

Динамика наиболее вероятной потери энергии релятивистскими ионами

Л. Г. Глазов¹⁾

Институт сильноточной электроники Сибирского отд. РАН, 634055 Томск, Россия

University of Southern Denmark, DK-5230 Odense M, Denmark

Поступила в редакцию 2 мая 2007 г.

После переработки 28 мая 2007 г.

На основе обобщения классического подхода Ландау и метода перевала получены простые, но весьма общие формулы, определяющие параметры статистического распределения неупругих потерь энергии (в частности, их наиболее вероятные значения) релятивистскими ионами как функции скорости и длины пробега в веществе. Эти зависимости уточняют хорошо известные и существенно расширяют их области применимости. Сравнение с численными результатами подтверждает высокую точность полученных аналитических представлений в широких диапазонах параметров и выявляет их ограничения.

PACS: 34.50.Bw, 79.20.Nc

Цель настоящей работы – обобщение на релятивистский случай и расширение области применимости классических результатов для параметров распределения электронных (“ионизационных”) потерь энергии быстрыми ионами.

Основные результаты для распределения и его параметров широко известны, вплоть до изложения в учебниках (см., например, недавний обзор в [1]). В рассматриваемом ниже случае малой *относительной* потери энергии ($\Delta E/E_0 \ll 1$) среднее значение и дисперсия (страгглинг) распределения просто связаны с первыми моментами сечения: $\overline{\Delta E} = NxQ_1$, $\Omega^2 \equiv \overline{(\Delta E - \overline{\Delta E})^2} = NxQ_2$, $Q_n \equiv \int T^n d\sigma(T)$, а общим решением кинетического уравнения является интегральная формула [2, 3], представляемая в виде

$$F(\Delta E, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ ik\Delta E - Nx \int (1 - e^{-ikT}) d\sigma(T) \right\} dk, \quad (1)$$

где $F(\Delta E, x)$ – распределение ионов по потере энергии ΔE после пробега x в веществе, $d\sigma(T)$ – сечение столкновений, дифференциальное по переданной энергии $T \leq T_m$ и соответствующее концентрации N атомов мишени. Анализ (1) воспроизводит (относительно простые) аппроксимации для F , такие, как гауссов предел [4] и приближение Вавилова [3] для больших длин пробега ($\Omega^2 \gg T_m^2$) или распределение Ландау [2] для достаточно (но не слишком) малых ($E_a T_m \ll \Omega^2 \ll T_m^2$, где E_a – характерная атомная энергия мишени). Эти асимптотические результа-

ты, однако, имеют ограниченную точность (даже если номинально применимы) и неудовлетворительны в широкой области параметров с $\Omega/T_m \sim 1$.

Для нерелятивистских ионов в [5, 6] была предложена ревизия подхода Ландау (RL, revised Landau), учитывающая конечную величину T_m (в отличие от модели $T_m = \infty$ [2], приемлемой при $\Omega^2 \ll T_m^2$). Это существенно улучшает точность и распространяет применимость метода до $E_a T_m \ll \Omega^2 \lesssim T_m^2$. Также в [5] тестировались аналитические результаты, возникающие при приложении к интегралу (1) уместной адаптации [7] асимптотического метода перевала (наискорейшего спуска, SD, steepest-descent). В нерелятивистском пределе [6] комбинация этих двух подходов²⁾ приводит к весьма общему и точному аналитическому описанию распределений F в широчайшем диапазоне длины пробега (Ω^2/T_m^2 от $\ll 1$ до $\gg 1$) и почти столь же общим результатам для их характеристических параметров.

Как SD-, так и RL-методы успешно обобщаются на релятивистские ($\beta \equiv v/c \sim 1$) скорости ионов v , см. в [11] краткое обсуждение аналитической методики и некоторые результаты. Как сечение близких ($E_a \ll T \leq T_m$) столкновений используем борновское приближение для кулоновского рассеяния [3, 12, 13]:

$$d\sigma(T) = \frac{W_B}{2mv^2} \left(1 - \beta^2 \frac{T}{T_m} \right) \frac{dT}{T^2}, \quad T_m = \frac{2mv^2}{1 - \beta^2}, \quad (2)$$

²⁾Отметим, что матричное обобщение [8] формулы (1) позволяет распространить обе методики и на случай торможения с перезарядкой [9, 10], хотя результаты не столь же просты и универсальны. В данной работе (для релятивистских ионов) эффекты перезарядки не учитываются.

¹⁾e-mail: glazov@to.hcei.tsc.ru

где $W_B \equiv 4\pi Z_1^2 Z_2 e^4$ ($= Z_1^2 Z_2 e^4 / 4\pi \epsilon_0^2$ в СИ) – коэффициент в предельной формуле Бора [4] для страгглинга ($\Omega_B^2 \equiv NxW_B$), e и m – заряд и масса электрона, Z_1 и Z_2 – атомные номера иона и мишени. Формула (2) обобщает на релятивистский случай классическое сечение Резерфорда ($\sim dT/T^2$) и, будучи пертурбационной, обеспечивает наилучшую точность при небольших значениях Z_1 . При необходимости различные поправки к сечению при $T \sim T_m$ могут быть учтены как возмущения [11] (что приводит к конечным разложениям для F), но здесь ограничимся моделью (2) для получения базовых результатов. Простая формула (2), конечно, неприменима к $T \lesssim E_a$, но это не очень существенно для статистики торможения: Q_1 и $\overline{\Delta E}$ (сдвиг F по оси ΔE) получают значительный вклад от значений $T \lesssim E_a$, однако поведение $d\sigma(T)$ в этой области слабо влияет на форму распределения для не слишком малых длин пробега ($\Omega^2 \gg E_a T_m$) [2]. Таким образом, можно получать достаточно точные и общие результаты, просто отделяя среднее значение $\overline{\Delta E}$ в аналитических формулах, рассматривая его как заданный (из теории или эксперимента) параметр, и вообще не конкретизируя вид сечения при малых T . В соответствии с этим, например, общие результаты представляются ниже для интервала $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ между средней и наиболее вероятной потерями энергии (MP-интервал, Mean-to-Reak), а не собственно ΔE_p .

Уместный выбор безразмерной длины пробега, определяющей форму распределения, слегка различается для RL- и SD-подходов. При меньших x (RL) это $z \equiv NxW_B / 2mv^2 T_m = (1 - \beta^2) \Omega_B^2 / (2mv^2)^2$, при больших – отношение Ω^2 / T_m^2 , к разложениям по обратным степеням которого приводит SD-метод. Для сечения (2) это различие – менее, чем в 2 раза: $\Omega^2 / T_m^2 \simeq (1 - \beta^2 / 2) z$, и несущественно при $\beta \rightarrow 0$.

Как и в нерелятивистском случае [5, 6], для сечения (2) комбинация RL- и SD-подходов доставляет весьма точное аналитическое описание динамики распределения F от малых до больших значений z (Ω^2 / T_m^2). В настоящей работе эти громоздкие формулы (и, тем более, их вывод) рассматривать не будем и ограничимся соответствующими результатами для таких параметров распределения, как MP-интервал и др. Эти результаты менее широко применимы, исключая некоторую область с $z \sim 0.1-1$: даже при аналитически заданном F , решение трансцендентного уравнения для искомого параметра влечет асимптотические приближения, приемлемые в ограниченном интервале z . Опуская здесь все эти выкладки, ниже продемонстрируем применимость аналитических формул их сравнением с численными результатами.

Примеры последних приведены на рис.1. Рис.1а показывает зависимости MP-интервала $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ от

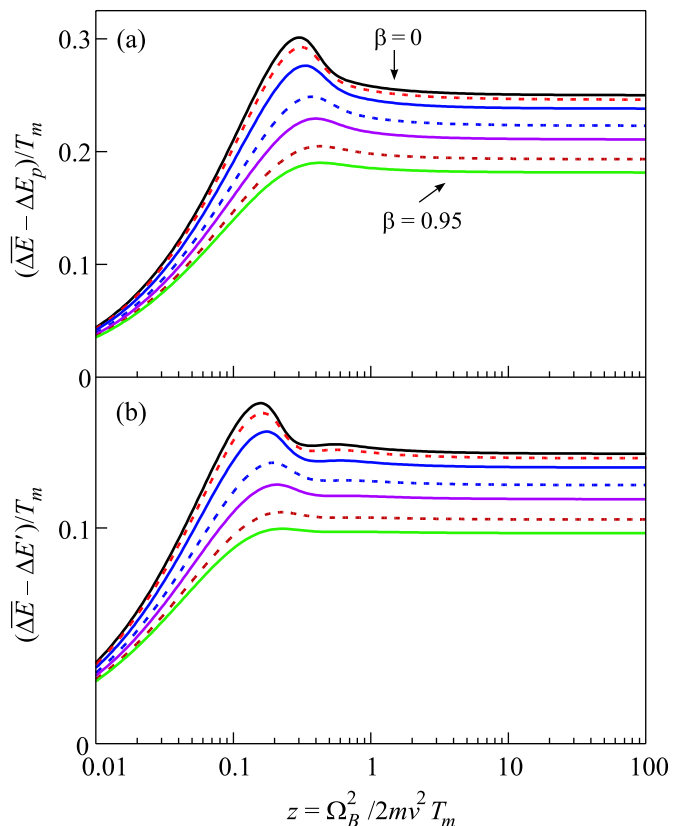


Рис.1. Численные результаты для сечения (2): (а) MP-интервал $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ (в единицах T_m) как функция безразмерной длины пробега z . Значения β (сверху вниз): 0 (нерелятивистский предел), 0.3, 0.5, 0.7, 0.8, 0.9, 0.95; (б) то же для псевдо-MP-интервала $\overline{\Delta E} - \Delta E'_p$, определенного согласно (3)

безразмерной длины пробега z для различных значений β , рис.1б – аналогичные результаты для другого параметра, $\overline{\Delta E} - \Delta E'_p$. Он также характеризует асимметрию $F(\Delta E, x)$, но вместо истинной величины ΔE_p включает среднее значений ΔE , отвечающих полувысоте распределения:

$$\Delta E'_p \equiv [\Delta E_{-1/2} + \Delta E_{+1/2}] / 2, \quad (3)$$

где $\Delta E_{\pm 1/2}$ ($\Delta E_{-1/2} < \Delta E_p < \Delta E_{+1/2}$) удовлетворяют $F(\Delta E_{\pm 1/2}, x) = F(\Delta E_p, x) / 2$.

Получение численных результатов требует полной конкретизации сечения, которое выбиралось в виде (2) для $T_{\min} \leq T \leq T_m$. Представленные данные, конечно, получены для конкретных значений $T_{\min} / T_m \ll 1$, но, как и следовало ожидать, не претерпевают сколько-нибудь видимых изменений при их варьировании в этой области, так что зависимости

на рис.1 достаточно универсальны. Точный и эффективный метод вычисления значений распределения для выбранного сечения является обобщением описанного в [6]; простая итерационная схема использовалась для локализации искомых параметров.

Качественно, изменение (истинного и псевдо-) МР-интервалов с увеличением длины пробега схоже с их поведением [6] в нерелятивистском пределе (верхние кривые на рис.1): довольно быстрый рост при малых z , достижение максимального значения (при $z \gtrsim 0.3$ для $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ или $z \gtrsim 0.15$ для $\overline{\Delta E} - \Delta E'_p$), и далее монотонное приближение к конечному асимптотическому значению. Нетрудно видеть, что распространенная оценка (3) для наиболее вероятной потери энергии заметно (до ~ 2 раз при больших z) занижает значение $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$. С ростом β общей тенденцией является уменьшение МР-интервалов (нормированных на T_m). Это ярко проявляется в окрестности их максимума, который становится все менее выраженным с увеличением β . Следует отметить, что некоторые качественные изменения с ростом β на рис.1 – например, монотонное убывание МР-интервалов (для любого фиксированного значения абсциссы) или смещение вправо местоположения максимума – на самом деле не имеют общего характера, а специфичны для выбранной параметризации. Это демонстрирует рис.2, представляющий МР-интервал как функцию другой безразмерной длины пробега.

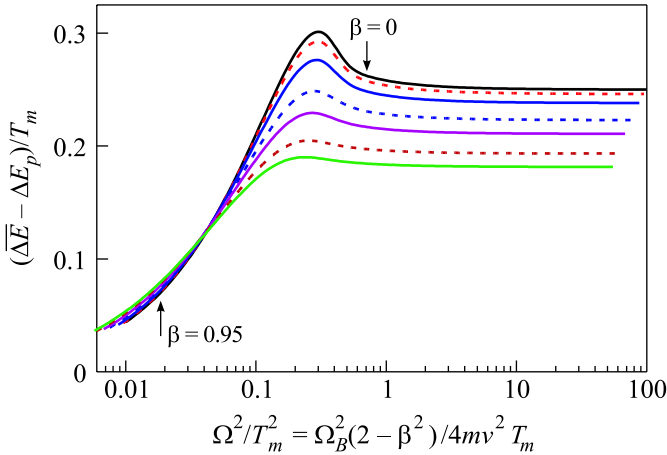


Рис.2. Данные рис.1а при альтернативном выборе абсциссы: Ω^2/T_m^2

Рассмотрим теперь аналитические формулы для параметров распределения, вытекающие из SD- и RL-подходов и (в значительной мере) воспроизводящие зависимости на рис.1,2.

Для больших длин пробега метод перевала позволяет получать общие асимптотические выражения, формально годные для произвольных сечений (хотя их практическая точность и область применимости зависят от $d\sigma(T)$); уравнения для искомых параметров легко решаются [7, 5] с помощью разложения по обратным степеням Nx ($\propto \Omega^2/T_m^2$ для сечения (2)). Так, опуская вклады $\propto (Nx)^{-2}$, для МР-интервала получаем общую асимптотическую формулу

$$\overline{\Delta E} - \Delta E_p \simeq \frac{Q_3}{2Q_2} + \frac{1}{4Nx} \left(\frac{5Q_3Q_4}{3Q_2^3} - \frac{Q_3^3}{Q_2^4} - \frac{Q_5}{2Q_2^2} \right), \quad (4)$$

уточняющую первый член, полученный в [7]. Для сечения (2) формула (4) принимает явный вид

$$\overline{\Delta E} - \Delta E_p \simeq \frac{T_m}{6} \left\{ \frac{3 - 2\beta^2}{2 - \beta^2} + \frac{120 - 248\beta^2 + 163\beta^4 - 32\beta^6}{360(2 - \beta^2)^3} \cdot \frac{T_m^2}{\Omega^2} \right\}. \quad (5)$$

Результаты (4), (5) учитывают ведущую поправку (относительный порядок $\propto (Nx)^{-1}$) к базовой SD-формуле для $F(\Delta E, x)$ [7]. Заметим, однако, что даже при $\Omega = T_m$ относительный вклад последнего члена в (5) составляет $< 3\%$ (максимален при $\beta \rightarrow 0$ и монотонно убывает с ростом β), да и он не целиком происходит от упомянутой поправки в распределении: полное пренебрежение ею дает ошибку $\lesssim 1\%$ при определении МР-интервала для любых β , что лишний раз подтверждает высокую точность SD-аппроксимаций в области $\Omega^2 \gtrsim T_m^2$ [5].

Для псевдо-МР-интервала [7] аналогично получаем (ограничиваясь главным членом асимптотики)

$$\overline{\Delta E} - \Delta E'_p \simeq \left(\frac{1}{2} - \frac{\ln 2}{3} \right) \frac{Q_3}{Q_2} \simeq \frac{0.269(3 - \beta^2)}{3(2 - \beta^2)} T_m. \quad (6)$$

В частности, оценка (3) почти вдвое занижает величину МР-интервала при больших x : $\overline{\Delta E} - \Delta E'_p \simeq \simeq 0.538(\overline{\Delta E} - \Delta E_p)$, в согласии с данными на рис.1.

В рамках RL-подхода параметры распределения тоже легко определяются аналитически в широких областях длин пробега. Последние далеко не ограничиваются только предельным случаем $z \ll 1$, предполагавшимся в [2]. Например, нерелятивистский МР-интервал определяется простой формулой [6] во всей области $z \lesssim 0.4$, где одночленное RL-представление корректно описывает распределение F в окрестности

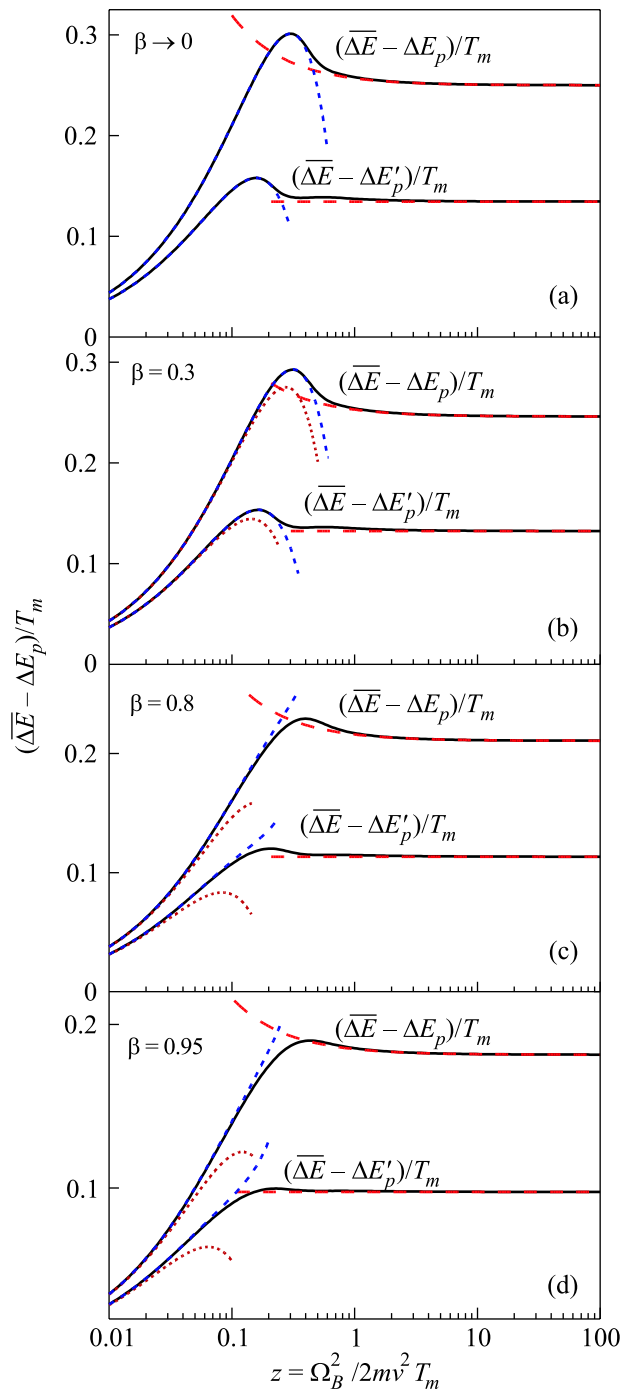


Рис.3. Сравнение численных и аналитических зависимостей МР-интервалов $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ и $\overline{\Delta E} - \Delta E'_p$ (в единицах T_m) от безразмерной длины пробега z . Сплошные линии: численные результаты; штриховые линии: SD-формулы (5), (6); пунктирные линии: RL-формулы (7), (8); тонкий пунктир: (7), (8) без последних членов ($\sim z\beta^2$) в правых частях. (a) $\beta \rightarrow 0$; (b) $\beta = 0.3$; (c) $\beta = 0.8$; (d) $\beta = 0.95$

его максимума ($\Delta E = \Delta E_p$). Релятивистское обобщение [11] этого результата имеет вид

$$\overline{\Delta E} - \Delta E_p \simeq -zT_m (\ln z + 0.2 + \beta^2 - 2.290z\beta^2), \quad (7)$$

и аналогично для псевдо-МР-интервала:

$$\overline{\Delta E} - \Delta E'_p \simeq -zT_m (\ln z + 0.8456 + \beta^2 - 4.342z\beta^2). \quad (8)$$

Здесь числовые параметры³⁾ представляют собой (и вычислены как) определенные характеристики функции Ландау $\phi(\lambda)$ [2]. Кроме ограничения одночленным RL-выражением для F , вывод (7), (8) включает разложение МР-интервалов по степеням уместного релятивистского параметра, $z\beta^2$. Пренебрежение членами $\sim (z\beta^2)^2$ в этих формулах (плавно) сужает z -интервал их применимости с ростом β – для (7), например, до $z \lesssim 0.3$ при $\beta = 0.5$ и $z \lesssim 0.2$ при $\beta = 0.9$. Он, однако, всегда много шире, чем $z \ll 1$, а при $\beta \lesssim 0.5$ зависимости (7), (8) достаточно точно определяют и максимумы МР-интервалов, обобщая схожие нерелятивистские результаты [6]. Так, $\overline{\Delta E} - \Delta E_p$ достигает максимального значения

$$(\overline{\Delta E} - \Delta E_p)_{\max} \simeq z_m^0 T_m (1 - 2.29z_m^0 \beta^2)$$

при $z \simeq z_m^0 e^{-4.58z_m^0 \beta^2}$, где $z_m^0 = e^{-1.2-\beta^2}$.

В заключение приведем рис.3, который иллюстрирует применимость аналитических представлений (5)–(8) путем прямого их сравнения для различных β с численными результатами на рис.1. Как и ожидалось, асимптотические SD- и RL-формулы удовлетворительно описывают динамику МР-интервалов (и, тем самым, наиболее вероятной потери энергии и смежных параметров распределения) в широких областях (соответственно, больших и меньших) длин пробега, исключая лишь некоторую область промежуточных значений z (довольно узкую при $\beta \ll 1$, но постепенно расширяющуюся с ростом β).

Автор весьма признателен проф. П. Зигмунду (P. Sigmund) за инициирование этого цикла исследований, участие в нем и гостеприимство в Оденсе, где большая часть работы и была выполнена при поддержке Danish Natural Science Research Council.

1. P. Sigmund, *Particle Penetration and Radiation Effects*, Springer, 2006.

³⁾ Оригинальное значение (0.37 [2]) первого коэффициента (0.2) в (7) неоднократно уточнялось; см. подробности в [6].

2. L. Landau, J. Phys. USSR **8**, 201 (1944) (Л. Д. Ландау, Собрание трудов, т. 1, М.: Наука, 1969, с. 482).
3. П. В. Вавилов, ЖЭТФ **32**, 920 (1957) (P. V. Vavilov, JETP **5**, 749 (1957)).
4. N. Bohr, Phil. Mag. **30**, 581 (1915).
5. L. Glazov, Nucl. Instr. Meth. B **161**, 1 (2000).
6. L. G. Glazov, Nucl. Instr. Meth. B **192**, 239 (2002).
7. P. Sigmund and K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. B **12**, 1 (1985).
8. P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. B **69**, 113 (1992).
9. L. G. Glazov, Phys. Rev. A **57**, 2746 (1998).
10. L. G. Glazov, Nucl. Instr. Meth. B **193**, 56 (2002).
11. L. G. Glazov and P. Sigmund, Nucl. Instr. Meth. B **256**, 50 (2007).
12. U. Fano, Ann. Rev. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963).
13. S. M. Seltzer and M. J. Berger, Nat. Acad. Sci.-Nat. Res. Council Publ. **1133**, 187 (1964).