

УДК 537.533.35:53.072

## ЗАВИСИМОСТЬ ЗАРЯДОВОГО СОСТОЯНИЯ ИОНОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВ ОТ СКОРОСТИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

© 2025 г. Н. Н. Михеев<sup>a,\*</sup>, И. Ж. Безбах<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ  
“Курчатовский институт”, Калуга, 248033 Россия

\*e-mail: kmikran@spark-mail.ru

Поступила в редакцию 10.07.2024 г.

После доработки 30.08.2024 г.

Принята к публикации 30.08.2024 г.

Представлены результаты решения задачи описания зависимости зарядового состояния пучка ионов от их скорости для всех атомов периодической системы элементов. Определены значения базовых параметров, которые необходимы для расчета зарядового состояния пучка ионов, и проведена их апробация путем сопоставления расчетов тормозной способности с массивом экспериментально измеренных величин.

**Ключевые слова:** направленный пучок моноэнергетических ионов, многократное неупругое рассеяние, тормозная способность вещества, зарядовое состояние пучка ионов.

**DOI:** 10.31857/S1028096025020096, **EDN:** EHMEZN

### ВВЕДЕНИЕ

Тормозная способность вещества для направленных пучков моноэнергетических заряженных частиц представляет собой исключительно важную характеристику сложных процессов взаимодействия частиц с веществом, которая необходима для многих областей как фундаментальной, так и прикладной физики [1–3]. Если тормозная способность  $S$  вещества зависит от электрического заряда  $z$  пучка быстрых заряженных частиц как  $S \sim z^2$ , то с уменьшением скорости ионов необходимо учитывать зависимость зарядового состояния пучка ионов от их скорости. Поэтому для эффективного применения направленных ионных пучков средних и низких энергий как прецизионного технологического и исследовательского инструмента требуется детальная информация о зарядовом состоянии  $z_{\text{eff}}$  пучка ионов, например, при модификации физико-химических свойств и пространственной морфологии приповерхностных слоев в тонкопленочных структурах или при проведении локальной диагностики свойств вещества. Законченной теории, описывающей зависимость этой величины от скорости, нет. Де-

тальный обзор существующих аналитических выражений, применяемых при описании зарядового состояния низкоэнергетических ионов, проведен в [4]. Все они основаны на учете зависимости зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к средней скорости электронов самого ионного пучка и не предполагают какой-либо взаимосвязи зарядового состояния  $z_{\text{eff}}$  со структурой электронов атома мишени.

Ранее в [5] была предложена принципиально новая методика учета зарядового состояния пучка ионов, учитывающая его зависимость от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества. Она позволила решить прямую задачу аналитического описания зависимости тормозной способности вещества от энергии для пучка моноэнергетических  $\alpha$ -частиц в широком диапазоне первичной энергии частиц [5], а также она была успешно использована при расчете тормозной способности ряда веществ для ионных пучков легких элементов от лития до углерода [6]. Важными результатами работ стали аналитическое выражение для  $z_{\text{eff}}$  и установление предельного для пучка заряженных частиц рав-

новесного эффективного заряда  $z_{\text{eq}}$ , после того как скорость ионов становится равной примерно 1.55 минимальной скорости электронов конденсированного вещества. Ведь ранее полагали [4, 7], что с уменьшением скорости ионного пучка его эффективный заряд должен также непрерывно уменьшаться, в пределе стремясь к нулю.

Цель работы заключалась в решении прямой задачи описания зависимости зарядового состояния направленных пучков ионов от их скорости для всех атомов периодической системы элементов. Определены значения фундаментального параметра  $\beta$  для всех атомов периодической системы элементов и базового параметра  $z_{\text{eq}}$ , которые необходимы для расчета  $z_{\text{eff}}$  и проведена их апробация путем сопоставления расчетов тормозной способности с массивом экспериментально измеренных величин, собранных в известной компиляции X. Пауля [8].

### БАЗОВЫЕ ФОРМУЛЫ

Для заряженных частиц средних и низких энергий, как показано в [5, 9, 10], электронная тормозная способность  $S_e$  вещества, т.е. средние потери энергии пучка частиц на каждом атоме мишени, отнесенные к единице длины их пробега, описываются как

$$S_e = \frac{2\pi q^4 Z z_{\text{eff}}^2}{m_e V_0^2} F_M^N \ln \left[ \frac{m_e V_0^2}{\varepsilon_{li}} \right] \quad (1.1)$$

при  $m_e V_0^2 / \varepsilon_{li} > 2.7183$

и

$$S_e = 0.184 \frac{4\pi q^4 Z z_{\text{eff}}^2}{\varepsilon_{li}} F_M^N \text{ при } m_e V_0^2 / \varepsilon_{li} \leq 2.7183. \quad (1.2)$$

Здесь  $m_e$  — масса покоя электрона,  $q$  — заряд электрона,  $Z$  — средний атомный номер мишени,  $m_e V_0^2$  — максимально вероятная однократная потеря энергии,  $z_{\text{eff}}$  — эффективный заряд ионов пучка,  $\varepsilon_{li}$  — минимальная энергия связи электронов в атоме мишени, функция  $F_M^N$  описывает уменьшение вероятности неупругого рассеяния частиц на электронах мишени, когда скорость частиц становится сопоставимой со скоростью электронов атомов [5, 9, 10]. Эффективный заряд  $z_{\text{eff}}$  пучка ионов согласно [5] определяется как

$$z_{\text{eff}} = z [1 - \exp(-\beta V_0 / V_{li})], \quad (2)$$

где  $z$  — заряд ядра иона пучка,  $\beta$  — параметр, учитывающий зависимость  $z_{\text{eff}}$  от отношения скоро-

сти ионов  $V_0$  к минимальной скорости электронов вещества  $V_{li}$ .

В результате применения методики [5] были определены значения фундаментального параметра  $\beta$  для пучков ионизированных атомов периодической системы элементов от водорода до урана. Они приведены в табл. 1 и представлены на рис. 1. Отметим некоторые особенности полученных результатов. Во-первых, для пучка ионов водорода величины  $z_{\text{eff}}$  и  $z$  всегда тождественны и равны одному заряду электрона. Виртуально это соответствует большим значениям параметра  $\beta \geq 30$  в формуле (2). Во-вторых, для пучка  $\alpha$ -частиц величина  $\beta$  пусть функционально слабо, но зависит от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов атома как:

$$\beta = 0.805 + 0.25 \exp \left[ - \frac{\left( 4.25 - \frac{V_0}{V_{li}} \right)^2}{1.2211} \right] \quad (3)$$

при  $1.55 \leq V_0 < 4.25$ ,

и

$$\beta = 1.055 \text{ при } V_0 \geq 4.25.$$

В-третьих, начиная с лития фундаментальный параметр  $\beta$  фиксирован для каждого элемента периодической системы. Его величина не зависит от свойств облучаемого ионами образца. Это существенно упрощает проведение расчетов  $z_{\text{eff}}$  и  $S_e$  по формулам (2) и (1). Возрастание электрического заряда ядер ионов в ряду от лития до титана сопровождается монотонным снижением параметра  $\beta$ . Для ионов с атомным номером  $Z \geq 14$  значения параметра  $\beta$  могут быть аппроксимированы простым выражением:

$$B = \exp(-z^\gamma), \quad (4)$$

где  $\gamma = 0.26[1 - \exp(-0.183z)]$  при  $14 \leq z < 22$  и  $\gamma = 0.26$  при  $z \geq 22$ . И наконец, формула для расчета равновесного заряда пучка ионов, когда отношение  $V_0/V_{li} \leq 1.55$ :

$$z_{\text{eq}} = z_{\text{eff}} = z[1 - \exp(-1.55\beta)]. \quad (5)$$

### АПРОБАЦИЯ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные значения параметров  $\beta$  были использованы при проведении модельных расчетов тормозной способности ряда веществ со стабиль-

**Таблица 1.** Значения параметра  $\beta$ 

№	Элемент	$Z$	$\beta^{\text{exp}}$	$\beta^{\text{calc}}$
1	H	1	—	—
2	He	2	0.805–1.055	
3	Li	3	0.430	0.3240
4	Be	4	0.353	0.3000
5	B	5	0.300	0.2770
6	C	6	0.266	0.2560
7	N	7	0.240	0.2370
8	O	8	0.230	0.2200
9	F	9	0.220	0.2050
10	Ne	10	0.220	0.1915
11	Na	11	0.200	0.1800
12	Mg	12	0.180	0.1690
13	Al	13	0.165	0.1600
14	Si	14	0.150	0.1520
15	P	15	0.144	0.1450
16	S	16	0.137	0.1380
17	Cl	17	0.130	0.1320
18	Ar	18	0.129	0.1270
19	K	19		0.1225
20	Ca	20	0.124	0.1180
21	Sc	21		0.1100
22	Ti	22	0.110	0.10713
23	V	23		0.10440
24	Cr	24	0.101	0.01018
25	Mn	25	0.100	0.09934
26	Fe	26		0.09702
27	Co	27		0.09481
28	Ni	28	0.101	0.09271
29	Cu	29	0.086	0.09071
30	Zn	30		0.08880
31	Ga	31		0.08698
32	Ge	32	0.085	0.08524
33	As	33		0.08357
34	Se	34		0.08197
35	Br	35	0.08	0.08043
36	Kr	36	0.08	0.07896
37	Rb	37		0.07754
38	Sr	38		0.07617
39	Y	39		0.07485
40	Zr	40		0.07358
41	Nb	41		0.07235
42	Mo	42		0.07117
43	Tc	43		0.07003
44	Ru	44		0.06892
45	Rh	45		0.06785
46	Pd	46		0.06681

*Окончание таблицы*

№	Элемент	$Z$	$\beta^{\text{exp}}$	$\beta^{\text{calc}}$
47	Ag	47	0.070	0.06580
48	Cd	48		0.06483
49	In	49		0.06388
50	Sn	50		0.06296
51	Sb	51		0.06207
52	Te	52		0.06120
53	I	53	0.063	0.06036
54	Xe	54	0.062	0.05954
55	Cs	55		0.05874
56	Ba	56		0.05796
57	La	57		0.05721
58	Ce	58		0.05647
59	Pr	59		0.05575
60	Nd	60		0.05505
61	Pm	61		0.05437
62	Sm	62		0.05370
63	Eu	63		0.05305
64	Gd	64		0.05242
65	Tb	65		0.05180
66	Dy	66		0.05119
67	Ho	67		0.05060
68	Er	68		0.05002
69	Tm	69		0.04945
70	Yb	70		0.04890
71	Lu	71		0.04835
72	Hf	72		0.04782
73	Ta	73		0.04730
74	W	74		0.04680
75	Re	75		0.04630
76	Os	76		0.04581
77	Ir	77		0.04533
78	Pt	78		0.04486
79	Au	79	0.0438	0.04440
80	Hg	80		0.04395
81	Tl	81		0.04351
82	Pb	82	0.0425	0.04308
83	Bi	83		0.04265
84	Po	84		0.04223
85	At	85		0.04182
86	Rn	86		0.04142
87	Fr	87		0.04102
88	Ra	88		0.04064
89	Ac	89		0.04026
90	Th	90		0.03988
91	Pa	91		0.03951
92	U	92	0.040	0.03915

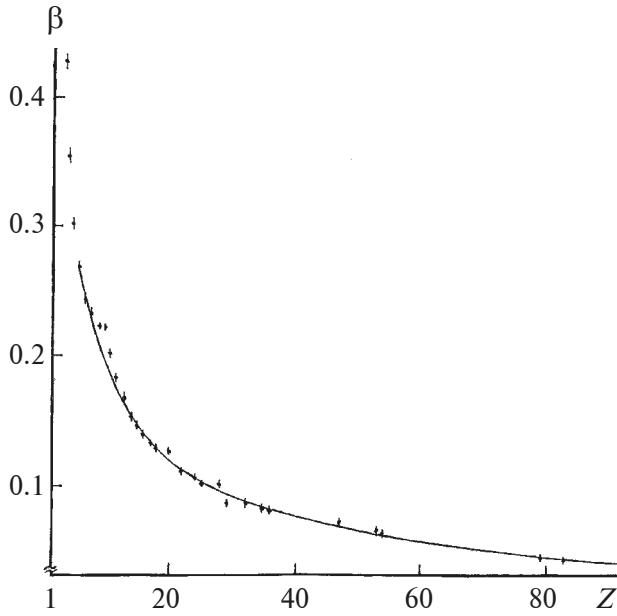


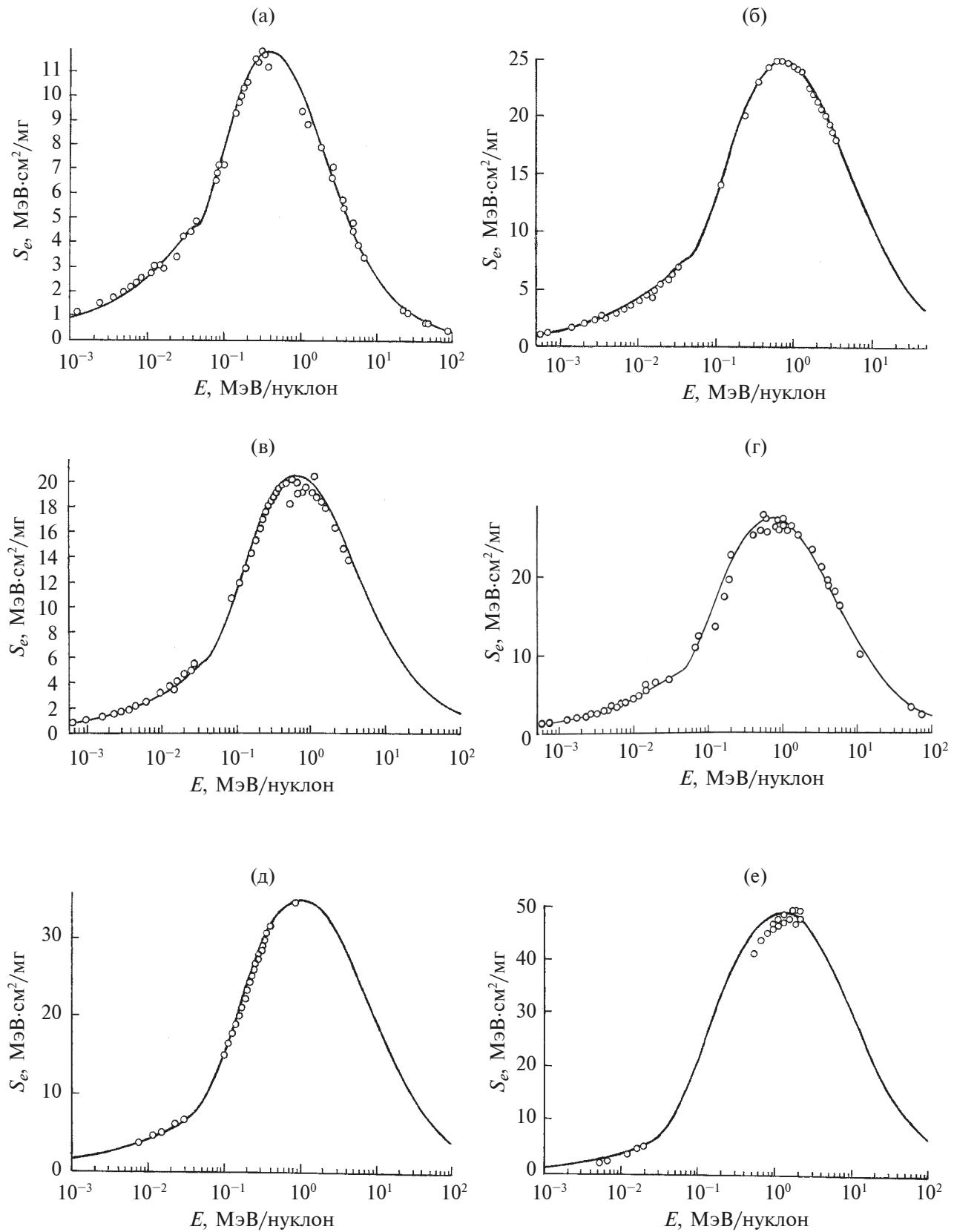
Рис. 1. Зависимость параметра  $\beta$  от атомного номера элемента: сплошная кривая — расчет по формулам работы; точки — данные экспериментальной апробации.

но прогнозируемыми значениями параметра  $\epsilon_{l_i}$  по формулам (1)–(5) для пучков ионизированных атомов периодической системы элементов от кислорода до урана. Результаты сравнения рассчитанных функциональных распределений  $S_e = f(E_0)$  с экспериментальными данными из известной компиляции [8] Х. Пауля приведены на рис. 2–4. Видно, что наблюдается их хорошее взаимное соответствие. Поэтому для каждой выбранной энергии  $E_0$  ионного пучка и при известном значении  $\epsilon_{l_i}$  материала мишени формулы (1)–(5) дают решение прямой задачи расчета тормозной способности одноЭлементной мишени. Более того, предлагаемый подход позволяет на основе сопоставления расчетов с экспериментальными данными проводить оценку качества примесно-дефектной структуры материала мишени. Так, на рис. 3 приведены данные двух серийных измерений тормозной способности алюминия для пучка ионов серебра, взятые из [17, 18]. Эти экспериментальные результаты хорошо соотносятся с приведенными рассчитанными распределениями  $S_e = f(E_0)$ , полученными для значений энергии связи электронов  $\epsilon_{l_i} = 11.5$  и  $12.5$  эВ соответственно. Напомним, что в случае высокочистых пленок алюминия  $\epsilon_{l_i} \approx 6.0$  эВ [9] и в зависимости от качества примесно-дефектной структуры материала она может находиться в диапазоне  $6.0$ – $14.0$  эВ [9]. Из рисунка видно, что изменение параметра  $\epsilon_{l_i}$  всего на 1 эВ приводит к снижению максимального значения тормозной способности вещества и к смещению этого максимума в сторону больших энергий. Это позволяет объяснить

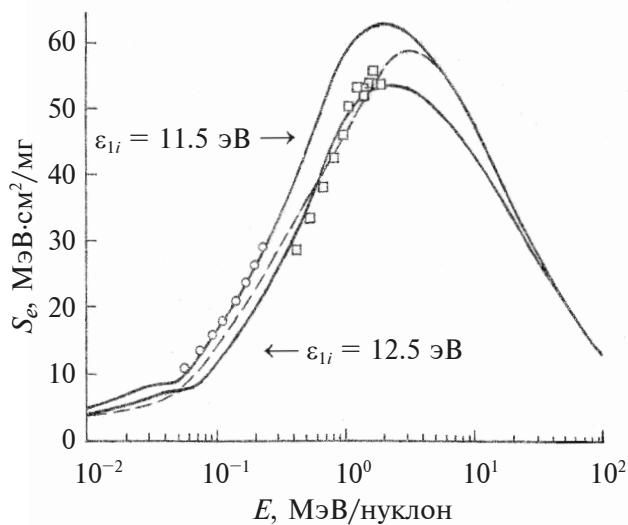
наблюдаемое различие двух серийных измерений тормозной способности алюминия простым различием качества примесно-дефектной структуры использованных алюминиевых мишеней, а также дает основание отметить корректность и качество выполненных экспериментальных измерений внутри каждой серии, поскольку эти различия не связаны с реальным разбросом измерений. Для сравнения возможностей предлагаемого подхода с широко используемыми в настоящее время программами SRIM [19] на рис. 3 пунктирной линией обозначено приведенное в [8] распределение тормозной способности, предлагаемое программой SRIM 2003, версия 2003.10. Оно анонсировано “как новый теоретический расчет тормозной способности тяжелых ионов при низких энергиях”. Из-за равнодаленности в области низких энергий ионов серебра этого распределения от экспериментальных значений  $S_e$  следует, что имеет место простое полуэмпирическое усреднение имеющихся экспериментальных данных. Очевидно, что применение данных о  $S_e$  из такого распределения для практических приложений будет автоматически приводить к введению неопределенных и непредсказуемых погрешностей в итоговый результат.

## ВЫВОДЫ

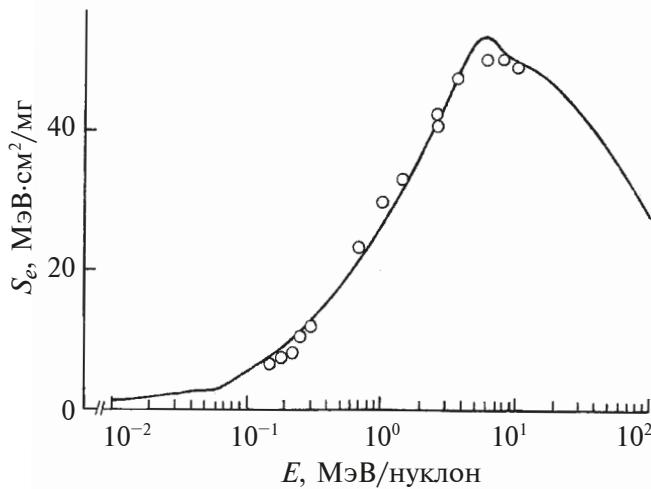
Разработана новая методика учета зарядового состояния  $z_{\text{eff}}$  для пучков ионизированных атомов периодической системы элементов средних и низких энергий. Предложены формулы для расчета  $z_{\text{eff}}$ , определяющие его функциональную зависимость от отношения скорости ионов пучка к минимальной скорости слабосвязанных электронов ( $V_0/V_{l_i}$ ) вещества мишени. Установлено равновесное зарядовое состояние  $z_{\text{eq}}$  для пучка ионов, когда отношение  $(V_0/V_{l_i}) \leq 1.55$ . Определены значения базовых параметров  $\beta$  и  $z_{\text{eq}}$ , характеризующие зависимость тормозной способности вещества для всех ионизированных атомов периодической системы элементов от их скорости в широком диапазоне энергий. На этой основе выполнены модельные расчеты тормозной способности  $S_e$  ряда элементов для направленных пучков ионов средней и низкой энергии и проведена их апробация в результате сопоставления расчетов тормозной способности с массивом экспериментально измеренных величин. Показано, что использование предложенной методики, основанной на учете зависимости зарядового состояния ионов пучка от отношения скорости ионов к минимальной скорости электронов вещества, позволяет проводить расчеты тормозной способности  $S_e$  вещества для ионов средних и низких энергий адекватно экспериментальным результатам.



**Рис. 2.** Тормозная способность  $S_e$  углерода для пучка ионов кислорода (а), кремния (б), хлора (в), аргона (г), хрома (д), германия (е): сплошная кривая — расчет по формулам работы; точки — измерения [8] и [11] (а), [12] (б), [13] (в), [14] (г), [15] (д), [16] (е).



**Рис. 3.** Тормозная способность  $S_e$  алюминия для пучка ионов серебра: сплошная кривая — расчет по формулам работы; кружки — измерения [17]; квадраты — [18]; штриховая линия — данные программы SRIM 2003 [19].



**Рис. 4.** Тормозная способность  $S_e$  золота для пучка ионов урана: сплошная кривая — расчет по формулам работы; точки — измерения [8, 20].

## ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ “Курчатовский институт”.

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- ICRU Report 73. Stopping of Ions Heavier Than Helium. International Commission on Radiation Units and Measurements. 2005.
- ICRU Report 49. Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles. International Commission on Radiation Units and Measurements. 1993.
- Van Gastel R., Hlawacek G., Zandvliet H.J.W., Poelsema B. // Microelectron. Reliab. 2012. V. 52. № 9–10. P. 2104.  
<http://doi:10.1016/j.microrel.2012.06.130>
- Cruz S.A. // Radiat. Eff. 1986. V. 88. P. 159.  
<https://doi.org/10.1080/00337578608207480>
- Mихеев Н.Н., Безбах И.Ж. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейtron. исслед. 2023. № 1. С. 20.  
<https://doi.org/10.31857/S1028096023010168>
- Mихеев Н.Н., Безбах И.Ж. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейtron. исслед. 2024. № 3. С. 72.  
<https://doi.org/10.26201/Surf.2024.3.72>
- Betz H.D., Hortig G., Leischner E., Schmelzer Ch., Stadler B., Weihrauch J. // Phys. Lett. A. 1966. V. 22. P. 643.  
[https://doi.org/10.1016/0031-9163\(66\)90690-1](https://doi.org/10.1016/0031-9163(66)90690-1)
- Paul H. IAEA. NDS.  
<http://www-nds.iaea.org/stopping>
- Mихеев Н.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейtron. исслед. 2010. № 4. С. 25.
- Mихеев Н.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейtron. исслед. 2022. № 3. С. 94.  
<https://doi.org/10.31857/S1028096022030141>
- Ormrod J.H., Duckworth H.E. // Can. J. Phys. 1963. V. 41. P. 1424.  
<https://doi.org/10.1139/p63-142>
- Fastrup B., Hvelplund P., Sautter C.A. // K. Dansk. Videnskab. Selskab Mat.-Fys. Medd. 1966. V. 35. № 10.
- Booth W., Grant I.S. // Nucl. Phys. 1965. V. 63. P. 481.  
[https://doi.org/10.1016/0029-5582\(65\)90478-5](https://doi.org/10.1016/0029-5582(65)90478-5)
- Ormrod J.H., Mac Donald J.R., Duckworth H.E. // Can. J. Phys. 1965. V. 43. P. 275.  
<https://doi.org/10.1139/p65-025>
- Zhang Y. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2002. V. 196. P. 1.  
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(02\)01246-6](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(02)01246-6)
- Hvelplund P., Fastrup B. // Phys. Rev. 1968. V. 165. P. 408.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.165.408>
- Abdesselam M., Stoquert J.P., Guillaume G., Haga-ali M., Grob J.J., Siffert P. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1991. V. 61. P. 385.  
[https://doi.org/10.1016/0168-583X\(91\)95310-A](https://doi.org/10.1016/0168-583X(91)95310-A)
- Ribas R.V., Seale W.A., Rao M.N. // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. P. 3234.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.28.3234>
- Ziegler J.F. SRIM: the Stopping and Range of Ions in Matter ([www.srim.org](http://www.srim.org)).
- Brown M.D., Moak C.D. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. P. 90.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.90>

## Dependence of the Charge State of Ions of a Periodic System of Elements on the Velocity of Charged Particles

N. N. Mikheev<sup>1,\*</sup>, I. Zh. Bezbakh<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Shubnikov Institute of Crystallography, Kurchatov Complex of Crystallography and Photonics,  
National Research Centre “Kurchatov Institute”, Kaluga, 248033 Russia*

\*e-mail: kmikran@spark-mail.ru

The results of solving the problem of describing the dependence of the charge state of the ion beam on their velocity for all atoms of the periodic system of elements are presented. The values of the basic parameters that are necessary for calculating the charge state of the ion beam are determined and tested by comparing the calculations of the stopping power with an array of experimentally measured values.

**Keywords:** directed beam of monoenergetic ions, multiple inelastic scattering, stopping power of matter, charge state of an ion beam.