

РЕЗОНАНСНОЕ КОГЕРЕНТНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ БЫСТРЫХ ИОНОВ Ne^{9+} В КРИСТАЛЛЕ - КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

О.Э.Кривошеев, Ю.Л.Пивоваров

*Научно-Исследовательский Институт Ядерной Физики
Томского Политехнического Университета,
634050, Томск, Россия*

Поступила в редакцию 10 августа 1992 г.

Развит метод моделирования внутренней динамики водородоподобных ионов, пролетающих через кристаллы, и достигнуто количественное согласие с результатами недавних экспериментов по резонансному когерентному возбуждению ионов Ne^{9+} в кристалле Au.

Резонансное когерентное возбуждение (РКВ или эффект О कोरोкова¹), быстрых водородоподобных ионов в кристалле возникает при совпадении (в СЦИ иона) одной из гармоник возмущающего периодичного поля кристалла с частотой перехода между двумя уровнями иона:

$$\omega_n = \frac{2\pi\gamma\beta c n}{a} = \omega_{ik}. \quad (1)$$

При выводе (1) предполагается, что ион движется параллельно кристаллографической оси, γ и βc - лоренц-фактор и скорость иона, a - расстояния между атомами оси. Хотя РКВ экспериментально исследуется довольно давно (см. обзор²), законченной количественной теории не существует. Основная трудность заключается в корректном учете одновременного действия периодичного возмущения с набором частот (1), непрерывного потенциала осей и кильватерного потенциала³, приводящих к расщеплению и смешиванию вырожденных электронных уровней иона в кристалле и неупругих факторов, приводящих к потере электрона, а также в изменении амплитуд и частот возмущения вдоль сложной траектории иона в кристалле (с учетом торможения иона вследствие ионизационных потерь энергии). Эти трудности отмечались в работах^{4,5} где предпринимались попытки качественно интерпретировать экспериментальные данные на основе двухуровневой (или с большим числом уровней⁵) схемы в резонансном приближении и с использованием прямолинейных траекторий ионов в кристаллах.

Нами развит новый подход к этой проблеме, основанный на компьютерном моделировании траекторий ионов в кристалле и расчете квантовой динамики иона на полученной траектории. Основные принципы метода следующие:

1. Потенциал кристалла представляется в виде

$$V(\mathbf{R}) = U(\mathbf{R}_\perp) + W(\mathbf{R}_\perp, z); \quad (2)$$

$$U(\mathbf{R}_\perp) = \sum_{\mathbf{k}_\perp, k_\parallel=0} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}_\perp \mathbf{R}_\perp} S(\mathbf{k}_\perp, k_\parallel=0); \quad (3)$$

$$W(\mathbf{R}_\perp, z) = \sum_{\mathbf{k}_\perp, k_\parallel \neq 0} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}_\perp \mathbf{R}_\perp} S(\mathbf{k}_\perp, k_\parallel) e^{ik_\parallel z}; \quad (4)$$

$$\mathbf{k} = \{k_{\perp}, k_{\parallel}\} = \left\{ \frac{2\pi l}{a_x}, \frac{2\pi m}{a_y}, \frac{2\pi n}{a_z} \right\},$$

где $V_{\mathbf{k}}$ - фурье-компонента потенциала кристалла, $S(k_{\perp}, k_{\parallel})$ - структурный фактор, а ось Z направлена параллельно выбранным кристаллографическим осям. Траектория иона в кристалле определяется, при малом угле влета относительно кристаллографических осей, главным образом потенциалом (3) - непрерывным потенциалом осей и находится с помощью стандартной мульти-стринговой модели с учетом многократного рассеяния и потерь энергии.

2. Для найденной траектории иона $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_{\perp}(t) + \beta_{\parallel} ct$, где \mathbf{R}_{\perp} - поперечное по отношению к осям смещение, численно решается уравнение Шредингера (или уравнение фон Неймана для матрицы плотности), описывающее внутреннюю динамику водородоподобного иона. В СЦИ иона возникают скалярный и векторный потенциалы, зависящие как от поперечных координат, так и от времени t'

$$V'(\mathbf{R}') = \gamma \left\{ U(\mathbf{R}'_{\perp}) + \sum_{n \neq 0} U_n(\mathbf{R}'_{\perp}) \exp \left[i \frac{2\pi n \gamma z'}{a} + i \omega_n t' \right] \right\}; \quad (5)$$

$$\mathbf{A}'(\mathbf{R}') = \vec{\beta}_{\parallel} V'(\mathbf{R}'), \quad U_n(\mathbf{R}'_{\perp}) = \sum_{\mathbf{k}_{\perp}} V_{\mathbf{k}} e^{i \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{R}'_{\perp}} S(\mathbf{k}). \quad (6)$$

Для нерелятивистских ионов ($\vec{\beta} \ll 1$) действием магнитного поля пренебрегаем, но добавляем кильватерный (поляризационный) потенциал $\vec{\phi}_{wake}(\mathbf{R}')$, зависящий от скорости в виде ³. Если координаты электрона \mathbf{r} отсчитывать от \mathbf{R}' , то возмущение, действующее на электрон иона, находится по формулам (5) с заменой \mathbf{R}' на $(\mathbf{R}' + \mathbf{r})$. Решение уравнения Шредингера с подобным возмущением ищем в виде

$$\Psi(t) = \sum_m C_m(t) \Psi_m(\mathbf{r}) \exp(i \epsilon_m t / \hbar),$$

где $\Psi_m(t)$ и ϵ_m - волновые функции и энергии невозмущенных состояний иона до влета в кристалл. Подстановка во временное уравнение Шредингера приводит к системе зацепляющихся уравнений для $C_m(t)$, с начальным условием $C_m(0) = \delta_{m_0}$, а соответствующие матричные элементы переходов вычисляются разложением потенциала $\Phi = \phi_{wake}(\mathbf{R}' + \mathbf{r}) + V'(\mathbf{R}' + \mathbf{r})$ до членов второго порядка по степеням \vec{r} (то есть учитываются дипольные и квадрупольные переходы). Далее, мы используем резонансное приближение для случая, когда одна из гармоник возмущения (5) $\hbar \omega_n$ близка к одной из энергий перехода, то есть собственно резонансное когерентное возбуждение. Для $1S \rightarrow 2S$ -, $2P$ -перехода в системе уравнений для $C_m(t)$ достаточно оставить основной $1S$ и четыре возбужденных вырожденных уровня $2S, 2P_0, 2P_{\pm 1}$ для ионов с относительно небольшим Z ($\alpha Z \ll 1$). В результате приходим к системе вида :

$$i \hbar \dot{C}_0 = \sum_{l=1}^4 C_l M_{0l}^n \exp\{i(\omega_{l0} - \omega_n)t\} + M_{00}^0 C_0 - \frac{i \hbar \Gamma_0}{2} C_0; \quad (8)$$

$$i \hbar \dot{C}_i = \sum_{l=1}^4 M_{il}^0 C_l + M_{i0}^n \exp\{-i(\omega_{i0} - \omega_n)t\} C_0 - \frac{i \hbar \Gamma_i}{2} C_i, \quad \omega_{ml} = (\epsilon_m - \epsilon_l) / \hbar, \quad (9)$$

в которую добавлены распадные константы Γ_i , описывающие потерю электрона ионом при движении в кристалле и возможный радиационный распад

возбужденных уровней. В частности, для случая ионов Ne^{9+} радиационным распадом на длине кристалла в 2000\AA (эксперимент ⁶) можно пренебречь и Γ_i вычисляются на основе сечений ионизации иона электронным ударом (в СЦИ иона) с учетом локальной электронной плотности в канале и сечений фотоионизации нерезонансными гармониками потенциала. В уравнениях (8)-(9) матричные элементы переходов определены как :

$$M_{ik}^n = \langle I \frac{\partial \Phi_n}{\partial \mathbf{r}_\perp} \mathbf{r}_\perp + \sum_{j,l} \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x_{j\perp} \partial x_{l\perp}} x_{j\perp} x_{l\perp} | K \rangle,$$

где Φ_n означает, что из разложения Фурье для Φ в матричный элемент входит только n -ая гармоника.

3. Принципиальное отличие схемы интегрирования системы (7) от использования приближений прямолинейных траекторий ^{3,5} состоит в изменении величин M_{ik}^n и Γ_i при переходе к очередному отрезку интегрирования (фрагменту траектории), на котором движение считается прямолинейным. При этом каждый раз вычисляются зависящие от положения иона в канале кристалла матричные элементы M_{ik}^n и M_{ik}^o , определяющие новый набор собственных волновых функций и новые собственные значения энергии электрона в ионе (зависящий от координаты иона эффект Штарка), а также новое значение частоты возмущения ω_n , изменяющееся вследствие уменьшения энергии иона из-за ионизационных потерь, и новые распадные константы Γ_i в силу зависимости вероятности ионизации электронным ударом от локальной электронной плотности. Такая процедура позволяет проследить динамику возбуждения и потери электрона вдоль каждой траектории иона в кристалле, при различной начальной энергии, координате влета и угловом распределении на входе и вычислить вероятность нахождения иона на выходе в любом состоянии $1S, 2S, 2P_o, 2P_{\pm 1}$. Это особенно важно для описания спектрально-угловых и поляризационных свойств излучения возбужденных ионов.

4. Наиболее часто в экспериментах по РКВ измеряются зарядовые состояния пучка ионов на выходе из кристалла, в зависимости от начальной энергии ион. Так как радиусы возбужденных состояний иона примерно на порядок выше радиуса основного состояния, вероятность ионизации выше, поэтому при энергиях иона, близких к резонансной (когда происходит заселение возбужденных уровней) возрастает доля полностью ободранных ионов ². Измеряемая в экспериментах относительная доля водородоподобных ионов описывается в нашей модели величиной (E_{ion} - начальная энергия иона)

$$R(E_{ion}) = \langle \sum_{n=0,1,2,3,4} |C_n(E_{ion})|^2 \rangle, \quad (10)$$

где скобки означают усреднение по всем возможным траекториям ионов в кристалле или, что эквивалентно, усреднению по начальным точкам, углам влета и энергетическому разбросу начальной энергии.

Описанная схема была применена для интерпретации эксперимента ⁶ по РКВ ионов Ne^{9+} в $\langle 111 \rangle$ кристалле Au толщиной $0,2\text{ мкм}$. На рис. 1а приведена карта потенциала для $\langle 111 \rangle$ направления Au и проекция типичной траектории на плоскость, перпендикулярную направлению $\langle 111 \rangle$ для энергии иона $E_{ion} = 87,7\text{ МэВ}$ вблизи резонанса $n = 6$. На рис 1б представлена вероятность, остаться в основном состоянии $|C_0(z)|^2$ вдоль данной траектории для трех значений энергии $E_{ion}/E_{res} < 1$, $E_{ion}/E_{res} = 1$, $E_{ion}/E_{res} > 1$, откуда

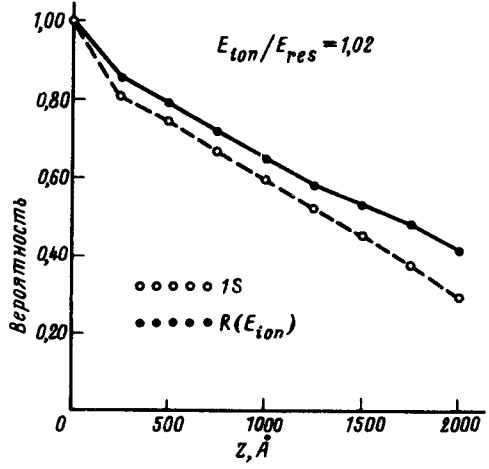
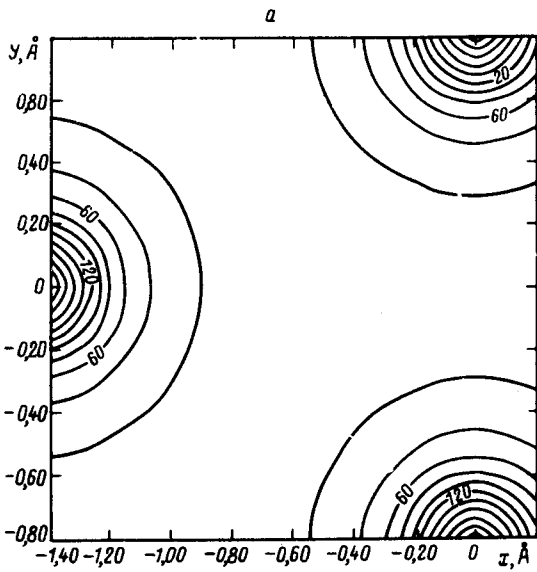


Рис.2

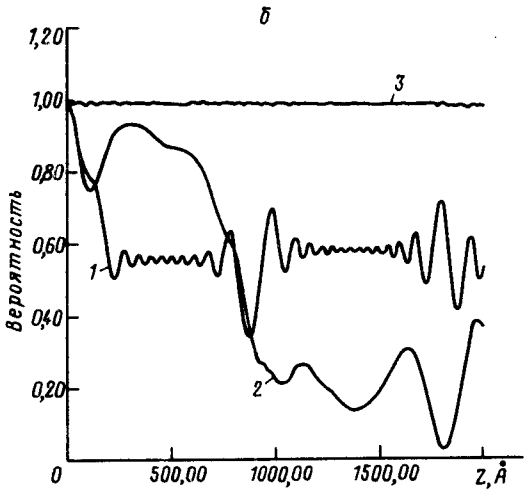


Рис.1

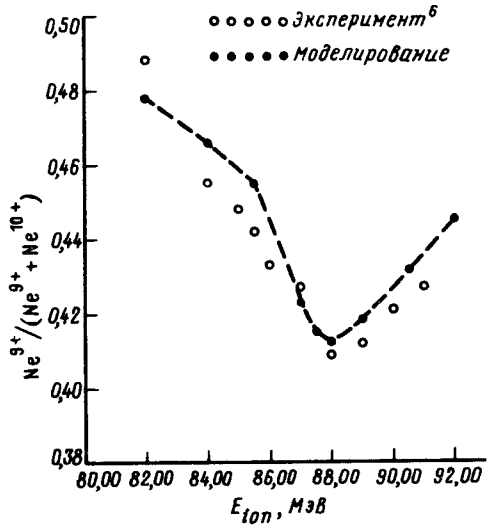


Рис.3

Рис.1. *a* – Карта потенциала $U(R_{\perp})$ для $\langle 111 \rangle$ Au и типичная траектория иона Ne^{9+} в поперечной плоскости для начальной энергии $E_{ion}/E_{res} \sim 1$. Угол влета $\sim 0,1$ угла Линдхарда. Толщина кристалла 2000 Å, $T = 293$ К. *б* – Вероятность остаться в основном состоянии 1S как функция глубины проникновения в кристалл Z для ряда начальных энергий $E_{ion}/E_{res} = (0,99; 1,00; 1,01)$ (кривые 1, 2, и 3 – соответственно)

Рис.2. Заселенность состояния 1S и величина $R(E_{ion})$ как функция глубины проникновения в кристалл Z для $E_{ion}/E_{res} = 1,02$ после усреднения по 10^3 траекторий)

Рис.3. Отношение выхода фракции ионов Ne^{9+} в состояниях 1S, 2S, 2P к полному числу ионов как функция начальной энергии пучка ионов E_{ion} вместе с экспериментальными данными. Статистика 10^3 частиц, угловой разброс $\sim 0,1$ угла Линдхарда, энергетический разброс $\Delta E/E \sim 0,001$

ясно следует существование резонанса и влияние потерь энергии (прохождение через резонанс внутри кристалла). Рис.2 демонстрирует поведение $R(E_{ion})$ и заселенности состояния $1S$ в зависимости от глубины проникновения после усреднения по траекториям для $E_{ion}/E_{res} = 1.02$, откуда следует, что при РКВ ионы преимущественно заселяют состояние $1S$, потому выход фотонов вследствие радиационного распада возбужденных состояний за кристаллом будет невелик. Наконец, рис.3 - окончательный результат компьютерного эксперимента - демонстрирует полученную зависимость $R(E_{ion})$ от энергии ионов E_{ion} , вместе с экспериментальными данными работы ⁶. Неплохое совпадение расчетных данных с экспериментом позволяет сделать вывод о правильности исходных физических принципов модели. Вместе с тем, расчеты выявили сильную зависимость величины провала $R(E_{ion})$ при $E_{ion} = E_{res}$ от величины кильватерного потенциала, и ширины резонанса - от значения распадных констант возбужденных состояний, особенно состояния $2P_0$, которые в данном конкретном расчете выбирались исходя из средней по кристаллу электронной плотности. Более корректный расчет должен включать прямое вычисление распадных констант из деформированных полей кристалла состояний с учетом локальной электронной плотности, а также выход из резонансного приближения при $E_{ion}/E_{res} \approx 1$.

Таким образом, развитая модель дает возможность проследить динамику переходов в возбужденные состояния и формирование зарядовых состояний водородоподобных ионов по толщине кристалла, позволяя выбирать оптимальные условия экспериментов, для дальнейшего понимания физики процессов РКВ. Релятивистские эффекты (для ионов с $\alpha Z < 1$ и $\gamma > 1$) могут быть легко включены в рассматриваемую схему.

Авторы признательны Й.У.Андерсену, Г.Гейсселю и Дж.Форстеру за обсуждение проблемы кильватерного потенциала и интерес к работе.

-
1. V.V.Okorokov, JETP Lett. **2**, 111 (1965).
 2. S.Datz and H.D.Moak, In: Treatise on Heavy-Ion Science, **6**, 169 (1965).
 3. O.H.Crawford and R.H.Ritchie, Phys.Rev. A **20**, 1848 (1979).
 4. V.A.Bazylev and N.K.Zhevago, ZhETF, **77**, 312 (1979).
 5. Y.Yamashita and Y.H.Ohtsuki, Phys.Rev. B **22**, 1183 (1980).
 6. F.Fujimoto et al. NIM B **33**, 354 (1989).