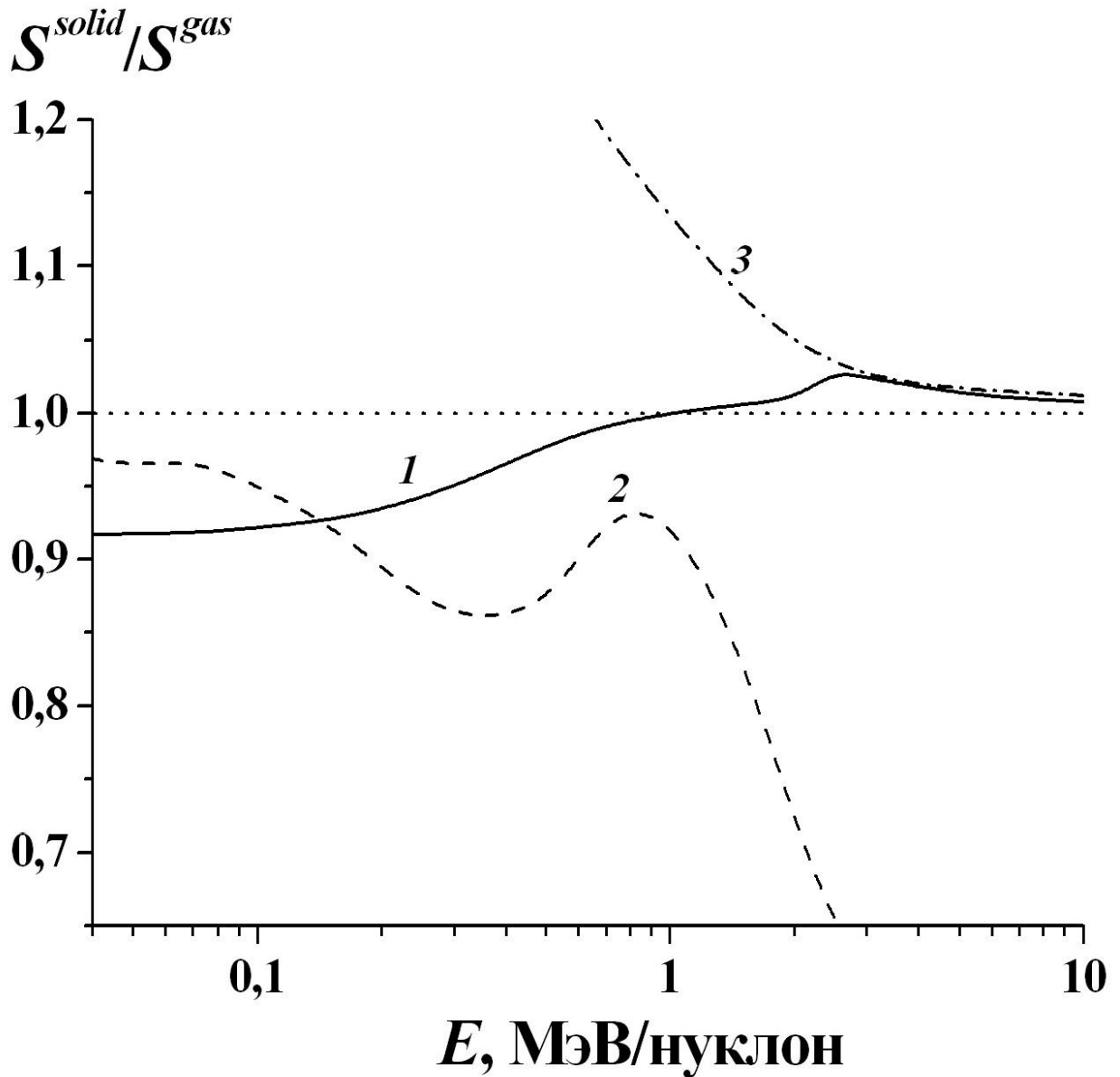


Рис. 54. Результаты расчетов величин, характеризующих неупругие потери энергии ускоренных ионов в твердой и газообразной мишенях в случае равновесного зарядового распределения в пучке ионов азота ($Z = 7$) в углероде ($Z_t = 6$): 1 – отношение неупругих потерь энергии ионов в твердой мишени S_e^s к неупругим потерям энергии ионов в газе S_e [145]; 2 – отношение потерь энергии в процессах перезарядки в твердой $S_{q\pm 1}^s$ (4.22) в газообразной $S_{q\pm 1}$ (4.18) мишенях; 3 – отношение квадрата среднего заряда иона в твердой (1.11) и газообразной (1.10) мишенях $(\bar{q}^s / \bar{q})^2$.

потери энергии в процессах перезарядки в твердой мишени меньше, чем в газе $S_{q\pm 1}^s / S_{q\pm 1} < 1$ (кривая 2 на рис. 54). Это связано со сдвигом зарядового распределения в сторону больших q в твердой мишени. Увеличение среднего заряда \bar{q} в твердой мишени приводит к уменьшению сечений перезарядки, определяющих величину доминирующих зарядовых фракций F_q ($\bar{q} - 1 \leq q \leq \bar{q} + 1$) в области энергии, где $\sigma_{q,q+1} \approx \sigma_{q,q-1}$ (табл. 6), и к уменьшению потерь энергии в процессах перезарядки $S_{q\pm 1}^s$. Учет эффекта плотности в $S_{q\pm 1}^s$ уменьшает отношение S_e^s / S_e для ионов с энергией $E \leq 1$ МэВ/нуклон. Это изменение в нужную сторону, но оно небольшое (рис. 52 и 53), и $(S_e^s - S_{q\pm 1}^s) / (S_e^s - S_{q\pm 1}) < 1$. Учет вклада процессов перезарядки в сумму (4.17) не может полностью объяснить слабое изменение суммарных неупругих потерь энергии иона S_e в твердой мишени по сравнению с газами $S_e^s / S_e \approx 1$ [145]. По-видимому, в области максимума потерь энергии $E \approx E_S$ для объяснения зависимости $S_e^s / S_e \approx 1$ кроме учета процессов перезарядки требуется уточнение потерь энергии, связанных с ионизацией атома мишени. Возможно, эффект плотности проявляется также в (4.19) в виде ослабления зависимости сечения ионизации атома от заряда q , и в твердой мишени $S_i \sim q^{-\xi}$, где $\xi < 2$.

4.5. Результаты применения метода расчета сечений перезарядки к некоторым задачам с участием ускоренных ионов

Предложенный в диссертации метод оценки сечений потери и захвата электрона ионами позволил исследовать процесс установления равновесного зарядового распределения ионов. При малой толщине мишени зарядовое распределение ускоренных ионов отличается от равновесного и изменяется при увеличении t . Толщина мишени T_q , необходимая для установления равновесного заряда ионов, зависит от соотношения между начальным зарядом иона q_0 и значением среднего равновесного заряда \bar{q} . При

$q_0 < \bar{q}$ для достижения зарядового равновесия ускоренный ион теряет свои электроны, и при увеличении толщины мишени средний заряд иона в неравновесном распределении $\bar{Q}(t)$ возрастает. При $q_0 > \bar{q}$ ускоренный ион захватывает электроны, и $\bar{Q}(t)$ уменьшается. Равновесная толщина мишени T_q имеет минимум при $q_0 \approx \bar{q}$. Отмечена асимметрия в поведении T_q при одинаковом по величине отклонении $|\bar{q} - q_0|$: значения T_q при $\bar{q} - q_0 < 0$ меньше, чем при $\bar{q} - q_0 > 0$.

Для установления зарядового равновесия в пучках ускоренных ионов необходимо, чтобы средний заряд иона $\bar{Q}(t)$ и ширина зарядового распределения $D(t)$ мало отличались от своих равновесных значений. Последовательность установления равновесного зарядового распределения ускоренных ионов зависит от величины $|\bar{q} - q_0|$. Когда значения q_0 и \bar{q} близкие, в неравновесном зарядовом распределении при увеличении толщины t сначала устанавливается средний заряд, и только потом ширина зарядового распределения ($T_q < T_d$). При большой величине $|\bar{q} - q_0|$, наоборот, сначала устанавливается ширина зарядового распределения, и только затем средний заряд ($T_q > T_d$).

При увеличении энергии ускоренных ионов зарядовое равновесие в пучке наступает медленнее, а равновесная толщина мишени $T = \max(T_q, T_d)$ возрастает. Объясняется этот эффект зависимостью сечений перезарядки от энергии в области E , где $\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t) \approx \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$. Увеличение энергии иона в этой области приводит к уменьшению как сечения захвата $\sigma_{q,q-1}$, так и потери электрона $\sigma_{q,q+1}$, и, следовательно, к увеличению расстояния между точками, где происходит столкновение иона с атомами мишени, в которых заряд иона изменяется. Толщина мишени, необходимая для установления равновесного зарядового распределения, $T = \max(T_q, T_d)$, увеличивается также при возрастании Z , что связано с увеличением диапазона изменения заряда q .

Для расширения области применимости эмпирического метода описания равновесного зарядового распределения в пучке ускоренных ионов в газообразных и твердых средах предложен новый подход к описанию параметров ширины d и асимметрии s . Метод основан на использовании в качестве аргумента функций, описывающих эти параметры распределения, не скорости V или энергии E иона, а отношения \bar{q}/Z . В этом случае область определения функций $d(\bar{q}/Z)$ и $s(\bar{q}/Z)$ ограничена ($\bar{q}/Z \leq 1$), что удобно для их аппроксимации. Для описания параметра ширины равновесного зарядового распределения d предложено соотношение, которое учитывает уменьшение d в случае медленных ($\bar{q}/Z \rightarrow 0$) и быстрых ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$) столкновений. Это соотношение более точное по сравнению с теми, которые использовались ранее. Оно получено на основе экспериментальных данных отдельно в газах и в твердой среде, учитывает зависимость d от заряда ядра атома мишени Z_t и удовлетворительно описывает экспериментальные данные в широком диапазоне значений E .

Впервые получено выражение для параметра асимметрии равновесного зарядового распределения в пучке ускоренных ионов s , которое учитывает увеличение $|s|$ в области медленных ($\bar{q}/Z \rightarrow 0$) и быстрых ($\bar{q}/Z \rightarrow 1$) столкновений. В области значений $0.3 < \bar{q}/Z < 0.7$ асимметрия равновесного зарядового распределения ионов небольшая, и величина параметра s стремится к нулю ($|s| \rightarrow 0$). В области значений $\bar{q}/Z < 0.2$ и $\bar{q}/Z > 0.8$ асимметрия зарядового распределения с учетом знака параметра s в твердой среде больше, чем в газах, что связано с увеличением сечения потери и уменьшением сечения захвата электрона в твердой среде по сравнению с газами. Предложенное соотношение для описания асимметрии равновесного зарядового распределения удовлетворительно описывает экспериментальные данные во всем диапазоне значений энергии.

Угловые, энергетические и зарядовые распределения быстрых ионов, отраженных от поверхности, были теоретически исследованы при небольших углах скольжения. Из-за

значительной потери энергии и большого числа столкновений зарядовое распределение отраженных от поверхности частиц не зависит от заряда падающей частицы и определяется равновесными зарядовыми фракциями F_q . Если в экспериментах по отражению ионов от поверхности получено энергетическое и угловое распределение для ионов с любыми зарядами, то распределение отраженных ионов с зарядом q вычисляется умножением исходного распределения на F_q . Это позволяет использовать экспериментальные данные по отражению от поверхности ионов при скользящем падении для получения равновесных зарядовых фракций в широком диапазоне значений энергии ионов. Результаты расчетов распределений ускоренных ионов, отраженных от поверхности, показали необходимость корректировки сечений перезарядки с учетом эффекта плотности. Применимость этого метода для малых углов рассеяния θ ограничена влиянием кинематических эффектов, связанных с взаимодействием рассеянных ионов с поверхностью, их перераспределением по углу рассеяния и зависимостью доли отраженных поверхностью атомов F_0 от θ .

Предложенный метод позволил представить неупругие потери энергии ускоренных ионов в твердой многокомпонентной мишени в виде суммы потерь в различных процессах. Эта модель дала возможность исследовать в широком энергетическом диапазоне вклады различных неупругих процессов в суммарные потери энергии ускоренных ионов. Основной вклад в неупругие потери энергии вносят процессы ионизации атомов мишени. С увеличением энергии столкновения E потери энергии ускоренных ионов в процессах перезарядки уменьшаются быстрее, чем потери энергии в процессах ионизации атомов мишени. Связано это с уменьшением сечения потери электрона быстрым ионом $\sigma_{q,q+1}$ при увеличении его заряда q и быстрым уменьшением сечения захвата электрона $\sigma_{q,q-1}$ при увеличении E . Потери энергии в процессах перезарядки превышают потери энергии в процессах возбуждения атома мишени в области $E < 1$ МэВ/нуклон. Процессы захвата электрона могут приводить как к

увеличению, так и к уменьшению потерь энергии иона. Так как сечение $\sigma_{q,q+1}$ уменьшается, а сечение $\sigma_{q,q-1}$, наоборот, увеличивается с возрастанием q , то вклады в потери энергии в процессах потери и захвата электрона различны. При $q < \bar{q}$ в выражениях, описывающих потери энергии в процессах перезарядки, доминируют слагаемые, связанные с процессами потери электрона, а при $q > \bar{q}$ – слагаемые, связанные с процессами захвата электрона. Относительный вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии ионов увеличивается с уменьшением Z и для ионов бора в области значений энергии $E \approx 0.1$ МэВ/нуклон достигает 13–15%.

ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ НА ЗАЩИТУ

1. Предложен метод расчета сечения захвата электрона быстрыми ионами в газах. Метод основан на численном интегрировании выражения для амплитуды захвата электрона с учетом кулоновского отталкивания между рассеянным ионом и остатком атома мишени. Это приводит к уменьшению времени взаимодействия налетающего иона с атомом мишени при малых межъядерных расстояниях и к уменьшению сечения захвата электрона быстрым ионом, что позволяет значительно улучшить согласие величины вычисленных сечений и имеющихся экспериментальных данных. Показано, что в широкой области значений энергии E и зарядов ядра Z иона при расчетах сечения захвата электрона быстрым ионом необходимо учитывать захват в возбужденные состояния.
2. Создана информационная база данных, содержащая экспериментальные и теоретические значения сечений потери и захвата электронов ионами, а также равновесные зарядовые распределения ионов в пучке при их прохождении через твердые и газообразные среды. База данных позволила организовать быстрый поиск информации, ее наглядное представление, сравнение и анализ.
3. Разработан метод учета влияния эффекта плотности среды на сечения перезарядки ионов с зарядами ядер $Z \geq 5$. Согласно этому методу все сечения потери одного электрона в газах умножаются, а все сечения захвата одного электрона делятся на коэффициент $C_{g \rightarrow s}(E, Z, Z_t)$. Этот коэффициент описывает увеличение среднего заряда иона в твердой мишени по сравнению с газовыми мишенями, и его значение определяется на основе данных о значениях среднего заряда ионов в твердой мишени. Показано, что учет эффекта плотности приводит к сдвигу максимума сечения потери одного электрона в сторону меньшего значения энергии. Это можно объяснить уменьшением энергии связи активного электрона в ионе за счет влияния возбужденных состояний.
4. На основе экспериментальных данных и выявленных теоретических закономерностей создана компьютерная программа, которая позволяет рассчитать параметры ионных

пучков при их взаимодействии с различными материалами мишени и вычислить сечения потери и захвата электронов ионами с энергией от 0.01 до 20 МэВ/нуклон и зарядами ядер от 5 до 18 в газообразной и твердой мишенях. Кроме сечений потери и захвата одного электрона программа позволяет вычислить сечения потери и захвата двух электронов, параметры равновесного зарядового распределения ионов в пучке, а также потери энергии ускоренных ионов в процессах перезарядки.

5. Процесс установления равновесного зарядового распределения ионов в пучке исследован в широком диапазоне значений энергии. Установлено, что механизм формирования равновесного зарядового распределения ионов в пучке зависит от соотношения между зарядом падающего иона q_0 и значением среднего заряда иона в равновесном зарядовом распределении \bar{q} . Показано, что с увеличением энергии ускоренного иона толщина мишени, при прохождении которой достигается равновесное зарядовое распределение ионов в пучке, возрастает. Этот эффект объясняется уменьшением сечений потери и захвата электрона с увеличением энергии.

6. Для равновесного зарядового распределения ионов в пучке при прохождении газообразной и твердой среды получены эмпирические выражения для параметров ширины и асимметрии распределения. Эти соотношения позволяют улучшить согласие вычисленных параметров равновесного зарядового распределения ионов в пучке с экспериментальными данными и расширяют область использования эмпирического метода описания равновесных зарядовых распределений.

7. На основе предложенного метода оценки сечений установлено, что при моделировании транспортировки ионных пучков необходимо учитывать процессы перезарядки. Вклад потерь энергии в процессах перезарядки в неупругие потери энергии важен в области значений энергии ионов $E < 1$ МэВ/нуклон, увеличивается при уменьшении заряда ядра ионов Z и для ионов бора при $E \approx 0.1$ МэВ/нуклон достигает 13–15%.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, обеспечена использованием современных подходов к описанию процессов перезарядки ионов в веществе и согласием результатов расчетов с многочисленными экспериментальными данными и результатами теоретических работ других авторов.

Новизна полученных результатов связана с возможностью описания зарядовых распределений ускоренных ионов в пучке в широком диапазоне значений энергии и зарядов. Традиционно считалось, что кулоновское взаимодействие между рассеянными ионами и ионом остатка атома мишени в конечном состоянии приводит лишь к появлению фазового множителя, который не влияет на сечение захвата электрона. Проведенный теоретический анализ и результаты расчета показали, что взаимодействие ионов в конечном состоянии влияет на величину сечения захвата электрона и изменяет его зависимость от энергии ионов. Это приводит к уменьшению значения вычисленного сечения и улучшению согласия результатов расчета с экспериментальными данными. Предложенной автором метод аппроксимации решения уравнения Хартри–Фока позволил впервые получить в аналитическом виде волновые функции возбужденных состояний более 150 атомов и ионов с зарядами ядер $2 \leq Z \leq 18$ и количеством электронов от 2 до 18. Разработана новая модель учета влияния плотности среды на сечения потери и захвата электронов ионами в твердых мишенях, которая применима в широком диапазоне изменения энергии столкновения E , заряда ядра иона Z , а также заряда ядра атомов среды Z_t . Создана компьютерная программа, которая впервые позволила вычислить сечения перезарядки ускоренных ионов с зарядом ядра $5 \leq Z \leq 18$ в широком диапазоне значений энергии иона E и заряда ядра атома мишени Z_t . В эмпирическом описании ширины равновесного зарядового распределения ионов в пучке основное внимание раньше уделялось ее зависимости от энергии E или скорости иона V . Применение отношения \bar{q}/Z в качестве аргумента для описания ширины и асимметрии равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в пучке позволило значительно расширить диапазон

использования эмпирического метода, так как область определения функций, описывающих параметры ширины $d(\bar{q}/Z)$ и асимметрии $s(\bar{q}/Z)$ равновесного зарядового распределения ионов, ограничена ($\bar{q}/Z \leq 1$). Предложенное уточненное выражение для параметра ширины d равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в пучке включает зависимость d от заряда ядра атома мишени Z_t и учитывает отличия между газообразными и твердыми мишенями. Эмпирическое соотношение для параметра асимметрии s равновесного зарядового распределения ускоренных ионов в пучке получено впервые. Предложенный метод вычисления сечений перезарядки и созданная компьютерная программа позволили обнаружить и теоретически исследовать новые закономерности процессов прохождения ионных пучков в среде. Впервые в широком диапазоне значений энергии E и зарядов ядер Z и Z_t исследовано влияние процессов захвата и потери двух электронов на зарядовое распределение ускоренных ионов, вычислен вклад процессов перезарядки в неупругие потери энергии ионов в пучке, проведен анализ механизмов формирования равновесного зарядового распределения. Ранее оценки этих эффектов были возможны только в узкой области значений энергии, для которой в эксперименте были измерены сечения перезарядки.

Практическая значимость полученных результатов важна для развития ряда технических приложений: в ускорительной технике для получения ионного пучка высокой интенсивности с определенным зарядом ионов; для моделирования радиационного воздействия космических лучей на бортовую электронику космических аппаратов; в радиационном материаловедении. Предложенные методы оценки зарядового распределения ионов в различных средах позволяют уточнить потенциал взаимодействия иона и атома среды, что важно при описании воздействия ионного пучка на материал мишени. Предложенная модель повышает точность теоретических оценок характеристик процессов, происходящих при формировании трека заряженной частицы в среде, при неупругом распылении мишени и при рождении вторичных частиц. Выявленные

закономерности формирования зарядовых распределений ионов важны для решения проблем радиационной стойкости материалов в условиях облучения. Оценка толщины мишени, необходимой для установления равновесного распределения ионов по зарядам, является неотъемлемой составляющей описания процессов прохождения ускоренных ионов через тонкие пленки. Особенности зарядовых, угловых и энергетических распределений ионов, отраженных от поверхности, необходимо учитывать в ускорительной технике для оценки изменения параметров ионного пучка при его взаимодействии с конструкционными материалами. При использовании пучков заряженных частиц в радиационной медицине требуется уточнение величины неупругих потерь энергии ионов и оценка пробегов ионов в веществе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации получено научно-обоснованное решение задачи описания зарядового распределения в пучках ионов, которое необходимо использовать при моделировании процессов ускорения и транспортировки ионных пучков. Научная ценность проведенных исследований заключается в разработке теоретических методов и компьютерных программ, позволяющих рассчитать параметры ионных пучков и анализировать их воздействие на различные материалы мишени.

Для описания зарядовых распределений ускоренных ионов необходимы сечения перезарядки, которые являются основной характеристикой при описании этих процессов. Зная сечения, можно описать все особенности, связанные с изменением заряда иона при его прохождении через слой вещества (равновесные зарядовые распределения, неравновесные процессы в тонких пленках, потери энергии иона в процессах перезарядки). Теоретической модели, которая могла бы описать изменение сечений потери и захвата электрона во всем энергетическом диапазоне, нет. Есть несколько квантово-механических моделей потери и захвата электрона отдельно в области

медленных и в области быстрых столкновений, а также достаточно много экспериментальных данных о сечениях перезарядки ионов в нескольких газах.

Первым этапом работы стали компиляция, создание информационной базы данных и анализ опубликованных экспериментальных и теоретических данных о сечениях перезарядки. Затем с помощью квантово-механических методов теории столкновений и полуэмпирических моделей была описана зависимость сечений потери и захвата одного электрона от энергии иона E , ионного заряда q , заряда ядра иона Z и заряда ядра атома мишени Z_t . Были обобщены имеющиеся данные о сечениях на всю область значений энергии, в которой необходимо учитывать процессы перезарядки. Результатом этой работы явилась компьютерная программа, которая для ускоренных ионов с зарядом ядра Z ($5 \leq Z \leq 18$) позволяет в широком энергетическом диапазоне получить оценку сечений перезарядки на основе используемых в диссертации методов и данных. Проведенный анализ экспериментальных данных показал, что, чем больше у иона электронов и больше заряд ядра Z , тем лучше работают статистические закономерности и законы подобия, на которых основана оценка сечений, предложенная в этой работе. Ограничение области исследования по заряду ядра иона $Z \leq 18$ только технические, из-за большого количества сечений. Даже если ограничиться сечениями потери и захвата одного электрона, требуется описать $2 \times Z$ функций энергии. Ограничения по заряду ядра иона $Z \geq 5$ более принципиальные. Экспериментальных сечений перезарядки ионов бериллия ($Z = 4$) мало, а данные о величине сечений перезарядки ионов лития ($Z = 3$) не укладываются в те эмпирические закономерности, которые было предложено использовать для ионов с $Z \geq 5$.

Ранее для описания зарядовых распределения ускоренных ионов в твердой среде использовали модель, в которой ион считался бесструктурной частицей с эффективным зарядом. Предложенная теоретическая модель расчета сечений перезарядки с учетом эффекта плотности (при замене газовой мишени твердой) описывает в широком энергетическом диапазоне не только параметры и зарядовые фракции ионов в

равновесном распределении, но и неравновесные зарядовые распределения ионов в тонких пленках, а также потери энергии ускоренных ионов в процессе перезарядки. Созданная компьютерная программа для вычисления сечений потери и захвата ионом электронов позволяет использовать результаты этой работы для оценки воздействия ионов на мишень, что важно учесть в процессах формирования трека заряженной частицы, описания движения ядер отдачи, неупругого распыления мишени и рождения вторичных частиц (фотонов и электронов).

В заключение автор выражает глубокую признательность Я.А. Тепловой за постоянное внимание и помощь в работе. Только благодаря ее опыту удалось провести квалифицированную компиляцию экспериментальных данных о сечениях перезарядки. Автор также выражает благодарность Ю.А. Белковой, Ю.А. Файнбергу и И.С. Дмитриеву за полезные обсуждения, критические замечания и помощь в работе, искреннюю признательность В.С. Сенашенко за научную школу и Н.Е. Новиковой за помощь при работе над текстом диссертации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сегре Э.* // Экспериментальная ядерная физика. Т. 1. М. ИЛ, 1955. 662 с.
2. *Толстихина И.Ю., Шевелько В.П.* Столкновительные процессы с участием тяжелых многоэлектронных ионов при взаимодействии с нейтральными атомами // Успехи Физических Наук. Т. 183 (2013) С. 225–255.
3. *Bimbot R., Geissel H., Paul H. Schinner A., Sigmund P., Caswell R., Seltzer S.M., Arista N.R., Mikkelsen H.H., Sorensen A.H., Thwaites D.I.* Stopping of ions heavier than helium. // Journal of International Commission of Radiation Units and Measurements (ICRU). V. 5. No. 1. Rep. 73. Oxford University Press, 2005. 253 p.
4. *Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. 192 с.
5. *Комаров Ф.Ф.* Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий. // Успехи физических наук. Т. 173 (2003) С. 1287–1318.
6. *Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф.* // Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск: Изд-во БГУ им. В.И. Ленина, 1979. 319 с.
7. *Грас-Марти А., Урбасек Г.М., Ариста Н.Р. Флорес Ф.* Взаимодействие заряженных частиц с твердым телом М.: Высшая школа, 1994. 752 с.
8. *Брусиловский Б.А.* Кинетическая ионно-электронная эмиссия. М.: Энергоатомиздат, 1990. 183 с.
9. *Акишин А.И., Новиков Л.С.* Воздействие окружающей среды на материалы космических аппаратов М.: Знание, 1983. 59 с.
10. *Панасюк М.И.* Странники вселенной или это большого взрыва. Фрязино: "Век2", 2005, 272с.

11. *Чумаков А. И.* Действие космической радиации на интегральные схемы. М.: Радио и связь, 2004. 320 с.
12. *Гаперо К.И., Улимов В.Н., Членов А.М.* Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах космического применения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2012. 304 с.
13. *Лейман К.* Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. М.: Атомиздат, 1979. 296 с.
14. *Баранов Я.А., Мартыненко Ю.В., Цеплевич С.О., Явлинский Ю.Н.* Неупругое распыление твердых тел. // Успехи физических наук. Т. 156 (1988) С. 477–511.
15. *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
16. *Афросимов В.В., Гладковский И.П., Гордеев Ю.С., Калинин И.Ф. Федоренко Н.В.* Метод исследования потока атомов, испускаемых плазмой. // Журнал технической физики. Т. 30 (1960) С. 1456–1468.
17. *Henderson G.H.* Changes in the charge of an α -particle passing through matter. // Proceeding of the Royal Society of London. A. V. 102 (1922) P. 496–499.
18. *Rutherford E.* The capture and loss of electron by α particles. // Philosophical Magazine. V. 47 (1924). P. 277–303.
19. *Bartels H.* Uber umladung von wasserstoffkanalstrahlen beim durch gase und feste korper. // Annalen der Physik. B. 398 (1930) S. 957–984.
20. *Sloan D.H., Lawrence E.O.* The production of heavy high speed ions without the use of high voltages. // Physical Review. V. 38 (1931) P. 2021–2132.
21. *Lawrence E.O., Cooksey D.* On the apparatus for the multiple acceleration of light ions to high speeds. // Physical Review. V. 50 (1936) P. 1131–1140.
22. *Lassen N.O.* On the energy loss by fission fragments along their range. // Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab Matematisk Fisiske Meddelelser. V. 25 (1949) P. 1–41.

23. *Дмитриев И.С., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Экспериментальная установка “Сокол” // Столкновения быстрых ионов в веществе. Сб. статей к 75-летию проф. В.С.Николаева / Ред. Панасюк М.И, Романовский Е.А., Теплова Я.А. М.: УНЦДО, 2002. С. 17–28.
24. *Fowler R.H.* A tentative theory of the capture and loss of electrons by swift nuclei. // *Philosophical Magazine*. V. 47 (1924) P. 416–430.
25. *Бор Н.* Прохождение атомных частиц через вещество М.: ИЛ, 1950. 158 с.
26. *Bohr N., Lindhard J.* Electron capture and loss by heavy ions penetrating through matter. // *Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab Matematisk Fysiske Meddelelser*. V. 28. No. 7 (1954) P. 3–31.
27. *Bell G.J.* The capture and loss of electrons by fission fragments. // *Physical Review*. V. 90 (1953) P. 548–557.
28. *Gluckstern R.L.* Electron capture and loss by ions in gases. // *Physical Review*. V. 98 (1955) P. 1817–1821.
29. *Allison S.K.* Experimental results on charge-changing collisions of hydrogen and helium atoms and ions at kinetic energies above 0.2 keV. // *Review of Modern Physics*. V. 30 (1958) P. 1137–1168.
30. *Николаев В.С.* Захват и потеря электронов быстрыми ионами в атомных столкновениях. // *Успехи физических наук*. Т. 85 (1965) С. 679–720.
31. *Lo H.H., Fite W.L.* Electron-capture and loss cross sections for fast heavy particles passing through gases. // *Atomic Data*. V. 1 (1970) P. 305–328.
32. *Betz H. D.* Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media. // *Reviews of Modern Physics*. V. 44 (1972) P. 465–539.
33. *Tawara H., Kato T., Nakai Y.* Cross sections for electron capture and loss by positive ions in collisions with atomic and molecular hydrogen. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 32 (1985) P. 235–303.

34. *Wu W.K., Huber B.A., Wiesemann K.* Cross sections for electron capture by neutral and charged particles in collisions with He. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 40 (1988) P. 57–200.
35. *Wu W.K., Huber B.A., Wiesemann K.* Cross sections for electron capture by neutral and charged particles in collisions with He. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 42 (1989) P. 157–185.
36. *Shima K., Kuno N., Yamanouchi M., Tawara H.* Equilibrium charge fractions of ions of $Z = 4-92$ emerging from a carbon foil. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 51 (1992) P. 173–241.
37. *Allison S.K., Garsia-Munor M.* *Atomic and Molecular Processes*. Chapter 19. Enrico Fermi Institute for Nuclear Studies, University of Chicago, 1961. 76 p.
38. *Drapper J.E.* Relation of charge-changing cross sections to relative population of charge states for fast heavy ions. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 13 (1980) P. 1209–1220.
39. *Betz H.D., Hortig G., Leischner E., Schmelzer Ch., Stadler B., Weihrauch J.* The average charge of stripped heavy ions. // *Physics Letters*. V. 22 (1966) P. 643–644.
40. *Nikolaev V.S., Dmitriev I.S.* The equilibrium charge distribution in heavy element ion beams. // *Physics Letters. A*. V. 28 (1968) P. 277–278.
41. *Schiwietz G., Grande P.L.* Improved charge-state formulas. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 175–177 (2001) P. 125–131.
42. *Schiwietz G., Czeski K., Stauffebiel F., Grande P.L.* Femtosecond dynamics – snapshots of the early ion-track evolution. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 226 (2004) P. 683–704.
43. *Shima K., Ishihara T., Miyoshi T., Mikumo T.* Equilibrium charge-state distributions of 35–146 MeV Cu ions behind carbon foils. // *Physical Review. A*. V. 28 (1983) P. 2162–2168.
44. *Brandt W., Kitagawa M.* Effective stopping power charges of swift ions in condensed matter. // *Physical Review. B*. V. 25 (1982) P. 5631–5637.

45. *Northcliffe L.C.* Energy loss and effective charge of heavy ions in aluminum. // *Physical Review*. V. 120 (1960) P. 1744–1757.
46. *Northcliffe L.C.* Passage of heavy ions through matter. // *Annual Reviews of Nuclear Science*. V. 13 (1963) P. 67–102.
47. *Аллисон С., Гарсиа-Муньос М.* Захват и потеря электрона при высоких энергиях. // *Атомные и молекулярные процессы*. / Ред. Бейтс Д. М.: Мир, 1964. С. 624–678.
48. *Dmitriev I.S., Zaikov V.P., Kral'kina E.A., Nikolaev V.S., Teplova Ya.A.* On the target thickness to attain equilibrium charge distribution in a beam of fast ions. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. B. V. 14 (1986) P. 515–526.
49. *Дмитриев И.С., Николаев В.С.* Об изменении параметров неравновесного зарядового распределения в пучках быстрых ионов при увеличении толщины перезарядной мишени. // *Журнал технической физики*. Т. 63 (1993) С. 122–130.
50. *Belkova Yu.A., Teplova Ya.A.* Multicomponent approximation for evaluation of nonequilibrium charge fractions of ions passing through thin films. // *Radiation Effects Defects in Solid*. V. 168 (2013) P. 365–371.
51. *McDowell M.R., Coleman J.P.* Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions. Amsterdam–London: North-Holland Publishing Company, 1970. 450 p.
52. *Fritch W., Lin C.D.* The semiclassical close-coupling description of atomic collisions: recent developments and results. // *Physics Report*. V. 202 (1991) P. 1–97.
53. *Fritch W., Lin C.D.* Atomic-orbital-expansion studies of electron transfer in bare-nucleus Z ($Z = 2, 4-8$) hydrogen-atom collisions. // *Physical Review*. A. V. 29 (1984) P. 3039–3051.
54. *Gillespie G.H.* Excitation and ionization contributions to sum-rule Born cross sections for collisions of one-electron ions with atoms. // *Physical Review*. A. V. 18 (1978) P. 1967–1989.
55. *Montenegro E.C., Meyerhof W.E.* Sum rules and electron-electron interaction in two-center scattering. // *Physical Review*. A. V. 43 (1991) P. 2289–2293.

56. *Berkowitz J.* Sum rules and the oscillator strength distribution in helium. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 30 (1997) P. 881–892.
57. *Anholt R.* Corrections to the theory of screening and antiscreening in collisions with hydrogen atoms. // *Physics Letter. A.* V. 114. (1986) P. 126–128.
58. *Дмитриев И.С., Жилейкин Я.М., Николаев В.С.* Расчет эффективных сечений потери *K*-электрона быстрыми водородоподобными ионами при соударении с атомами водорода и гелия. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 49 (1965) С. 500–514.
59. *Сенашенко В.С., Николаев В.С., Дмитриев И.С.* Расчет эффективных сечений потери *K*-электрона быстрыми гелиеподобными ионами в столкновениях с атомами водорода и гелия. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 54 (1968) С. 1203–1212.
60. *Сенашенко В.С., Николаев В.С., Шафер В.Ю., Дмитриев И.С.* Расчет эффективных сечений потери *K*-электрона быстрыми водородоподобными ионами при соударении с атомами азота. // *Вестник Московского университета.* № 2 (1970) С. 136–145.
61. *Belkić Dz.S., Gayet R., Salin A.* Electron capture in high-energy ion-atom collisions. // *Physics Reports.* V. 56 (1979) P. 279–369.
62. *Dewangan D.P., Eichler J.* Charge exchange in energetic ion-atom collisions. // *Physics Reports.* V. 247 (1994) P. 59–219.
63. *Пресняков Л.П., Уланцев А.Д.* Перезарядка многозарядных ионов на атомах. // *Квантовая электроника.* Т. 1. № 11 (1974) С. 2377–2385.
64. *Шевелько В.П.* Перезарядка при больших скоростях столкновения. // *Труды ФИАН.* Т. 118 (1980) С. 108–119.
65. *Oppenheimer J.R.* On the quantum theory of the capture of electrons. // *Physical Review.* V. 31 (1928) P. 349–355.
66. *Brinkman H.G., Kramers H.A.* // *Proceedings of Academy of Science Amsterdam.* V. 33 (1930) P. 973–979.

67. Николаев В.С. Расчет эффективных сечений перезарядки протонов в соударениях с многоэлектронными атомами. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 51 (1966) С. 1263–1280.
68. Дмитриев И.С., Воробьев Н.Ф., Коновалова Ж.М., Николаев В.С., Новожилова В.Н., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А. Потеря и захват электронов быстрыми ионами и атомами гелия в различных средах. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 84 (1983) С. 1987–2000.
69. Jackson J.D., Schiff H. Electron capture by proton passing through hydrogen. // Physical Review. V. 89 (1953) P. 359–365.
70. Greenland P.T. Electron capture by highly stripped ions. // Physics Reports. V. 81 (1982) P. 131–237.
71. Janev R.K., Winter H. State-selective electron capture in atom-highly charged ion collisions. // Physics Reports. V. 117 (1985) P. 266–387.
72. Omidvar K., Golden J.E., McGuire J.H., Weaver L. Single-electron Born approximation for charge transfer from multielectron atoms to protons. // Physical Review. A. V. 13 (1976) P. 500–503.
73. Shakeshaft R., Spruch L. Mechanisms for charge transfer (or for the capture of any light particle) at asymptotically high impact velocities. // Reviews of Modern Physics. V. 51 (1979) P. 369–406.
74. Vinitzky P.S., Popov Yu.V., Chuluunbaatar O. // Physical Review. A. 71 (2005) P. 0127061–0127069.
75. Cheshire I.M. Continuum distorted wave approximation; resonant charge transfer by fast protons in atomic hydrogen. // Proceedings of the Physical Society. V. 84 (1964) P. 89–98.
76. Macek J.H., Shakeshaft R. Second Born approximation with the Coulomb Green's function: Electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion. // Physical Review. A. V. 22 (1980) P. 1441–1446.

77. *Belkic Dz., Gayet R., Salin A.* Computation of total cross-sections for electron capture in high energy collisions. III // *Computer Physics Communications*. V. 32 (1984) P. 385–397.
78. *Розмей О., Толстихина И.Ю., Шевелько В.П.* Влияние плотности мишени на сечение перезарядки быстрых ионов на атомах. // *Журнал технической физики*. Т. 3 № 9 (2003) С. 31–38.
79. *Froese Fischer C.* // *The Hartree-Fock Method for Atoms: A Numerical Approach*. New York: Wiley, 1977.
80. *Froese Fischer C.* The MCHF atomic-structure package. // *Computer Physics Communications*. V. 64 (1991) P. 369–398.
81. *Huzinaga S., Hart-Davis A.* Stability of the restricted Hartree–Fock–Roothaan method. // *Physical Review. A*. V. 8 (1973) P. 1734–1738.
82. *Clementi E., Roetti C.* Roothaan–Hartree–Fock atomic wave functions. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 14 (1974) P. 177–478.
83. *Bunge C.F., Barrientos J.A., Bunge A.V.* Roothaan–Hartree–Fock ground-state atomic wave function: Slater-type orbital expansion and expectation values. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 53 (1993) P. 113–162.
84. *Sachdeva M.L., Puri S.P.* Analytic self-consistent-field wave functions for Cs^+ and Cs . // *Physical Review. A*. V. 14 (1976) P. 1603–1606.
85. *McLean A.D., McLean R.S.* Roothaan–Hartree–Fock atomic wave functions slater basis-set expansions for $Z = 55–99$. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 26 (1981) P. 197–381.
86. *Афросимов В.В., Бараш Д.Ф., Басалаев А.А., Гуцина Н.А., Ложкин К.О., Никулин В.К., Панов М.Н., Степанов И.Ю.* Захват одного и двух электронов α -частицами мегаэлектронвольтовых энергий у многоэлектронных атомов. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. Т. 104 (1993) P. 3297–3310.

87. *Hvelplund P., Heinemeier J., Pedersen E.H., Simpson F.R.* Electron capture by fast He^{2+} ions in gases. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 9 (1976) P. 491–496.
88. *Faria N.V. C., Freire F.L., Pinho A.G.* Electron loss and capture by fast helium ions in noble gases. // *Physical Review. A.* V. 37 (1988) P. 280–283.
89. *Дмитриев И.С., Ташаев Ю.А., Николаев В.С., Теплова Я.А., Попов Б.М.* Экспериментальное исследование потери и захвата электронов быстрыми многозарядными ионами азота и неона в различных средах. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 73 (1977) С. 1684–1696.
90. *Дмитриев И.С., Теплова Я.А., Белкова Ю.А., Файнберг Ю.А.* Сечения захвата электронов ионами бора в газовых средах. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 125 (2004) С. 1052–1057.
91. *Пивовар Л.И., Новиков М.Т., Тубаев В.М.* Захват электрона ионами гелия в различных газах в интервале энергии 300–1500 кэВ. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 42 (1962) С. 1490–1494.
92. *Bell F., Betz H.D.* Influence of electron capture on the X-ray emission of heavy ions passing through solid targets. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 10 (1977) P. 483–490.
93. *Пивовар Л.И., Левченко Ю.З., Кривоносов Г.А.* Ионизационные столкновения и перезарядка ионов Li^+ , Li^{2+} и Li^{3+} в газах (0.2–2 МэВ). // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 59 (1970) С. 19–28.
94. *Дмитриев И.С., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Экспериментальное исследование сечений потери электрона атомами и отрицательными ионами водорода в различных средах. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 107 (1995) С. 55–61.
95. *Vorobiev N.F., Zaikov V.P., Kralkina E.A., Sirotinin E.I.* Effect of target density on the equilibrium charge composition of fast He ion beams. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 33 (1988) P. 207–208.

96. *Haruyama Y., Kanamory Y., Kido T., Itoh A., Fukuzawa F.* Z_i dependence of equilibrium charge state distributions of MeV He ions emerging from solid. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 16 (1983) P. 1225–1232.
97. *Cowern N.E.B., Woods C.J., Sofield C.J.* The gas-solid density effect for MeV/u ions: charge changing cross sections and the effective charge. // *Nuclear Instruments and Methods.* V. 216 (1983) P. 287–292.
98. *Теплова Я.А.* Прохождение ионизирующего излучения через вещество. // *Модель Космического пространства. Т. 2.* / Ред. Вернов С.Н. М.: Изд-во МГУ, 1983. С. 29–57.
99. *Betz H. D.* Effects of the density of gaseous targets on electron capture and loss by fast heavy ions. // *Physical Review Letters.* V. 25 (1970) P. 211–214.
100. *Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н., Теплова Я.А.* Исследование равновесного распределения зарядов в пучке быстрых ионов. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 39 (1960) С. 905–914.
101. *Sofield C.J., Cowern N.E.B., Draper J., Bridwell L.B., Freeman J.M., Woods C.J., Spencer-Harper M.* Charge-exchange cross sections of nearly fully stripped ^{16}O ions in solid targets.// *Nuclear Instruments Methods.* V. 170 (1980) P. 257–260.
102. *Sofield C.J., Bridwell L.B., Woods C.J., Moak C.D., Cowern N.E.B., Miller P.D., Gregory D., Jones C., Alton G., Permillier P., Hall H.J.* Excited state populations and charge-exchange of fast ions in solids. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 52 (1984) P. 260–264.
103. *Woods C.J., Sofield C.J., Cowern N.E.B., Murrell M., Draper J.* Comparison of charge-changing cross sections in gaseous and solid targets. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys.* V. 17 (1984) P. 867–878.
104. *Miller P.D., Sofield C.J., Woods C.J., Cowern N.E.B., Bridwell L.B., Moak C.D., Gregory D.C., Jones C.M., Alton C.D., Permillier P.L., Hall J.* Excited state populations and charge-

- exchange of fast ions in solids. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 10/11 (1985) P. 225–227.
105. *Eckstein W.* Charge fractions of reflected particles. // Inelastic Particle-Surface Collisions. / Eds. Taglauer E., Heiland W. Berlin–Heidelberg–N.Y.: Springer–Verlag, 1981. P. 157–187.
106. *Мартыненко Ю.В., Рязанов А.И., Фирсов О.Б., Явлинский Ю.Н.* // Вопросы теории плазмы. Вып. 12. / Ред. Леонтович М.А. и Кадомцев Б.Б. М.: Энергоиздат, 1982. С. 205–267.
107. *Cross M.C.* Charge states of fast protons in solids. // Physical Review. B. V. 15 (1977) P. 602–607.
108. *Guinea F., Flores F., Echennique P.M.* Charge states for H and He moving in an electron gas. // Physical Review. B. V. 25 (1982) P. 6109–6125.
109. *Готт Ю.В., Явлинский Ю.Н.* Взаимодействие частиц с веществом и диагностика плазмы. М.: Атомиздат, 1973. 128 с.
110. *Оцуки Е.Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 277 с.
111. *Zaikov V.P., Kralkina E.A., Nikolaev V.S., Fainberg Yu.A., Vorobiev N.F.* Passage of nitrogen and oxygen ions through carbon and celluloid films. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 17 (1986) P. 97–107.
112. *Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н., Теплова Я.А.* Экспериментальные исследования захвата электрона многозарядными ионами. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 40 (1961) С. 989–1000.
113. *Пивовар Л.И., Тубаев В.М., Новиков М.Т.* Распределение зарядов в пучках ионов, прошедших через газообразные мишени. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 48 (1965) С. 1022–1032.
114. *Smith P.S., Whaling W.* Equilibrium charge distributions of C, N, Ar and Fe in carbon. // Physical Review. V. 188 (1969) P. 36–40.

115. Girardeau R., Knystautas E.J., Beauchemin G., Neveu B., Drouin R. Equilibrium charge distributions of C, N, O, Ne in carbon foil. // *Journal of Physics. B.* V. 4 (1971) P. 1743–1746.
116. Shevelko V.P., Tawara H., Ivanov O.V., Mlyoshi T., Noda K., Sato Y., Subbotin A.V., Tolstikhina I. Yu. Target density effects in collisions of fast ions with solid targets. // *Journal of Physics. B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* V. 38 (2005) P. 2675–2690.
117. Miyoshi T., Noda K., Sato H., Tawara H., Yu I., Tolstikhina I. Yu., Shevelko V.P. // Evaluation of excited nl -state distributions of fast exit ions after penetrating through solid foils. Part I: Charge-state fractions for 4.3 MeV/u projectiles with atomic numbers $Z = 6–26$ passing through carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 251 (2006) P. 79–88.
118. Shevelko V.P., Beigman I.L., Litsarev M.S., Tawara H., Tolstikhina I. Yu., Weber G. Charge-changing processes in collisions of heavy many-electron ions with neutral atoms. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 269 (2011) P. 1455–1463.
119. Rozet J.P., Stephan C., Vernhet D. ETACHA: a program for calculating charge states at GANIL energies. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 107 (1996) P. 67–70.
120. Scheidenberger C., Stohlker Th., Meyerhof W.E., Geissel H., Mokler P.H., Blank B. Charge states of relativistic heavy ions in matter. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 142 (1998) P. 441–462.
121. Osmani O., Sigmund P. Charge evolution of swift-heavy-ion beams explored by matrix method. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 269 (2011) P. 813–816.
122. Imai M., M. Sataka M., Matsuda M., Okayasu S., Kawatsura K., Takahiro K., Komaki K., Shibata H., Nishio K. Equilibrium and non-equilibrium charge-state distributions of 2.0 MeV/u carbon ions passing through carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 354 (2015) P. 172–176.

123. *Bethe H.* Zur theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie. // Annalen der Physik. B. 397 (1930) S. 324–400.
124. *Bloch F.* Zur bremsung rasch bewegter teilchen beim durchgang durch materie. // Annalen der Physik. B. 408 (1933) S. 285–320.
125. *Ziegler J.F.* Stopping Cross-Sections for Energetic Ions in all Elements. V. 5. Pergamon Press, 1980. 432 p.
126. *Chu W.K., Powers D.* On the Z_2 dependence of stopping cross sections for low energy alpha particles. // Physics Letter. A. V. 38 (1972) P. 267–268.
127. *Фирсов О.Б.* Качественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 366 (1959) С. 1517–1523.
128. *Lindhard I., Scharff M.* Energy loss in matter by fast particles of low charge. // Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab Matematisk Fysiske Meddelelser. V. 27. No. 15 (1953) P. 1–31.
129. *Lindhard I., Scharff M.* Energy dissipation by ions in the keV region. // Physical Review. V. 124 (1961) P. 128–130.
130. *Fermi E., Teller E.* The capture of negative mesotrons in matter. // Physical Review. V. 72 (1947) P. 399–407.
131. *Arista N.R.* Dynamical image potential and induced forces for charge particles moving parallel to a solid surface. // Physical Review. A. V. 49 (1994) P. 1885–1896.
132. *Lifschitz A.F., Arista N.R.* Velocity-dependent screening in metals. // Physical Review. A. V. 57 (1998) P. 200–207.
133. *Arista N.R., Lifschitz A.F.* Non-Linear Approach to the Energy Loss of Ions in Solids. // Advances in Quantum Chemistry. Ed. by Sabin J. Elsevier Inc. V. 45 (2004) P. 47–77.
134. *Brice D.K.* Three-parameter formula for the electronic stopping cross section at nonrelativistic velocities. // Physical Review. A. V.6 (1972) P. 1791–1805.

135. *Garnir-Monjole F.S., Garnir H.P., Baudinet-Robinet Y, Dumont P.D.* Empirical relation for electronic stopping of heavy ions in carbon. // *Journal de Physique*. V. 41 (1980) P. 599–601.
136. *Paul H., Schinner A.* An empirical approach to the stopping power of solids and gases for ions from Li to Ar. Part II. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. B. V. 195 (2002) P. 166–174.
137. *Линдхард Й.* Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц. // *Успехи физических наук*. Т. 69 (1969) С. 249–296.
138. *Grande P.L., Schiwietz G.* Ionization and energy loss beyond perturbation theory. // *Advances in Quantum Chemistry* V. 45 (2004) P. 7–46.
139. *Shulga V.I.* Computer simulation of single-crystal and polycrystal sputtering I. // *Radiation Effects and Defects in Solid*. V. 70 (1983) P. 65–83.
140. *Shulga V.I.* Computer simulation of single-crystal and polycrystal sputtering II. // *Radiation Effects and Defects in Solid*. V. 82 (1984) P. 169–187.
141. *Shulga V.I.* Computer simulation of single-crystal and polycrystal sputtering III. // *Radiation Effects and Defects in Solid*. V. 84 (1985) P. 1–25.
142. *Аккерман А.Ф.* Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991. 200 с.
143. *Экитайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995. 254 с.
144. *Sigmund P., Schinner A.* Binary theory of electronic stopping. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. B. V. 195 (2002) P. 64–90.
145. *Ziegler J.F.* SRIM: Stopping and Range of Ions in Matter (www.srim.org).
146. *Biersack J.P., Haggmark L.G.* A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 174 (1980) P. 257–269.

147. *Biersack J.P., Steinbauer E., Bauer P.* A particularly fast TRIM version for ion backscattering and high energy ion implantation. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 61 (1991) P. 77–82.
148. *Sigmund P.* Stopping of Heavy Ions. A Theoretical Approach. Springer, 2004. 255 p.
149. *Теплова Я.А., Николаев В.С., Дмитриев И.С., Фатеева Л.Н.* Торможение многозарядных ионов в твердых и газообразных средах. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. Т. 42 (1962) С. 44–60.
150. *Теплова Я.А., Belkova Yu.A., Yuminov O.A.* Energy loss calculations for fast light ions in celluloid including charge-exchange processes. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 230 (2005) P. 73–76.
151. *Feldman L.C., Mayer J.W., Picraux S.T.* Materials Analysis by Ion Channeling: Submicron Crystallography. N.Y.: Acad. press, 1982. 300 p.
152. *Рязанов М.И., Тилинин И.С.* Исследование поверхности по обратному рассеянию. М.: Энергоатомиздат, 1985. 195 с.
153. *Winter H., Remillieux J., Poizat J.C.* Grazing scattering of fast protons at a clean W(1000) surface. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 48 (1990) P. 382–385.
154. *Lucas A.A.* Self-image excitation mechanism for fast ions scattered by metal surfaces at grazing incidence. // Physical Review. B. V. 20 (1979) P. 4990–5001.
155. *Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Угловое, энергетическое и зарядовое распределение частиц, рассеянных от металла. // Поверхность. Физика, химия, механика. № 10 (1994) С. 5–9.
156. *Теплова Я.А., Файнберг Ю.А., Куликаускас В.С.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 3 (1997) С. 72–78.
157. *Файнберг Ю.А., Теплова Я.А., Куликаускас В.С.* Закономерности отражения быстрых протонов от металла при скользящем падении на поверхность. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 4 (2002). С. 43–45.

158. *Eckstein W., Molchanov V.A., Verbeek H.* The charge states of He and Ne backscattered from Ni in the energy of 1.5–15 keV. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 149 (1978) P. 599–604.
159. *Mashkova E.S., Molchanov V.A.* Medium-Energy Ion Reflection from Solid. Amsterdam: North-Holland Physics Publishing, 1985. 438 p.
160. *Robin A., Hatke N., Narmann A., Grether M., Plachke D., Jensen J., Heiland W.* Energy loss of fast N^{q+} ions scattered off a Pu(110) surface. // *Nuclear Instruments and Methods Physics in Research*. B. V. 164–165 (2000) P. 566–574.
161. *Robin A., Niemann D., Stolterfoht N., Heiland W.* Highly charged ions impinging on a stepped metal surface under grazing incidence. // *Physical Review*. A. V. 67 (2003) P. 0529011–0529017.
162. *Winter H.* Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence. // *Physics Reports*. V. 367 (2002). P. 387–582.
163. *Atomic Collisions in Solid.* / Ed. by Datz S., Appleton B.R., Moak C.D., V. 1. N.Y.: Plenum Press, 1975.
164. *Kimura K., Mannami M.* Backscattered H_2^+ ions at the glancing incidence on Au target. // *Journal of the Physical Society of Japan*. V. 53 (1984) P. 3372–3377.
165. *Schneider P.J., Eckstein W., Verbeek H.* Charge states of reflected particles for grazing incidence of D^+ , D^{2+} and D^0 on Ni and Cs targets. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 194 (1982) P. 387–390.
166. *Rudd M.E., Kim Y.K., Madison D.H., Gallagher J.W.* Electron production in proton collisions: total cross sections. // *Reviews of Modern Physics*. V. 57 (1985) P. 965–994.
167. *Madison H.D., Manson S.T.* Doubly differential cross sections for proton-impact of argon. // *Physical Review*. A. V. 20 (1979) P. 825–833.
168. *Anholt R., Nagamiya S., Rasmussen J.O., Bowman H., Ioannou-Yannou J.G., Rauscher E.* K-vacancy production by 4.88 GeV protons. // *Physical Review*. A. V. 14 (1976) P. 2103–2108.

169. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Asymptotic of the cross section of electron loss ions in light media. // *Physics Letter. A.* V. 373 (2009) P. 550–553.
170. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Асимптотика сечения потери электрона атомами и ионами в легких средах. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 4 (2009) С. 5–8.
- Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Asymptotic of the cross section for the electron loss by atoms and ions in light media. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* V. 3. No. 2 (2009) P. 264–267.
171. *Новиков Н.В.* Ионизация *L*-оболочки в столкновениях протонов с атомами. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 4 (2008) С. 47–50.
- Novikov N. V.* *L*-shell ionization in proton-atom collisions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* V. 2. No. 2 (2008) P. 297–300.
172. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Потеря электрона быстрыми ионами в гелии. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 5 (2008) С. 34–37.
- Novikov N.V., Teplova Ya. A.* Single electron loss by fast ions in helium. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* V. 2. No. 3 (2008) P. 360–363.
173. *Дмитриев И.С., Николаев В.С., Фатеева Л.Н., Теплова Я.А.* Экспериментальное исследование потери электрона многозарядными ионами в газах. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 42 (1962) С. 16–26.
174. *Dillingham T.R., Macdonald J.R., Richard P.* Ionization of one-electron ions and capture by bare and one-electron ions. // *Physical Review. A.* V. 24 (1981) P. 1237–1248.
175. *Knudsen H., Andersen L.H., Haugen H.K., Hvelplund P.* Electron loss from fast one-electron ions colliding with He, N₂ and Ar. // *Physica Scripta.* V. 26 (1982) P. 132–140.

176. *Montenegro E.C., Melo W.S., Meyerhof W.E., Pinho A.G.* Intermediate-velocity atomic collision. IV. Screening, antiscreening, and related processes in $\text{He}^+ + (\text{H}_2, \text{He})$. // *Physical Review. A. V. 48* (1993) P. 4259–4266.
177. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Influence of the coulomb interaction in the final state on the cross section of single-electron capture by fast ions. // *Physics Letter. A. V. 375* (2011) P. 4138–4140.
178. *Новиков Н. В.* Описание захвата электрона быстрыми многоэлектронными ионами. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 3* (2012) С. 14–19.
- Novikov N.V.* Description of single-electron capture by fast multielectron ions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. V. 6. No. 2* (2012) P. 203–207.
179. *Belkić D, Salin A.* Coulomb Brinkman–Kramers approximation: differential cross section for electron capture. // *Journal of Physics. B: At. Mol. Phys. V. 9* (1976) P. L397–L402.
180. *Macdonald J.R., Martin F.W.* Experimental electron-transfer cross sections for collisions of oxygen ions in argon, nitrogen and helium at energy of 7–40 MeV. // *Physical Review. A. V. 4* (1971) P. 1965–1974.
181. *Houck J.N., Zavodszky P.A., Tanis J.A.* Charge-changing cross sections for 8–40-MeV $\text{O}^{7.8+}$ + (Ar, Ne) collisions. // *Physical Review. A. V. 56* (1997) P. 1954–1957.
182. *Tonuma T., Kohno I., Miyazawa Y., Yoshida F., Karasawa T., Takahashi T., Konno S.* Charge changing of energetic heavy ions in gases. // *Journal of the Physical Society of Japan. V. 34* (1973) P. 148–155.
183. *Anholt R., Xu X.-Y., Stoller Ch., Molitoris J.D., Meyerhof W.E., Rude B.S., McDonald R.J.* Intermediate-velocity atomic collisions: Electron capture and loss in 10–42 C ions. // *Physical Review. A. V. 37* (1988) P. 1105–1114.

184. *Graham W.G., Berkner K.H., Pyle R.V., Schlachter A.S., Stearns J.W., Tanis J.A.* // Charge-transfer cross sections for multiply charged ions colliding with gaseous targets at energies from 310 keV/amu to 8.5 MeV/amu. // *Physical Review. A.* V. 30 (1984) P. 722–728.
185. *Boman S.A., Bernstein E.M., Tanis J.A.* Single-electron capture and loss cross sections versus target Z for 1 MeV/u oxygen ions incident on gases. // *Physical Review. A.* V. 39 (1989) P. 4423–4427.
186. *Hippler R., Datz S., Miller P.D., Pepmiller P.L., Dittner P.F.* Double- and single-electron capture and loss in collisions of 1–2 MeV/u boron, oxygen and silicon projectiles with helium atoms. // *Physical Review. A.* V. 35 (1987) P. 585–590.
187. *Macdonald J.R., Ferguson S.M., Chiao T., Ellsworth L.D., Savoy A.* Experimental electron-transfer cross sections for fluorine ions in nitrogen at energies from 4 to 54 MeV. // *Physical Review. A.* V. 5 (1972) P. 1188–1194.
188. *Ferguson S.M., Macdonald J.R., Chiao T., Ellsworth L.D., Savoy A.* Experimental determination of electron-transfer cross sections for fluorine ions in argon at energies from 8 to 54 MeV. // *Physical Review. A.* V. 8. (1973) P. 2417–2424.
189. *Novikov N.V., Teplova Ya.A., Chernysh V.S.* Cross section for the single-electron capture by fast He^+ ions in inert gases. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B.* V. 269 (2011) P. 834–836.
190. *Новиков Н.В.* Сечение захвата одного электрона быстрыми ионами He^+ . // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 2 (2010) С. 12–17.
- Novikov N.V.* Cross section for single-electron capture by fast He^+ ions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* V. 4. No. 4 (2010). P. 276–281.
191. *Новиков Н.В.* Влияние структуры быстрого однозарядного иона на сечение захвата электрона. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 3 (2011) С. 80–84.

Novikov N.V. Effect of the structure of the singly charged ion on the cross section for electron capture. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 5. No. 2 (2011) P. 279–283.

192. *Novikov N.V.* New method of the approximation of Hartree–Fock wave functions. // *International Journal of Mathematics and Computational Science (Public Science Framework)*. V. 1. No. 2 (2015) P. 55–58.

193. *Novikov N.V.* Wave function value database. // <http://cdfе.sinp.msu.ru/services/wftables>

194. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Database on charge-changing cross sections in ion-atom collisions. // *Journal of Physics: Conference Series* V. 194 (2009) P. 082032.

195. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Database on charge-changing cross sections in ion-atom collisions. // <http://cdfе.sinp.msu.ru/services/cccs/cccs.htm>

196. *Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A., Novikov N.V., Fainberg Yu.A.* Experimental electron loss and capture cross sections in ion-atom collisions. // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. V. 96 (2010) P. 85–121.

197. *Дмитриев И.С., Теплова Я.А., Белкова Ю.А., Новиков Н.В.* Сечения перезарядки ионов углерода. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 4 (2008) С. 11–14.

Dmitriev I.S., Teplova Ya.A., Belkova Yu.A., Novikov N.V. Charge exchange cross sections of carbon ions. // *Journal of Surface Investigation*. V. 2. No. 2 (2008) P. 270–273.

198. *Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Анализ соотношения между сечениями захвата и потери электрона ионами углерода. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2009) С. 20–23.

Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A. Analysis of the relationship between the electron-capture and electron-loss cross sections for carbon ions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 3. No. 2 (2009) P. 188–191.

199. *Teplova Ya.A., Dmitriev I.S., Belkova Yu.A., Novikov N.V.* Boron beam interaction with matter. // *Boron: Compounds, Production and Application.* / Ed. by Perkins G.L. Nova Science Publishers Inc., 2011. Chapter 12. P. 1–36.
200. *Teplova Ya.A., Novikov N.V., Belkova Yu.A.* Interaction of helium atoms and ions with matter. // *Helium: Occurrence, Application and Biological Effects.* / Ed. by Davis S.B. Nova Science Publishers, 2013. P. 87–114.
201. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Эмпирические закономерности в сечениях перезарядки ионов с зарядами от 5 до 10. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* № 3 (2015) С. 55–59.
- Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Empirical regularities in the charge exchange cross sections of ions with nuclear charges from 5 to 10. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* V. 9. No. 2 (2015) P. 263–267.
202. *Welsh L.M., Berkner K.H., Kaplan S.N., Pyle R.V.* Cross sections for electron capture by fast protons in H₂, He, N₂ and Ar. // *Physical Review.* V. 158 (1967) P. 85–92.
203. *Toburen L.H., Nakai M.Y., Langley R.A.* Measurement of high-energy charge-transfer cross sections for incident protons and atoms hydrogen in various gases. // *Physical Review.* V. 171 (1968) P. 114–122.
204. *Schlachter A.S., Stearns J.W., Graham W.G., Berkner K.H., Pyle R.V., Tanis J.A.* Electron capture for fast highly charged ions in gas targets: an empirical scaling rule. // *Physical Review.* A. V. 27 (1983) P. 3372–3374.
205. *Пивовар Л.И., Кривоносов Г.А., Тубаев В.М.* Многоэлектронная ионизация при близких столкновениях ионов и атомов Ag и Kr. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* Т. 53 (1967) С. 1872–1878.
206. *Scott H.A., Bridwell L.B., Moak C.D., Alton G.D., Jones C.M., Miller P.D., Sayer R.O., Kessel Q.C., Antar A.* Electron-loss cross sections for 20-MeV Cl⁴⁺ and I⁵⁺ ions incident on thin

gaseous targets: Experimental measurements and potential-model data analyses. // *Physical Review. A*. V. 18 (1978) P. 2459–2463.

207. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Влияние захвата и потери двух электронов на зарядовое распределение ионов. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 5 (2016) С. 99–103.

Novikov N.V., Teplova Ya.A. Effect of the capture and loss of two electrons on the charge distributions of ions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 10. No. 3 (2016) P. 558–562.

208. *Файнберг Ю.А., Теплова Я.А., Новиков Н.В.* Энергетическое и зарядовое распределение атомов гелия, отраженных от поверхности меди при скользящем падении. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2012) С. 5–9.

Fainberg Yu.A., Teplova Ya.A., Novikov N.V. Energy and charge distribution of helium atoms reflected from a Cu surface under grazing incidence. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 6. No. 2 (2012) P. 195–198.

209. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Methods of estimation of equilibrium charge distribution of ions in solid and gaseous media. // *Physics Letter. A*. V. 378 (2014) P. 1286–1289.

210. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Эффект плотности в равновесных зарядовых распределениях ионов углерода и кислорода. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2014) С. 10–14.

Novikov N.V., Teplova Ya.A. Effect of density on the equilibrium charge distribution of carbon and oxygen ions. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 8. No. 2 (2014) P. 206–210.

211. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Зарядовое распределение ионов азота, отраженных от медной и графитовой поверхностей. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2013) С. 35–39.

- Novikov N.V., Teplova Ya.A., Fainberg Yu.A.* Charge distribution of nitrogen ions reflected from copper and graphite surfaces. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 7. No. 2 (2013) P. 227–230.
212. *Baron E.* Heavy ion stripping by solid foils between 1 and 6 Mev/nucleon. // *IEEE transactions on Nuclear Science*. V. NS-19. No. 2 (1972) P. 256–262.
213. *Turkenburg W.C., Colenbrander B.G., Kersten H.H., Saris F.W.* Inelastic collisions of argon and chlorine ions in carbon. // *Surface Science*. V. 47 (1975) P. 272–281.
214. *Clark R.B., Grant I.S., King R., Eastham D.A., Joy T.* Equilibrium charge state distributions of high energy heavy ions. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 133 (1976) P. 17–24.
215. *Knystautas E.J., Jomphe M.* Equilibrium charge-state distributions for 2–20-MeV argon ions in carbon. // *Physical Review. A*. V. 23 (1981) P. 679–682.
216. *Sato Y., Miyoshi T., Murakami T., Noda K., Shevelko V.P., Tawara H.* Penetration of 4.3 and 6.0 MeV/u highly charged, heavy ions through carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 225 (2004) P. 439–448.
217. *Novikov N. V.* Charge-Changing Cross Sections code. // <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/cccs/HTM/ccccode.htm>
218. *Zaikov V.P., Kralkina E.A., Vorobjev N.F., Dmitriev I.S., Nikolaev V.S., Teplova Ya.A.* Attainment of equilibrium charge distributions in fast beams passing through solid films. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 5 (1984) P. 10–13.
219. *Теплова Я.А., Дмитриев И.С., Белкова Ю.А.* Установление равновесного зарядового состояния ионов азота при прохождении через пленки целлулоида. // *Известия РАН. Сер. Физическая*. Т. 66. № 4 (2002) С. 565–567.
220. *Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Оценка средних зарядов легких ионов при прохождении через тонкие пленки углерода. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2015) С. 60–64.

Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A. Estimation of the average charges of light ions during their penetration through thin carbon films. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 9. No. 2 (2015) P. 268–271.

221. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Equilibrium thickness of carbon target interacting with nitrogen and neon ion beams. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 373 (2016) P. 35–39.

222. *Blazevic A., Bohlen H.G., Oertzen W.* Charge-state changing processes for Ne ions passing through thin carbon foils. // *Physical Review. A*. V. 61 (2000) P. 032901–032906.

223. *Imai M., Sataka M., Kawatsura K., Takahiro K., Komaki K., Shibata H., Sugai H., Nishio K.* Equilibrium and non-equilibrium charge-state distributions of 2 MeV/u sulfur ions passing through carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B*. V. 267 (2009) P. 2675–2679.

224. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Ширина равновесного зарядового распределения тяжелых ионов в твердой и газообразной средах. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. № 3 (2013) С. 40–42.

Novikov N.V., Teplova Ya.A. Width of the equilibrium charge distribution of heavy ions in solid and gaseous media. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. V. 7. No. 2 (2013) P. 231–233.

225. *Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Empirical estimation of the equilibrium charge distribution of heavy ions in solid and gaseous media. // *Physics Letter. A*. V. 377 (2013) P. 463–466.

226. *Hvelplund P., Laegsgard E., Olsen J.E., Pedersen E.H.* Equilibrium charge distributions of ion beams in carbon. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 90 (1970) P. 315–320.

227. *Lennard W.N., Phillips D., Walker D.A.* Equilibrium charge distributions of ions beams exiting carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods*. V. 179 (1981) P. 413–419.

228. *Schmitt C., Laverne J.A., Robertson D., Bowers M., Lu W., Collon P.* Equilibrium charge state distributions for boron and carbon ions emerging from carbon and aluminum targets. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 268 (2010) P. 1551–1557.
229. *Stoller Ch., Suter M., Himmel R., Bonani G., Nessi M., Wolfli W.* Charge state distributions of 1 to 7 MeV C and Be ions stripped in thin foils. // IEEE transactions on Nuclear Science. V. NS-30 (1983) P. 1074–1075.
230. *Ambros R., Kleinfeld A.M.* Equilibrium charge state distributions of oxygen and sulfur ions in the carbon stripper of a tandem accelerator. // Nuclear Instruments and Methods. V. 99 (1972) P. 173–177.
231. *Hvelplund P., Laegsgaard E., Pedersen E.H.* Equilibrium charge state distributions for light ions in helium, measured with a positron-sensitive open electron multiplier. // Nuclear Instruments and Methods. V. 101 (1972) P. 497–502.
232. *Brown R.A., Symons G.D., Hall I.* Equilibrium charge state fractions for 11.5 to 37.3 MeV ^{16}O ions in carbon. // Nuclear Instruments and Methods. V. 58 (1968) P. 274–276.
233. *Kanai Y., Awaya Y., Kambara T., Kase M., Kumagai H., Mizogawa T., Shima K.* Charge-state distribution measurements of heavy ions. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. V. 262 (1987) P. 128–131.
234. *Miyoshi T., Noda K., Tawara H., Tolstikhina I. Yu., Shevelko V.P.* Distribution of exit silicon ions over excited states after penetrating through carbon foils at 2.65, 4.3 and 6.0 MeV/u. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 258 (2007) P. 329–339.
235. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Угловое и энергетическое распределение ионов азота, отраженных от медной поверхности. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 7 (2004) С. 109–112.
236. *Novikov N.V., Teplova Ya.A., Fainberg Yu.A., Kulikauskas V.S.* Reflection of nitrogen ions from copper surface: experiment and calculations. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 235 (2005) P. 448–451.

237. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Рассеяние быстрых ионов от медной и графитовой поверхностей при малых углах скольжения. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 7 (2006) С. 45–47.
238. *Файнберг Ю.А., Теплова Я.А., Новиков Н.В.* Энергетическое и зарядовое распределение быстрых ионов и атомов водорода, отраженных от Cu при скользящем падении. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 6 (2010) С. 40–44.
- Fainberg Yu.A., Teplova Ya.A., Novikov N.V.* Energy and charge distributions of fast hydrogen ions and atoms reflected from Cu in case of grazing incidence. // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. V. 4. No. 3 (2010) P. 494–497.
239. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Теоретическое описание быстрых ионов, отраженных поверхностью при скользящем падении. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 9 (2003) С. 47–50.
240. *Novikov N.V., Teplova Ya.A., Fainberg Yu.A., Kurnaev V.A.* Theoretical description of fast proton scattering from steel surface under grazing incidence. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 212 (2003) P. 96–100.
241. *Новиков Н.В., Теплова Я.А., Файнберг Ю.А.* Глубина проникновения ионов, падающих на металлическую поверхность при небольших углах скольжения. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 4 (2006) С. 19–22.
242. *Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Энергетическое и зарядовое распределение ионов азота, отраженных от металлической поверхности при небольших углах скольжения. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. № 3 (2007) С. 33–37.

243. *Novikov N.V., Teplova Ya.A., Bondurko V.V.* Energy and charge distributions of fast ions reflected from metal surface at grazing incidence. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 256 (2007) P. 21–23.*
244. *Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Charge distributions and energy losses of ions in solids. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 343 (2015) P. 110–115.*
245. *Белкова Ю.А., Новиков Н.В., Теплова Я.А.* Потери энергии ионов в процессе перезарядки. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 4 (2016) С. 56–60.*
- Belkova Yu.A., Novikov N.V., Teplova Ya.A.* Ion energy losses during the charge-exchange process. // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. V. 10. No. 2 (2016) P. 417–420.*
246. *Rauhala E., Raisanen J.* Stopping power of ${}^7\text{Li}$, ${}^{11}\text{B}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{14}\text{N}$ and ${}^{16}\text{O}$ ions in $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_3$. // *Physical Review. B. V. 42 (1990) P. 3877–3881.*
247. *Yu Y.C., Hsu J.Y., Chen K.M.* The stopping forces of small cluster ions of Li and C with MeV energies in carbon foils. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B. V. 261 (2007) P. 1184–1190.*

Обозначения

$a_0 = 0.5291 \times 10^{-8}$ см – боровский радиус.

$A_q(Z, Z_t)$ – коэффициент, определяющий асимптотическую зависимость $\sigma_{q,q+1}$ от E

$\sigma_{q,q+1} \rightarrow A_q(Z, Z_t)/E$, при $E \rightarrow \infty$.

α – угол скольжения при падении ускоренных ионов на поверхность.

$C_{gs}(E, Z, Z_t)$ – коэффициент, учитывающий эффект плотности для сечений перезарядки.

В твердой мишени $C_{gs}(E, Z, Z_t) > 1$. В газе $C_{gs}(E, Z, Z_t) = 1$.

d – ширина равновесного зарядового распределения, $d^2 = \sum_q (q - \bar{q})^2 F_q$.

$D(t)$ – ширина неравновесного зарядового распределения $[D(t)]^2 = \sum_q [q - \bar{Q}(t)]^2 \Phi_q(t)$.

E – энергия иона.

E_0 – энергия падающих на поверхность ионов.

E_q – энергия, при которой $\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ достигает максимума.

E'' – энергия, при которой $\sigma_{q,q-1}(E'', Z, Z_t) = \sigma_{q,q+1}(E'', Z, Z_t)$.

E_S – энергия иона, при которой потери энергии ионов S в данной среде достигают максимума.

E_e – энергия электрона, выбитого из атома мишени в процессе его ионизации.

ε_q – энергия связи электрона на внешней оболочке иона с зарядом q .

Φ_q – неравновесные зарядовые фракции $\sum_q \Phi_q = 1$.

F_q – равновесные зарядовые фракции $\sum_q F_q = 1$.

$F_q^s(C_{g-s})$ – равновесные зарядовые фракции ионов в твердой мишени.

$\langle F_0(E, \alpha) \rangle$ – усредненная по углу рассеяния зарядовая фракция атомов ($q = 0$), отраженных от поверхности.

K – переданный атому мишени импульс.

l – орбитальное квантовое число активного электрона.

$m = 9.109 \times 10^{-28}$ г – масса покоя электрона.

n – главное квантовое число активного электрона.

q – заряд иона.

q_0 – заряд падающих на поверхность ионов.

\bar{q} – средний заряд иона в равновесном распределении $\bar{q} = \sum_q q F_q$.

\bar{q}^s – средний равновесный заряд иона в твердой мишени.

$q_i(K)$ – эффективный заряд атома мишени.

$\bar{Q}(t)$ – средний заряд иона в неравновесном распределении $\bar{Q}(t) = \sum_q q \Phi_q(t)$.

\vec{R} – относительное положение тяжелых частиц $\vec{R} = \vec{x} - \vec{y}$.

s – асимметрия равновесного зарядового распределения $s = \sum_q (q - \bar{q})^3 F_q / d^3$.

S – потери энергии иона $S = S_n + S_e$.

S_n – упругие потери энергии ионов [МэВ/(мг/см²)].

S_e – неупругие потери энергии ионов $S_e = S_{q\pm 1} + S_i + S_{nl}$ [МэВ/(мг/см²)].

$S_{q\pm 1}$ – потери энергии иона в процессе перезарядки [МэВ/(мг/см²)].

S_i – потери энергии иона в процессах ионизации [МэВ/(мг/см²)].

S_{nl} – потери энергии иона в процессах возбуждения атома мишени [МэВ/(мг/см²)].

t – толщина мишени [мкг/см²].

T_q – толщина мишени [мкг/см²], необходимая для установления равновесного заряда (зависит от q_0).

T_d – толщина мишени [мкг/см²], необходимая для установления ширины равновесного зарядового распределения (зависит от q_0).

T_{qd} – толщина мишени [мкг/см²], необходимая для установления равновесного зарядового распределения $T_{qd} = \max(T_q, T_d)$ (зависит от q_0).

T_{\max} – максимальная толщина мишени T_{qd} для $0 \leq q_0 \leq Z$ (не зависит от q_0).

τ – время [с].

$V_0 = 2.188 \times 10^8$ см/с – атомная единица скорости.

V – скорость иона.

\vec{x} – положение активного электрона относительно ядра атома мишени.

\vec{y} – положение активного электрона относительно ядра налетающего иона.

Z – заряд ядра иона.

Z_t – заряд ядра атома мишени.

$\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_t)$ – сечение потери одного электрона ионом в газе.

$\sigma_{q,q+1}^{\max}(Z, Z_t)$ – сечение потери одного электрона ионом в газе при энергии $E = E_q$.

$\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_t)$ – сечение захвата одного электрона ионом в газе.

$\sigma_{q,q-1}^{\max}(Z, Z_t)$ – сечение захвата одного электрона ионом в газе при $E \approx 10$ кэВ/нуклон.

$\sigma_{q,q+2}(E, Z, Z_t)$ – сечение потери двух электронов ионом в газе.

$\sigma_{q,q-2}(E, Z, Z_t)$ – сечение захвата двух электронов ионом в газе.

$\sigma_{q,q+1}^s(E, Z, Z_t, C_{g-s})$ – сечение потери одного электрона ионом в твердой мишени.

$\sigma_{q,q-1}^s(E, Z, Z_t, C_{g-s})$ – сечение захвата одного электрона ионом в твердой мишени.

ρ_j – плотность [ат/см³] атомов j -го сорта в многокомпонентной мишени.

θ – угол рассеяния отраженных поверхностью ионов.

$\varphi_{nl}(x)$ – радиальная часть волновой функции электрона с квантовыми числами n и l в приближении Хартри–Фока.

$\varphi_{E_{el'}}(x)$ – радиальная часть волновой функции электрона в непрерывном спектре, нормированная по шкале энергии.