

低能离子与物质相互作用中电子能损 微观机制的研究进展*

张丰收^{1,2,7)†} 付艳龙^{1,2,3)} 毛飞⁴⁾ 李长楷⁵⁾ 张超⁶⁾

(1) 射线束技术教育部重点实验室, 北京师范大学核科学与技术学院, 100875, 北京;

2) 辐射技术研究所, 北京市科学技术研究院, 100875, 北京;

3) 北京师范大学天文系, 100875, 北京; 4) 南华大学核科学技术学院, 421001, 湖南衡阳;

5) 北京大学物理学院, 100871, 北京; 6) 安徽理工大学材料科学与工程学院, 232001, 安徽淮南;

7) 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心, 530004, 甘肃兰州)

摘要 深入了解离子与物质的相互作用是研究材料抗辐照性能以及应用离子束技术的基础和关键。离子的能量沉积是导致材料辐照损伤的根本原因, 所以研究离子碰撞过程中的能损机制显得尤为重要。本文从离子与物质相互作用机制的研究背景和应用价值出发, 阐述了有关载能离子在材料中的电子阻止本领的微观机制, 总结了基于第一性原理分子动力学研究低速离子在材料中电子阻止本领的相关模型。回顾了国内外关于低能离子与物质相互作用中电子阻止本领及电子能损微观机制的理论和实验研究进展及发展趋势, 论述了近几年北京师范大学在有关电子能损微观机制方面所取得的研究成果。阐述了电荷转移、化学键状态以及内层电子激发等因素对电子能损影响的微观机制, 研究了在极低速度下电子阻止本领的阈值行为, 为离子束技术的应用和材料抗辐照性能的评估提供了理论依据。对未来的研究进行建议展望。

关键词 离子与物质相互作用; 电子能损; 电子阻止本领; 低能离子

中图分类号 O562.5

DOI: 10.12202/j.0476-0301.2022135

0 引言

从核能利用到太空探索, 除核反应堆的极端环境对材料产生辐照损伤外, 空间环境中也存在着大量的辐射离子, 银河系中大约有 83% 的质子和 13% 的 α 粒子, 对于航空航天器件而言也会受到这些空间离子的辐照。先进核能系统与核技术的不断进步, 对材料的抗辐照性能提出了新的挑战。载能离子与物质相互作用产生的能量沉积, 导致了材料的辐照损伤效应。对于低能离子而言, 其电子能损机制是交织复杂的, 厘清不同能损方式交互影响是阐明离子与物质相互作用机制的根本, 也是粒子物理和原子核物理研究领域的前沿和重点问题。

阻止本领定义为载能离子在材料中穿过单位距离所损失的能量, 表征了材料减速(或阻挡)离子的能力, 是描述离子与物质相互作用的一个非常重要的物理量, 可以用来预测和理解离子在物质中能量损失以

及辐照效应。随着加速器性能的不不断提升, 其在材料改性^[1]、生物医学^[2]、空间探索^[3]和核技术^[4]等领域都得到广泛的应用, 因此, 研究离子的阻止本领不仅具有重要的科学意义, 而且具有重大的应用价值。离子与靶电子之间的非弹性碰撞导致电子激发和电离, 以及与靶原子核之间的弹性碰撞产生晶格缺陷而损失的能量, 分别称为电子能损和核能损。入射离子在单位路径上的电子能损和核能损分别称为电子阻止本领(electronic stopping power, S_e)和核阻止本领(nuclear stopping power, S_n), 总称阻止本领 $S = -dE/dx$ 。离子作为能量和物质的载体, 在与靶材料碰撞过程中通过多种方式损失能量。离子与物质相互作用损失能量的方式如图 1 所示。离子辐照对材料有 2 个主要影响: 1) 产生吸收剂量; 2) 导致辐照缺陷。在离子与物质相互作用过程中, 电子能损与核能损并不是相互独立的存在, 离子的电子能损会通过电子-声子耦合效应传递给靶原子系统, 并导致原子晶格结构发生改变从

* 国家自然科学基金资助项目(12147159, 12135004, 11635003, 11961141004, 12105091, 12047513, 11975119)

† 通信作者: 张丰收(1966—), 男, 博士, 教授。研究方向: 重离子核物理、重离子与物质相互作用微观机制、射线束技术及应用、材料辐照损伤和辐射育种。E-mail: fszhang@bnu.edu.cn

收稿日期: 2022-04-29

而形成辐照缺陷. 因此, 分析电子能损对辐照缺陷的形成和演化过程至关重要. 本团队通过采用双温度模型研究了离子辐照碳化硅和碳纳米管的动力学演化过程, 并分析了电子-离子耦合效应对辐照缺陷的形成机制的影响^[5-8].

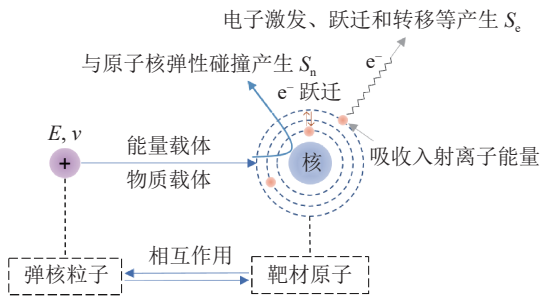


图 1 离子与物质相互作用中能量损失的示意

离子的 S_e 与入射离子类型、靶材料的晶格结构和电子结构有关. 在晶体材料中, S_e 对于离子的入射方向有一定的依赖性. 如果把阻止本领看作在原子尺度上发生的相互作用, 特别是由连续或同时的多体库仑碰撞的集合^[9], 那么这种方向依赖性是很容易被理解的. 此外, S_e 对入射离子有一定的方向依赖性, 这主要归因于靶材料晶体结构的各向异性.

从早期 S_e 的经典模型到现在的第一性原理计算, 理论模型的发展提高了其可适用范围, 减少了经验参数对计算的影响. 由于第一性原理模型的不断完善和数值模拟的发展, 除线性响应理论之外, 目前可以通过含时密度泛函理论 (time-dependent density functional theory, TDDFT) 实时模拟离子辐照情况下靶电子的激发动力学过程, 从而预测材料的电子阻止本领. S_e 的第一性原理计算可以应用于多种体系, 包括固体 (金属、非金属、高分子) 和液体等. 本文将概述目前国内外关于 S_e 及其微观机制的研究进展, 并对 S_e 的未来研究进行展望.

1 低能离子在介质中的电子阻止本领

由于低能离子与物质相互作用过程中存在多种微观物理机制, 因此低能离子 (keV/u) 的电子能损的研究相较于高能离子 (MeV/u) 更加复杂. 对于靶材料体系而言, 当高速离子的电子被完全剥离, 其 S_e 可由 Bethe-Bloch 理论^[10-11] 给出较好的结果. 然而, 对于低速离子而言 ($v < v_F$, v_F 为 Fermi 速度), Fermi 等^[12] 基于自由电子气模型指出金属的电子阻止本领与离子的入射速度成正比. 由于低能离子与介质相互作用时能够俘获电荷, 因此不仅需要考虑电子激发对电子能损的影响, 而且要考虑电荷转移效应对离子的有效电荷态的影响. 因此, 定量描述低能离子与物质相互

作用过程中的 S_e , 以及明确低能电子能损的微观机制是离子与物质相互作用领域研究的重点和难点问题.

研究表明, 在原子尺度上理解电子能损的微观机制, 要求在不同时间和空间尺度上建模原子 (离子) 和电子的动力学模型和结构. 可以通过建立离子的经典力学理论和电子的量子力学理论相耦合的理论框架, 研究材料 S_e 的微观物理机制. 目前采用基于 TDDFT 的第一性原理分子动力学研究低速离子与物质相互作用中的 S_e , 获得的计算结果能够与实验值及半经典 SRIM 值吻合得很好. 这个理论模型结合了 Ehrenfest 分子动力学和 TDDFT, 对于离子运动采用 Ehrenfest 分子动力学描述, 电子系统的演化则由 TDDFT 处理. 这个电子-离子耦合动力学模型, 使得研究载能离子辐照条件下靶电子系统的非平衡响应以及离子与靶电子之间的非绝热能量交换成为可能.

离子的受力包括离子间的库仑排斥力和电子对离子的 Hellmann-Feynman 力, 表达式为

$$M_I \frac{d^2 \mathbf{R}_I(t)}{dt^2} = - \int dx \Psi^*(x, t) \nabla_I \hat{H}_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}(t)) \Psi(x, t) - \nabla_I \sum_{J \neq I} \frac{Z_I Z_J}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|},$$

式中: $\Psi(x, t)$ 为非相互作用电子的多体波函数; $\hat{H}_e(\mathbf{r}, \mathbf{R}(t))$ 为电子的哈密顿量; $\mathbf{R}(t)$ 为所有原子核的瞬时位置.

通过求解含时 Kohn-Sham 方程, 可以描述离子与靶材料碰撞过程中系统的电子密度和能量的演化, 表达式为

$$i \frac{\partial \varphi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_I \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I(t) - \mathbf{r}|} + \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{xc}[n](\mathbf{r}, t) \right) \varphi_i(\mathbf{r}, t),$$

式中: $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ 为含时 Kohn-Sham 单电子轨道; 体系的电子密度由 $n(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{N/2} 2|\varphi_i(\mathbf{r}, t)|^2$ 对全部 Kohn-Sham 单个电子轨道平方求和得到, 通过电子密度可以得到系统的其他物理量. 对碰撞系统进行含时演化时, 采用 Verlet 算法对离子运动方程进行积分, 采用强制时间反演对称法传播电子波函数. 在计算过程中为了提升计算效率, 可以采用 MPI 并行计算模拟离子与固体之间的相互作用过程. 目前, 应用比较广泛的基于 TDDFT 的第一性原理分子动力学程序包有 OCTOPUS^[13] 和 SIESTA^[14].

2 电子能损机制的研究进展

实验上主要通过离子穿透法和背散射法测量低能离子在靶材料中的 S_e . 离子穿透法是通过 2 个静电

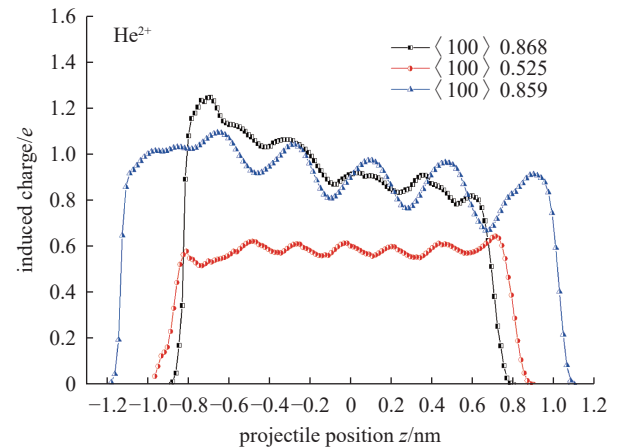
球形分析仪,第1个分析仪用于测量入射光束的能量 E_1 ,在穿过厚度为 Δx 的靶箔片后,第2分析仪测量出口光束的能量 E_2 ,因此可以测得阻止本领为 $-dE/dx = (E_1 - E_2)/\Delta x$ ^[15].低能离子散射(low energy ion scattering, LEIS)采用飞行时间谱仪(time-of-flight spectrometer, TOF)检测背散射粒子,通过分析背散射过程中电子溅射的能量从而得到 S_e ,这使得TOF-LEIS成为一种适合研究离子与物质相互作用中能量损失的关键实验技术^[16].

Correa^[17]对基于第一性原理计算低能离子的 S_e 做了清晰的总结评述,分析了离子的沟道效应,以及不同碰撞参数下的非沟道过程对结果可靠性的影响,阐述了离子在非沟道条件下会激发内层电子参与碰撞过程,并强调了入射离子和靶材料的电子结构对低能 S_e 的重要影响.对于具有较大带隙的绝缘体和半导体,低能离子损失的能量不足以使其价带顶的电子跨过带隙激发到导带上去,此时电子激发以及电子能损就被抑制了,这就是电子能损的阈值效应.但最新的研究表明,半导体Si中的价电子可以通过一个由入射离子引入的带隙态从价带顶抬升到导带底,从而使得离子的 S_e 在阈值速度以下并没有消失^[18].

2.1 电荷交换对电子能损的影响 Primetzhofer等^[19]测量了低能H和He离子在自由电子气金属Al中的 S_e ,结果表明H离子的 S_e 与离子速度成正比例关系;然而对于He离子,在离子速度为0.20~0.28 a.u.(4~8 keV)之间时其 S_e 偏离了与速度的线性关系.对于这种异常现象,研究人员认为当He离子速度 >0.20 a.u.时与Al发生了电荷交换,从而导致额外的电子能损产生,并与电子-空穴对激发产生的能损所叠加,因此在0.20 a.u.两侧 S_e 与速度之间的斜率存在着约40%的差别.类似报道都只是定性解释了电荷交换是产生偏离线性比例关系的主要原因,但是缺乏定量的描述.

本课题组采用基于TDDFT的第一性原理分子动力学研究了低能H和He离子在半导体或金属材料(CdTe^[20]、ZnTe^[21]、ZnSe^[22]和HgTe^[23])中电子能损的微观机制,以及在LiF和SiO₂^[24]、SiC^[25]等体系中的电荷交换行为.这些材料共同特点是价键极性较强,具有较大的带隙,因此在一定程度上抑制了价带电子跨过带隙激发到导带的概率,所以在此体系中电荷交换行为较为明显.利用分步积分法获得入射粒子穿透靶材料过程中每一离子步的电荷转移情况,具体方法是通过分步积分法,实现将激发态时离子周围电子数减去初始态时离子周围的电子数,从而得到离子与靶材料之间的电荷转移量.比较不同入射方向条件下

电荷转移随入射深度的变化曲线(如图2),发现入射离子在具有较高电子密度的沟道中会俘获更多的电荷,并在初始阶段就产生大量的电荷转移,这被认为是入射离子对高电子密度分布扰动的瞬时行为.研究发现,活跃的电荷转移会导致更大的电子能损,基于此得到 S_e 与电荷转移之间的内在关联.从定量的分析中,论证了电荷交换是电子能损的额外方式,是导致 S_e 偏离速度线性关系的主要原因.

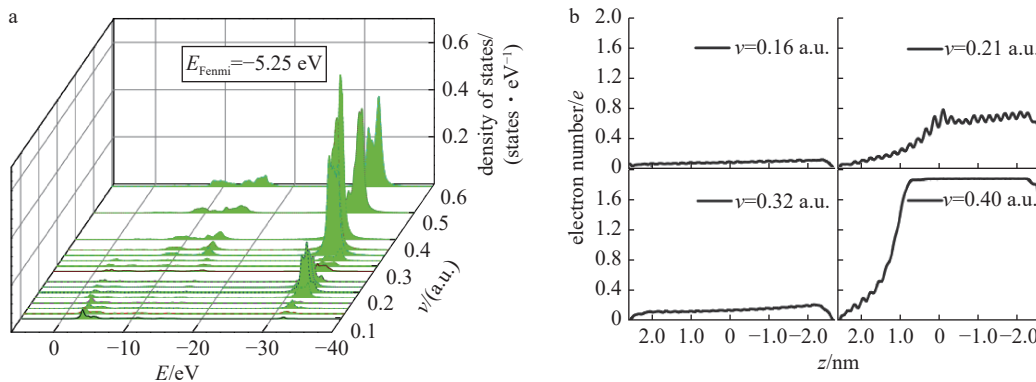


注:图中在<100>、<110>和<111>沟道中的平均电荷转移数为0.868、0.525和0.859个电子^[23].

图2 速度为0.5 a.u.的He离子在HgTe不同沟道的电荷转移量

在理论计算中,目前通常采取对离子周围区域的电荷态密度进行积分以获取离子的实时电荷态,但该方法存在一定的缺陷:1)无法准确区离子周围电子究竟属于离子还是靶原子;2)积分区域的选取存在一定的主观性^[26].因此,有必要改进现有的离子实时电荷态的提取方法以及提出新的离子电荷态表征思路.本团队提出采用投影态密度算法对离子的实时电荷态进行表征,并进一步建立离子速度-电荷态-电子能损的关联(图3)^[27-28].通过改进的方法获取离子的实时电荷态,从而更精确地定量分析电荷交换对电子能损的影响.在He离子碰撞AlN中的 S_e 研究中发现,速度为0.17~0.31 a.u.的 S_e 出现偏离线性的行为,如图3所示.为此,分析了该速度区间离子的实时电荷态,可以发现在 $v = 0.21$ 和 0.40 a.u.处离子在初始阶段有明显的电荷积累,然后在离子经过一定距离后达到电荷稳态,离子有明显的俘获电荷行为,再次验证了电荷转移是额外的能损方式,并导致了 S_e 的非线性行为.

2.2 化学键对电子能损的影响 当入射离子穿过靶材料时,离子与靶原子之间化学键的伸长(形成)和缩短(断裂)在能量损失过程中起着至关重要的作用,也



a. 不同速度 He 离子在 AlN 的瞬时 PDOS; b. 在非线性 S_e 对应的速度范围内, 采用对电子轨道态密度积分的方法得到不同速度离子的实时电荷态.

图 3 投影态密度算法获得离子的实时电荷态^[27]

是电子能损的一种方式. 化学键的直观定义是相邻原子之间共享的电子对(局域化吸引子)提供了结合分子的必要吸引力. 然而, 定量地描述一个特定的键并将其可视化存在一定困难.

含时电子局域化函数(electron localization function, ELF)被认为是一种可以展示化学键变化(化学键的形成、断裂或调整)的表征方式. 当低速离子通过材料时, 离子会与近邻靶原子形成化学键, 随着离子移动改变了化学键的状态, 并产生电子能损. 研究发现在 Si 的自辐照过程中(图 4), Si-Si 化学键对能损的影响是不可忽视的, 化学键的状态随着离子在晶格原子层间的移动发生变化^[29]. 从化学键角度分析离子与物质相互作用中的电子能损是一个值得进一步研究的问题, 有望在评估慢重离子与介质的相互作用中发挥重要作用.

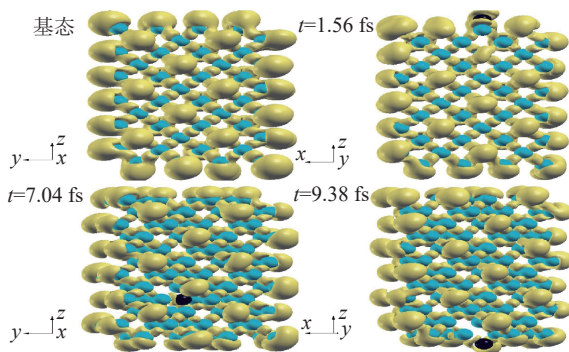


图 4 Si 原子以速度 $v=0.10$ a.u. 沿 $\langle 100 \rangle$ 沟道通过晶体 Si 薄层的 ELF 随时间的演化^[29]

2.3 内层电子激发对电子能损的影响 自由电子气模型认为低能离子的 S_e 与速度保持线性关系, 这是由于该模型只考虑了价电子的激发. 早期对低能离子在部分过渡金属中 S_e 的测量结果显示, 低能离子的 S_e 偏离了与速度之间的线性关系, 一些研究文献认为这是过渡金属中的半芯 d 和 f 电子的激发导致了

这种偏离^[30-31]. Valdés 等^[32] 提出了 d 电子激发导致 Cu、Ag 和 Au 对低能质子的 S_e 偏离了速度线性关系, 偏折处的速度取决于靶材料中 d 电子的激发能. 最近, 对 S_e 的实验研究为这种解释提供了详细的证据^[30, 33-35].

本团队近期的研究工作也报道了关于内层电子激发在 S_e 中所扮演的重要角色. 采用基于 TDDFT 的第一性原理分子动力学模型, 分别研究了 H 和 He 离子在金属 In^[36]、Zn^[37-38] 和 ZnO^[39] 的 S_e 与速度之间的关系, 揭示了 In、Zn 和 ZnO 中的 d 电子激发的微观机制及其对电子能损的贡献. 在低能情况下, 由于 In-4d 电子激发导致质子和氦离子的 S_e 分别在 0.30~0.40 a.u. 和 0.25~0.35 a.u. 的速度范围内出现了转折(图 5). 此外, 研究结果还显示, 由于 In 的 5s5p 价电子均匀分布于晶体中, 因此在所研究的速度范围内, 通过库仑散射导致的价电子激发与碰撞参数无关. 相反, 由于 In-4d 电子分布的高度局域性, 使得 4d-电子的激发随着碰撞参数的降低而显著增强, 这表明 In-4d 电子的激发是由离子-电子直接碰撞所触发.

2.4 电子能损的速度阈值效应 在低能离子与具有最小激发能(E_{\min})的电子系统相互作用时(如惰性气体^[19, 40]), 产生电子能损存在着阈值效应. 当入射离子的能量 $< E_{\min}$, 与靶的电子系统作用不会激发任何电子, 从而导致离子电子能损的阈值效应. 也就是说, 在低于这个阈值速度情况下, S_e 将严格为 0(即不会产生电子能损).

理论和实验研究表明, 在半导体^[41-42]、绝缘体^[43]、金属氧化物^[44]、氟化物和有机薄膜^[45-47] 中也存在类似的效应, 在这些材料中需要一个最低能量来激发价带电子, 从而导致低能离子在这些材料中 S_e 的阈值效应^[48].

HfO₂ 具有较大的带隙, 低能质子在 HfO₂ 中的 S_e

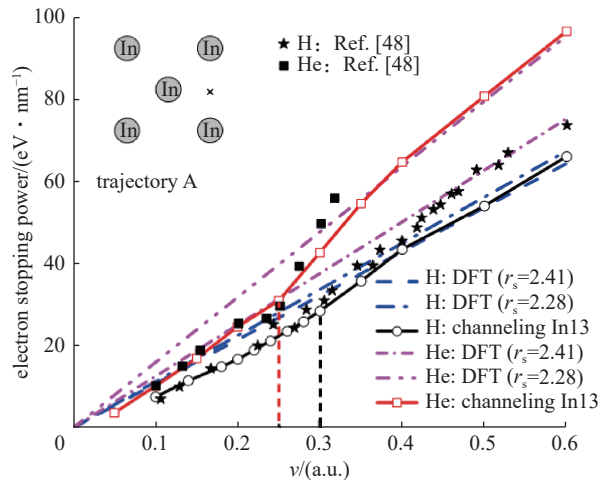


图 5 H 和 He 离子在 In 中的 $S_e^{[36]}$

出现了阈值效应^[49-50]. 如图 6 所示, 质子在 HfO_2 的 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 沟道方向上 S_e 的阈值速度分别为 0.07、0.10 和 0.04 a.u., 而在 He 离子的 S_e 却没有出现阈值效应. 这表明当 He 离子穿过 HfO_2 时, 在电子-空穴对激发之外存在额外的能量损失通道. 通过研究 He 离子的电荷态, 发现 He 离子和靶原子之间存在电荷交换行为. 因此, He 离子在阈值速度以下的能量损失归因于电荷转移.

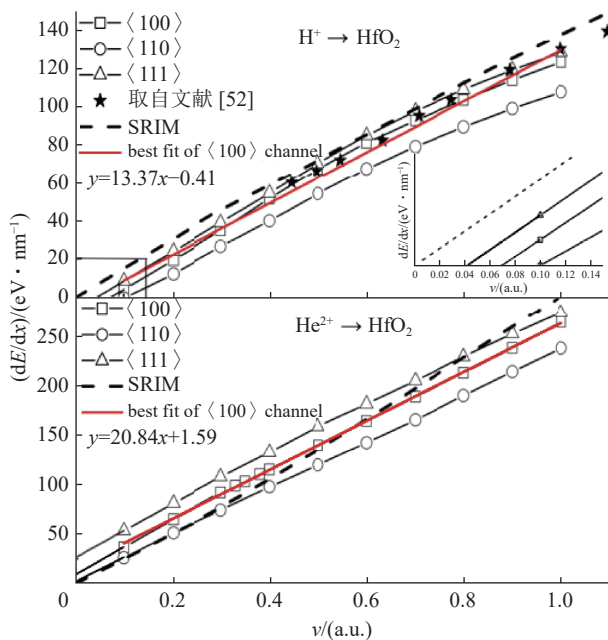


图 6 H 和 He 离子在 HfO_2 中的 S_e 与速度之间的关系, 计算结果与实验值及半经验 SRIM 值进行比较^[49]

最近本团队在 H 离子碰撞 TiN 的研究中, 进一步揭示了 S_e 的阈值速度与带隙之间的定量关系^[51]. 当入射离子穿过靶材料时, 在电子带隙中由入射离子引起的局域电子缺陷态类似“电梯”一样将价带中的电子携带通过间接带隙.

3 总结与展望

本文概述了离子与物质相互作用中电子能损微观机制的研究进展, 对电子能损的微观机制按电荷转移、化学键形成与断裂、内层电子激发等通道进行了总结, 探讨了 S_e 与速度之间的阈值效应. 本团队的研究工作初步阐明了入射离子和介质的电子结构对电子能损微观机制的影响, 促进了电子能损理论的发展. 在研究中提出一些需要解决的问题, 如化学键的定量表征有待寻找新的更好的表述途径, 而对于更内层电子激发对电子能损的贡献也需要再继续进行深入的研究.

为了更好地揭示各种能损机制对 S_e 的贡献, 不仅需要在实验上进行验证分析, 也要在理论上阐明各种电子能损机制起作用的能量范围及其所占的比例, 从而更好地分析它们的共同影响机制, 为揭示低能电子能损的微观机制奠定基础.

4 参考文献

- [1] LI Z Q, CHEN F. Ion beam modification of two-dimensional materials: characterization, properties, and applications[J]. Applied Physics Reviews, 2017, 4(1): 011103
- [2] VERKHOVTSSEV A, SURDUTOVICH E, SOLOV'YOV A V. Multiscale approach predictions for biological outcomes in ion-beam cancer therapy[J]. Scientific Reports, 2016, 6: 27654
- [3] ILIC O, WENT C M, ATWATER H A. Nanophotonic heterostructures for efficient propulsion and radiative cooling of relativistic light sails[J]. Nano Letters, 2018, 18(9): 5583
- [4] KNASTER J, MOESLANG A, MUROGA T. Materials research for fusion[J]. Nature Physics, 2016, 12(5): 424
- [5] ZHANG C, MAO F, ZHANG F S. Collision dynamics of energetic carbon ions impinging on single-walled carbon nanotubes[J]. The European Physical Journal Applied Physics, 2013, 64(1): 10401
- [6] ZHANG C, MAO F, ZHANG F S. Electron-ion coupling effects on radiation damage in cubic silicon carbide[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2013, 25(23): 235402
- [7] ZHANG C, MAO F, ZHANG F S, et al. Impact energy dependence of defect formation in single-walled carbon nanotubes[J]. Chemical Physics Letters, 2012, 541: 92
- [8] ZHANG C, MAO F, DAI J X, et al. Irradiation effects in

- single-walled carbon nanotubes: density-functional theory based treatments[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 93: 15
- [9] WESCH W, WENDLER E. Ion beam modification of solids: ion-solid interaction and radiation damage[M]. Berlin, Germany: Springer International Publishing, 2016
- [10] BETHE H. Zur theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie[J]. *Annalen Der Physik*, 1930, 397(3): 325
- [11] BLOCH F. Zur bremsung rasch bewegter teilchen beim durchgang durch materie[J]. *Annalen Der Physik*, 1933, 408(3): 285
- [12] FERMI E, TELLER E. The capture of negative mesotrons in matter[J]. *Physical Review*, 1947, 72(5): 399
- [13] MARQUES M A L, CASTRO A, BERTSCH G F, et al. Octopus: a first-principles tool for excited electron-ion dynamics[J]. *Computer Physics Communications*, 2003, 151(1): 60
- [14] SOLER J M, ARTACHO E, GALE J D, et al. The SIESTA method for *ab initio* order- N materials simulation[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, 14(11): 2745
- [15] MØLLER S P, CSETE A, ICHIOKA T, et al. Stopping power in insulators and metals without charge exchange[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93(4): 042502
- [16] DRAXLER M, CHENAKIN S P, MARKIN S N, et al. Apparent velocity threshold in the electronic stopping of slow hydrogen ions in LiF[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95(11): 113201
- [17] CORREA A A. Calculating electronic stopping power in materials from first principles[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 150: 291
- [18] LIM A, FOULKES W M C, HORSFIELD A P, et al. Electron elevator: excitations across the band gap via a dynamical gap state[J]. *Physical Review Letters*, 2016, 116(4): 043201
- [19] PRIMETZHOFFER D, RUND S, ROTH D, et al. Electronic excitations of slow ions in a free electron gas metal: evidence for charge exchange effects[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(16): 163201
- [20] LI C K, MAO F, FU Y L, et al. Electronic stopping power of slow H^+ and He^{2+} ions in CdTe from first principle[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2017, 392: 51
- [21] LI C K, MAO F, WANG F, et al. Electronic stopping power of slow-light channeling ions in ZnTe from first principles[J]. *Physical Review A*, 2017, 95(5): 052706
- [22] LI C K, WANG F, GAO C Z, et al. Nonlinear electronic stopping power of channeled slow light ions in ZnSe: evidence of energy loss caused by formation and breaking of chemical bond[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2018, 426: 41
- [23] FU Y L, ZHANG Z J, LI C, et al. Electronic stopping power for slow ions in the low-hardness semimetal HgTe using first-principles calculations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, 32(10): 105701
- [24] MAO F, ZHANG C, DAI J X, et al. First-principles study of the threshold effect in the electronic stopping power of LiF and SiO₂ for low-velocity protons and helium ions[J]. *Physical Review A*, 2014, 89(2): 022707
- [25] MAO F, ZHANG C, ZHANG F S. Theoretical study of the channeling effect in the electronic stopping power of silicon carbide nanocrystal for low-energy protons and helium ions[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2015, 342: 215
- [26] LEE C W, STEWART J A, DINGREVILLE R, et al. Multiscale simulations of electron and ion dynamics in self-irradiated silicon[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(2): 024107
- [27] LI C K, XUE J M, OUYANG X P, et al. Resonant coherent excitation and energy loss of slow channeling helium ions in AlN[J]. *Physical Review A*, 2022, 105: 012819
- [28] LI C K, LIU S, CAO Q, et al. Effect of resonant coherent excitation on the electronic stopping of slow channeled ions[J]. *Physical Review A*, 2019, 100(5): 052707
- [29] LI C K, LIU S, ZHANG F S. Chemical effect on the energy lose for slow ion channeling a narrow band gap semiconductor[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2019, 444: 38
- [30] MARKIN S N, PRIMETZHOFFER D, PRUSA S, et al. Electronic interaction of very slow light ions in Au: electronic stopping and electron emission[J]. *Physical Review B*, 2008, 78(19): 195122
- [31] LI S M, MAO F, ZHAO X D, et al. Contribution of f-electron excitation to electronic stopping power of platinum for protons[J]. *Physical Review B*, 2022, 106(1): 014103
- [32] VALDÉS J E, ECKARDT J C, LANTSCHNER G H, et al. Energy loss of slow protons in solids: deviation from the proportionality with projectile velocity[J]. *Physical Review*

- A, 1994, 49(2): 1083
- [33] FIGUEROA E A, CANTERO E D, ECKARDT J C, et al. Threshold effect in the energy loss of slow protons and deuterons channeled in Au crystals[J]. *Physical Review A*, 2007, 75(1): 010901
- [34] ROTH D, BRUCKNER B, MORO M V, et al. Electronic stopping of slow protons in transition and rare earth metals: breakdown of the free electron gas concept[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118(10): 103401
- [35] CANTERO E D, LANTSCHNER G H, ECKARDT J C, et al. Velocity dependence of the energy loss of very slow proton and deuteron beams in Cu and Ag[J]. *Physical Review A*, 2009, 80(3): 032904
- [36] LI S M, MAO F, ZHAO X D, et al. First-principles study of the electronic stopping power of indium for protons and He ions[J]. *Physical Review B*, 2021, 104(21): 214104
- [37] ZHAO X D, MAO F, LI S M, et al. First-principles study of the electronic stopping power of Zn for protons[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2022, 519: 28
- [38] ZHAO X D, MAO F, TANG S A, et al. Excitation effect of d electrons on the electronic energy loss of energetic protons colliding with a Zn atom[J]. *Physical Review A*, 2020, 101(6): 062705
- [39] ZHAO X D, MAO F, LI S M, et al. First-principles study of semicore electron excitation in the electronic energy loss of ZnO for protons[J]. *Physical Review A*, 2021, 104(3): 032801
- [40] GOLSER R, SEMRAD D. Observation of a striking departure from velocity proportionality in low-energy electronic stopping[J]. *Physical Review Letters*, 1991, 66(14): 1831
- [41] FU Y L, LI C K, SANG H B, et al. Electronic stopping power under channeling conditions for slow ions in Ge using first principles[J]. *Physical Review A*, 2020, 102: 012803
- [42] MAO F, ZHANG C, GAO C Z, et al. The effects of electron transfer on the energy loss of slow He^{2+} , C^{2+} , and C^{4+} ions penetrating a graphene fragment[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2014, 26(8): 085402
- [43] MARKIN S N, PRIMETZHOFFER D, BAUER P. Vanishing electronic energy loss of very slow light ions in insulators with large band gaps[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 103(11): 113201
- [44] ROTH D, BRUCKNER B, UNDEUTSCH G, et al. Electronic stopping of slow protons in oxides: scaling properties[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 119(16): 163401
- [45] SERKOVIC LOLI L N, SÁNCHEZ E A, GRIZZI O, et al. Stopping power of fluorides and semiconductor organic films for low-velocity protons[J]. *Physical Review A*, 2010, 81(2): 022902
- [46] SERKOVIC L N, SÁNCHEZ E A, GRIZZI O, et al. Stopping power of fluorides for low-velocity protons[J]. *Physical Review A*, 2007, 76(4): 040901
- [47] ZEB M A, KOHANOFF J, SÁNCHEZ-PORTAL D, et al. Electronic stopping power of H and He in Al and LiF from first principles[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2013, 303: 59
- [48] PAUL H. Recent results in stopping power for positive ions, and some critical comments[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms*, 2010, 268(22): 3421
- [49] LI C K, WANG F, LIAO B, et al. *Ab initio* electronic stopping power and threshold effect of channeled slow light ions in HfO_2 [J]. *Physical Review B*, 2017, 96(9): 094301
- [50] GOEBL D, ROTH D, BAUER P. Role of d electrons in electronic stopping of slow light ions[J]. *Physical Review A*, 2013, 87(6): 062903
- [51] FU Y L, TANG Z Z, CHENG W, et al. Electronic stopping power and electronic energy-loss mechanism for a low-energy ion in TiN under channeling conditions[J]. *Physical Review A*, 2022, 105(4): 042818
- [52] SHUKRI A A, BRUNEVALL F, REINING L. *Ab initio* electronic stopping power of protons in bulk materials[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(3): 035128

Progress on microscopic mechanism of electronic energy loss in the interactions between low energy ions and matter

ZHANG Fengshou^{1, 2, 7)} FU Yanlong^{1, 2, 3)} MAO Fei⁴⁾ LI Changkai⁵⁾ ZHANG Chao⁶⁾

(1)The Key Laboratory of Beam Technology of Ministry of Education, College of Nuclear Science and Technology, Beijing Normal University, 100875, Beijing, China;

2)Institute of Radiation Technology, Beijing Academy of Science and Technology, 100875, Beijing, China;

3)Department of Astronomy, Beijing Normal University, 100875, Beijing, China;

4)School of Nuclear Science and Technology, University of South China, 421001, Hengyang, Hunan, China;

5)School of Physics, Peking University, 100871, Beijing, China;

6)School of Materials Science and Engineering, Anhui University of Science and Technology, 232001, Huainan, Anhui, China;

7)Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, 530004, Lanzhou, Gansu, China)

Abstract A thorough knowledge of the ion-matter interaction is the basis and key to studying the anti-radiation performance of materials and solving the specific application of ion beam technology. The energy deposition of ions is the fundamental cause of irradiation damage to materials, so it is particularly important to study the energy loss mechanism in the process of ion collision. This paper will introduce the background and application value of energetic ions in the material and summarize the model of slow ions in the material based on first principles. In addition, the research progress and development trend of electronic stopping power and microscopic mechanism of electronic energy loss in the interaction between low energy ions and matter at home and abroad are reviewed from theoretical and experimental aspects, and the research results of Beijing Normal University on electronic energy loss in recent years are reviewed. The microscopic mechanism of electronic energy loss affected by charge transfer, chemical bond state, inner electron excitation, and other factors is expounded. The threshold behavior of electron stopping ability at a very low speed is studied, which provides a theoretical basis for the application of ion beam technology and the evaluation of the anti-irradiation performance of materials. Finally, the preliminary work is summarized and the future research is reviewed.

Keywords ion-matter interaction; electronic energy loss; electronic stopping power; low energy ion

【责任编辑: 武 佳】