

# **СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ЗАРЯДАМ ИОНОВ В ГАЗООБРАЗНЫХ И ТВЕРДЫХ СРЕДАХ**

**Н. В. Новиков**

Специальность 01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных  
частиц

**НИИЯФ МГУ**

**24 Мая 2016**

# Введение

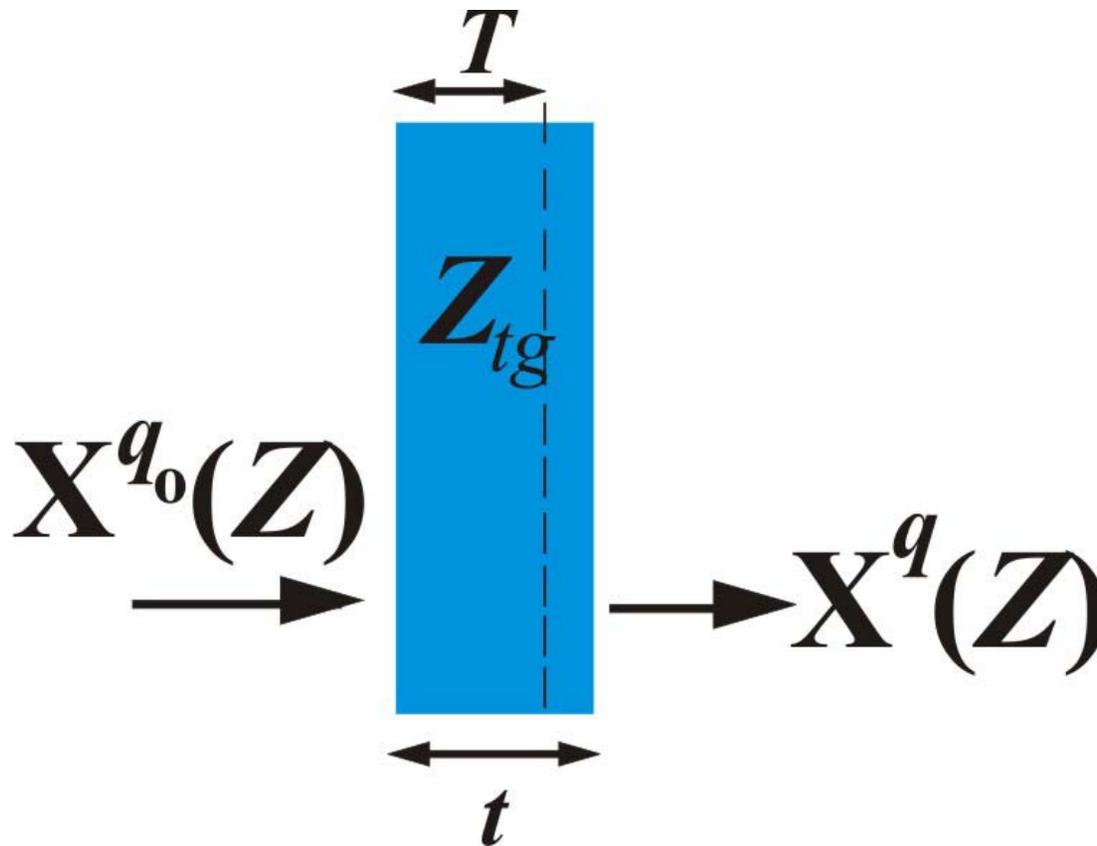


Рис. 1

$\Phi_q$  - зарядовые фракции,

$T$  – толщина для установления равновесного зарядового распределения ионов.

$$\sum_q \Phi_q = 1$$

## Уравнения перезарядки:

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

$$\Phi_{q0}(0) = 1 \quad \sum_q \Phi_q(t) = 1 \quad (1)$$

$\sigma_{q,k}(E, Z, Z_{tg})$  сечения потери ( $q < k$ ) и захвата ( $q > k$ )

## Равновесное распределение:

$$\Phi_q(t) \rightarrow F_q \quad \text{при} \quad t > T$$

$$\sum_{k \neq q} F_k \sigma_{kq}(E, Z, Z_{tg}) - F_q \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E, Z, Z_{tg}) = 0 \quad (2)$$

# Актуальность

Зарядовые распределения ионов необходимы в различных областях науки и техники:

- исследование потерь энергии ионов в веществе;
- для получения ионного пучка определенного заряда;
- описание процессов при формировании трека заряженной частицы в веществе;
- в радиационном материаловедении;
- описание воздействия космических лучей на электронику космических аппаратов;
- при лечении онкологических заболеваний;
- для диагностики плазмы.

# Цель работы

1. Разработка методов расчета сечений потери и захвата электронов ионами в газообразных и твердых средах,
2. описание особенностей зарядовых распределений и потерь энергии ионов.

# Структура доклада

## Введение

1. **Обзор** методов оценки распределения ионов по зарядам
2. **Результаты** по развитию квантово-механических методов расчета сечений перезарядки
3. **Результаты** по описанию сечений перезарядки на основе экспериментальных данных и теоретических закономерностей.
4. **Результаты** для решения некоторых задач с участием ионов.

## **Положения, выносимые на защиту**

## 1.1 Экспериментальные измерения $\Phi_q(t)$

Измерялись  $\Phi_q(t)$  для нескольких значений  $t$ .  
Затем вычисляются сечения  $\sigma_{q,k}(E, Z, Z_{tg})$ .

### Точность измерений сечений:

**в газах ( $t \geq 0.01$  мкг/см<sup>2</sup>)**

$$\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_{tg}): \mathbf{7-15\%}$$

$$\sigma_{q,q\pm 2}(E, Z, Z_{tg}): \mathbf{25- 40\%}$$

*(сотни работ);*

**в твердой мишени ( $t \geq 1$  мкг/см<sup>2</sup>)**

*(5-7 работ, где измерялись сечения).*

*В твердой мишени измерялись  $F_q$ .*

## 1.2 Расчеты на основе сечений перезарядки

$$\sigma_{q,q\pm 1}(E,Z,Z_{tg});$$

Методы расчета:  $V < V_0$  АО ;  $V > V_0$  FBA, CDW

$$\sum_{k \neq q} F_k \sigma_{kq}(E,Z,Z_{tg}) - F_q \sum_{k \neq q} \sigma_{qk}(E,Z,Z_{tg}) = 0 \quad (3)$$

**Средний заряд**  $\bar{q} = \sum_q q F_q \quad (4)$

**Ширина**  $d^2 = \sum_q (q - \bar{q})^2 F_q \quad (5)$

**Асимметрия**  $s = \sum_q (q - \bar{q})^3 F_q / d^3 \quad (6)$

## 1.3 Эмпирический метод

**Средний заряд**

**G.Schiwietz, P.L. Grande (2001)**

$$\bar{q}/Z = \frac{8.29 X + X^4}{0.06/X + 4 + 7.4X + X^4} \quad X=X(Z, Z_{tg}, V) \quad (7)$$

**Ширина равновесного зарядового распределения**

**V.S. Nikolaev, I.S. Dmitriev (1968)**

$$d^2 = \{ 1 - (\bar{q}/Z)^{5/3} \} \bar{q} / 4 \quad (8)$$

**Асимметрия (s=0)**

$$F_q = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d} \exp\left[-(q - \bar{q})^2 / (2d^2)\right] \quad (9)$$

## 1.4 Эффект плотности (эксперимент)

1. Средний заряд в твердой мишени больше чем в газе

$$\bar{q}_{solid} > \bar{q}_{gas} \quad (10)$$

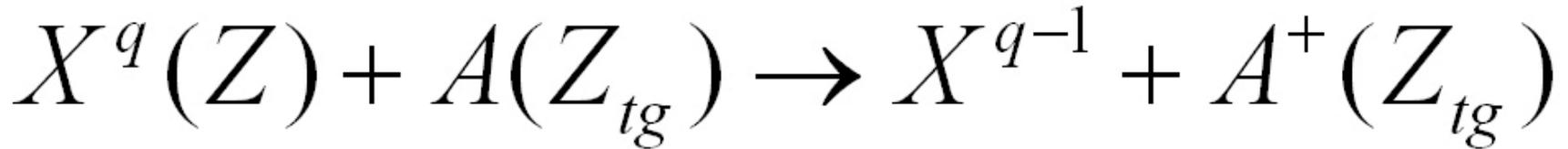
2. Эффективные сечения перезарядки в твердой мишени отличаются от сечений в газе

$$\sigma_{q,q+1}^{solid} > \sigma_{q,q+1}^{gas} \quad (11)$$

$$\sigma_{q,q-1}^{solid} < \sigma_{q,q-1}^{gas} \quad (12)$$

*Нарушается приближение парных столкновений.  
Уменьшается время между столкновениями.*

## 2.1 Захват электрона с учетом взаимодействия ионов



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

$$\vec{R} = \vec{y} - \vec{x} \quad (13)$$

$$\psi_{v\lambda}(\vec{x}) \propto \exp(-\varepsilon_i x), \quad \psi_{nl}(\vec{y}) \propto \exp(-\varepsilon_f y)$$

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

$$E \geq 1 \text{ МэВ/нуклон}, \quad q > 1.$$

## 2.1 Захват электрона с учетом взаимодействия ионов

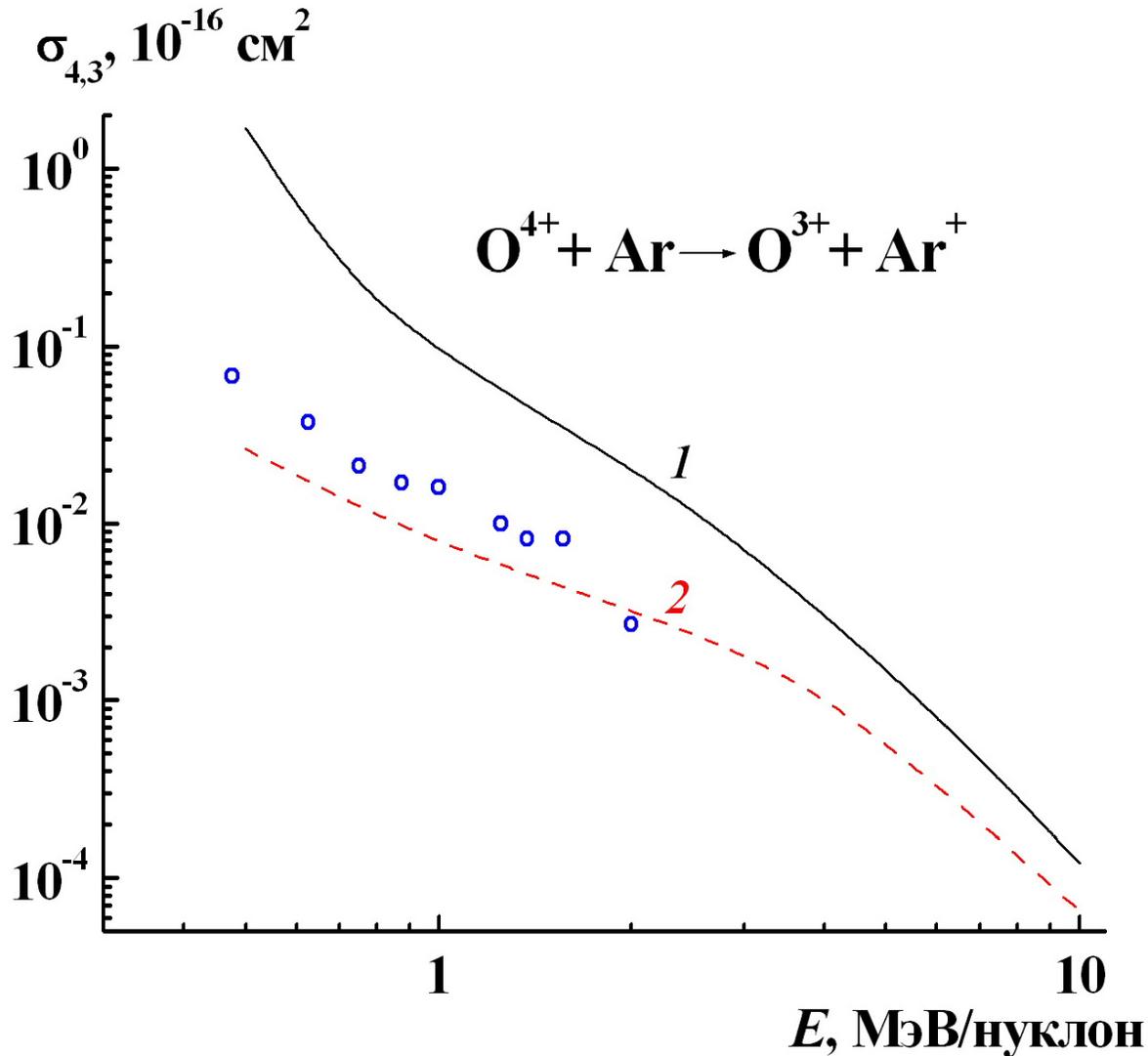


Рис. 2

$$1 - F(\xi, \vec{R}) = 1 ;$$

$$2 - F(\xi, \vec{R}) \neq 1 ,$$

o – эксперимент  
[Macdonald et al.  
1971].

## 2.1 Захват электрона с учетом взаимодействия ионов

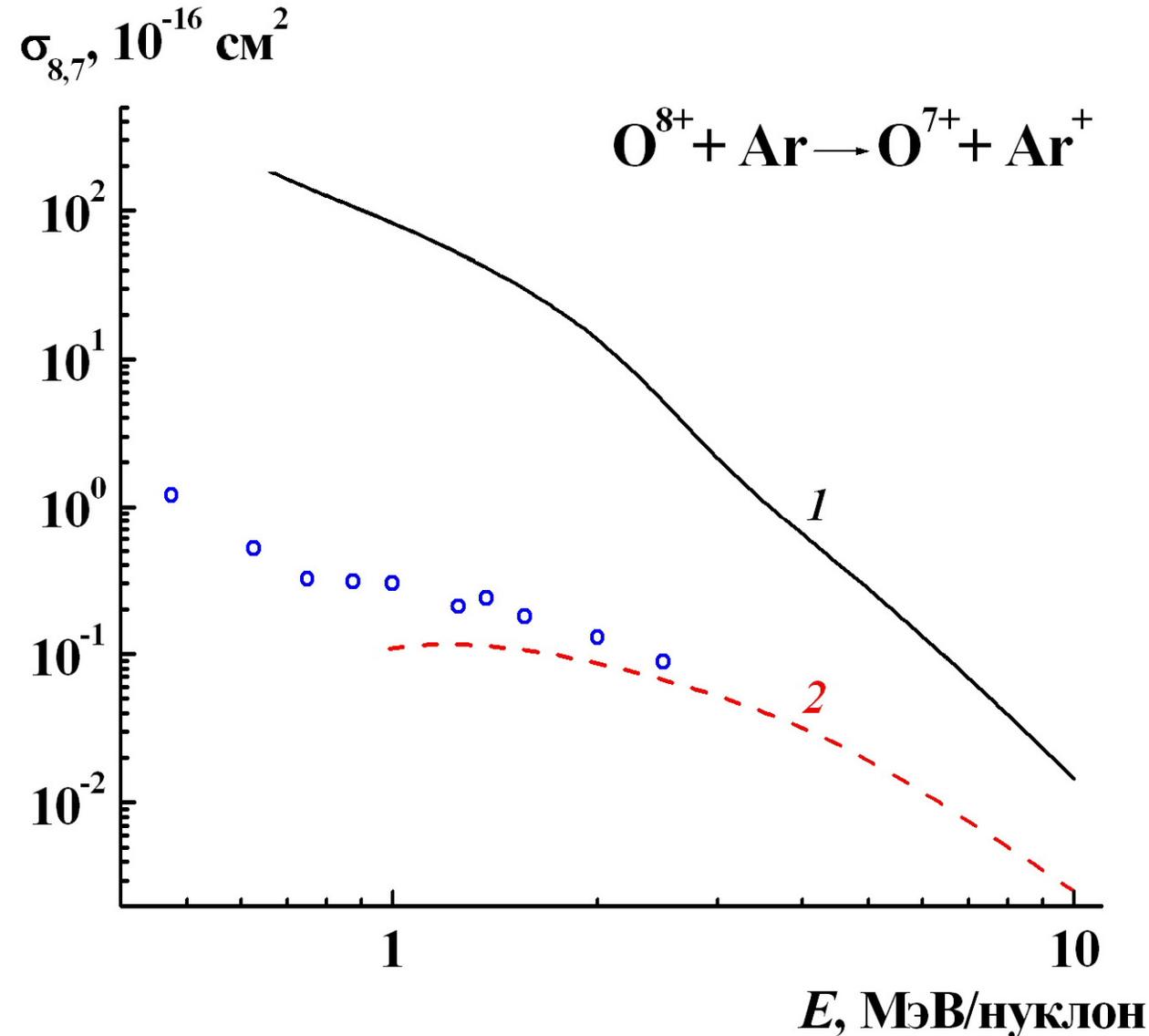


Рис. 3

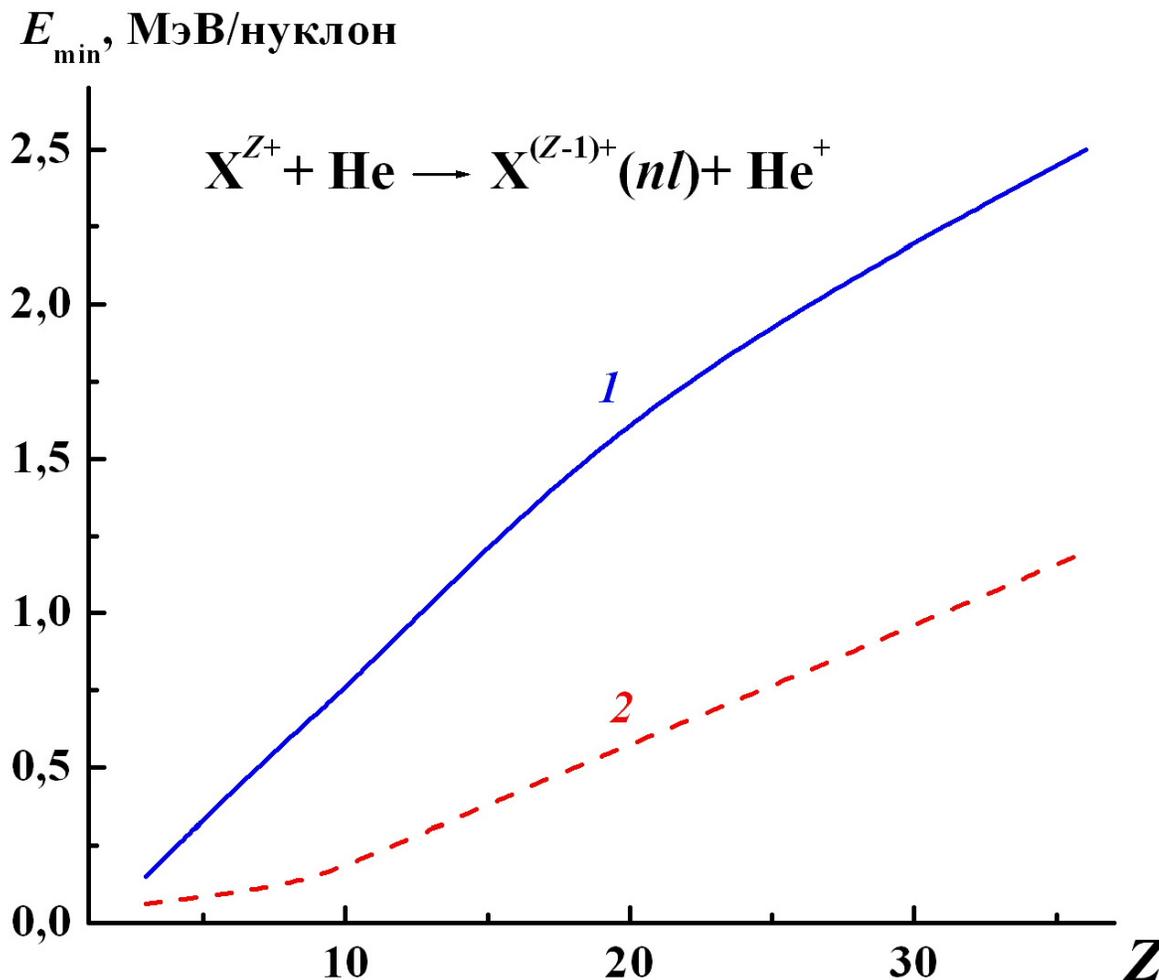
$$1 - F(\xi, \vec{R}) = 1;$$

$$2 - F(\xi, \vec{R}) \neq 1$$

o – эксперимент  
[Macdonald et al  
1971].

## 2.2 Количество возбужденных состояний для описания захвата электрона

$$\sigma_{Z,Z-1} = \sum_{nl} \sigma_{Z,Z-1}(nl) \quad (14)$$



**Рис. 4**

$E \geq E_{\min}$ ,  
 $n \leq 5, l \leq 2$ :

**1 – 1%;**  
**2 – 10%.**

## 2.3 Волновые функции возбужденных состояний атомов и ионов

Численное решение уравнения Хартри - Фока:

$$\langle \varphi_{nl}(r) \mid \varphi_{n'l}(r) \rangle = \delta_{nn'}, \quad (15)$$

Аппроксимация аналитическими функциями:

$$\psi_{nl}(r) = \sum_{i=1}^{i \max} C_i r^{n_i-1} \exp(-\alpha_i r), \quad (16)$$

$$(C_i, n_i, \alpha_i \quad i=1, i \max)$$

$$\Delta_{nl} = \int dr r^2 \mid \varphi_{nl}(r) - \psi_{nl}(r) \mid^2 \rightarrow 0 \quad (17)$$

$$\langle \psi_{nl}(r) \mid \psi_{n'l}(r) \rangle = \xi_{nl,n'l} \ll 1 \quad (18)$$

$2 \leq N_e \leq 18$  – число электронов  $(n \leq 5, l \leq 2)$

## 3.1 Компиляция данных

Novikov N V , Teplova Ya A.

Database on charge – changing cross sections in ion – atom collision.

J. Phys.: Conf. Ser. 194 Volume 194 (2009) 082032;

<http://cdfc.sinp.msu.ru/cgi-bin/> (свободный доступ)

Организован быстрый поиск информации, ее наглядное представление, сравнение и анализ.

Экспериментальные и *теоретические*

- **Сечения** потери и захвата электронов;
- Равновесные **зарядовые фракции**.

Данные **620** статей и монографий представлены в виде **8000** Таблиц и **600** рисунков, связанных между собой *html-страниц*

## 3.2 Основные приближения при оценке значений сечений перезарядки в газах

1. Аппроксимировать экспериментальные данные плавными функциями от  $E, q, Z, Z_{tg}$ .

2. Вид этих функций выбирается на основе теоретических моделей.

3. Используются приближения:

$\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_{tg})$  – непрерывная функция  $E$ , имеющая не более одного максимума;

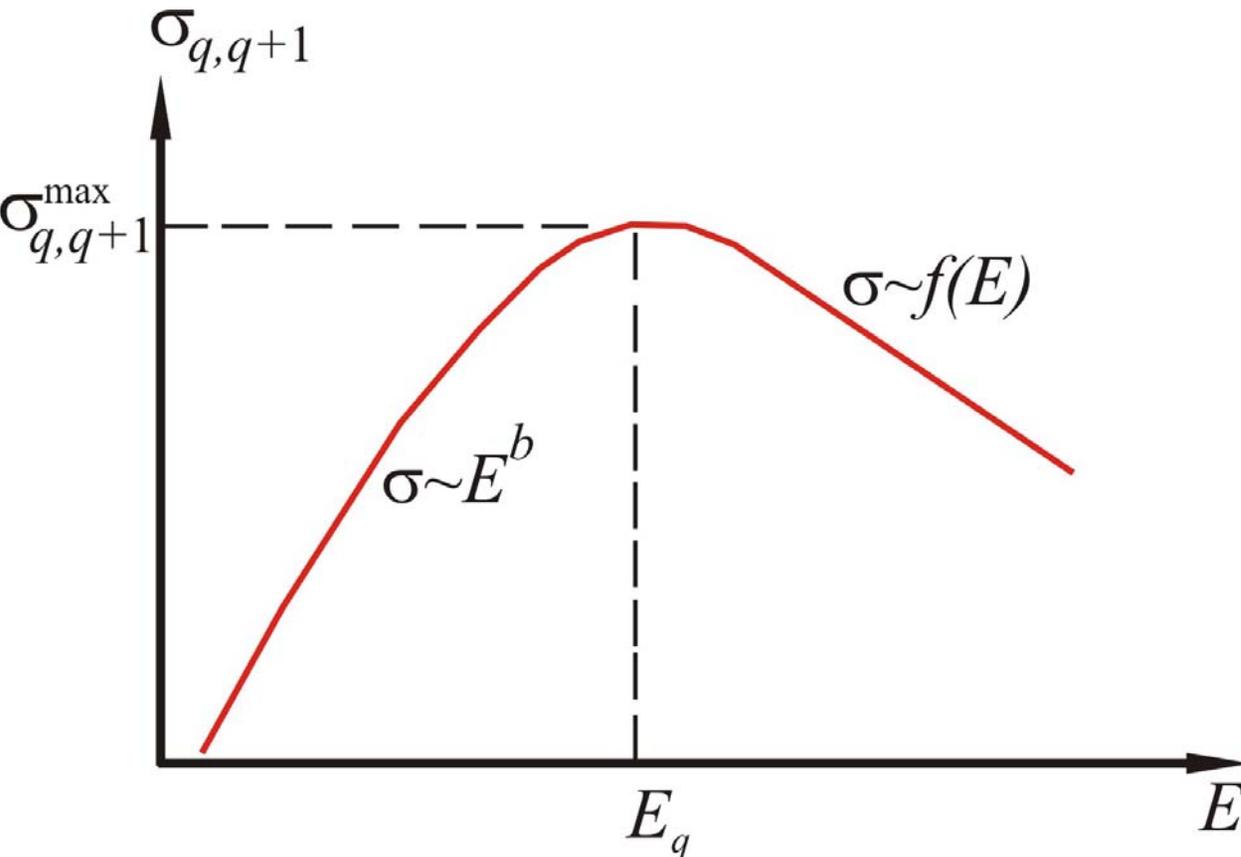
$d\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_{tg})/dE$  – непрерывная функция  $E$ ;

$\sigma_{q,q\pm 1}(E, Z, Z_{tg})$  – непрерывная функция  $q, Z, Z_{tg}$  при  $E = const$ .

### 3.3 Сечение потери электрона

$$E \geq E_q$$

$$\sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_{tg}) = \sigma_{q,q+1}(E_q, Z, Z_{tg}) \times f(E/E_q) \quad (19)$$



**Рис. 5**

$E_q$  – не зависит  
от  $Z_{tg}$  и слабо  
зависит от  $Z$

$f(E/E_q)$  – не  
зависит  
от  $q, Z, Z_{tg}$

### 3.4 Сечение захвата электрона

$$\sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_{tg}) = \sigma_{q,q-1}(E_m, Z, Z_{tg}) \times (E/E_m)^{a(E)} \quad (20)$$

при  $E \geq E_m$

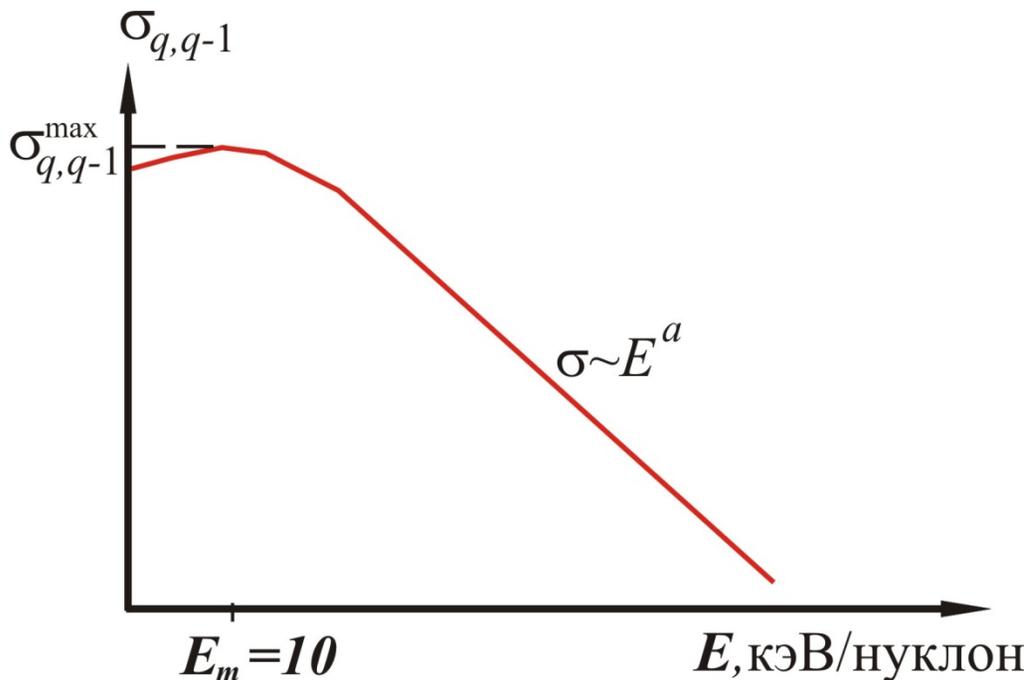


Рис. 6

Таблица. 1

$Z_{tg}$	$\alpha$
1	$-4.50 \pm 0.10$
2	$-4.50 \pm 0.10$
7	$-3.50 \pm 0.10$
10	$-3.25 \pm 0.10$
18	$-3.00 \pm 0.10$
36	$-2.85 \pm 0.10$
54	$-2.85 \pm 0.10$

$\alpha \leq 0$ ;  $a(E) \rightarrow \alpha$  при  $E \rightarrow \infty$

$\alpha(Z_{tg})$  не зависит от  $q, Z$  (для  $Z \geq 5$ )

## 3.5 Эффект плотности

Корректировка газ – твердая среда:  $C_{g-s}(E, Z, Z_{tg}) > 1$

**Потеря электрона:**

$$\sigma_{q,q+1}^s(E, Z, Z_{tg}) = \sigma_{q,q+1}(E, Z, Z_{tg}) \times C_{g-s}(E, Z, Z_{tg}) \quad (21)$$

**Захват электрона:**

$$\sigma_{q,q-1}^s(E, Z, Z_{tg}) = \sigma_{q,q-1}(E, Z, Z_{tg}) / C_{g-s}(E, Z, Z_{tg}) \quad (22)$$

**Зарядовые фракции и средний заряд:**

$$\bar{q}^s(C_{g-s}) = \sum_q q F_q^s(E, C_{g-s}) \quad (23)$$

$$\min \left[ \bar{q}^s(C_{g-s}) - \bar{q}^{\text{exp}}(E) \right] \quad (24)$$

## 3.5 Эффект плотности

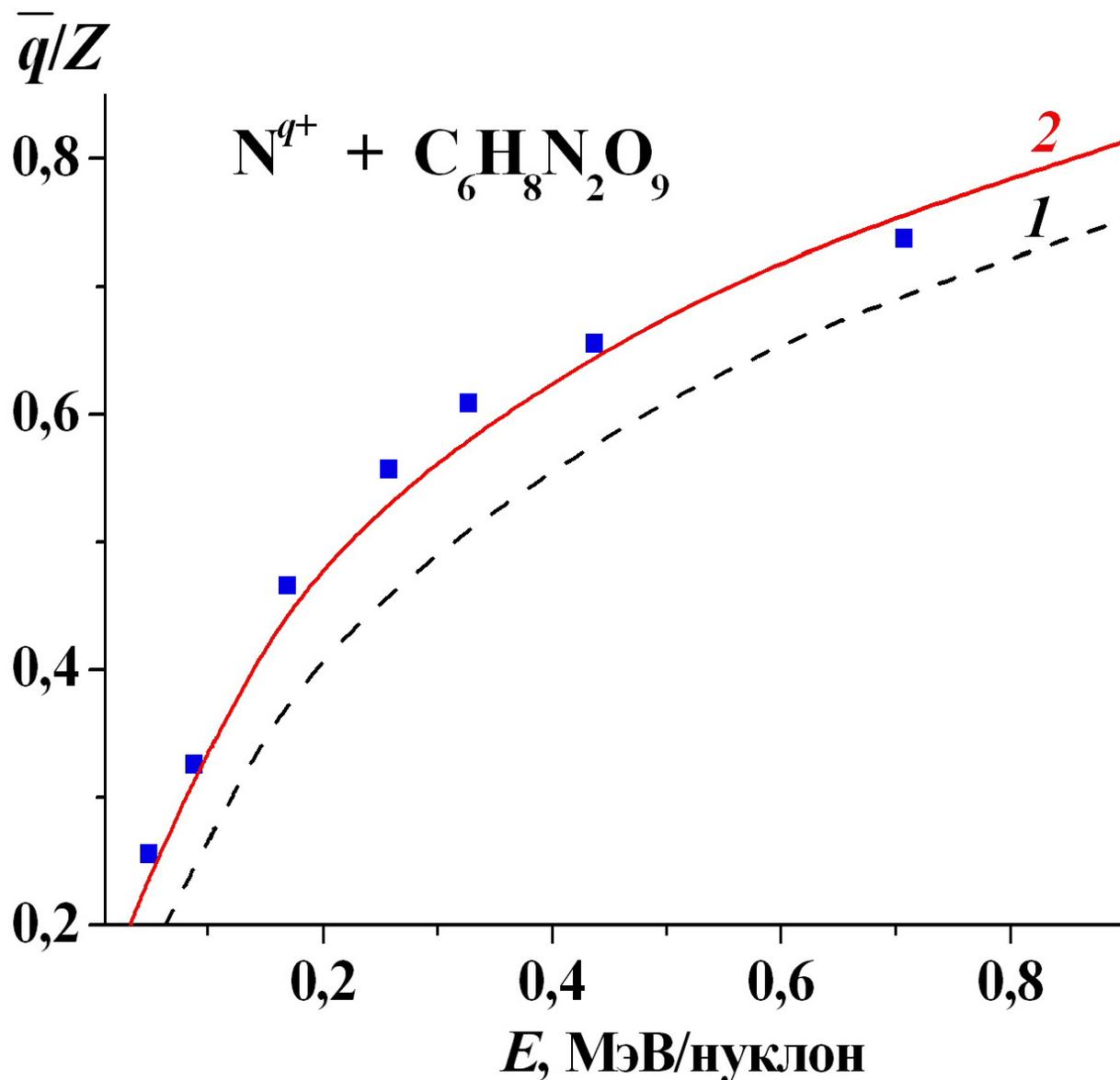


Рис. 7

1 -  $C_{g-s}=1$ ;

2 -  $C_{g-s}>1$ .

Экспериментальные  
данные: (■)  
[Николаев и др.1961].

## 3.5 Эффект плотности

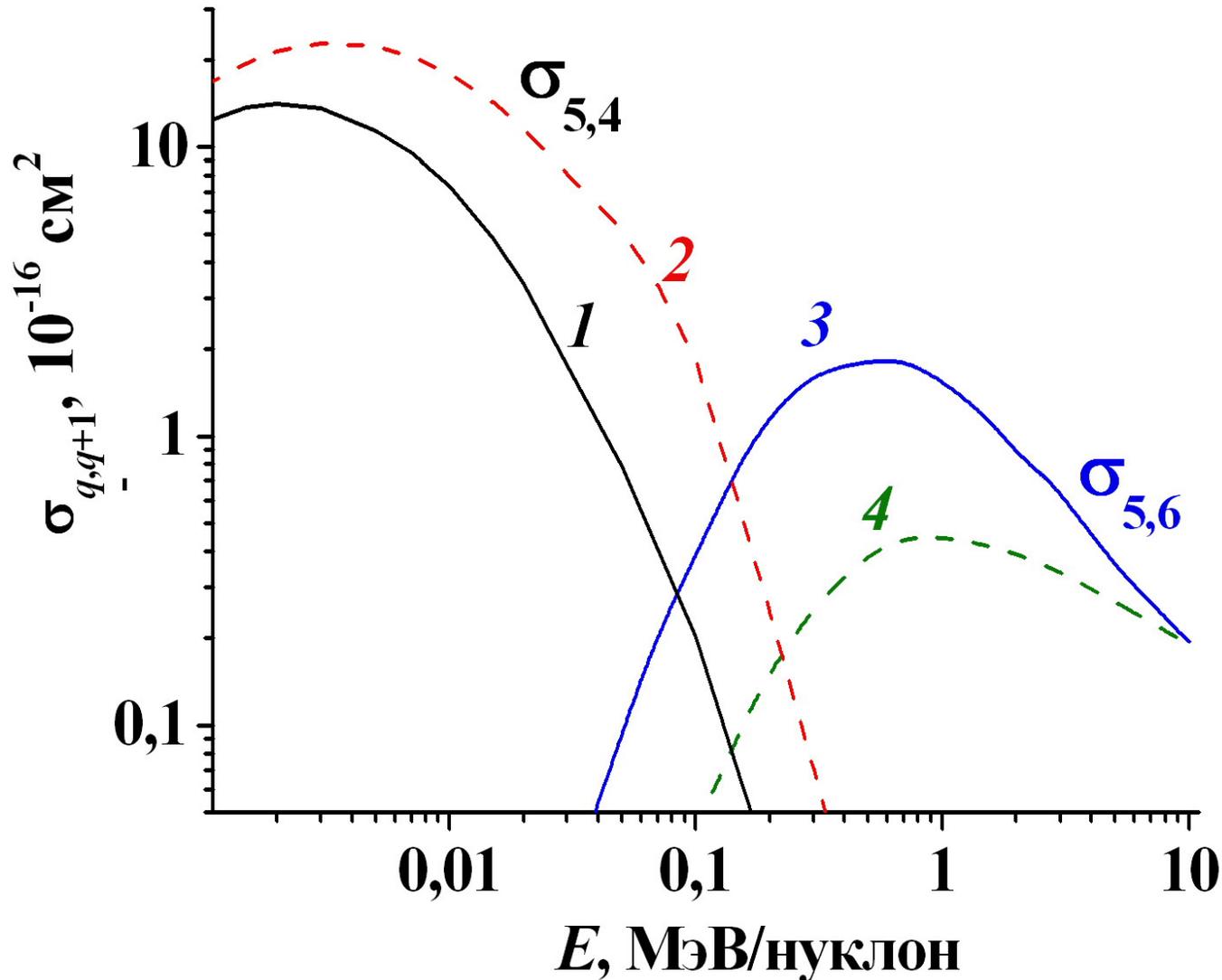


Рис. 8

$\text{Ar}^{5+} + \text{C}$

$\sigma_{5,4}$

1 -  $C_{g-s} > 1$ ;

2 -  $C_{g-s} = 1$ .

$\sigma_{5,6}$

3 -  $C_{g-s} > 1$ ;

4 -  $C_{g-s} = 1$ .

## 3.6 Программа расчета сечений

*Novikov N.V.* // Charge – Changing Cross Sections  
code

<http://cdfе.sinp.msu.ru/services/cccs/HTM/cccscode.htm>

$$\sigma_{q,q\pm 1}, \sigma_{q,q\pm 2}, S_{q\pm 1}$$

$$10 \text{ кэВ/нуклон} \leq E \leq 20 \text{ МэВ/нуклон}$$

$$5 \leq Z \leq 18$$

$$1 \leq Z_{tg} \leq 92$$

## 4.1 Установление зарядового равновесия

**Средний заряд:** 
$$\bar{Q}(t) = \sum_q q \Phi_q(t) \quad (25)$$

$$|\bar{Q}(t) - \bar{q}| / \bar{q} \leq \delta, \quad t > T_q \quad (26)$$

**Ширина распределения по заряду:**

$$[D(t)]^2 = \sum_q [q - \bar{Q}(t)]^2 \Phi_q(t) \quad (27)$$

$$|D(t) - d| / d \leq \delta, \quad t > T_d \quad (28)$$

$$T = \max(T_q, T_d)$$

(точность  $\delta$  - несколько %)

## 4.1 Установление зарядового равновесия

$$\bar{q} < q_0$$

$$\bar{q} \approx q_0$$

$$\bar{q} > q_0$$

$T, \text{мкг/см}^2$

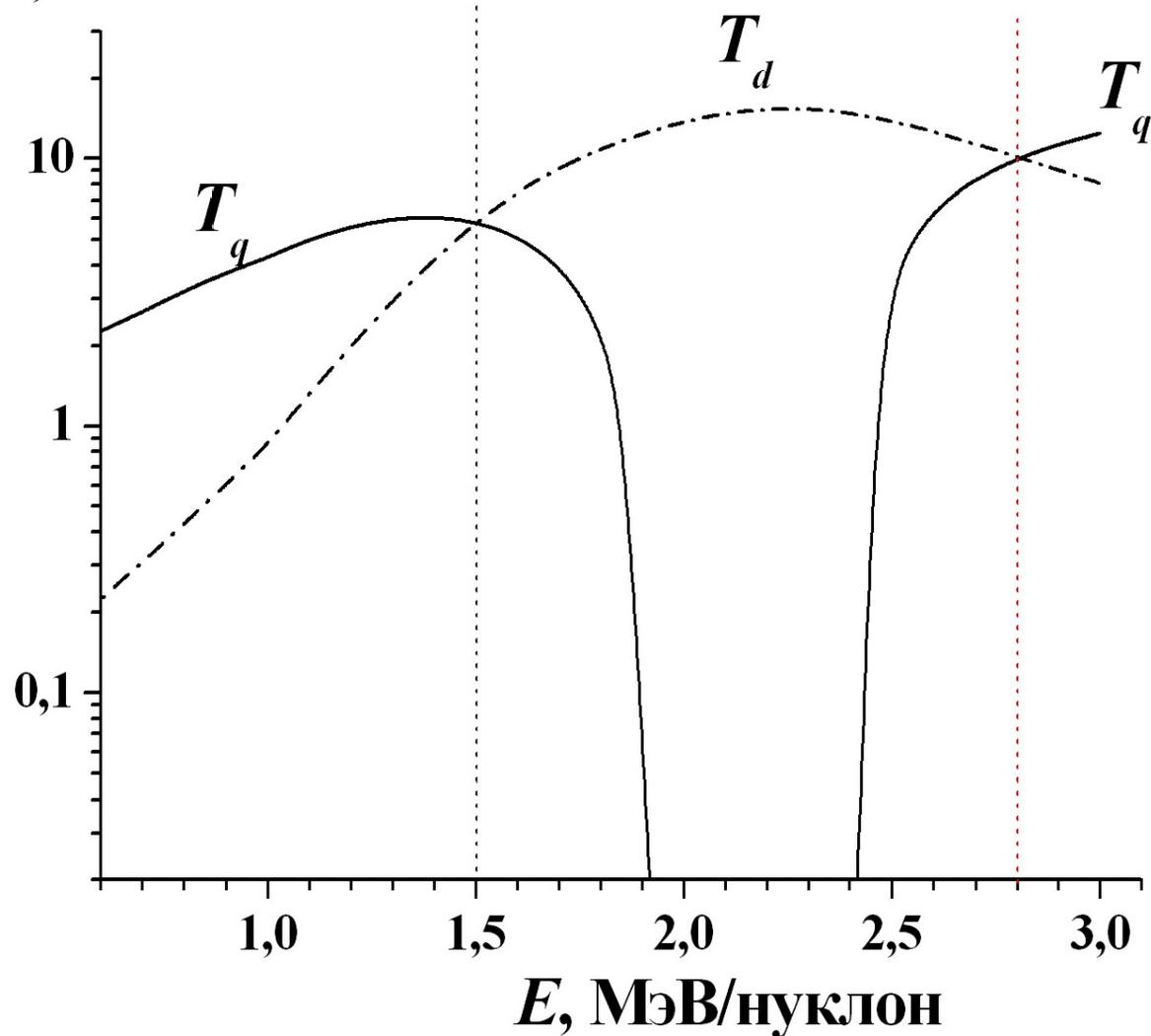
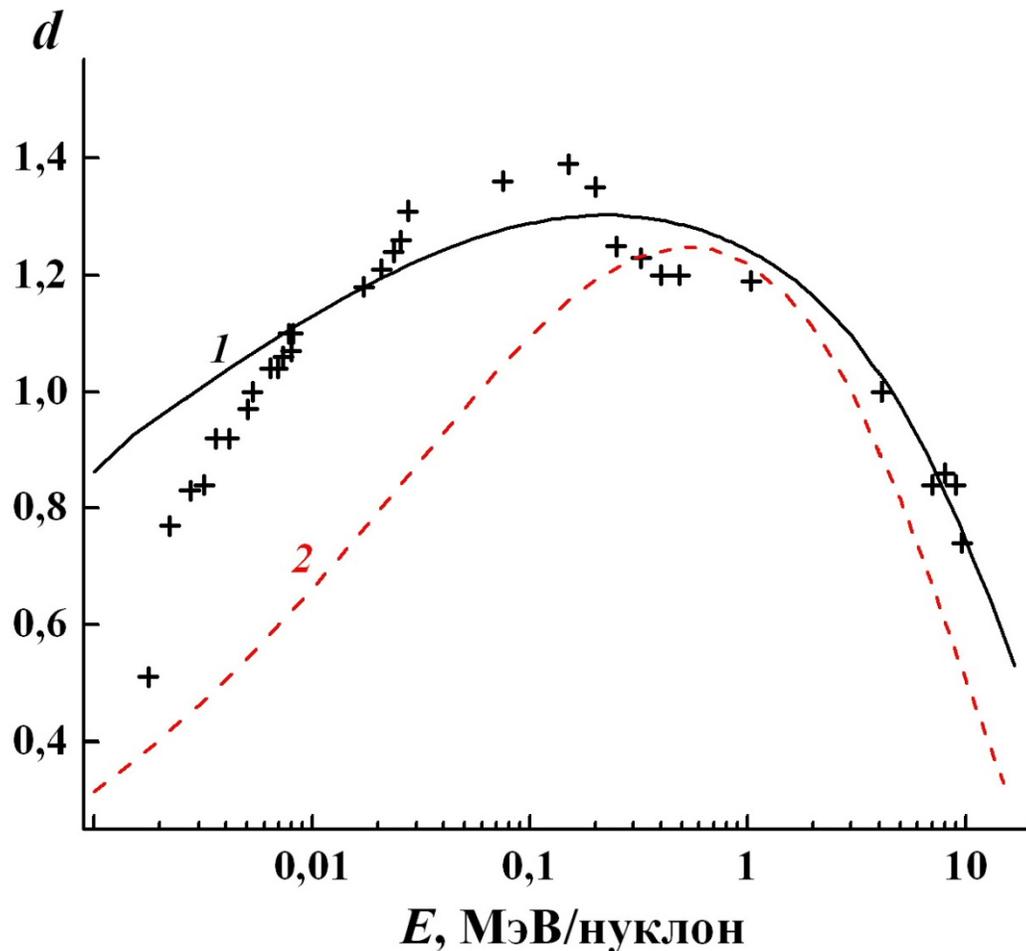


Рис. 9

$\text{Ne}^{9+} - \text{C}$

## 4.2 Параметры равновесного зарядового распределения

$$d(\bar{q}/Z) = C \times \{1 - \exp[-(\bar{q}/Z)^\gamma]\} \times \{1 - \exp[-(1 - \bar{q}/Z)^\beta]\} \quad (29)$$



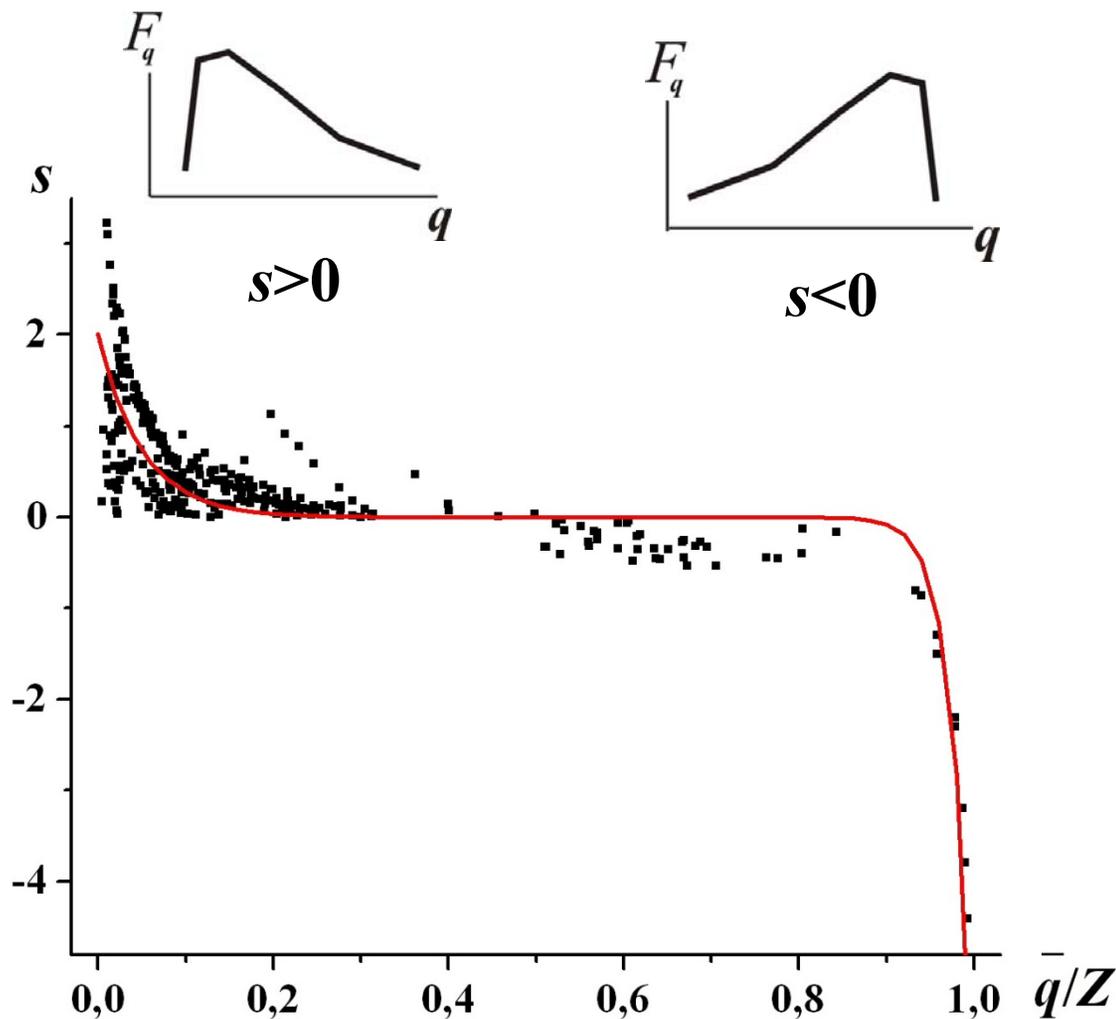
**В газах:**  
 $\gamma=0.40, \beta=0.75$   
**В твердой среде:**  
 $\gamma=0.23, \beta=0.32$

**Рис. 10**  
**Ar<sup>q+</sup> – C**  
**1 – d( $\bar{q}/Z$ );**  
**2 – ND68;**  
 (+) – экспериментальные данные.

*d* зависит от  $Z_{tg}$  и агрегатного состояния

## 4.2 Параметры равновесного зарядового распределения

$$s(\bar{q}/Z) = A \exp[-\lambda_A (\bar{q}/Z)] - B \exp[-\lambda_B (1 - \bar{q}/Z)] \quad (30)$$



**В газах:**  
 $A=2, \lambda_A=20,$   
 $B=7, \lambda_B=45.$

**В твердой  
 среде:**  
 $A=3, \lambda_A=25,$   
 $B=6, \lambda_B=50.$

**Рис. 11**  
 $Z > 5$  в газах

(■)- эксперим.  
 данные.

## 4.3 Потери энергии от процессов перезарядки

### Неупругие потери энергии

$$S_e = S_i + S_{q\pm 1} + S_{ex} \quad (31)$$

$S_i$  – ионизация атома мишени;

$S_{q\pm 1}$  – перезарядка иона;

$S_{ex}$  – возбуждение атома мишени.

### Потери энергии от процессов перезарядки

$$S_{q\pm 1} = \sum_q F_q \left[ \sigma_{q,q+1} \left( \frac{mV^2}{2} + |\varepsilon_q| \right) + \sigma_{q,q-1} \left( \frac{mV^2}{2} - |\varepsilon_{q-1}| \right) \right] \quad (32)$$

$m$  – масса электрона,

$\varepsilon_q$  – энергия связи электрона в ионе с зарядом  $q$ .

## 4.3 Потери энергии от процессов перезарядки

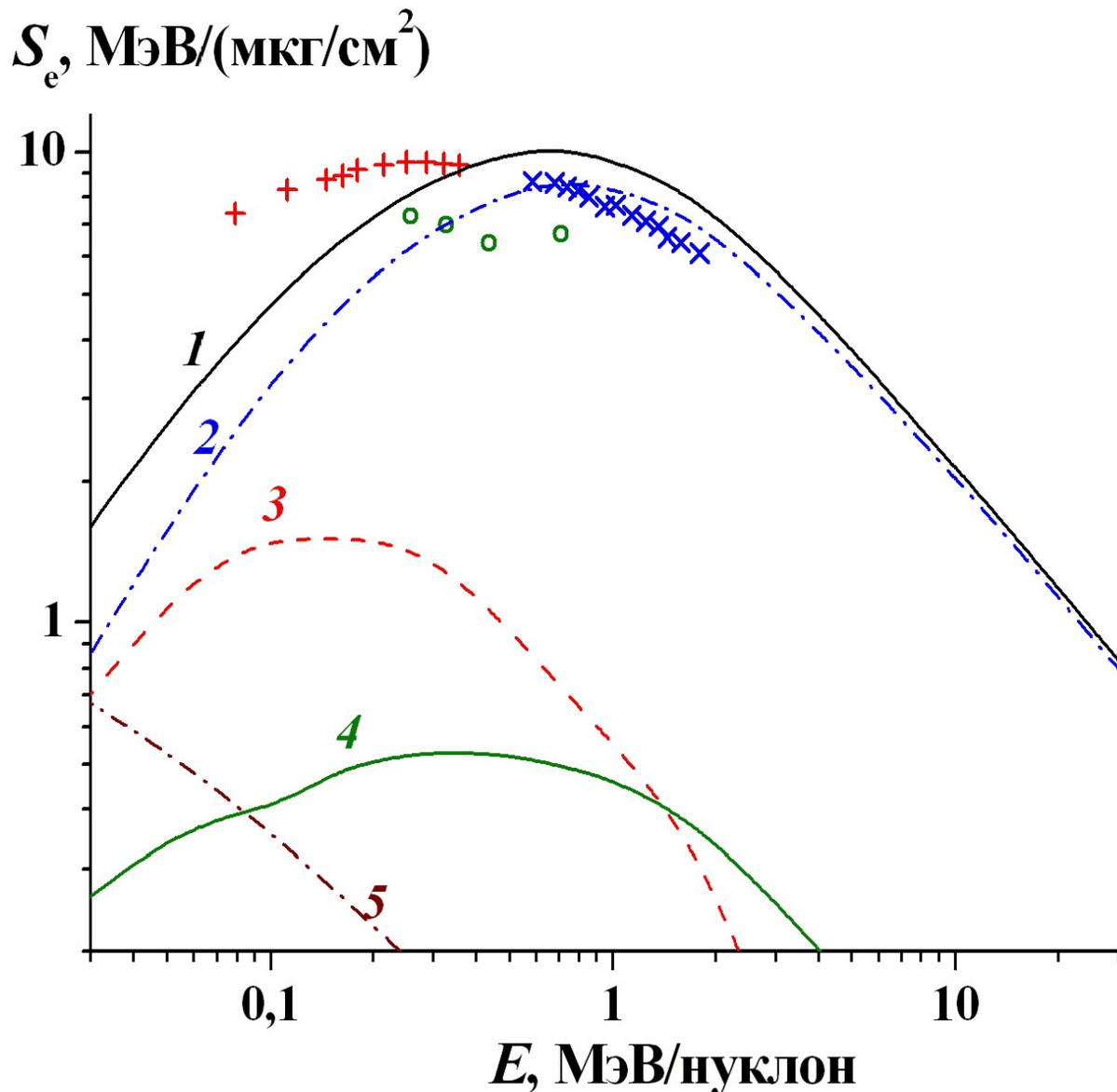


Рис. 12



Эксперимент:

(o) -  $\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_9$ ;

(+), (x) - mylar;

1- все неупругие процессы;

2 – ионизация;

3 – перезарядка;

4 – возбуждение;

5 – упругие потери энергии

## 4.3 Потери энергии от процессов перезарядки

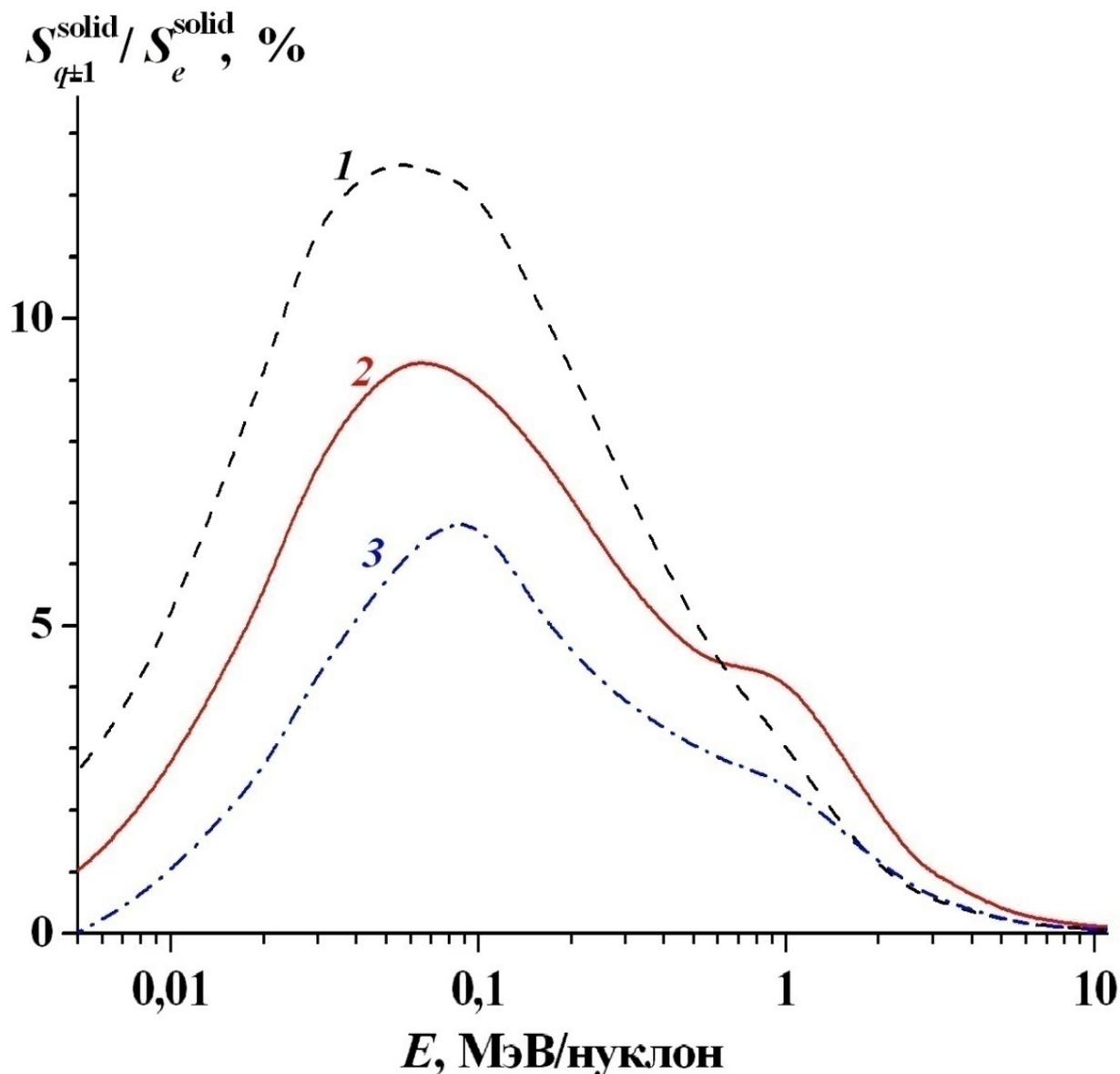


Рис. 13

$$S_{q\pm 1}^{solid} / S_e^{solid}$$

$$(Z_{tg}=6)$$

1 –  $Z=5$ ;

2 –  $Z=7$ ;

3 –  $Z=10$ .

## Положения, выносимые на защиту:

1. Предложен **метод расчета сечения захвата одного электрона быстрым ионом** в газах с учетом кулоновского отталкивания между рассеянным ионом и остатком атома мишени.
2. Показано, что в расчетах сечения захвата электрона быстрым ионом в широкой области  $E$  и  $Z$  необходимо **учитывать захват в возбужденные состояния.**
3. Предложен метод аппроксимации **волновых функций возбужденных состояний** более 150 атомов и ионов.
4. Создана **информационная база данных** для экспериментальных и теоретических значений сечений перезарядки.

## **Положения, выносимые на защиту:**

5. Разработан метод расчета сечений перезарядки с учетом **влияния эффекта плотности.**
6. Создана **компьютерная программа** для вычисления сечений перезарядки и потерь энергии.
7. Предложен новый метод расчета толщины мишени, необходимой для **установления равновесного зарядового распределения ионов.**
8. Получены эмпирические соотношения для **параметров ширины и асимметрии** равновесного зарядового распределения ионов.
9. Получено, что в широкой области  $E$  и  $Z$  **потери энергии от процессов перезарядки** вносят значительный вклад в неупругие потери энергии ионов.

# Результаты:

## Дано:

Экспериментальные данные

Теоретические модели  $V < V_0$ ;  $V > V_0$

## Получено:

1. Уточнение теоретических моделей  $V > V_0$ ;
2. Компиляция экспериментальных данных;
3. Описание в широком диапазоне энергии (эксперимент + теория);
4. Создание компьютерной программы расчета;
5. Исследования процессов с участием ионов.

## Публикации

### Статьи:

Nucl.Inst.Meth.B(2003,2005,2007,2011,2015,2016) - 6

Phys. Let. A (2009,2011,2013,2014) - 4

At. Data Nucl. Data Tab. (2010) - 1

J. Phys. Conf. (2009) - 1

Поверхность - 22

**Всего - 34**

**Соавторы:** Теплова Я.А., Белкова Ю.А., Файнберг Ю.А.,  
Дмитриев И.С.

**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ**