

# ФОРМИРОВАНИЕ ЗАРЯДОВОГО И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ В ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ

*С. Ю. Гуськов, В. Б. Розанов, А. Н. Черкасов\**

*Отделение квантовой радиофизики Физического института им. П. Н. Лебедева  
Российской академии наук  
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 октября 2002 г.

В предлагаемой работе исследуется формирование зарядового и энергетического распределений ионов, тормозящихся и случайно меняющих свой заряд в столкновениях с частицами среды. Изучено влияние, которое оказывает разброс ионов по заряду на форму кривой Брэгга. Предложенное диффузионное приближение для кинетического уравнения тяжелых ионов позволяет простым образом находить параметры распределений ионов по заряду и энергии на всем пути движения ионов. Показана связь между характеристиками зарядового распределения ионов и сечениями процессов ионизации–рекомбинации. Рассчитанные в предложенной аналитической модели распределения ионов сравнены с результатами численных расчетов. Получено хорошее соответствие между аналитическими, численными и экспериментальными результатами.

PACS: 52.58.Hm, 52.59.Fn, 52.40.Mj

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к проблемам торможения ионов связан с возможным осуществлением при помощи пучков тяжелых ионов цепной реакции термоядерного синтеза. Ориентируясь на эту проблему, мы будем рассматривать торможение высокоэнергетических ионов тяжелых элементов в веществе, которое может быть как слабоионизированным, так и практически полностью ионизованным. Мы не будем интересоваться дальнейшим поведением ионов при торможении их до скоростей, сравнимых со скоростями частиц вещества, так как при этом ионы практически полностью теряют свою энергию.

Тема торможения заряженных частиц в веществе имеет давнюю историю, начинаяющуюся еще с работ Бете и Бора. В дальнейшем теория торможения была значительно уточнена, однако внимание к проблеме влияния зарядового распределения ионов в процессе торможения на потери энергии было обращено сравнительно недавно. В той или иной степени про-

блеме учета влияния изменения заряда на торможение ионов посвящены работы [1–5]. Авторы этих работ рассматривали процесс изменения заряда иона при столкновении его с частицами плазмы как случайный процесс перехода между небольшим числом зарядовых состояний. Точные решения, полученные ими, справедливы лишь для некоторых частных случаев и неприменимы к проблеме торможения в веществе ионов высокой кратности заряда.

Предложенный нами приближенный метод, основанный на уравнении, описывающем кинетику изменения заряда и энергии тяжелых ионов, применим для ионов тяжелых элементов с большим числом зарядовых состояний. Работа построена следующим образом. В разд. 2 рассматриваются уравнения динамики ионного пучка в приближении метода зарядовых моментов и диффузионном приближении. В разд. 3 исследуются аналитические зависимости сечений процессов от энергии и заряда ионов и проводится их сравнение с численными расчетами и экспериментальными данными. Приближенные аналитические решения, уравнения для среднего заряда и дисперсии распределения по заряду, а также диспер-

---

\*E-mail: al\_cherkasov@rambler.ru

сия распределения быстрых ионов по энергии рассмотрены в разд. 4 и 5. В разд. 6 проводится сравнение полученных результатов с численными расчетами и имеющимися в литературе экспериментальными данными.

## 2. УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ ТОРМОЖЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ ЗАРЯДА ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

Задача торможения тяжелых ионов приводит к системе связанных кинетических уравнений для плотностей потока ионов, находящихся в разных зарядовых состояниях  $Z$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_Z}{\partial l} - \frac{\partial (S_Z N_Z)}{\partial E} &= -(\sigma_i(Z) + \sigma_r(Z)) N_Z + \\ &+ \sigma_i(Z-1) N_{Z-1} + \sigma_r(Z+1) N_{Z+1}, \quad (1) \\ Z = 0, 1, 2, \dots, Z_1, \quad \sigma_i(Z_1) &= \sigma_r(0) = 0. \end{aligned}$$

Здесь

$$l = \int_0^x n_e(x') dx', \quad (2)$$

$$S_Z = -\frac{\partial E}{\partial l} \quad (3)$$

— тормозная способность вещества, зависящая от заряда иона,  $n_e$  — полная плотность электронов среды, включая связанные электроны, а  $\sigma_i$ ,  $\sigma_r$  — сечения процессов ионизации и рекомбинации, приведенные к плотности электронов среды по формуле

$$\sigma = \frac{\alpha}{n_e v}, \quad (4)$$

где  $\alpha$  — скорость процесса ионизации или рекомбинации,  $v$  — скорость иона относительно частиц среды. Условие равенства нулю сечения ионизации полностью ободранного иона очевидно, равенство нулю сечения рекомбинации иона с зарядом нуль, т. е. нейтрального атома, необходимо для того, чтобы исключить из рассмотрения отрицательные ионы, вероятность образования которых в рассматриваемой задаче крайне мала.

В дальнейшем для анализа уравнения мы будем пользоваться специальной системой единиц, в которой единицей энергии будем считать максимальную энергию ионов, а единицей пробега  $l$  — величину, близкую к полному пробегу иона с максимальной энергией и зарядом, равным заряду ядра:

$$\xi = \frac{l}{l_0}, \quad \varepsilon = \frac{E}{E_0}, \quad (5)$$

где  $E_0$  — максимальная энергия (начальная энергия в случае моноэнергетического пучка ионов),

$$l_0 = \frac{m_e}{M} \frac{E_0^2}{2\pi Z_1^2 e^4 L(Z_1, E_0)} \quad (6)$$

( $Z_1$  — заряд ядра иона,  $M$  — масса иона,  $L$  — кулоновский логарифм торможения). В этой системе единиц тормозная способность вещества будет иметь крайне простой вид (мы ограничимся рассмотрением нерелятивистского случая, что оправдано вплоть до энергий порядка 100 МэВ/нуклон):

$$s_Z(\varepsilon) = \frac{l_0 S_Z}{E_0} = \frac{Z^2}{Z_1^2} \frac{1}{\varepsilon} \frac{L(Z, \varepsilon)}{L(Z_1, \varepsilon = 1)}. \quad (7)$$

Формулы для тормозной способности были получены еще Бете [6] и Бором [7] из линеаризованных уравнений электродинамики движущейся частицы. Простую оценочную формулу для потерь энергии нетрудно получить, если объединить нерелятивистские формулы Бете и Бора в одно выражение:

$$-\frac{dE}{dl} = \frac{4\pi Z_2 Z^2 e^4}{mv^2} \times \left( (1 - \kappa) \ln \frac{2mv^2}{\bar{I}} + \kappa \ln \frac{mv^3}{Ze^2 \omega_p} \right). \quad (8)$$

Здесь  $\bar{I}$  — средняя энергия возбуждения атомов и ионов среды,  $\omega_p$  — плазменная частота,  $\kappa$  — коэффициент ионизации среды. Формула (8) имеет множество поправок, связанных с релятивистскими и нелинейными эффектами (см., например, работы [8–10]). Для дальнейшего рассмотрения точный вид кулоновского логарифма в формуле (8) несуществен, заметим только, что тормозная способность не растет бесконечно при стремлении к нулю скорости иона,  $v \rightarrow 0$  (см. [10, 11]), однако зависимость (7) сохраняется до довольно низких энергий для рассматриваемого нами случая.

Перепишем уравнения (1) в новых обозначениях:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_Z}{\partial \xi} - \frac{\partial (\tilde{s}_Z N_Z)}{\partial \varepsilon} &= -(\tilde{\sigma}_i(Z) + \tilde{\sigma}_r(Z)) N_Z + \\ &+ \tilde{\sigma}_i(Z-1) N_{Z-1} + \tilde{\sigma}_r(Z+1) N_{Z+1}, \quad (9) \\ Z = 0, 1, \dots, Z_1, \quad \tilde{s}_i &= l_0 \sigma_i, \quad \tilde{s}_r = l_0 \sigma_r. \end{aligned}$$

где

В дальнейшем будем опускать знак «тильда» над безразмерными сечениями  $\tilde{\sigma}_i$  и  $\tilde{\sigma}_r$ . Величина безразмерных сечений ионизации и рекомбинации показывает относительную скорость процессов изменения заряда по сравнению с процессом торможения иона.

Как правило, торможение иона можно считать медленным процессом, на фоне которого происходят быстрые случайные процессы изменения заряда, заставляющие ион принимать некоторое равновесное при данной скорости движения относительно среды зарядовое состояние. Существует ряд эмпирических формул, описывающих зависимость равновесного заряда иона в холодном веществе от его скорости, некоторые из них будут рассмотрены в конце следующего раздела.

Эта картина, всегда справедливая для холодных мишней, может измениться в случае сильноионизованного вещества [12]. При торможении ионов тяжелых элементов с большим зарядовым состоянием и высокой энергией в сильноионизованной плазме отсутствует самый эффективный процесс рекомбинации — рекомбинация за счет обмена электроном с ионом среды. Резкое уменьшение рекомбинации приводит к смещению равновесного заряда в область больших значений, и сечения ионизации–рекомбинации вблизи равновесного заряда оказываются существенно меньше, чем в случае движения иона в холодном веществе. С точки зрения кинетического уравнения это приводит к тому, что все члены уравнения становятся одного порядка величины.

Получим первое приближение к решению системы (9). Сложим уравнения (9) с разными  $Z$ :

$$\frac{\partial n}{\partial \xi} - \sum_Z \frac{\partial s_Z N_Z}{\partial \varepsilon} = 0, \quad n = \sum_Z N_Z. \quad (10)$$

Будем считать, что разброс ионов по заряду незначителен, так что можно рассматривать только ионы со средним зарядом  $\bar{z}$  (буквой  $z$  будем далее обозначать непрерывную аппроксимацию дискретной переменной  $Z$ ). В этом случае уравнение сводится к известному приближению непрерывного замедления. Вместе с уравнением для среднего заряда в этом приближении получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial \xi} - \frac{\partial s n}{\partial \varepsilon} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{z}}{\partial \xi} - s \frac{\partial \bar{z}}{\partial \varepsilon} &= \sigma_i(\bar{z}, \varepsilon) - \sigma_r(\bar{z}, \varepsilon). \end{aligned} \quad (11)$$

Решение уравнений (11) дает первое приближение к решению задачи (9), в котором энергия иона оказывается однозначно связанной с координатой  $\xi$ :

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{s(\bar{z}, \varepsilon)} \delta \left( \xi - \int_{\varepsilon}^1 \frac{1}{s(\bar{z}, \varepsilon')} d\varepsilon' \right), \\ \bar{z} &= z_0 + \int_{\varepsilon}^1 \frac{1}{s(\bar{z}, \varepsilon')} (\sigma_i(\bar{z}, \varepsilon') - \sigma_r(\bar{z}, \varepsilon')) d\varepsilon'. \end{aligned} \quad (12)$$

Для ионов фиксированного заряда, например для полностью ободренных ядер легких элементов, более точные кинетические модели и их решения можно найти в [13]. Для интересующего нас случая ионов тяжелых элементов наиболее существенным механизмом, приводящим к отличию решения от выражений (12), является разброс ионов по зарядовому состоянию и связанный с ним разброс по энергиям.

Рассмотрим возможность использования метода зарядовых моментов для получения следующих по порядку точности решений задачи. Введем кроме среднего заряда второй центральный момент зарядового распределения или зарядовую дисперсию  $D$ :

$$D = \frac{1}{n} \sum_Z Z^2 N_Z - \bar{Z}^2. \quad (13)$$

Учтем также явный вид зависимости  $s_Z$  от  $Z$ . Будем считать, что в функции  $s(Z, \varepsilon)$  переменные разделяются. Это близкое к реальности предположение (см. формулу (7)), в соответствии с ним запишем

$$s(Z, \varepsilon) = Z^2 s_1(\varepsilon) \quad (14)$$

и сделаем замену переменной

$$\eta = \int_0^{\varepsilon} \frac{d\varepsilon'}{s_1(\varepsilon')}, \quad (15)$$

с учетом (7) имеем

$$\eta \approx Z_1^2 \varepsilon^2 / 2.$$

Ведем также плотность потока ионов, зависящую от переменной  $\eta$ :

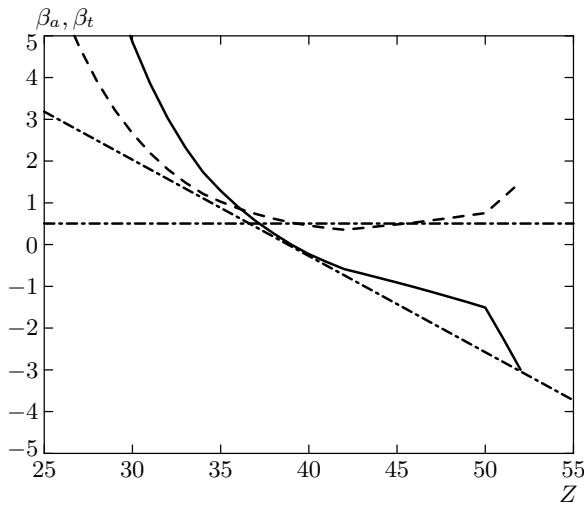
$$\bar{N}(\xi, \eta) = N(\xi, \varepsilon) s_1(\varepsilon), \quad (16)$$

где  $\bar{N}$ , так же, как и  $N$ , будем считать нормированной на единицу:

$$\int \bar{N}(\xi = 0, \eta) d\eta = 1.$$

С учетом этих преобразований система (9) приобретает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_Z}{\partial \xi} - Z^2 \frac{\partial N_Z}{\partial \eta} &= -(\sigma_i(Z) + \sigma_r(Z)) N_Z + \\ &+ \sigma_i(Z-1) N_{Z-1} + \sigma_r(Z+1) N_{Z+1}. \end{aligned} \quad (17)$$



**Рис. 1.** Пример зависимости коэффициентов  $\beta_a$  (сплошная кривая) и  $\beta_t$  (штриховая кривая) от заряда иона (1.5 МэВ/u ионы йода в водородной плазме). Штрих-пунктирные прямые — линейные аппроксимации сечений вблизи равновесного заряда в соответствии с (20). Видно, что в диапазоне  $q - 2 < z < q + 4$  погрешность такой аппроксимации не превышает 30 %

Суммируя по  $Z$  уравнения (17), а также умножая их на  $Z$  и  $Z^2$  и суммируя, получим следующие уравнения для моментов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} ((\bar{Z}^2 + D)n) &= 0, \\ \frac{\partial \bar{Z}n}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} (\bar{Z}(\bar{Z}^2 + 3D)n) &= \sum_Z (\sigma_i - \sigma_r)N_Z, \quad (18) \\ \frac{\partial((\bar{Z}^2 + D)n)}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} (\bar{Z}^2(\bar{Z}^2 + 6D)n) &= \\ = 2 \sum_Z Z(\sigma_i - \sigma_r)N_Z + \sum_Z (\sigma_i + \sigma_r)N_Z, \end{aligned}$$

где

$$\bar{Z} = \frac{1}{n} \sum_Z Z N_Z$$

и использованы выражения, следующие из статистики и справедливые, по крайней мере, при условии  $D \ll \bar{Z}^2$ :

$$\begin{aligned} \sum_Z Z^3 N_Z &= \bar{Z}(\bar{Z}^2 + 3D)n, \\ \sum_Z Z^4 N_Z &= \bar{Z}^2(\bar{Z}^2 + 6D)n. \quad (19) \end{aligned}$$

Для замыкания уравнений метода моментов необходимо сделать предположения относительно

зарядовых зависимостей сечений ионизации и рекомбинации. Будем считать, что в существенной для решения задачи области изменения переменных, а именно, вблизи среднего заряда при данной энергии ионов, сечения можно аппроксимировать линейной зависимостью (см. рис. 1), так что

$$\begin{aligned} \sigma_i(z, \varepsilon) + \sigma_r(z, \varepsilon) &= a(\varepsilon), \\ \sigma_i(z, \varepsilon) - \sigma_r(z, \varepsilon) &= b(\varepsilon)(q(\varepsilon) - z), \\ a > 0, \quad b > 0. \end{aligned} \quad (20)$$

В этом случае нам удается замкнуть уравнения (18), записав

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} ((\bar{Z}^2 + D)n) &= 0, \\ \frac{\partial \bar{Z}n}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} (\bar{Z}(\bar{Z}^2 + 3D)n) &= b(\varepsilon)(q(\varepsilon) - \bar{Z})n, \quad (21) \\ \frac{\partial((\bar{Z}^2 + D)n)}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} (\bar{Z}^2(\bar{Z}^2 + 6D)n) &= \\ = 2b(\varepsilon)(q(\varepsilon)\bar{Z} - \bar{Z}^2 - D)n + a(\varepsilon)n. \end{aligned}$$

Уравнения (21) представляют собой замкнутую систему уравнений в частных производных для определения зарядовых моментов. Для однозначного решения этой системы необходимо задать начальные условия, например условие моноэнергетического однозарядного пучка ионов:

$$\begin{aligned} n(\xi = 0, \eta) &= \delta(\eta), \quad \bar{Z}(\xi = 0, \eta) = Z_0, \\ D(\xi = 0, \eta) &= 0, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $\delta(\eta)$  — дельта-функция. В силу линейности уравнения по переменным  $\xi$  и  $\eta$  решения задачи с произвольным начальным условием можно получить из решений задач с начальными условиями вида (22).

Рассмотрим влияние тех или иных членов кинетического уравнения на решение задачи. Для этого перейдем к непрерывной зарядовой переменной в уравнении (9). Предполагая гладкость сечений ионизации и рекомбинации по зарядовой переменной, мы можем использовать разложение в ряд Тейлора в правой части уравнения. Оставляя члены до второго порядка включительно, получим уравнение

$$\frac{\partial N}{\partial \xi} - \frac{\partial(sN)}{\partial \varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial z}(\beta_a N) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\beta_t N), \quad (23)$$

где

$$\beta_a = \sigma_i - \sigma_r, \quad \beta_t = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_r). \quad (24)$$

Функция  $\beta_t(\varepsilon, z)$  положительна и имеет по заряду минимум, который расположен вблизи равновесного заряда. Напомним, что равновесный заряд определяется равенством сечений ионизации и рекомбинации при данной энергии иона. Функция  $\beta_a(\varepsilon, z)$ ,

напротив, меняет знак при переходе заряда через равновесное значение. Вид решения кинетического уравнения напрямую связан с этими особенностями в зависимости его коэффициентов от заряда. Пример зарядовых зависимостей коэффициентов  $\beta_a$  и  $\beta_t$  приведен на рис. 1.

Начальные и граничные условия уравнения (23) имеют вид

$$\begin{aligned} N(\xi = 0, \varepsilon, z) &= \phi(\varepsilon, z), \\ \beta_a N - \frac{\partial}{\partial z} (\beta_t N)|_{Z=z_1, 0} &= 0, \end{aligned} \quad (25)$$

где  $\phi(\varepsilon, z)$  — функция, описывающая распределение ионов в пучке по энергии и заряду до взаимодействия со средой.

Уравнение (23) представляет собой уравнение диффузии по заряду с собирающей силой. Качественно его решение представлено на рис. 2. К решению уравнений (21) и (23) мы вернемся после рассмотрения особенностей их коэффициентов.

### 3. СЕЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ И РЕКОМБИНАЦИИ

Основная сложность в исследовании уравнения (9) состоит в том, что его коэффициенты являются функциями как заряда, так и энергии иона. Ниже мы попытаемся найти для коэффициентов этого уравнения подходящие аппроксимации, которые, в частности, помогут обосновать сделанные в предыдущем разделе преобразования.

Заметим, что в рассматриваемой нами постановке для решения уравнения (9) можно пользоваться точными (взятыми из хорошей теории или из эксперимента) сечениями процессов. Однако для решения уравнения (23) необходимы «гладкие» формулы, в том числе и интерполяционные, которые могут аппроксимировать поведение реальных сечений с хорошей точностью.

Приведем простые аналитические выражения для сечений ионизации и рекомбинации. Для сечения ионизации электронным ударом первым приближением может служить томсоновское сечение ионизации. В случае ионизации электроном мишени иона, сопровождающейся отрывом электрона с  $n$ -го уровня, сечение равно

$$\sigma_{ne} = \pi \frac{\varepsilon - U_n}{U_n \varepsilon^2},$$

где  $\varepsilon = v^2/2$ ,  $v$  — скорость относительного движения частиц, которая в соответствии с нашими предположениями равна скорости иона. Эта формула, а

также другие формулы этого раздела записаны с использованием атомной системы единиц, т. е. единица измерения сечений равна  $\hbar^4/m^2 e^4 = 2,8 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ .

В случае столкновения с ионом плазмы томсоновское сечение ионизации равно

$$\sigma_{ni} = \pi Z_t^2 \frac{4\varepsilon - U_n}{4U_n \varepsilon^2},$$

где  $Z_t$  — эффективный заряд иона мишени. Из сравнения этих формул следует, что основным механизмом ионизации является столкновение с ионами или атомами вещества. Даже если вещество не ионизовано, но энергии велики, эффективное значение заряда ионов мишени  $Z_t$ , как правило, больше единицы (за исключением случая, когда мишенью является водород).

Полуэмпирическая формула Лотца [20] более точно описывает сечение ионизации при столкновении с электронами мишени:

$$\sigma_{ne} = 2.17 \frac{\ln(\varepsilon/U_n)}{U_n \varepsilon}. \quad (26)$$

Сечение Лотца отличается от томсоновского не более чем в два раза, что иллюстрируется рис. 3.

Сечение ионизации при столкновении быстрого иона с ионом мишени, согласно классической теории, описывается формулой

$$\sigma_{ni} = \frac{\pi Z_t^2}{U_n^2} G\left(\frac{\varepsilon}{U_n}\right), \quad (27)$$

где функция  $G(x)$  найдена в работах [14, 15] из классических моделей столкновений внешнего электрона с атомными электронами. График рассчитанных по этим формулам сечений ионизации для иона йода в водородной плазме приведен на рис. 3 (кривые I). Еще более точные методы расчета сечений ионизации, основанные на квантовомеханических моделях, можно найти в [16].

Рассмотрим сечение рекомбинации. Запишем сечения основных процессов, приводящих к захвату электрона движущимся ионом: сечение радиационного захвата, сечение обмена электроном с ионом мишени и сечение трехчастичной рекомбинации.

Радиационный захват является основным процессом рекомбинации в случае полностью ионизованной плазмы не очень высокой плотности. Для сечения радиационного захвата воспользуемся классической формулой Крамерса,

$$\sigma_{nR} = A \frac{U_n^2}{\varepsilon \varepsilon_\gamma} \frac{1}{n}, \quad (28)$$

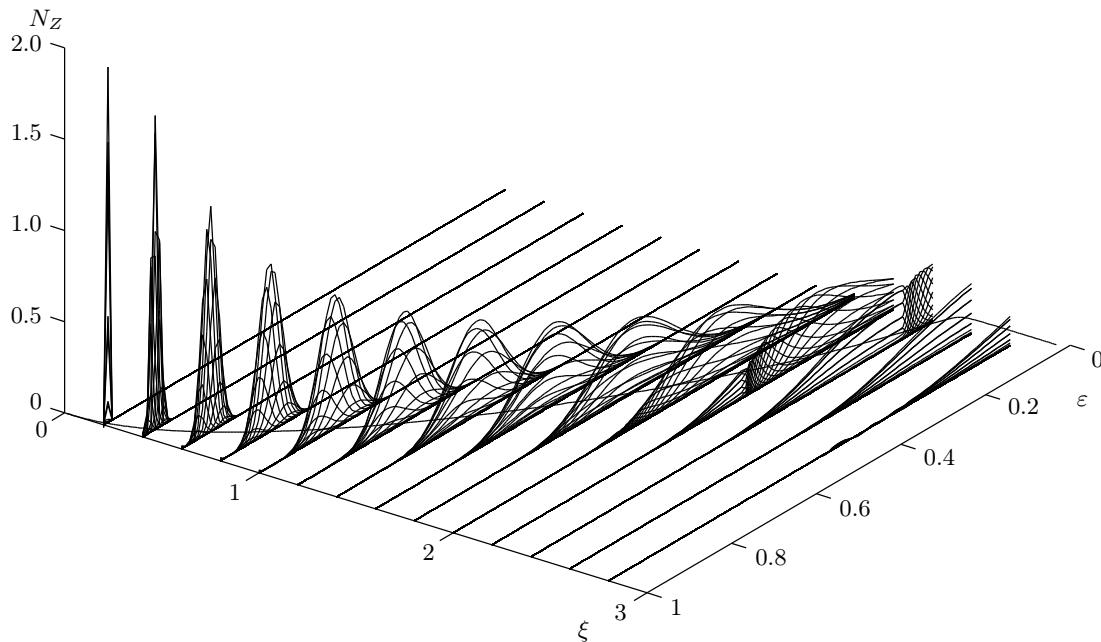


Рис. 2. Качественное распределение ионов разных зарядов по энергии и глубине. На входе — моноэнергетический и монозарядный пучок ионов

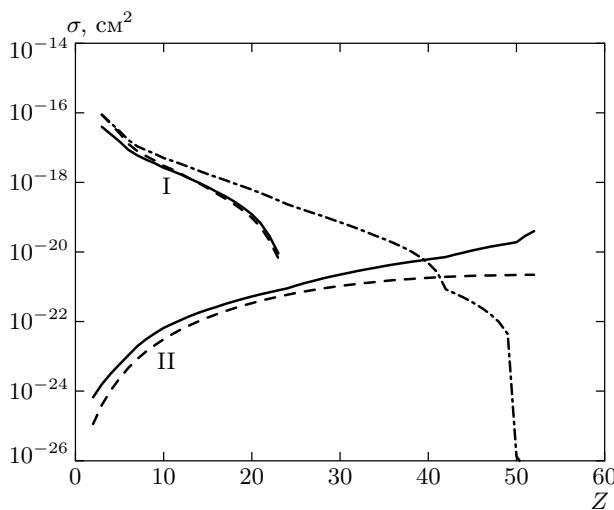


Рис. 3. Зависимости сечений ионизации (I) и рекомбинации (II) ионов йода с энергией 1.5 МэВ/u в водородной плазме с температурой 10 эВ и плотностью  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Кривые I: сечения Томсона (сплошная кривая), Лотца [20] (штриховая), Гризинского [14] (штрих-пунктирная); кривые II: сечения процессов фоторекомбинации (29) (сплошная кривая) и зарядового обмена (32) (штриховая). Условия взяты из статьи [11]. Энергии связи электронов рассчитаны в рамках модели Томаса–Ферми для основного состояния

где

$$A = 7.5 \cdot 10^{-6} a_B^2 = 2.1 \cdot 10^{-22} \text{ см}^2, \quad \varepsilon_\gamma = \varepsilon + U_n,$$

а  $U_n$  в данном случае соответствуют незанятым электронами уровням. Полагая  $v^2 > z^2/n^2$  и интегрируя сечение по  $n$ , считая, что последний занятый уровень равен

$$n_g = (Z_1 - Z)^{1/3},$$

получим для сечения радиационного захвата простое выражение

$$\sigma_R = \frac{A}{8\varepsilon^2} \frac{Z^4}{(Z_1 - Z)^{2/3}}. \quad (29)$$

Заметим, что если мы ограничимся рассмотрением сечения рекомбинации на основной уровень, то получим мало отличающееся выражение:

$$\sigma_R = \frac{A}{8\varepsilon^2} f(Z), \quad f(Z) = \frac{Z^4}{(Z_1 - Z)}.$$

Скорость трехчастичной рекомбинации может стать существенной при больших значениях плотности мишени. Напишем формулу для сечения трехчастичной рекомбинации, следуя Зельдовичу и Райзеру [17]:

$$\sigma_3 = \frac{\pi^2 Z_1^3 n_e}{\varepsilon^5}. \quad (30)$$

Ряд эмпирических формул сечений можно найти также в работах [18–20].

В неионизованном веществе или при неполной ионизации плазмы мишени ведущую роль играет процесс рекомбинации за счет передачи электрона от иона мишени проникающему иону. Сечение рекомбинации путем обмена электроном оценим, используя результат, полученный в рамках теории Оппенгеймера–Бринкмана–Крамерса (ОВК) [21], согласно которой сечение перехода электрона из состояния с энергией  $E_i$  в состояние с энергией  $E_f$  равно

$$\sigma_{OBK}^{i \rightarrow f} = 4 \cdot 10^4 \frac{Z^2 \varepsilon^4 E_i^{5/2} E_f^{3/2}}{(\varepsilon^2 + 2\varepsilon(E_i + E_f) + (E_i - E_f)^2)^5}. \quad (31)$$

Для вычисления сечения процесса обмена зарядом используем поправку второго борновского приближения, полученную в [22],

$$\sigma_{ct} = \left( 0.3 + \frac{5\pi v}{2^{12}} \right) \sigma_{OBK}. \quad (32)$$

Аппроксимируя энергию связи захваченного электрона выражением

$$E_f = \frac{Z^2}{2n^2}$$

и считая, что для последнего занятого в ионе энергетического уровня  $n = (Z_1 - Z + 1)^{1/3}$ , найдем приближенное выражение для сечения процесса зарядового обмена при больших скоростях ионов:

$$\sigma_{ct} = 2.1 \cdot 10^3 \frac{\sum_n N_n E_{in}^{5/2}}{\varepsilon^6} \frac{Z^5}{(Z_1 - Z + 1)^{2/3}}. \quad (33)$$

Эта формула подходит для аппроксимации сечения процесса обмена зарядом только для больших энергий движущегося иона. Сечения, вычисленные по формуле Бринкмана–Крамерса (31), дают правильные зависимости от заряда иона и его энергии, но недостаточно точно описывают данные эксперимента. Отметим еще раз, что мы не стремимся получить точные формулы для сечений. Так, для сечения процесса обмена зарядом можно использовать более точную теорию [23, 24] или следующую полуэмпирическую формулу, предложенную в [25] для неионизованных мишеней:

$$\begin{aligned} \sigma_{ct} = & 1.1 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2 Z_2^{0.5} / Z_2^{1.8} u^{-4.8} \times \\ & \times [1 - \exp(-0.037u^{2.2})] \times \\ & \times [1 - \exp(-2.44 \cdot 10^{-5}u^{2.6})], \end{aligned} \quad (34)$$

$$u = E[\text{кэВ/а.е.м.}] / (Z^{0.7} Z_2^{1.25}), \quad u \geq 10, \quad Z \geq 3.$$

Формулы для эмпирических сечений процесса зарядового обмена также можно найти в работе [26].

Для написания интерполяционных формул этого раздела мы использовали водородоподобные уровни энергии. Рассчитанные таким образом энергии связи оказываются меньше, чем их истинные значения. Это приводит к занижению в первую очередь сечений рекомбинации из-за их резкой зависимости от энергии связанных электронов, что в свою очередь является причиной низкого значения рассчитанного таким способом равновесного заряда иона и может значительно повлиять на точность расчетов параметров функции распределения ионов в плазме. Для того чтобы избежать этого, необходимо пользоваться более точными значениями энергий связи электронов в движущемся ионе, например, полученными в рамках модели Томаса–Ферми.

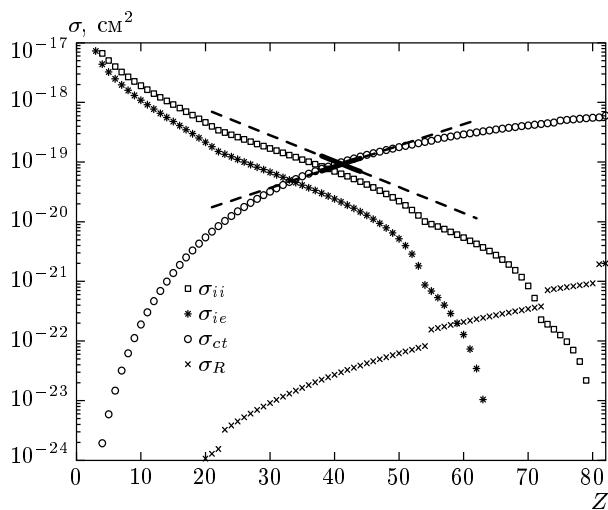
На рис. 3 приведены графики сечений с уровнями энергии, рассчитанными в модели Томаса–Ферми.

Заметим также, что удобной формой аппроксимации сечений  $\sigma_i$  и  $\sigma_r$  являются экспоненциальные зависимости типа

$$\sigma_i = \sigma_{i0} \exp(-a_i z), \quad \sigma_r = \sigma_{r0} \exp(a_r z). \quad (35)$$

Экспоненциальные аппроксимации сечений ионизации и рекомбинации приведены на рис. 4. Экспоненциальные зависимости использованы нами в тестовых расчетах торможения пучка тяжелых ионов в веществе.

В заключение раздела рассмотрим важный вопрос, касающийся равновесного заряда  $q$ . Равновесный заряд определяется равенством сечений ионизации и рекомбинации, и для его определения можно воспользоваться формулами, приведенными в этом разделе. Например, в случае практически полностью ионизованной мишени сечение ионизации (27) нужно приравнять сечению радиационной рекомбинации (28), а для холодного вещества рекомбинация будет определяться обменом зарядом и вычисляться по формуле (32). Формулы данного раздела позволяют установить зависимость равновесного заряда  $q$  от энергии иона. Кроме того, их можно сравнить с имеющимися в литературе эмпирическими формулами, которые используются, в основном, в случае холодного вещества мишени. Так, в работе [9] из сопоставления аналитических выражений для тормозной способности вещества, полученными в работе [27], с экспериментальными данными была предложена следующая формула для равновесного заряда:



**Рис. 4.** Расчет сечений ионизации и рекомбинации для иона свинца с энергией 11.6 МэВ/u в плазме капиллярного разряда в углеводороде с температурой 3.3 эВ. Пунктирные прямые — экспоненциальные аппроксимации сечений ионизации и рекомбинации вблизи равновесного заряда

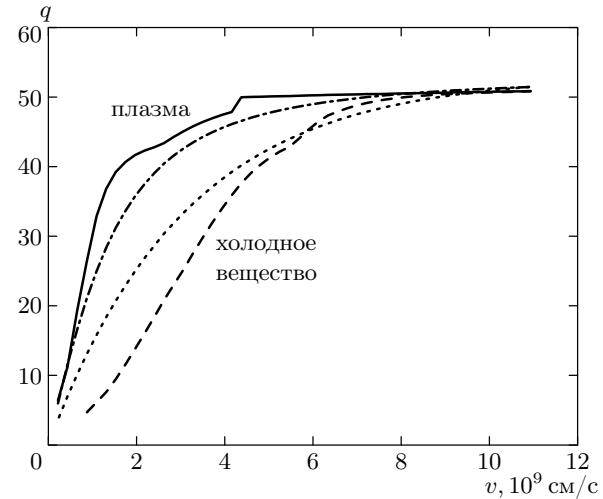
$$q = Z_1 \left( 1 + \left( 0.62 Z_1^{2/3} \frac{1}{v} \right)^{1.7} \right)^{-1/1.7}, \quad (36)$$

а в работе [28] было предложено выражение

$$q = Z_1 \left( 1 - a \exp \left( \frac{-v}{Z_1^{2/3}} \right) \right), \quad (37)$$

где  $a \approx 1$ . В статье [29] на основании формулы (37) и правила Бора для энергии эффективной ионизации получено выражение для потенциалов последовательной ионизации, совпадающее на асимптотиках с формулами, следующими из модели атома Томаса–Ферми.

На рис. 5 приведены результаты расчета равновесного заряда, полученные с помощью полуэмпирических формул, а также для сравнения — с помощью формул для сечений ионизации и рекомбинации из данного раздела. В качестве примера опять рассмотрен ион йода в водороде, причем как в полностью ионизованном (сплошная кривая на рис. 5), так и в холодном (штриховая кривая) веществе. Кроме того, на этом же рисунке показаны зависимости (36) (штрих-пунктир) и (37) (пунктир). Из рисунка видно, что имеется диапазон условий, где различия между формулами велики, хотя эмпирические кривые находятся в границах, определяемых формулами для сечений в плазме и в холодном веществе. В случае холодной мишени более предпочтительной оказывается формула (37), а формула (36) подходит для вычисления равновесного заряда для сильно ионизованной мишени.



**Рис. 5.** Зависимости равновесного заряда иона йода в водороде от скорости. Равновесный заряд рассчитан из равенства сечений ионизации и рекомбинации по приведенным в тексте формулам для полностью ионизованной мишени (сплошная кривая) и для холодного вещества (штриховая линия), а также вычислен по формулам (36) (штрих-пунктир) и (37) (пунктир)

тельной оказывается формула (37), а формула (36) подходит для вычисления равновесного заряда для сильно ионизированной мишени.

Во всем же диапазоне состояний вещества мишени построение явных формул, подобных (36) или (37), скорее всего невозможно, и единственным способом получения равновесного заряда остается приравнивание соответствующих сечений ионизации и рекомбинации.

#### 4. ПРИБЛИЖЕННЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ

Рассмотрим уравнение (23) с учетом особенностей его коэффициентов (см. разд. 2).

Уравнение (23) является аналогом уравнения диффузии и фактически содержит члены переноса по координате и энергии и диффузии по заряду. Оно сводится к обычному уравнению диффузии при условии, что заряд остается вблизи равновесного значения, а дисперсия зарядового распределения мала, так что можно пренебречь членом с  $\beta_a$ . Для этого дисперсия зарядового распределения должна удовлетворять условию

$$\beta_a (q \pm \sqrt{D}) \ll \beta_t. \quad (38)$$

Рассмотрим простейшее приближение, позволяющее определить характеристики зарядового распределения ионов. Заменим переменные:

$$\varepsilon = \varepsilon,$$

$$u = \xi - \int_{\varepsilon}^1 \frac{d\varepsilon'}{s(\varepsilon', \bar{z}(\varepsilon'))},$$

где  $\bar{z}$  — решение системы (11), т. е. средний заряд. Запишем уравнение в этих переменных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial u} \left( 1 - \frac{s(\varepsilon, z)}{s(\varepsilon, \bar{z}(\varepsilon))} \right) - \frac{\partial(sN)}{\partial \varepsilon} = \\ = -\frac{\partial}{\partial z} (\beta_a N) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\beta_t N). \end{aligned} \quad (39)$$

Если пренебречь зарядовой зависимостью, т. е. считать, что  $s(\varepsilon, z) = s(\varepsilon, \bar{z}(\varepsilon))$ , то придем к уравнению

$$-\frac{\partial(sN)}{\partial \varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial z} (\beta_a N) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\beta_t N). \quad (40)$$

В определенных условиях в уравнении (23) можно пренебречь членом, связанным с торможением ионов. Это корректно при больших значениях суммы безразмерных сечений ионизации и рекомбинации,  $\beta_t \gg 1$ , и соответствует ситуации, в которой происходит много столкновений с изменением заряда иона на отрезке пути, где торможение мало. В частности, можно показать, что в начале торможения, если заряд иона значительно отличается от равновесного,

$$\beta_a \approx \frac{M}{4\pi z_1^2 m} \approx 10^2.$$

Для получившегося при этом уравнения можно найти аналитическое решение, используя подходящие аппроксимации для сечений. Так, предположим, что вблизи равновесного заряда для коэффициентов  $\beta_a$  и  $\beta_t$  можно использовать линейные аппроксимации (см. рис. 1):

$$\begin{aligned} \beta_a &= b(q - z), \\ \beta_t &= a, \end{aligned} \quad (41)$$

где  $q$  является равновесным зарядом при данной скорости иона. В этом случае уравнение (23) примет вид

$$\frac{\partial N}{\partial \xi} + b \frac{\partial}{\partial z} ((z - q)N) - a \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} = 0, \quad (42)$$

а его решение можно записать в форме

$$N(\xi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D}} \exp \left( -\frac{(z - \bar{z})^2}{2D} \right), \quad (43)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{dz}{d\xi} &= \beta_a(\bar{z}) = b(q - z), \\ \frac{dD}{d\xi} + 2bD &= 2a. \end{aligned} \quad (44)$$

Отсюда видно, что зарядовая зависимость плотности потока ионов приближенно является гауссовой с дисперсией, рост которой, согласно (44), ограничен производной по заряду от коэффициента  $\beta_a$ . Заметим, что этот член всегда препятствует росту зарядовой дисперсии, так как производная  $\partial\beta_a/\partial z$  всегда отрицательна. Максимальное значение дисперсии по заряду легко оценить из второго уравнения (44) (мы предполагаем, что начальное значение дисперсии не превышает предельное значение),

$$D_{max} = \frac{a}{b}. \quad (45)$$

Иногда уже при изменении заряда на единицу от равновесного значения резко начинают преобладать процессы ионизации или рекомбинации. В этом случае оценка по формуле (45) дает для дисперсии значение, приблизительно равное единице. Это соглашается со следующими качественными рассуждениями. Ион с равновесным зарядом может с равной вероятностью как ионизоваться, так и захватить электрон. После изменения ионом заряда наиболее вероятным будет возвращение заряда иона к его равновесному значению. В результате участвующими в игре оказываются не более трех зарядовых состояний иона, а дисперсия зарядового распределения не превышает единицу.

Не выписывая общего решения системы (44), приведем решение в приближении постоянных коэффициентов:

$$z = z_0 e^{-b\xi} + q(1 - e^{-b\xi}), \quad D = \frac{a}{b}(1 - e^{-2b\xi}). \quad (46)$$

Сравним средний заряд и дисперсию зарядового распределения, вычисленные по этим формулам для ионов хлора в холодном водороде, с экспериментальными данными, приведенными ниже на рис. 9. Как видно, эти простые формулы хорошо описывают данные эксперимента, если заряды ионов близки к равновесному значению, как в данном случае.

Вернемся к системе уравнений (21), полученной нами при помощи метода моментов. Ее решение существенно упрощает то, что плотность потока ионов вдали от некоторой характеристической кривой на плоскости координата-энергия очень мала. Введем

новые координаты, связанные с этой характеристики:

$$\begin{aligned} dx &= d\xi - \frac{1}{\bar{z}^2 + D} d\eta, \\ dy &= d\xi + \frac{1}{\bar{z}^2 + D} d\eta. \end{aligned}$$

В новых переменных первое уравнение (21) записывается следующим образом:

$$2 \frac{\partial n}{\partial x} = \frac{n}{\bar{z}^2 + D} \left( -\frac{\partial(\bar{z}^2 + D)}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{z}^2 + D)}{\partial y} \right). \quad (47)$$

Как видим, оно не содержит производной по переменной  $y$ . Поскольку в сторону от характеристики функция  $n(\xi, \eta)$  быстро убывает, потребуем

$$\frac{\partial n}{\partial y} = 0. \quad (48)$$

Для дисперсии и среднего заряда из уравнений (21) с помощью этих выражений получим следующие уравнения, справедливые на характеристике  $dy = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{z}}{\partial \xi} - (\bar{z}^2 + D) \frac{\partial \bar{z}}{\partial \eta} - \bar{z} \frac{2\bar{z}^2 + D}{\bar{z}^2 + D} \frac{\partial D}{\partial \eta} - \\ - b(q - \bar{z}) = 0, \\ \frac{\partial \bar{D}}{\partial \xi} - \frac{\bar{z}^4}{(\bar{z}^2 + D)} \frac{\partial \bar{D}}{\partial \eta} - \bar{z} D \frac{4\bar{z}^2 + 9D}{\bar{z}^2 + D} \frac{\partial \bar{z}}{\partial \eta} + \\ + 2bD - 2a = 0. \end{aligned} \quad (49)$$

Равноправие переменных  $\xi$  и  $\eta$  с точки зрения кинетического уравнения должно привести к тому, что все параметры зарядового распределения ионов будут изменяться только вдоль характеристики. Положив, исходя из этих соображений,

$$\frac{\partial \bar{z}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial D}{\partial y} = 0, \quad (50)$$

получим следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений для среднего заряда и дисперсии зарядового распределения вдоль характеристики:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x} - \frac{\bar{z}(\bar{z}^2 + (1/2)D)}{(\bar{z}^2 + D)^2} \frac{\partial D}{\partial x} - b(q - \bar{z}) = 0, \\ \frac{\partial D}{\partial x} + \frac{D(\bar{z}^2 + (1/2)D)}{(\bar{z}^2 + D)^2} \frac{\partial \bar{D}}{\partial x} - \\ - \bar{z} D \frac{2\bar{z}^2 + (9/2)D}{(\bar{z}^2 + D)^2} \frac{\partial \bar{z}}{\partial x} + 2bD - 2a = 0. \end{aligned} \quad (51)$$

Как видно из первого уравнения (51), разброс ионов по заряду оказывает влияние на средний заряд только в самом начале пробега, когда зарядовая

дисперсия изменяется достаточно сильно, но в начале пробега из-за малости дисперсии этот член все равно невелик (порядка  $D/\bar{z}$ ). Таким образом, средний заряд вдоль характеристики торможения ионов можно вычислить в приближении нулевой дисперсии (см. (44)). После этого зарядовая дисперсия находится из второго уравнения (51).

Вычисленные с помощью метода моментов зарядовая дисперсия и средний заряд на характеристике приведены на рис. 6 в сравнении с полученными в результате численного расчета тестовой задачи. Как видно из рисунка, зарядовые дисперсии несколько различаются (не более чем на 30 %), что связано с плохим выполнением условия (50) в начальной части пути иона, когда заряд сильно отличается от равновесного.

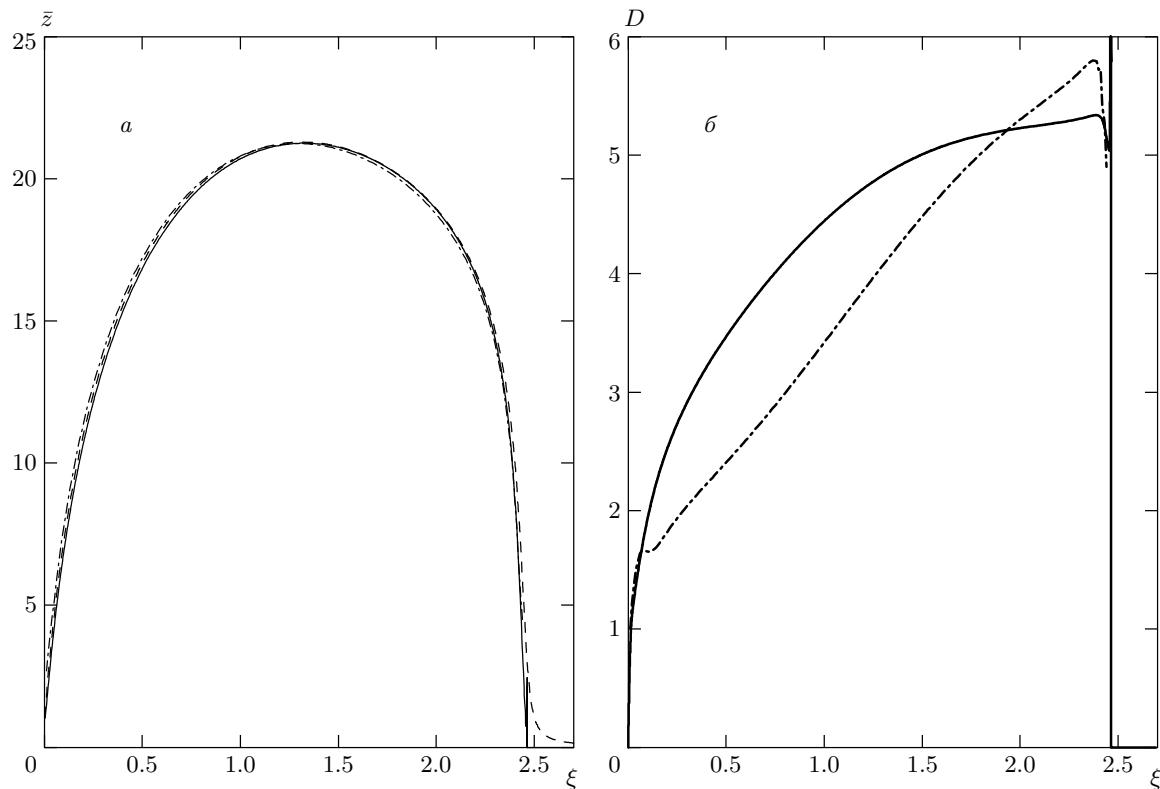
## 5. ДИСПЕРСИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЫСТРЫХ ИОНОВ ПО ЭНЕРГИИ

В рамках рассмотренной выше модели на каждой глубине  $\xi$  формируется распределение ионов со средним зарядом  $z$  и дисперсией  $D_z$ . Их можно рассчитать с помощью уравнений (21).

Важным физическим процессом, который влияет на дисперсию по энергии  $D_\varepsilon$ , является процесс изменения заряда иона за счет столкновений с частицами среды при том распределении энергии, которое сформировалось на предыдущем участке траектории иона. В результате переброса ионов по заряду с одной и той же энергией могут оказаться ионы с зарядом  $\Delta z = \pm 1$  (или даже с большей разностью зарядов). Напомним, что особенно в начале движения иона, если его заряд отличается от равновесного, скорость ионизации многократно превышает скорость торможения (в  $M/4\pi Z_1^2 m$  раз).

Если бы процесс переброса отсутствовал, то дисперсия по энергии для различных зарядов была бы следствием лишь начального разброса ионов по энергии. За счет переброса заряда накопленная дисперсия по энергии оказывается примерно одинаковой для различных зарядов, так как большой заряд, потерявший значительную часть энергии, может стать малым, в результате чего возрастет энергетическая дисперсия малых зарядов, и наоборот.

Рассмотрим эволюцию двух крайних зарядов в зарядовом распределении ионов  $z' = \bar{z} - \sqrt{D}$  и  $z'' = \bar{z} + \sqrt{D}$  и соответствующие им значения переменной  $\eta$ :



**Рис. 6.** Средний заряд (*а*) и дисперсия зарядового распределения (*б*), рассчитанные по формулам (51) (сплошная линия) и полученные в результате численного решения (штрих-пунктир). Штриховая линия на рис. *а* — решение задачи в приближении непрерывной ионизации. Тестовая задача

$$\eta' = \eta_0 - \int_0^\xi z'^2(\xi) d\xi,$$

$$\eta'' = \eta_0 - \int_0^\xi z''^2(\xi) d\xi.$$

Разность этих величин характеризует среднеквадратичное отклонение переменной  $\eta$ :

$$\begin{aligned} \eta'' - \eta' &= 2\sqrt{D_\eta} = \\ &= \int_0^\xi \left( (\bar{z} + \sqrt{D})^2 - (\bar{z} - \sqrt{D})^2 \right) d\xi' = \\ &= 4 \int_0^\xi \bar{z} \sqrt{D} d\xi'. \quad (52) \end{aligned}$$

Полученное выражение связывает среднеквадратичное отклонение переменной  $\eta$  с отклонением заряда иона  $\sqrt{D}$ . Оно справедливо при условии малости зарядовой дисперсии по сравнению со средним зарядом. Средний квадрат отклонения энергии иона

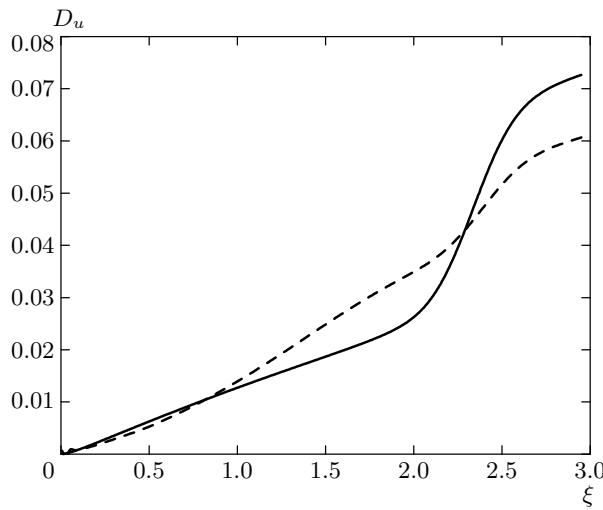
можно связать с дисперсией переменной  $D_\eta$  следующим образом (если пренебречь моментами более высоких порядков):

$$\begin{aligned} D_\eta &= \bar{\eta}^2 - \bar{\eta}^2 = \frac{Z_1^2}{4} (\bar{\varepsilon}^4 - (\bar{\varepsilon}^2)^2) = \\ &= \frac{Z_1^2}{4} (\bar{\varepsilon}^2 (\bar{\varepsilon}^2 + 6D_\varepsilon) - (\bar{\varepsilon}^2 + D_\varepsilon)^2) = Z_1^2 \bar{\varepsilon}^2 D_\varepsilon. \quad (53) \end{aligned}$$

На малых пробегах отсюда и из формулы (52) можно получить приближенную формулу для дисперсии по энергии:

$$\sqrt{D_\varepsilon} = \frac{2}{Z_1 \bar{\varepsilon}} \int_0^\xi \bar{z} \sqrt{D} d\xi'. \quad (54)$$

Отметим различие в поведении дисперсии по заряду и энергии. Дисперсия по заряду быстро возрастает в начале пробега, из-за того что скорости процессов ионизации и рекомбинации, как правило, превышают скорость торможения иона, но рост зарядовой дисперсии ограничивается величиной (45). Дисперсия по энергии, наоборот, растет на протяжении



**Рис. 7.** Сравнение дисперсии по переменной  $u$ : найденной по результатам численного решения кинетического уравнения (сплошная линия) и вычисляемой по формуле (52) (штриховая линия)

всего пробега и становится значительной к его концу. На рис. 7 приведена вычисляемая по этим формулам энергетическая дисперсия в сравнении с результатом численного расчета. Видно, что полученные формулы хорошо описывают зависимость дисперсии от глубины пробега.

## 6. СРАВНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

Сравним полученные аналитические решения с результатами численного решения уравнения (9). Для улучшения устойчивости решения перейдем к переменным  $\xi$  и  $u$ , где

$$u = \xi - \int_{\varepsilon}^1 \frac{d\varepsilon'}{s(\bar{z}, \varepsilon')}, \quad (55)$$

а  $\bar{z}(\varepsilon)$  находится из решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{d\xi} &= -s(\bar{z}, \varepsilon), \\ \frac{d\bar{z}}{d\xi} &= \sigma_i(\bar{z}, \varepsilon) - \sigma_r(\bar{z}, \varepsilon). \end{aligned} \quad (56)$$

Этот метод обусловлен тем, что в таких переменных наиболее просто выглядит решение задачи торможения ионов в приближении непрерывной ионизации, т. е. при пренебрежении зарядовым и энергетическим разбросом ионов. Действительно, в этом при-

ближении координата оказывается однозначно связана с энергией ионов и решение есть просто

$$u = 0.$$

В переменных  $\xi$  и  $u$  уравнение (9) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{N}_Z}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{N}_Z}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial u} \left( \frac{s_Z}{\bar{s}} \tilde{N}_Z \right) &= \\ = -(\sigma_i(Z) + \sigma_r(Z)) \tilde{N}_Z + & \\ + \sigma_i(Z-1) \tilde{N}_{Z-1} + \sigma_i(Z+1) \tilde{N}_{Z+1}, & \\ Z = 0, 1, \dots, Z_1, & \end{aligned} \quad (57)$$

где

$$\tilde{N}_Z(\xi, u) = N_Z(\xi, \varepsilon) s(\bar{z}, \varepsilon).$$

Для решения этого уравнения использовалось конечноэлементное представление функции  $\tilde{N}$  по переменной  $u$ ,

$$\tilde{N}(\xi, u) = \sum_m \tilde{N}_m(\xi) \varphi_m(u),$$

с кусочно-линейными базисными функциями  $\varphi_m(u)$ . Для получения дискретной аппроксимации производной по переменной  $\xi$  была применена неявная схема Эйлера.

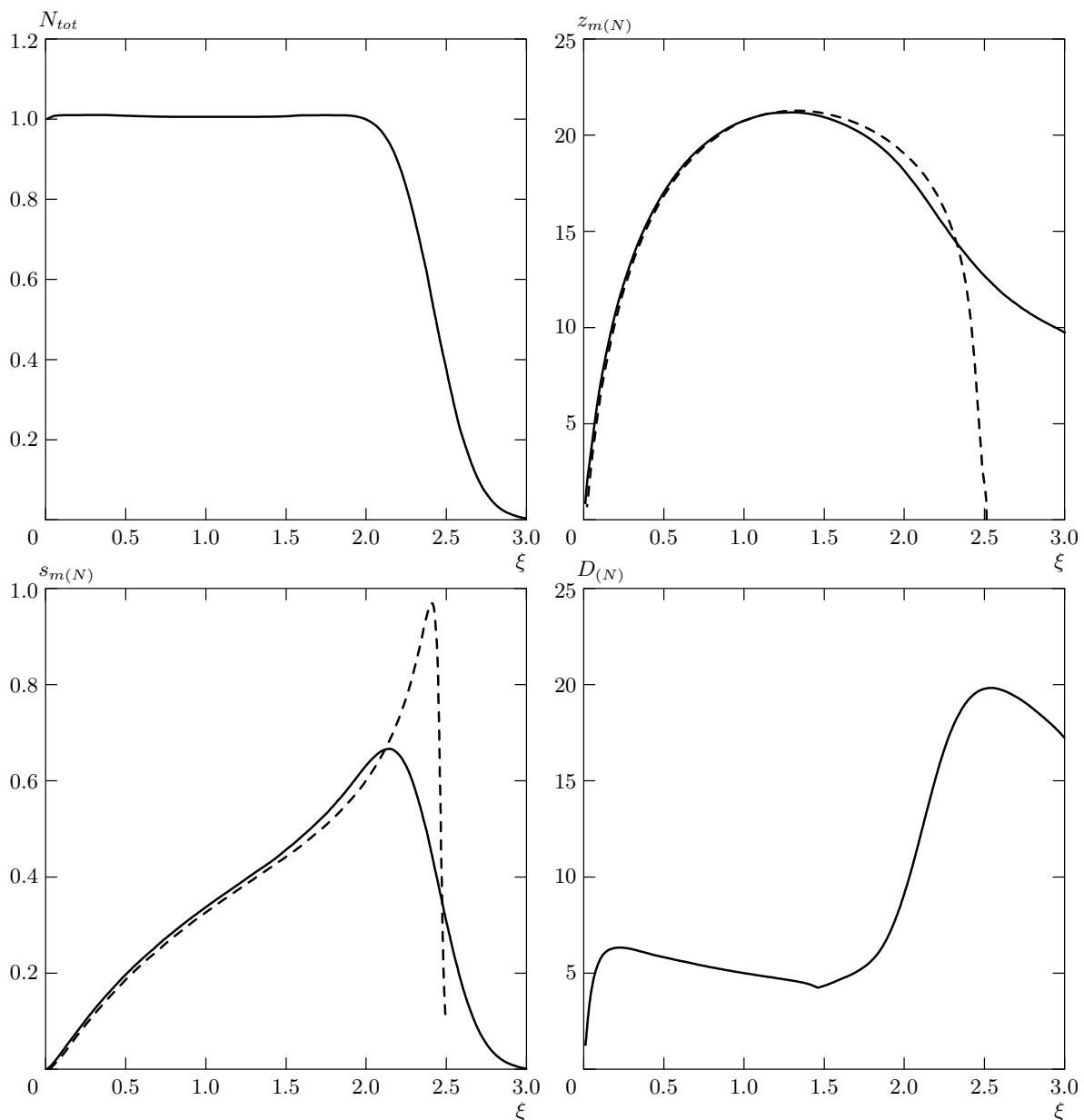
Для отладки численной схемы использовалась тестовая задача, в которой были заданы следующие модельные зависимости коэффициентов уравнения:

$$Z_0 = 1,$$

$$Z_1 = 40,$$

$$\begin{aligned} s(Z, \varepsilon) &= \frac{Z^2}{Z_1^2} \frac{1}{\varepsilon}, \\ \sigma_i(Z, \varepsilon) &= \exp(-0.1 Z) \frac{100}{\varepsilon}, \\ \sigma_r(Z, \varepsilon) &= \exp(0.1 Z) \frac{1}{\varepsilon^2}. \end{aligned} \quad (58)$$

Результаты решения кинетического уравнения с модельными зависимостями коэффициентов приведены на рис. 8. Как видно из этого рисунка, кривые Брэгга в точном расчете и в приближении непрерывной ионизации, не учитывающем флуктуации заряда иона, значительно отличаются друг от друга. Полный поток ионов, который в приближении непрерывной ионизации представляет собой ступеньку, обращаясь в нуль на глубине, равной полному пробегу иона, в точном расчете оказывается слаженным. При этом точка, в которой поток равен половине первоначального, лежит вблизи полного пробега, рассчитанного в приближении непрерывной ионизации.



**Рис. 8.** Результаты численного расчета:  $N_{tot}$  — полный поток ионов,  $z_{m(N)}$  — заряд, усредненный по потоку,  $s_{m(N)}$  — средние потери энергии на единице пробега (кривая Брэгга),  $D_{(N)}$  — дисперсия зарядового распределения, усредненная по потоку, как функции безразмерного пробега  $\xi$ . Пунктиром показаны решения в приближении непрерывной ионизации. Тестовая задача

На рис. 6 приведены результаты численных расчетов среднего заряда и среднего квадрата отклонения заряда от среднего значения, а также зависимости, полученные с помощью аналитических расчетов по формулам (44). Как видно из рисунка, совпадение является вполне удовлетворительным. На рис. 7 приведены графики зависимости  $D_u(\xi)$  среднеквадратичного отклонения переменной  $u$ , полу-

ченные при тестовом расчете и по формуле (52). Эти кривые также хорошо совпадают.

## 7. СРАВНЕНИЕ С ДАННЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Эксперименты по торможению ионов в холодном веществе проводятся давно. В последнее время стало

также возможным экспериментальное изучение поведения высокоэнергетических ионов в плазме. Экспериментально подтверждены предсказанные ранее (см., например, [12]) особенности торможения заряженных частиц большой массы в ионизованном веществе. Так, тормозная способность плазмы аномально велика по сравнению с холодным веществом. Это явление связано с уменьшением сечения рекомбинации ионов в плазме за счет ослабления процессов обмена зарядов с частицами среды. Уменьшение рекомбинации приводит к увеличению эффективного заряда иона и к соответствующему росту потерь энергии.

Исследование торможения высокоэнергетических ионов в плазме является довольно трудной задачей, так как предполагает приготовление плазмы с известными характеристиками и обеспечение синхронизации момента создания плазмы и ионного пучка и доступа пучка к плазме. Ниже приведены ссылки на известные нам экспериментальные работы, связанные с торможением ионного пучка в плазме. Наиболее просто задачи синхронизации и обеспечение доступа ионов достигаются в экспериментах с лазерной плазмой. Плазму, созданную облучением поверхности алюминия излучением CO<sub>2</sub>-лазера использовали, например, авторы работы [30]. В эксперименте, описанном в этой статье, исследовались средние зарядовые состояния ионов меди. Так, измеренный заряд ионов изменялся в пределах от 10 до 16 при заряде ядра меди 29. Авторы сравнивают полученные ими распределения с гауссовой зависимостью и отмечают во многих случаях хорошее совпадение. Следует заметить, однако, что исследованная область зарядовых состояний иона лежит внутри одной электронной оболочки (кроме заряда 10).

Плазма с хорошо известными параметрами получается в экспериментах с капиллярным разрядом. Этим способом создания плазмы пользовались авторы работ [31].

Укажем интересную возможность нахождения сечений ионизации и захвата электронов с использованием представленной в статье модели по экспериментальным данным о зарядовом распределении тормозящихся в веществе ионов. Для этого воспользуемся данными из работы [30]. В этой работе приведены результаты измерения зарядового распределения ионов Cl<sup>13+</sup> и Cl<sup>15+</sup> на различной глубине проникновения в холодный водород и сильноионизованную водородную плазму.

Графики для среднего заряда и дисперсии зарядового распределения ионов хлора в водороде при

различных начальных значениях заряда, приведенные на рис. 9, построены по экспериментальным данным из работы [31]. Сплошными линиями на этих рисунках показаны аналитические решения, полученные в настоящей работе по формулам (46). Из экспериментальных данных видно, что независимо от того, как ведет себя средний заряд (стремится ли он к равновесному значению со стороны больших или меньших значений), дисперсия зарядового распределения стремится к одному и тому же стационарному значению. В соответствии с приближенными решениями кинетического уравнения стационарное значение дисперсии равно отношению коэффициентов  $a$  и  $b$  линейной аппроксимации (20) сечений ионизации и рекомбинации. В данном случае это отношение приближенно равно

$$D = \frac{a}{b} = 0.9.$$

Поскольку в данном случае заряд иона близок к своему равновесному значению (приближенно равному 13.2), можно использовать формулу (46) для вычисления дисперсии. Как показано выше, средний заряд и дисперсия стремятся к равновесным значениям по экспоненциальному закону, причем показателем экспоненты является коэффициент  $b$ . С помощью этих зависимостей можно оценить значения этих коэффициентов:

$$a = 1.35 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2, \quad b = 1.5 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2.$$

Эти величины близки к значениям, которые использовали авторы [31] для компьютерного моделирования задачи торможения. Так, для сечения ионизации иона с зарядом 13 они использовали значение  $1.5 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ , что близко к полученному равновесному значению сечения  $\sigma_i = a = 1.35 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ . Заметим, что анализ поведения среднего заряда в соответствии с первым уравнением системы (44) также дает для коэффициента  $b$  значение, близкое к найденному с помощью зависимости дисперсии от пробега.

Отдельно на рис. 9 звездочками показаны точки, соответствующие среднему заряду и дисперсии зарядового распределения ионов в водородной плазме. Как видно из рисунка, в этом случае средний заряд превышает средний заряд ионов в холодном водороде при соответствующей плотности, а дисперсия зарядового распределения в плазме заметно меньше, чем в холодном веществе. Это согласуется с полученными ранее формулами для дисперсии. Действительно, при возрастании заряда иона сумма сечений

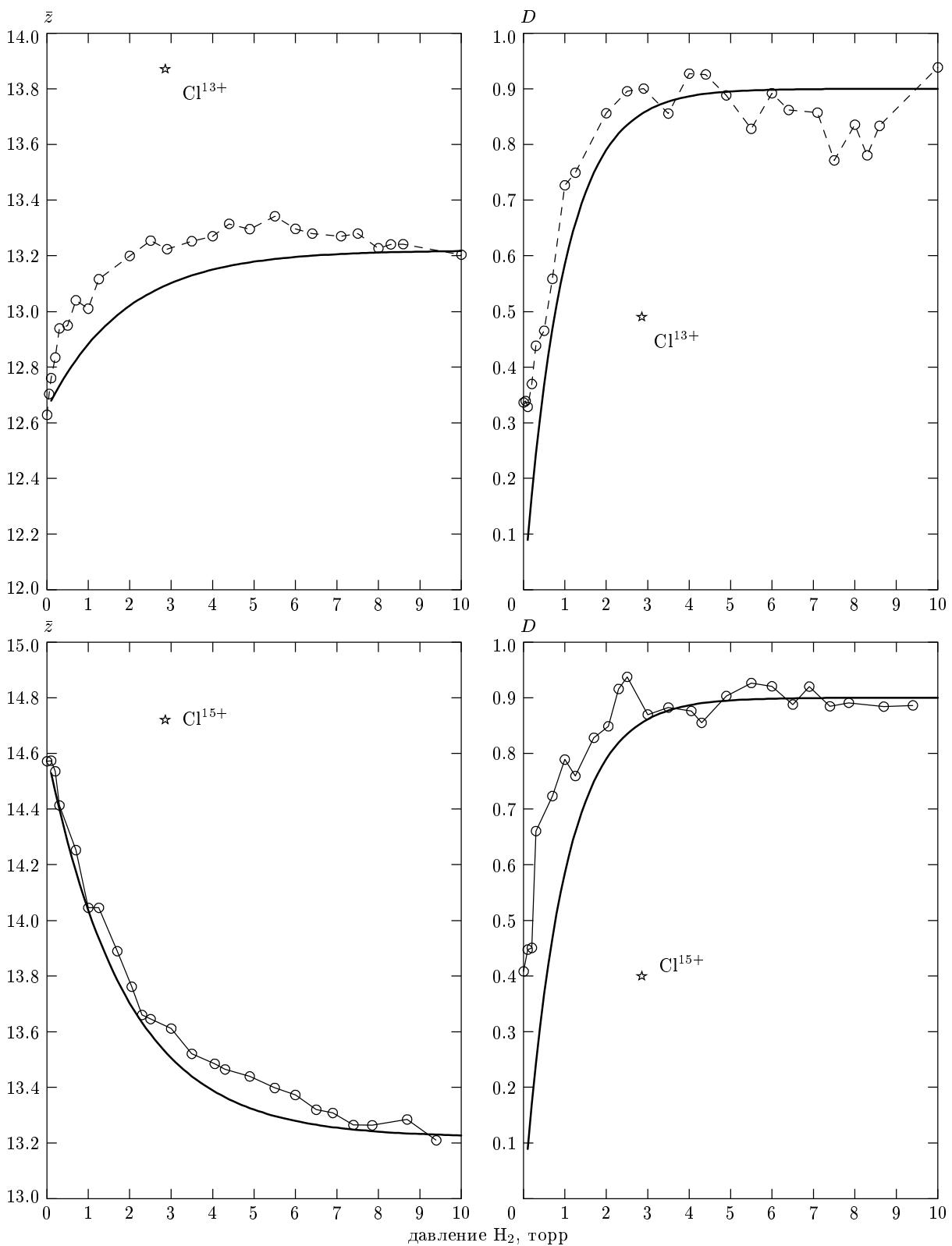


Рис. 9. Динамика изменения среднего заряда и зарядовой дисперсии ионов Cl с начальной энергией 1.5 МэВ/u и начальными зарядами 13 и 15 в холодном водороде. Кружки — экспериментальные данные из работы [31], сплошные кривые — теоретические зависимости (46). Звездочками показаны единичные измерения в водородной плазме

ионизации и рекомбинации (коэффициент  $a$ ) становится меньше, а наклон зависимости разности сечений от заряда (коэффициент  $b$ ) — больше. В результате дисперсия уменьшается.

Таким образом, представленный выше анализ показывает, что с помощью полученных в данной работе аналитических решений задачи торможения ионов в диффузационной модели может быть проведена оценка зависимостей сечений ионизации и рекомбинации от заряда иона. Поскольку, варьируя начальный заряд и энергию ионов, можно добиваться того, что ион в процессе своего торможения в плазме будет проходить через разные зарядовые состояния, этот метод может дать интересный способ вычисления сечений ионизации и рекомбинации из экспериментальных данных. С другой стороны, довольно простой оказывается оценка зарядовой дисперсии. Формулу для стационарного значения зарядовой дисперсии можно записать так, что в ней будут использоваться производные логарифмов сечений ионизации и рекомбинации, представляющих собой более гладкие функции, чем сами сечения:

$$D = \frac{\partial}{\partial z} \ln \left( \frac{\sigma_i}{\sigma_r} \right). \quad (59)$$

Сама же дисперсия довольно быстро достигает своего стационарного значения.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложен диффузационный метод для кинетического уравнения, описывающего движение высокоэнергетических ионов в плазме или в холодном веществе. В рамках построенной модели получены приближенные решения, описывающие средний заряд иона, а также дисперсии зарядовых распределений ионов в зависимости от величины их пробега в мишени. Расчет дисперсии зарядового распределения основан на том, что для тяжелых ионов средний квадрат отклонения от среднего заряда много меньше квадрата заряда и распределение ионов по заряду (при данной энергии и одинаковом начальном заряде) представляет собой узкий пик, локализованный вблизи среднего заряда. Это связано с особенностями зарядового поведения коэффициентов кинетического уравнения, описывающего торможение ионов в веществе.

В статье также описан метод численного решения уравнения переноса ионов и проведен расчет, результаты которого использованы для проверки аналитических решений диффузационного метода. Численные расчеты подтверждают вывод, сделанный

при аналитическом рассмотрении задачи, о том, что изменение заряда и зарядовой дисперсии ионов происходит вдоль характеристики в плоскости пробег—энергия. Причем средний заряд вдоль этой характеристики может быть рассчитан по формулам приближения непрерывной ионизации.

Рассмотрена проблема нахождения дисперсии распределения ионов по энергиям. Учет процессов изменения зарядов ионов приводит к значительному увеличению разброса ионов по энергии на завершающей стадии их торможения, что, в свою очередь, приводит к расплыванию пика кривой Брэгга средних потерь энергии ионов в веществе.

Проведено сравнение результатов аналитического решения задачи с имеющимися экспериментальными данными. Как правило, экспериментальные результаты хорошо согласуются с аналитическими формулами. Имеющиеся отличия данных эксперимента от результатов расчета по аналитической модели в случае торможения высокоэнергетических ионов в слабоионизованной плазме связаны, по нашему мнению, с недостаточно точными моделями расчета сечений. В этом случае эксперимент позволяет сделать вывод о справедливости той или иной модели, так как развитый в статье аналитический метод позволяет извлекать информацию о сечениях из данных о среднем заряде и зарядовой дисперсии.

В заключение авторы выражают благодарность коллективу лаборатории Б. Ю. Шаркова Института теоретической и экспериментальной физики за ценные обсуждения проблем взаимодействия тяжелых ионов с веществом.

## ЛИТЕРАТУРА

1. O. Volmer, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. **121**, 373 (1974).
2. K. B. Winterbon, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. **144**, 311 (1977).
3. F. Besenbacher, J. U. Andersen, and E. Bonderup, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. **168**, 1 (1980).
4. P. Sigmund, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **69**, 113 (1992).
5. A. Narmann and P. Sigmund, Phys. Rev. A **49**, 4709 (1994).
6. H. Bethe, Ann. Phys. Leipzig **5**, 324 (1930).
7. N. Bohr, Philos. Mag. **25**, 10 (1913).

8. J. Lindhard and A. H. Sorensen, Phys. Rev. A **53**, 2443 (1996).
9. М. М. Баско, Физика плазмы **10**, 1195 (1984).
10. T. Peter and Ju. Meyer-ter-Vehn, Phys. Rev. A **43**, 1998 (1991).
11. T. Peter, Ju. Meyer-ter-Vehn, Phys. Rev. A **43**, 2015 (1991).
12. E. Nardi and Z. Zinamon, Phys. Rev. Lett. **49**, 1251 (1982).
13. В. С. Ремизович, Д. Б. Рогозкин, М. И. Рязанов, *Флуктуации пробегов заряженных частиц*, Энергоатомиздат, Москва (1988).
14. Gryzinski, Phys. Rev. A **138**, 305 (1965).
15. Vriens, Proc. R. Soc. Lond. **90**, 935 (1966).
16. V. P. Shevelko, *Single and Multiple Ionization of Atoms and Ions by Electron Impact*, Harwood Academic publishers (1999).
17. Я. Б. Зельдович, Ю. А. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Физматлит, Москва (1965).
18. В. П. Ковалев, *Эффективный заряд иона*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
19. Б. М. Смирнов, *Ионы и возбужденные атомы в плазме*, Атомиздат, Москва (1974).
20. W. Lotz, Z. Phys. **220**, 466 (1969).
21. H. C. Brinkmann and H. A. Kramers, Proc. Ned. Acad. Wet. **33**, 973 (1930).
22. R. A. Mapleton, *Theory of Charge Exchange*, Springer-Verlag, New York (1972).
23. J. Eichler and F. T. Chen, Phys. Rev. A **20**, 104 (1979).
24. J. Eichler, Phys. Rev. A **32**, 112 (1985).
25. A. S. Schlachter et al., Phys. Rev. A **27**, 3372 (1983).
26. R. K. Janev, L. P. Presnyakov, and V. P. Shevelko, *Physics of Highly Charged Ions*, Springer-Verlag, New York (1985).
27. V. S. Nikolaev and I. S. Dmitriev, Phys. Lett. A **28**, 277 (1968).
28. M. D. Brown and C. D. Moak, Phys. Rev. B **6**, 90 (1972).
29. M. S. Armel and M. S. Funkhouser, Phys. Rev. A **64**, 64502 (2001).
30. C. Couillaud et al., Phys. Rev. E **49**, 1545 (1994).
31. M. Chabot et al., Phys. Rev. E **51**, 3504 (1995).
32. S. Andriamonje et al., Nucl. Instr. Meth. B **87**, 116 (1994).