تأثير الاضمحلال على قدرة إيقاف ايون الكاربون الساقط على الأهداف الصلبة (Au,C,Al) عند السرع الواطئة والعالية

معتز زامل محمد كلية العلوم / جامعة القادسية

الخلاصة:

لقد تم أجراء دراسة نظرية حول بيان تأثير الاضمحلال على قدرة إيقاف ايون الكاربون الثقيل الساقط على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) عند السرع الواطئة a.u (0.4,0.7,1) والسرعة العالية a.u(13,16.19)، وقد اعتمد التقريب العشوائي للطور وقطب البلازمون التقريبي لهذا الغرض. وعملت مقارنة لقدرة الإيقاف عند وجود الاضمحلال ($\gamma > 0$) وعند إهماله ($\gamma \to 0$) . حيث وجد ان قدرة الإيقاف تبقى ثابتة عند إهمال الاضمحلال ($\gamma \to 0$)، لكن الاضمحلال يُزيد من قدرة الإيقاف للايونات عند أخذه ($\gamma > 0$).

Abstract

Theoretical study is performed about effect of damping on the Stopping power for carbon ion incident on the solid target (Au, C, Al) at some low velocities (0.4,0.7,1) and some high velocities (13,16,19) a.u.. The Random Phase Approximation (RPA) and Plasmon-pole Approximation were dependent in the present work. A comparison is done on the stopping power under damping ($\gamma > 0$) and when it ignored ($\gamma \to 0$). We fond that stopping power remains constant when the damping is neglected. But increases the stopping power under damping ($\gamma > 0$).

المقدمة:

تعرف قدرة الإيقاف على انها الطاقة المفقودة لوحدة المسار للجسيمات حيث تعمل هذه الجسيمات على استقطاب ذرات الوسط، ويمكن اخذ دالة العزل بالاعتماد على نوع الاستقطاب الذي تحدثه هذه الجسيمات عند كل منطقة من مناطق السرعة، تعتبر قدرة الإيقاف من أهم العوامل التي تحدد عمليات فقدان الطاقة (Energy Loss)، وتكون هذه العمليات معقدة بسبب تأثير تغير الشحنة الذي يسبب تذبذب في مستوى الشحنة [١].

من الطرائق المهمة لوصف تفاعل الايونات مع الأهداف الصلبة هي صيغة العزل، وذلك باستخدام صيغ عزل مختلفة منها دالة عزل Lindhard والمعتمدة على التردد (ω) والزخم (K) وبيان تأثير عامل الاضمحلال عليها والذي يعمل ضد الجسيمات المتفاعلة، حيث يزيد من تفاعل الجسيمات بين الايونات الساقطة والأهداف الصلبة.

لدراسة قدرة الإيقاف تم صياغة دالة عزل Lindhard فمن خلال هذه الدالة يمكن وصف تفاعلات الايونات السريعة والجسيمات المشحونة المارة خلال المعدن ودراسة تأثير

مختلف العوامل على الطاقة المفقودة عند مناطق السرعة الواطئة والعالية [٢].

لدراسة تأثير الاضمحلال على قدرة الإيقاف نستخدم تقريبات مختلفة منها التقريب العشوائي [Random Phase Approximation (RPA)][٣] وتقريب قطب

البلازمـــــون [Plasmon-pole Approximation (PLA)][٤]، فعند إسقاط الجسيمات الثقيلة على مادة الهدف فأنها تسلك مساراً مستمراً ينتهي عند النقطة التي تفقد فيها الجسيمة كل طاقتها.

الأساس النظري:

i- قدرة الإيقاف (Stopping Power):

ان قدرة الإيقاف تمثل معدل الطاقة المفقودة لوحدة المسار (-dE/dx) حيث (E) تمثل الطاقة المفقودة، (x) طول المسار. [٥] تحسب قدرة الإيقاف S وفقاً للنظرية الخطية للجسيمات المشحونة باستخدام الصيغة التالية [٢].

$$S=\frac{2Z_1^2}{\pi v^2}\int_0^{\infty}\frac{dk}{k}\int_0^{kv}\omega d\omega\,\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right] \qquad (1)$$

حيث تمثل Z_1 العدد الذري للايون الساقط ، v سرعة الايون الساقط ، ϵ تمثل دالة لكل من العدد الموجي (k) والتردد (ω)

ii- الايونات البطيئة والايونات السريعة:

الايونات البطئية هي الايونات التي تكون سرعتها اقل او مقاربة من سرعة فيرمي ($v \le v_f$) حيث ان سرعة فيرمي ($2.18x10^6$)،[٦] ان قيم توزيع الطاقة المفقودة للايونات البطيئة قد تم وضعها من قبل (Lindhard 1950) [٧].

اما في نموذج (Fermi-Thomas) للغاز الالكتروني نجد ان الايونات المتحركة بسرعة اقل بكثير من سرعة ($v \le v_f$) تكون محاطة بجهد، يتم حسابه باستخدام دالة العزل التي تحتوي على الطور العشوائي التقريبي (RPA) الذي يتضمن الاضمحلال في دالة العزل [٥].

إما الايونات السريعة فتكون سرعتها اكبر من سرعة فيرمي والتي قيمتها ($2.18x10^6$) ($v \ge v_f$)، وتكن الجسيمات المشحونة السريعة محتثة بسبب عمليات الإثارة للهدف الذري، مما يسبب في تولد جهد محتث ناتج عن تفاضله قوة موقفة وقوة جانبية.[٥]

ان الوسط الحساس يمكن وصفه بوساطة الايونات السريعة والطاقة المفقودة للقذائف بالاعتماد على النظرية الخطية[٨]، وكذلك يمكن دراسة الطبيعة الفيزيائية للمواد الصلبة والتي تقود الى خصائص الطاقة المفقودة المفسرة على أساس تفاعل كولوم الحاصل بين الالكترونات، ويتم حساب الطاقة المفقودة للايونات السريعة باستخدام صيغ متطورة لدوال العزل (Dielectric Functions)[٣].

تعتمد دوال العزل على نوع الاستقطاب الذي تحدثه الذرات داخل الهدف، وهذا الاستقطاب ينتج عن تغير في مواقع الشحنة، حيث تقع الشحنة الموجبة بدلاً من الشحنة السالبة، كذلك امتلاك الجزيئات الى زخم مزدوج يساعد على عملية الاستقطاب[٩].

iii- الجزء الخيالي في دالة العزل:

يمثل الجزء الخيالي ($\mathrm{Im}(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)})$) او ما يسمى بدالة الفقد (Loss function) في دالة العزل ثابت العزل لالكترونات التكافؤ في المواد الصلبة ويعرف كزخم متحول (k) وطاقة متحولة يحدث فيها التشتت الأحادي غير المرن [٩]

يستخدم الجزء الخيالي في دالة العزل تبعاً لنوع الاستقطاب الذي يحدثه الايون الساقط على الهدف. ان وجود الجزء الخيالي ($-1/\varepsilon(k,\omega)$) في دالة العزل مهم جداً وذلك لما يحويه من معلومات مفصلة عن مستويات الطاقة لالكترونات التكافؤ في المواد الصلبة [٢].

iv-الاضمحلال ودالة العزل:

عامل الاضمحلال يمثل معدل الاضمحلال للكم البلازمي الناتج من تضارب في عدد الجسيمات المحفوظة عند نقطة معينة [١٠].
تحدث عملية الاضمحلال في المعادن وهي بذلك تسمح باستخدام تقريبات تتضمن معامل الاضمحلال كما في دالة عزل Lindhard والتي تعتمد على عدد الالكترونات المحفوظة.

ان عامل الاضمحلال يكون ضمن الكثير من التقريبات المستخدمة في حساب الإيقاف، كما أظهرت التجارب ان وجود الاضمحلال يزيد من قدرة الإيقاف الالكترونية بنسبة (٢٥%-١٥%) مما لو أهمل [11,12].

v- الطور العشوائي التقريبي Random phase approximation (RPA):

يستخدم الطور العشوائي التقريبي في دالة العزل عند السرع الواطئة للايونات.[6] ان دالة عزل Lindhard والتي تمثل استجابة الوسط باستخدام (RPA) تعطى بالمعادلة أدناه [١٣].

$$\varepsilon(\omega)=1-\frac{\omega_p^2}{\omega(\omega+i\gamma)}\ ,\ \gamma\to 0 \qquad (2)$$

كما ان الصيغة العامة لدالة العزل المطولة التي تتناسب مع دالة عزل Lindhard للسرع الواطئة ($v<v_f$) عند وجود الاضمحلال تعطى بالمعادلة الآتية -:[8]

$$\varepsilon(k,\omega)=1+\omega_p^2/\left\{s^2k^2\left[1-i\pi\omega\theta\left(2k_f-k\right)/2k_f v_f\right]-\omega(\omega+i\gamma)\right\} \qquad (3)$$

$s=v_f/\sqrt{3}$ تمثل السرعة المبطئة، w_p التردد البلازمي للوسط، k_f زخم فيرمي، $\theta(2k_f-k)$ تمثل دالة للزخم المحسوب.

vi- قطب البلازمون التقريبي:

وضع هذا التقريب من قبل Brandt and Kitagawa-1979 حيث يستخدم هذا التقريب عندما تكون سرعة الايونات الساقطة عالية ($v\geq v_f$)، أي عندما تكون الايونات الساقطة قادرة على اثارة الوسط. ان دالة العزل تحتوي على التقريب (PLA) هي كالأتي [14] ، [15]

$$\varepsilon(k,\omega)=1+\frac{\omega_p^2}{\omega_g^2+\beta^2k^2+k^4/4-\omega(\omega+i\omega)} \qquad (4)$$

حيث ان $\beta=\sqrt{3/5}v_f$ تمثل سرعة انتشار كثافة الاضطراب في الغاز الالكتروني ($k^2/4$) تمثل الطاقة الحركية، (threshold velocity = v_{thr}) تمثل سرعة العتبة، w_g تمثل تردد فجوة الطاقة.

وبعد اشتقاق معادلة الإيقاف وذلك بالاعتماد على قطب البلازمون التقريبي (RPA) نصل إلى الجزء الخيالي.

$$\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right)=(\pi\omega_p^2/2A)\delta(\omega-A) \qquad (5)$$

δ (w-A) تمثل دالة ديراك

النتائج والحسابات النظرية:

1- الإيقاف عند السرع الواطئة:

لدراسة تأثير الاضمحلال للأيونات الثقيلة مثل ايون الكاربون والتي تكون سرعتها اقل من سرعة فيرمي ($v<v_f$) قمنا بقصف الأهداف (Au,C,Al) والتي أنصاف أقطارها (1.49,1.66,2.12) بأيون الكاربون، حيث تكون سرعة الايون الساقط اقل من سرعة الالكترونات داخل الأهداف، باعتماد الطور العشوائي التقريبي (RPA) واستخدام دالة العزل المناسبة وحلها رياضياً ثم برمجتها و حساب تأثير الاضمحلال وكما يلي.

A- حساب الإيقاف عند إهمال الاضمحلال $\gamma\to 0$:

عند إهمال الاضمحلال دالة العزل المناسب استخدامها عند هذه الحالة هي

$$\varepsilon(k,\omega)\approx\varepsilon_1(k)+i\varepsilon_2(k) \qquad (6)$$

حيث تحل المعادلة أعلاه رياضياً وذلك بقلبها وأخذ المرافق لها، ثم فصل الجزء الحقيقي عن الجزء الخيالي. يتم إهمال الجزء الحقيقي واخذ الجزء الخيالي وهو

$$\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right)=\frac{2k\omega}{\left(k^2+k_D^2\right)^2} \qquad (7)$$

حيث ω تمثل التردد، k الزخم، $k_D=4k_f^2/\pi$ وبتعويض معادلة (٧) في معادلة الإيقاف (١) للجسيمات المشحونة المفردة.

$$S=\frac{dE}{dx}=\frac{2}{\pi v^2}\int_0^{2k_f}\frac{dk}{k}\int_0^{kv_1}d\omega\,\omega\,\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right) \qquad (8)$$

حيث v تمثل السرعة.

وبحل المعادلة أعلاه رياضياً وباعتماد التكاملات الجاهزة نحصل على معادلة الإيقاف عند إهمال الاضمحلال [٣].

$$S=\frac{2Z_1^2 v}{3\pi}\left[\ln\left(1+\frac{\pi}{\alpha r_s}\right)-\frac{1}{\left(1+\alpha r_s/\pi\right)}\right] \quad (9)$$

حيث $\alpha=\left(4/9\right)^{1/3}$ ، r_S = نصف قطر الأهداف، Z_1 = العدد الذري للأيون الساقط

B- حساب الإيقاف تحت تأثير الاضمحلال $\gamma > 0$:

لدراسة الإيقاف تحت تأثير الاضمحلال للأيونات الثقيلة، يتم استخدام دالة العزل المقترحة من قبل (Ferrell)[٦] باعتماد الجزء الخيالي في المعادلة التالية وتعويضها في معادلة الإيقاف (١) نحصل على:

$$\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right)=\frac{-1}{1+\omega_p^2/\left\{s^2k^2\left[1-i\pi\omega\vartheta\left(2k_f-k\right)/2kv_f\right]-\omega(\omega+i\gamma)\right\}} \quad (10)$$

$$S=\frac{2Z_1^2}{\pi v_1^2}\int_0^{2k_f}\frac{dk}{k}\int_0^{kv}d\omega\omega\,\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right)=\frac{-1}{1+\omega_p^2/\left\{s^2k^2\left[1-i\pi\omega\vartheta\left(2k_f-k\right)/2kv_f\right]-\omega(\omega+i\gamma)\right\}} \quad (11)$$

حيث يتم حل المعادلة أعلاه عددياً باعتماد طريقة (Simpson or Gaussian).

٢- الإيقاف عند السرع العالية:

عند السرع العالية تكون الجسيمات الساقطة قادرة على اثارة الوسط البلازمي، اي عندما تكون سرعتها اكبر من سرعة فيرمي، وهو اقل حد لازم لإثارة الوسط البلازمي، التقريب المستخدم في هذه الحالة هو قطب البلازمون التقريبي (PLA) ضمن دالة العزل [٦].

A- حساب الإيقاف عند إهمال الاضمحلال $\gamma \to 0$:

يتم اشتقاق قطب البلازمون التقريبي المتمثل بالمعادلة (٤) وصولاً الى الجزء الخيالي

$$\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right)=\left(\pi\omega_p^2/2A\right)\delta(\omega-A) \quad (12)$$

بتعويض معادلة (١٢) في معادلة الإيقاف (١) وأجراء بعض التكاملات بالاعتماد على معادلة ديراك(δ (w-A نحصل على معادلة الطاقة المفقودة عندما ($\gamma \to 0$) للسرع العالية.

$$S=\frac{Z_1^2\omega_p^2}{v_1^2}\ln\left[2\left(v^2-\beta^2\right)\pm 2\left[\left(v^2-\beta^2\right)-\Omega_p^2\right]^{1/2}\right]^{1/2} \quad (13)$$

$$\Omega_p^2=\left(\omega_p^2+\omega_g^2\right)^{1/2},\quad \beta^2=\frac{3}{5}k_f^2,\quad \omega_p=\frac{3^{1/3}}{r_s^{3/2}}$$

B- حساب الإيقاف تحت تأثير الاضمحلال $\gamma > 0$:

لحساب الإيقاف تحت تأثير الاضمحلال نعتمد قطب البلازمون التقريبي والمستخدم عند السرع العالية، نشتق التقريب للحصول على الجزء الخيالي.

$$\mathrm{Im}=\left[\frac{-1}{\varepsilon(k,\omega)}\right]=\frac{\omega\gamma\omega_p^2}{\left[A^2-\omega^2\right]+\omega^2\gamma^2} \quad (14)$$

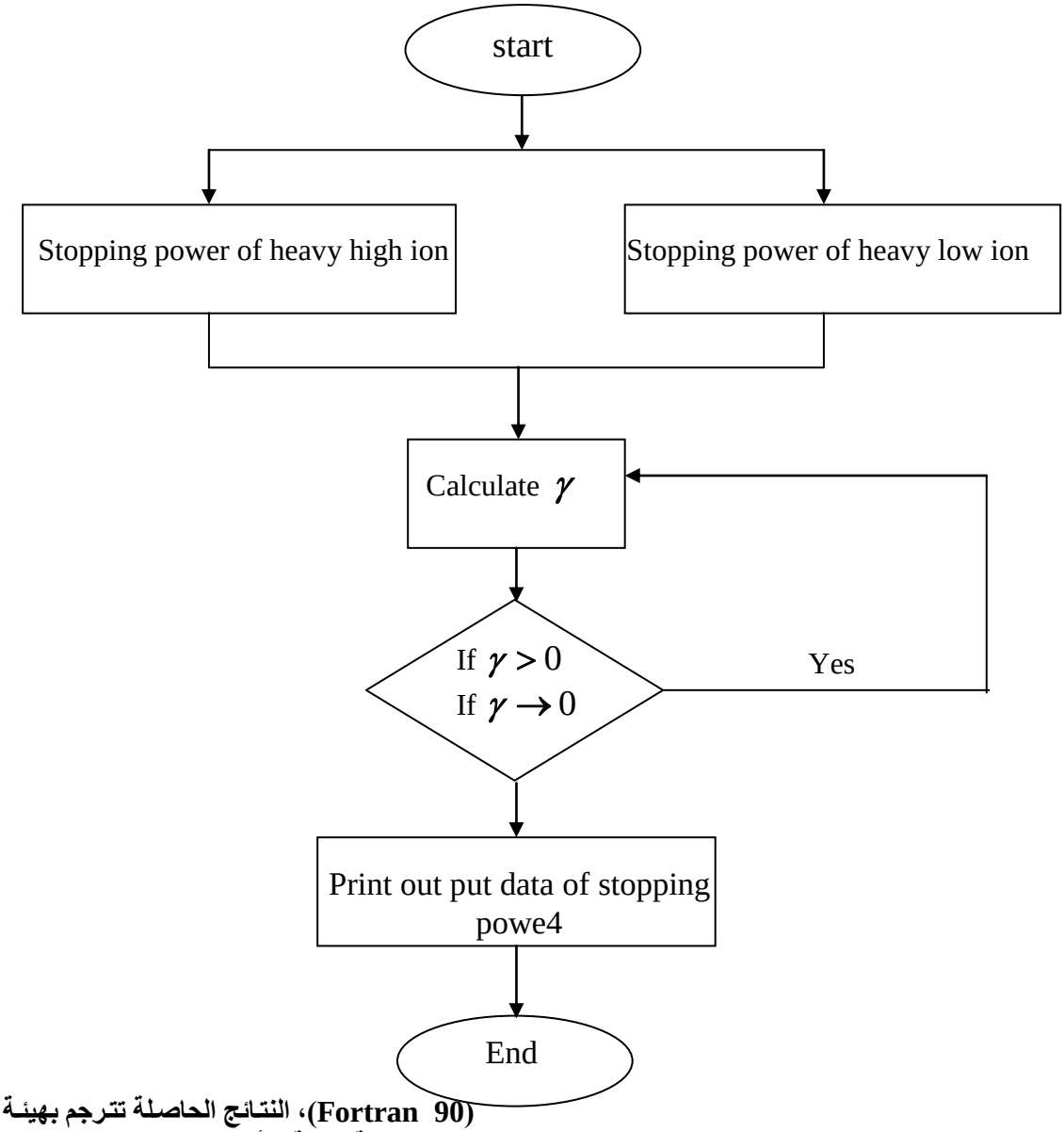
حيث ان ω_p التردد البلازمي للوسط

وبتعويض معادلة (١٤) في معادلة الإيقاف (١) نحصل على

$$S=\frac{Z_1^2}{\pi v_1^2}\int_0^{\infty}\frac{dk}{k}\int_0^{kv}\omega d\omega\frac{\omega\gamma\omega_p^2}{\left[A^2-\omega^2\right]+\omega^2\gamma^2} \quad (15)$$

يتم حل المعادلة اعلاه عددياً باستخدام برنامج (Fortran 90) باعتماد طريقة (Simpson or Gaussian). لحل التكاملات عددياً وبعد الحصول على النتائج يتم توضيحها بهيئة أشكال بيانية.

وفيما يلي مخطط للخوارزمية توضح البرنامج المستخدم للحصول على النتائج وذلك باعتماد برنامج (Fortran 90).



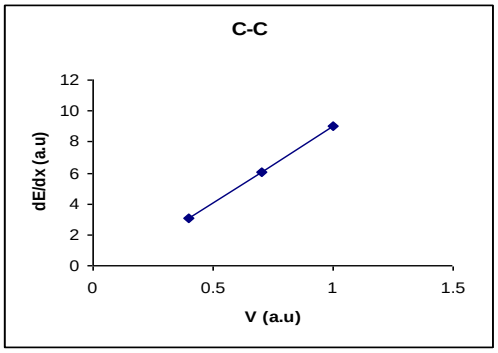
حيث يوضح المخطط أعلاه إيقاف الايونات الثقيلة عند السرع الواطئة والعالية وتأثير عامل الاضمحلال عليها. بالاعتماد على معادلة الطاقة العامة ونوع الاستقطاب الحاصل في كل حالة نشتق المعادلات وصولاً الى معادلات الإيقاف. تستخدم المعادلة (٨) للحصول على إيقاف الايون عند السرع الواطئة عندما ($\gamma \to 0$) والمعادلة (١١) لإيجاد إيقاف الايون عند السرع الواطئة عندما ($\gamma > 0$). اما عند السرع العالية فنستخدم المعادلة (١٣) عندما ($\gamma \to 0$) والمعادلة (١٥) عندما ($\gamma > 0$). ويتم برمجة المعادلات النهائية ضمن البرنامج التشغيلي (Fortran 90)، النتائج الحاصلة تترجم بهيئة اشكال بيانية مبينة تأثير عامل الاضمحلال على قدرة الإيقاف في كلا السرعتين.

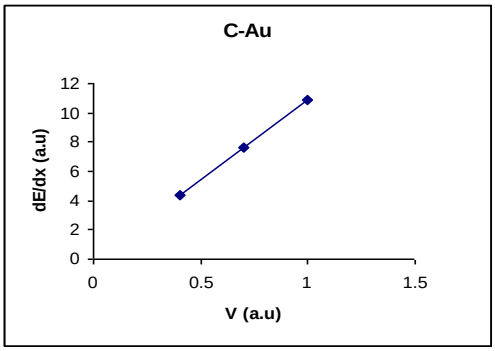
الشكلان (١،٢) يوضحان تغير قدرة الإيقاف لأيون الكاربون (C) الساقط على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) كدالة للسرعة، وبيان تأثير زيادة نصف قطر الأهداف على قدرة الإيقاف. نجد ان قدرة الإيقاف تزداد بزيادة السرعة للأيون الساقط وذلك بسبب التناسب الطردي بين قدرة الإيقاف والسرعة والموضح في المعادلة (٩). اما العلاقة بين قدرة الإيقاف ونصف القطر نجد ان الإيقاف يقل بزيادة نصف قطر الأهداف ويتناسب بشكل أسي (Exponential) وذلك بسبب زيادة عدد التصادمات لأيون الكاربون مع ذرات الأهداف المستخدمة وهي (Au, C, Al)، فيفقد ايون

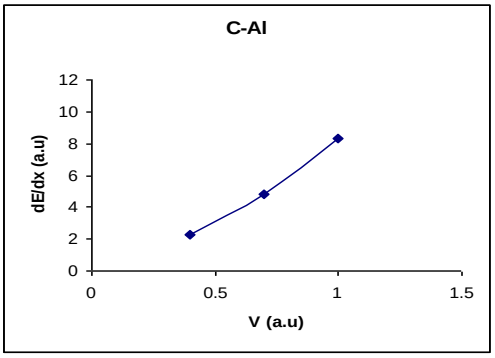
الكاربون جزء من طاقته بكل عملية تصادم مما يسبب في ايقافه.

اما عند مقارنة الشكل (١) والذي يمثل الإيقاف عند إهمال تأثير الاضمحلال والشكل (٢) الذي يمثل الإيقاف تحت تأثير الاضمحلال، نلاحظ اثر عامل الاضمحلال واضح في الإيقاف وذلك بسبب ظهوره في المعادلة (١١) واختفائه في المعادلة (٩) حيث يعمل ضد الجسيمات المتفاعلة ويبطء حركة الايون داخل الهدف مما يسبب في زيادة حركة الجسيمة داخل الهدف.

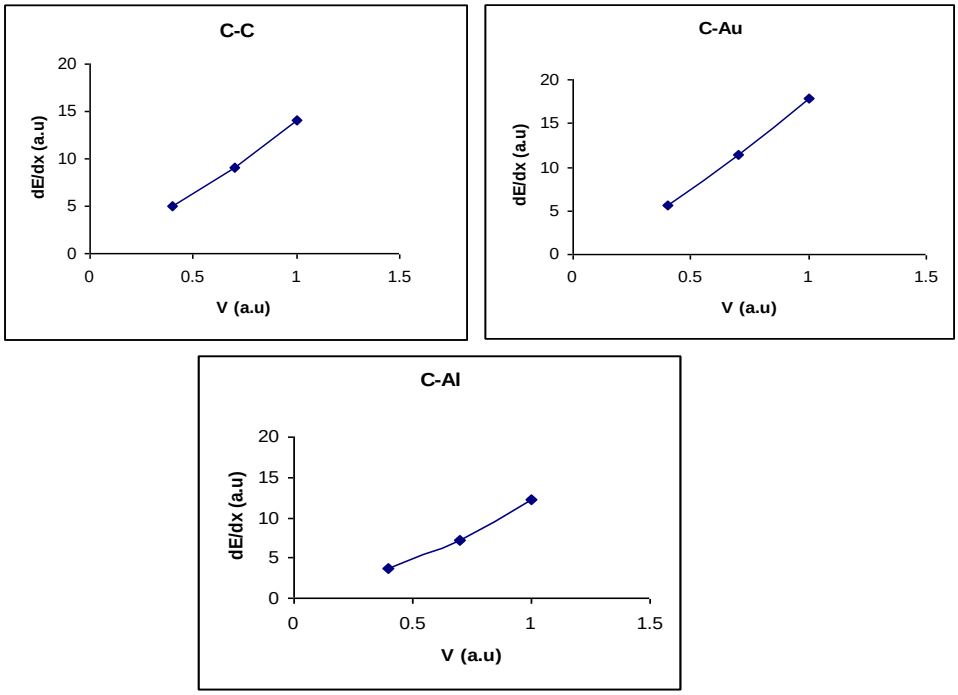
يدخل عامل الاضمحلال في الكثير من العمليات الفيزيائية كفقدان الطاقة، التطوح، المدى .....الخ.





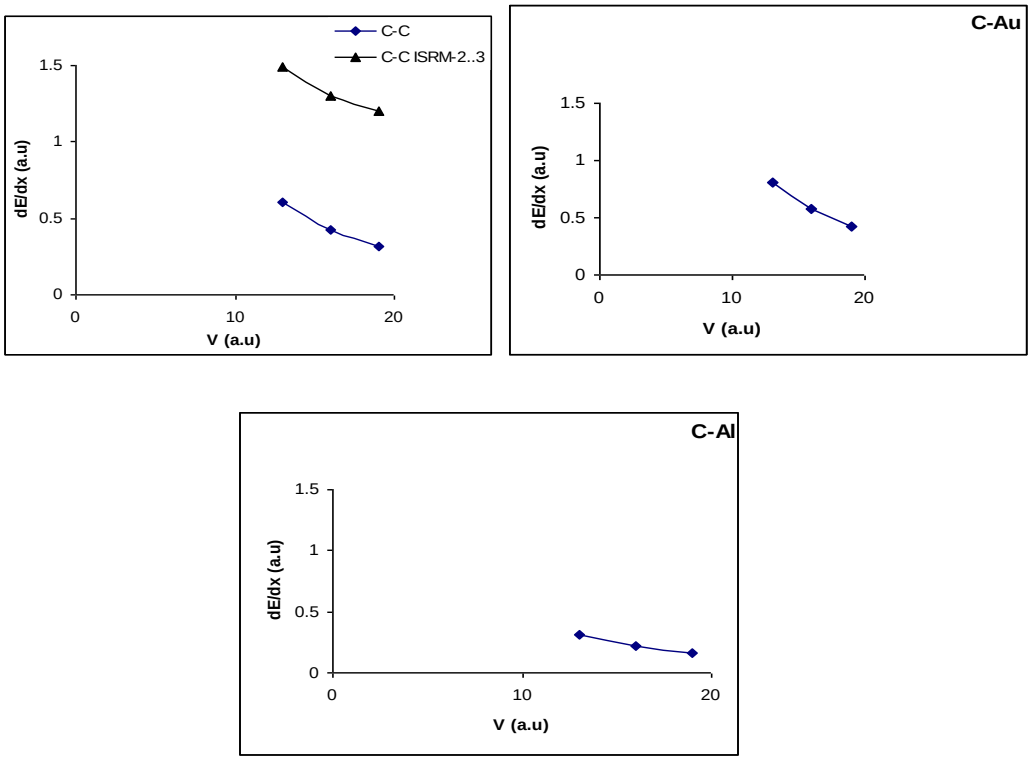


شكل (١) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف كدالة للسرع الواطئة عند تسقيط ايون الكاربون(C) على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) عند إهمال الاضمحلال (الاضمحلال يقترب او يساوي صفر).

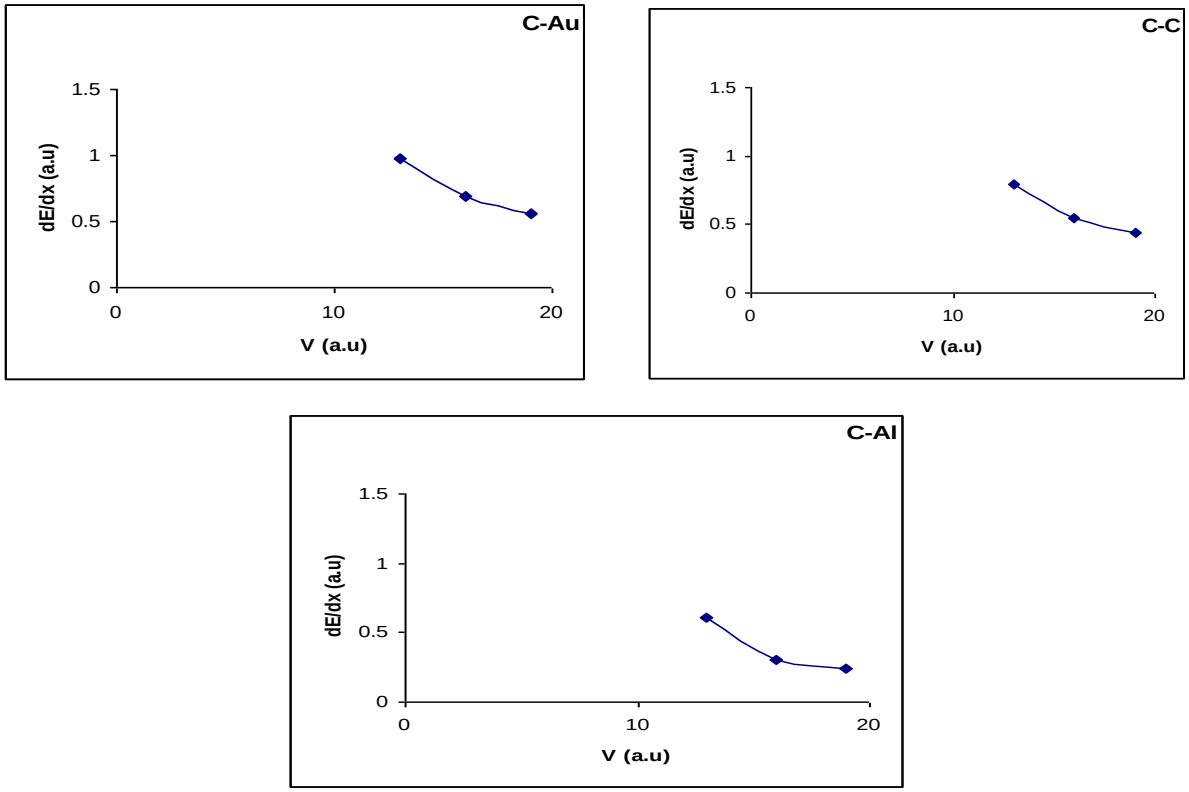


شكل (٢) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف كدالة للسرع الواطئة عند تسقيط ايون الكاربون (C) على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) تحت تأثير الاضمحلال (الاضمحلال اكبر من الصفر).

يوضح الشكل (٣) الإيقاف عندما ($\gamma \to 0$) والشكل (٤) الاضمحلال عندما ($\gamma > 0$). حيث تم اخذ قدرة الإيقاف لأيون الكاربون (C) الساقط على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) كدالة للسرع العالية، ان قدرة الإيقاف تقل عند زيادة (rs) والتي تمثل نصف قطر الايونات الساقطة وكما واضح من الإشكال، كما تزداد قدرة الإيقاف بزيادة العدد الذري للايون الساقط (Z1) حيث يساعد على اختراق اكبر للأيون الساقط، كما نلاحظ ان قدرة الإيقاف تزداد تحت تأثير الاضمحلال. كما يوضح الشكل (٣) مقارنة مع ISRm-2003 عند تسقيط ايون الكاربون على الكاربون وبيان تغير قدرة الإيقاف مع السرعة.[١٦]



شكل (3) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف كدالة للسرع العالية عند تسقيط ايون الكاربون (C) على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) عند اهمال الاضمحلال (الاضمحلال يقترب او يساوي صفر



شكل (٤) يوضح العلاقة بين قدرة الإيقاف كدالة للسرع العالية عند تسقيط ايون الكاربون (C) على الأهداف الصلبة (Au, C, Al) تحت تأثير الاضمحلال (الاضمحلال اكبر من الصفر).

References:

1. **M.Alducin,R.DiezMuino, "Nonlinear effects in the energy loss of a slow dipole in free-electrongas",Phys.Rev.A66,054901 (2002).**
2. **J,Lindhard, "Slowing down of ions".Proc.Roy.Soc:A311,11-19(1969).**
3. **J.Lindhard,K.Dan.Vidensk. Selsk. Mat. Fays.Medd.28, No.8(1954).**
4. **P.M.Echenique,R.H.Ritchie and W.Brandt, Phys. Rev.B20, 2567(1979).**
5. **J.Lindhardand Scharff,"Energy dissipation by ions in the KeV region".Phys.Rev.24,128(1961)**
6. **T.L.FerrellandR.H.Ritchie,"Energ y losses by slow ions and atoms in electronic excitation in solids".Phys.Rev.Vol.16,No.(1977).**
7. **E,Fermi and E.Teller, "The capture of Negative mesotrons inmatter", Phys.Rev. Vol.72,No .5(1947).**
8. **M.J.Puska,R.M.Nieminen, "Phaseshifts and cross section", Phys.Rev.B,Vol.27,No.101983).**
9. **P.M.Echeniqu and A.mazarro, "Charged-Particle wake in the random-phase approximation", Phys.Rev.B,Vol.7(1983).**
10. **J.C.AshleyandR.H.Ritchie, "The Influence of damping on the Mean Free path of low energy elections in an electron gas".Phys.Stat.Sol(B)83,K159 (1977).**
11. **R.AristaNestor,"Dynamical image potential and induced forces for charged particles moving parallel to solid surface", Phys.Rev.A,Vol.49,No .3(1994).**
12. **J.M.PitarkeandI.Campillo ,"Quadratic response theory for the interaction of charged particles with an electron gas",ScanningMicroscopy, Vol. 12 , No.1(1998).**
13. **M.Adyand B.Werner,"Material depenedenceofLow-velocity stoppingpower,"Phys.Rev. B, Vol. 24,No.9(1981).**
14. **D.Pines,Elementary Excitations in solids (Benjamin, New York) (1964).**
15. **H.Winter,J.I.Juaristiand I.Nagy , "Energy loss of slow ions in an a nonuniform electon gas, Phys. Rev.B67,245401(2003).**

16.J.F.Ziegler "The stopping of ions in matter", SRIM (2003).