

КИНЕТИКА ДВОЙНОГО РЕЗОНАНСНОГО КОГЕРЕНТНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В КРИСТАЛЛАХ ВНЕ УСЛОВИЙ КАНАЛИРОВАНИЯ

В. В. Балашов^{a,}, А. А. Соколик^b, А. В. Стысин^a*

*^a Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцина,
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119992, Москва, Россия*

*^b Научно-исследовательский институт спектроскопии Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2008 г.

На основе метода матрицы плотности для совместного описания когерентных и некогерентных (релаксационных) взаимодействий релятивистских многозарядных ионов в кристаллах дан теоретический анализ новейших экспериментов токийской группы по процессам двойного резонансного когерентного возбуждения ионов аргона Ar^{16+} и Ar^{17+} в тонких кремниевых мишенях вне условий каналирования. Результаты расчетов и данные экспериментов детально сравниваются между собой.

PACS: 61.85.+p, 32.60.+i, 32.80.Zb, 32.90.+a

1. ВВЕДЕНИЕ

Недавние эксперименты объединенной группы исследователей университетов и научно-исследовательских центров Токио [1, 2] открывают новое перспективное направление в исследованиях явления резонансного когерентного возбуждения (resonant coherent excitation, RCE) быстрых многозарядных ионов в кристаллах (эффекта Окорокова [3]). В названных работах совмещены два особых подхода, разработанных в последнее время этой группой для исследования характеристик процесса RCE. Во-первых, это выход за традиционные рамки экспериментов с каналированными ионами, позволяющий более гибко, чем ранее, использовать трехмерную (3D) геометрию кристаллической решетки мишени для выявления связи между наблюдаемыми характеристиками RCE и структурой электрического поля кристалла (в обозначениях работ [1, 2] это процесс 3D RCE). Во-вторых, специфический выбор взаимной ориентации мишени и пучка ионов делает возможным одновременное выполнение резонансных условий, соответствующих частотам возбужде-

ния двух разных переходов в электронной оболочке иона (эксперименты такого рода выполняются токийской группой также в условиях каналирования [4], теоретический анализ этих экспериментов проделан нами в работе [5]). Следуя терминологии работ [1, 2, 4], будем называть такие процессы двойным резонансным когерентным возбуждением.

В настоящей работе дан количественный, на основе метода матрицы плотности, теоретический анализ трех характерных экспериментальных результатов работ [1, 2, 6]. Ранее такой подход был успешно применен в теории процесса RCE в условиях плоскостного каналирования [5, 7–9].

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ПОДХОДА

Кинетика процесса RCE определяется когерентными и некогерентными (релаксационными) воздействиями на проходящий ион и его электронную оболочку со стороны кристалла. В случае каналирования это прежде всего согласованное влияние атомов решетки, расположенных упорядоченным образом в ее узлах, на поступательное движение иона как целого. Оно отвечает за криволинейный характер тра-

*E-mail: balvse@anna19.sinp.msu.ru

ектории иона в канале и учитывается через непрерывный потенциал Линдхарда. Пересекая по ходу своего движения чередующиеся ряды атомных цепочек решетки, ион испытывает действие осциллирующего во времени электрического поля кристалла, которое при совпадении его частоты с резонансной частотой возбуждения иона создает эффект РСЕ. Взаимодействие иона с «газом» электронов внутри канала и атомами его стенок создает ряд некогерентных эффектов: деканализирование иона, его торможение и угловой разброс его траектории, столкновительные переходы между состояниями электронной оболочки иона и др. К этой же категории относится спонтанное высвечивание возбужденных состояний иона; в процессе РСЕ релятивистских многозарядных ионов роль этого некогерентного механизма особенно существенна. Метод матрицы плотности позволяет единым образом учесть когерентные и некогерентные процессы при расчете широкого набора характеристик РСЕ.

Кинетика процесса РСЕ неканализированных ионов существенно иная, чем в случае каналирования. В среднем ион движется прямолинейно, но средняя электронная плотность на его траектории гораздо больше, а столкновения с электронами и атомами среды происходят намного чаще, чем при каналировании. Это быстро обрывает процесс РСЕ по мере продвижения иона вглубь мишени, поэтому для экспериментального изучения процесса РСЕ без каналирования подходят только очень тонкие кристаллы (во всех работах, проведенных к настоящему времени по методу 3D РСЕ, толщина мишени не превышает одного микрона). Экспериментальным трудностям применения этого метода противостоит его принципиальное достоинство — здесь можно вызывать и наблюдать процессы резонансного когерентного возбуждения, соответствующие отдельным гармоникам электромагнитного поля кристалла, каждая из которых характеризуется определенной частотой осцилляций и определенным волновым вектором поля. Для неканализированных ионов отсутствует статическая часть поля решетки, приводящая в случае каналирования к штарковскому смешиванию возбужденных уровней.

Описание процесса двойного резонансного когерентного возбуждения начинается с разложения потенциала электрического поля кристалла в ряд Фурье:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{klm} \Phi_{klm} \exp(i\mathbf{G}_{klm} \cdot \mathbf{r}), \quad (1)$$

где \mathbf{G}_{klm} — векторы обратной решетки кристалла. Коэффициенты разложения

$$\Phi_{klm} = \frac{1}{a^3} f_{klm} \exp\left(-\frac{1}{6} G_{klm}^2 \langle r^2 \rangle\right) \times \int u_0(\rho) \exp(-i\mathbf{G}_{klm} \cdot \boldsymbol{\rho}) d^3\rho$$

определяются структурными факторами решетки, электростатическим потенциалом отдельного атома кристалла $u_0(\rho)$ и через фактор Дебая–Валлера $\exp(-\frac{1}{6} G_{klm}^2 \langle r^2 \rangle)$ тепловыми колебаниями решетки.

Далее следуем конкретным условиям экспериментов [1, 2, 6], выполненных с монокристаллом кремния (решетка типа алмаза, $a = 5.43 \text{ \AA}$ — постоянная решетки). Выберем систему координат с осями X и Z , лежащими в плоскости (004) в направлениях $[\bar{1}10]$ и $[110]$, и осью Y , перпендикулярной этой плоскости. Плоскость (004) перпендикулярна самому широкому в решетке кремния плоскостному каналу (220), наиболее часто используемому в экспериментах по исследованию РСЕ в условиях каналирования [10]. При таком выборе координат структурный фактор решетки имеет вид

$$f_{klm} = 2 [1 + (-1)^{k+l+m}] [1 + (-i)^{2m+l}]. \quad (2)$$

Направление пучка ионов будем характеризовать углом θ (углом наклона вектора скорости \mathbf{v} к плоскости (004)) и углом ϕ (углом между осью $[\bar{1}10]$ и проекцией вектора скорости на плоскость (004)). Подобно тому, как это делается в случае каналирования [10], удобно перейти в систему координат, в которой ось x направлена по пучку. Для этого повернем систему координат на угол ϕ вокруг оси Y , а затем на угол θ вокруг новой оси Z . Векторы обратной решетки в новой системе имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{G}_{klm})_x = \frac{2\pi}{a} \left(\sqrt{2}k \cos \theta \cos \phi + \right. \\ \quad \left. + l \sin \theta + \sqrt{2}m \cos \theta \sin \phi \right), \\ (\mathbf{G}_{klm})_y = \frac{2\pi}{a} \left(-\sqrt{2}k \sin \theta \cos \phi + \right. \\ \quad \left. + l \cos \theta - \sqrt{2}m \sin \theta \sin \phi \right), \\ (\mathbf{G}_{klm})_z = \frac{2\pi}{a} \left(-\sqrt{2}k \sin \phi + \sqrt{2}m \cos \phi \right). \end{array} \right. \quad (3)$$

С помощью преобразования Лоренца перейдем в систему покоя иона, где все относящиеся к ней величины будем отмечать штрихами. Здесь скалярный и векторный потенциалы поля записываются в виде

$$\begin{aligned} \varphi'(\mathbf{r}', t') &= \gamma \sum_{klm} \exp(ivt'(\mathbf{G}'_{klm})_x) \times \\ &\quad \times \Phi_{klm} \exp(i\mathbf{G}'_{klm} \cdot \mathbf{r}'), \\ \mathbf{A}'(\mathbf{r}', t') &= -\mathbf{e}_x \frac{\gamma v}{c} \sum_{klm} \exp(ivt'(\mathbf{G}'_{klm})_x) \times \\ &\quad \times \Phi_{klm} \exp(i\mathbf{G}'_{klm} \cdot \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (4)$$

где векторы

$$\mathbf{G}'_{klm} = \mathbf{G}_{klm} + (\gamma - 1)(G_{klm})_x \mathbf{e}_x$$

отличаются от исходных векторов обратной решетки \mathbf{G}_{klm} увеличением в γ раз их x -компоненты ($\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$). Из временной зависимости скалярного и векторного потенциалов в системе покоя иона следует формула для частоты гармоники поля с заданными индексами (k, l, m)

$$\begin{aligned} \omega_{k,l,m} &= \\ &= \frac{2\pi\hbar}{a} \gamma v \left(\sqrt{2}(k \cos \phi + m \sin \phi) \cos \theta + l \sin \theta \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Эффект О कोरोкова наступает при совпадении частоты выбранной гармоники с энергией перехода: $\Delta E = \omega_{k,l,m}$.

Эволюция состояния электронной оболочки иона в процессе его прохождения через кристалл описывается обобщенным кинетическим уравнением для матрицы плотности иона [11]:

$$i \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{R} \hat{\rho}, \quad (6)$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ — полный гамильтониан, составленный из гамильтониана свободного иона \hat{H}_0 и оператора

$$\hat{V} = -e\varphi' + \frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}' + \mathbf{A}' \cdot \mathbf{p}) \quad (7)$$

его взаимодействия с электромагнитным полем кристалла (мы пренебрегаем в этом выражении членами более высокого порядка, которые не вносят заметного вклада в суммарное поле, действующее на электрон иона). Оператор \hat{R} отвечает за релаксационные процессы. Наряду со столкновительными процессами ионизации проходящего иона и вынужденных переходов между его уровнями, большой вклад в релаксацию его возбуждений дает их спонтанное девозбуждение с испусканием фотонов. Время жизни состояния $1s2p^1P_1$ гелиеподобного иона аргона относительно высвечивания составляет $\tau_{1s2p}^\gamma = 9.3 \cdot 10^{-15}$ с, что сопоставимо с его временем жизни относительно ионизации при прохождении кристалла кремния при энергии иона в районе 400 МэВ/нуклон ($\tau_{1s2p}^{ion} = 3.4 \cdot 10^{-15}$ с).

Так же, как это делается в случае RCE каналированных ионов [5, 7–9], обобщенное кинетическое уравнение (6) решается численно в представлении взаимодействия как система связанных дифференциальных уравнений для элементов матрицы плотности $\rho_{nn'}(t)$ в некотором базисе собственных состояний $|n\rangle$ свободного иона, который выбирается с учетом особенностей каждой конкретно поставленной задачи (эта процедура продемонстрирована в следующих разделах в связи с расчетами характеристик процесса 3D RCE применительно к разным экспериментальным результатам токийской группы). След $\text{Tr}[\hat{\rho}(t_{out})]$ матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$ на выходе из кристалла дает фракцию выживания $S(\phi, \theta; E_0)$ — вероятность того, что выходящий ион остался в своем исходном зарядовом состоянии. В обозначении учтен тот факт, что в экспериментальных работах по RCE релятивистских ионов фракция выживания обычно измеряется как функция углов ϕ и θ , показывающих ориентацию падающего пучка ионов в выбранной системе координат кристалла, при фиксированной кинетической энергии E_0 входящих ионов. Для расчета другой характеристики процесса RCE — выхода характеристического рентгеновского излучения возбужденных ионов и параметров их углового распределения — из матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$ выделяется субматрица $\hat{\rho}^\gamma(t)$ в соответствующем подпространстве «светящихся» состояний иона. Ее след $\text{Tr}[\hat{\rho}^\gamma(t_{out})]$ на выходе из мишени дает интегральный выход фотонов от его спонтанного девозбуждения за пределами мишени в расчете на один вошедший в кристалл ион. С помощью той же субматрицы, как интеграл по всему пути иона от входа до выхода из мишени, находится другая часть этого выхода, соответствующая процессу спонтанного высвечивания иона внутри мишени. Для расчета углового распределения и поляризации этого излучения используется представление квантовых чисел углового момента иона и его проекции на ось квантования, где матричные элементы $\langle JM | \hat{\rho}^\gamma(t) | J' M' \rangle$ субматрицы $\hat{\rho}^\gamma(t)$ сводятся к эквивалентному набору статистических тензоров $\rho_{kq}(J, J')$ возбужденного иона, через которые непосредственно, в рамках стандартных методов общей теории матрицы плотности [11, 12], рассчитываются корреляционные и поляризационные характеристики процесса.

В дипольном приближении, когда волновой вектор поля кристалла много меньше обратных размеров иона, особенности углового распределения излучения видны из простых геометрических соображений. В этом случае вектор напряженности поля

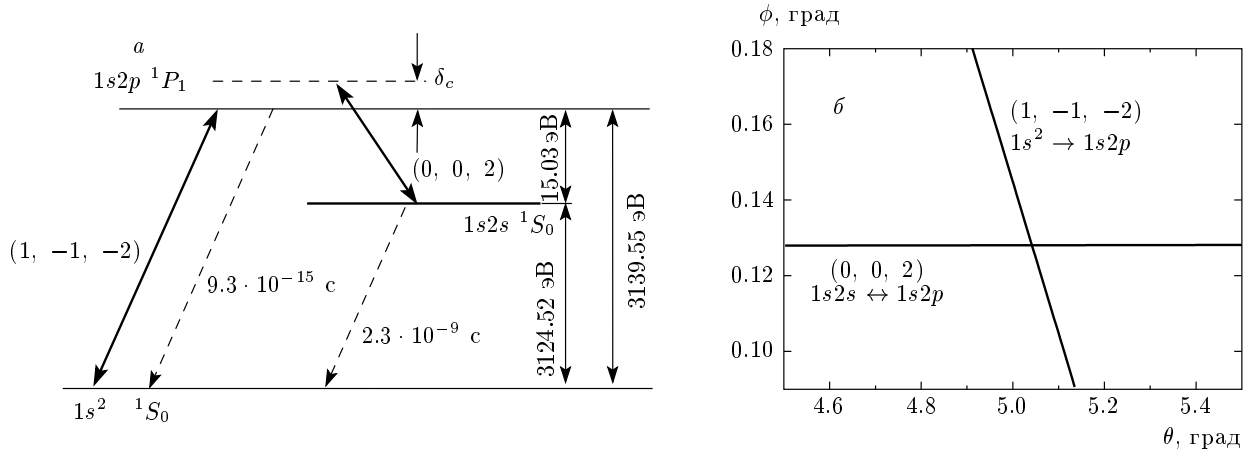


Рис. 1. а) Схема уровней иона Ar^{16+} . б) Условие двойного резонанса на гармониках $(k_1, l_1, m_1) = (1, -1, -2)$ и $(k_2, l_2, m_2) = (0, 0, 2)$ для ионов Ar^{16+} с энергией 416 МэВ/нуклон, проходящих через монокристалл кремния

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t'} \mathbf{A},$$

соответствующий определенной гармонике,

$$\mathbf{E}'_{klm}(t') = -i\Phi_{klm} \left[(\mathbf{G}_{klm})_x \mathbf{e}_x + \gamma (\mathbf{G}_{klm})_y \mathbf{e}_y + \gamma (\mathbf{G}_{klm})_z \mathbf{e}_z \right] \exp(i (\mathbf{G}'_{klm})_x vt'), \quad (8)$$

задает единственное направление в системе покоя иона, отражающее воздействие этой гармоники поля на ион. Именно в этом направлении происходит выстраивание углового момента возбужденного иона. Угловое распределение испускаемых фотонов аксиально симметрично относительно этого направления (в частном случае перехода $^1P \rightarrow ^1S$ оно описывается формулой $W(\theta_\gamma) \sim \sin^2 \theta_\gamma$, где θ_γ — угол между направлением вылета фотона и вектором \mathbf{E}'_{klm}).

3. РАСЧЕТЫ, ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ, СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

3.1. Эффект Отлера – Таунса

Эффект Отлера–Таунса в процессе РСЕ впервые наблюдался в работе [2]. Пучок гелиеподобных ионов аргона Ar^{16+} с энергией $E_0 = 416 \text{ МэВ/нуклон}$ ($\gamma \approx 1.45$) был направлен на кремниевую мишень толщиной около микрона под небольшим углом к плоскости $(2\bar{2}0)$. На рис. 1 показано, что при выбранной энергии ионов условия (5) резонансного возбуждения перехода

$1s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 1s2p \ ^1P_1$ ($\Delta E_{1s^2-1s2p} = 3139.55 \text{ эВ}$) гармоникой $(1, -1, -2)$ и перехода $1s2s \ ^1S_0 \rightarrow 1s2p \ ^1P_1$ ($\Delta E_{1s2s-1s2p} = 15.03 \text{ эВ}$) гармоникой $(0, 0, 2)$ электромагнитного поля кристалла, взятые отдельно одно от другого, выполняются в интервале углов $\phi = 0.1^\circ-0.2^\circ$ и $\theta = 4.6^\circ-5.4^\circ$, а их совместному выполнению должна отвечать точка ($\phi = 0.128^\circ, \theta = 5.04^\circ$). В действительности этого не происходит. Пользуясь формулой (5), выразим отклонение от этой точки по углу ϕ через параметр $\delta_c \equiv \hbar\omega_{(0,0,2)} - \Delta E_{1s2s-1s2p}$ расстройки частоты перехода $1s2s \rightarrow 1s2p$. Заметим, что в силу малости самого угла ϕ такой поворот мишени практически не сказывается на частоте другой рассматриваемой гармоники $(1, -1, -2)$.

На рис. 2 приведены экспериментальные данные [2] и результаты наших расчетов, относящиеся к РСЕ уровня $1s2p \ ^1P_1$ в описанных выше условиях. Вдали от точки пересечения, при расстройке $\delta_c = \pm 5.9 \text{ эВ}$ хорошо виден обычный РСЕ-резонанс в виде провала на кривой фракции выживания, положение которого точно соответствует энергии возбуждения уровня $1s2p \ ^1P_1$. По мере уменьшения расстройки δ_c эта картина искажается, и в точке $\delta_c = 0$ мы наблюдаем типичное для эффекта Отлера–Таунса раздвоение резонансной частоты возбуждения [13]; здесь оно вызывается динамическим резонансным смешиванием состояния $1s2p \ ^1P_1$ с состоянием $1s2s \ ^1S_0$ под действием гармоники $(0, 0, 2)$ электромагнитного поля кристалла.

Рисунок 2 показывает близкое согласие между теорией и экспериментом. Эффект Отлера–Таунса в рамках стандартной схемы применения метода

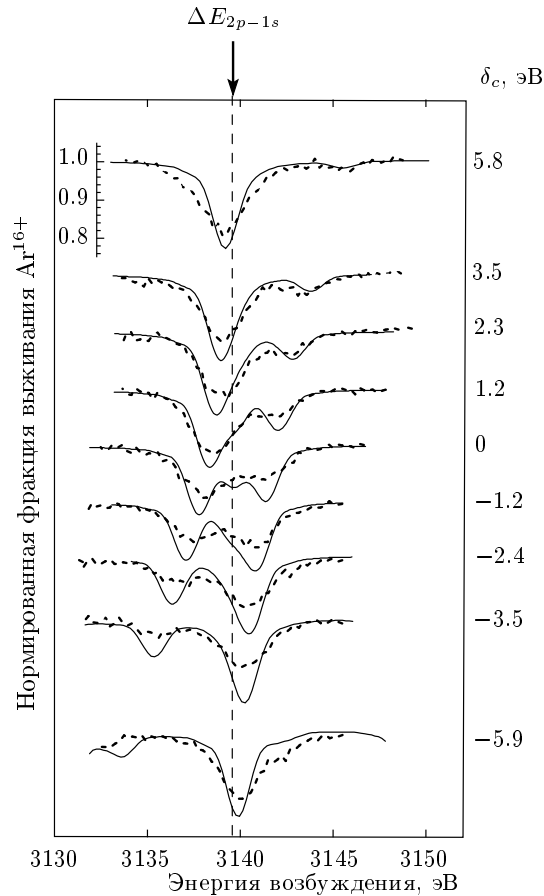


Рис. 2. Нормированная фракция выживания ионов Ag^{16+} с энергией 416 МэВ/нуклон при прохождении через кристаллическую мишень кремния толщиной 1 мкм в условиях двойного резонанса на гармониках $(k_1, l_1, m_1) = (1, -1, -2)$ и $(k_2, l_2, m_2) = (0, 0, 2)$ для различных значений расстройки δ_c (сплошные линии). Экспериментальные данные (пунктирные линии) взяты из работы [2]. Пересчет шкалы абсцисс от угла θ к энергии возбуждения проводится с помощью резонансного условия (5)

матрицы плотности к процессу RCE при адекватном наборе состояний свободного иона возникает автоматически. В данном случае базис включает пять состояний — основное, три магнитных подуровня состояния $1s2p^1P_{M=0,\pm 1}$ и состояние $1s2s^1S_0$. Самосогласованность используемого подхода дополнительно иллюстрируется результатами, показанными на рис. 3, куда с теоретических кривых рис. 2 перенесены положения резонансных минимумов на кривой фракции выживания. Положения этих точек хорошо аппроксимируются теоретической формулой для энергий квазиуровней дублета Отлера–Таунса [13]. В наших обозначениях она имеет вид

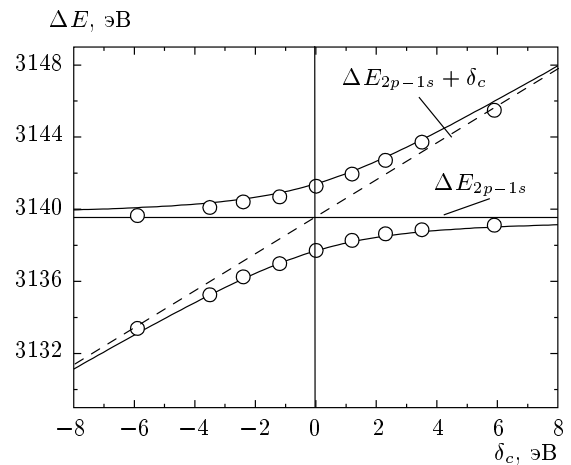


Рис. 3. Положения резонансных провалов во фракции выживания в эффекте Отлера–Таунса при двойном резонансном когерентном возбуждении иона Ag^{16+} , рассчитанные по формуле (9) (сплошные линии) и полученные путем решения обобщенного кинетического уравнения (6) (точки)

$$\hbar\omega_{(1,-1,-2)} = \Delta E_{1s^2-1s2p} - \frac{1}{2} \left[\delta_c \pm \sqrt{4V_{(0,0,2)}^2 + \delta_c^2} \right]. \quad (9)$$

Из этой аппроксимации (сплошные линии на рис. 3) следует, что расстояние между уровнями дублета в точке $\delta_c = 0$ составляет 3.72 эВ. Это лишь немного отличается от значения 3.55 эВ, полученного в результате решения кинетического уравнения (6) (точки на рис. 3).

Составной частью представленного расчета являются вычисления субматрицы $\hat{\rho}^\gamma(t)$ полной матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$ в базисе трех состояний $1s2p^1P_{M=0,\pm 1}$, отвечающих за характеристическое рентгеновское излучение иона. Выстроенность этих состояний в процессе RCE проявляется в угловой анизотропии излучения, которая в эксперименте токийской группы [2, 14], как и в их работах по исследованию процесса RCE каналированных ионов, измеряется по угловой асимметрии выхода фотонов в двух направлениях, перпендикулярных направлению пучка ионов: первое (горизонтальное, H), лежащее близко к плоскости (220), второе (вертикальное, V), практически перпендикулярное этой плоскости. На рис. 4 мы сопоставили наши вычисления дифференциального выхода фотонов из состояния $1s2p^1P_1$ с данными измерений (нормировка экспериментальных данных и результатов расчета произвольная). Профиль кривой выхода фотонов в направлении H и его изменения при

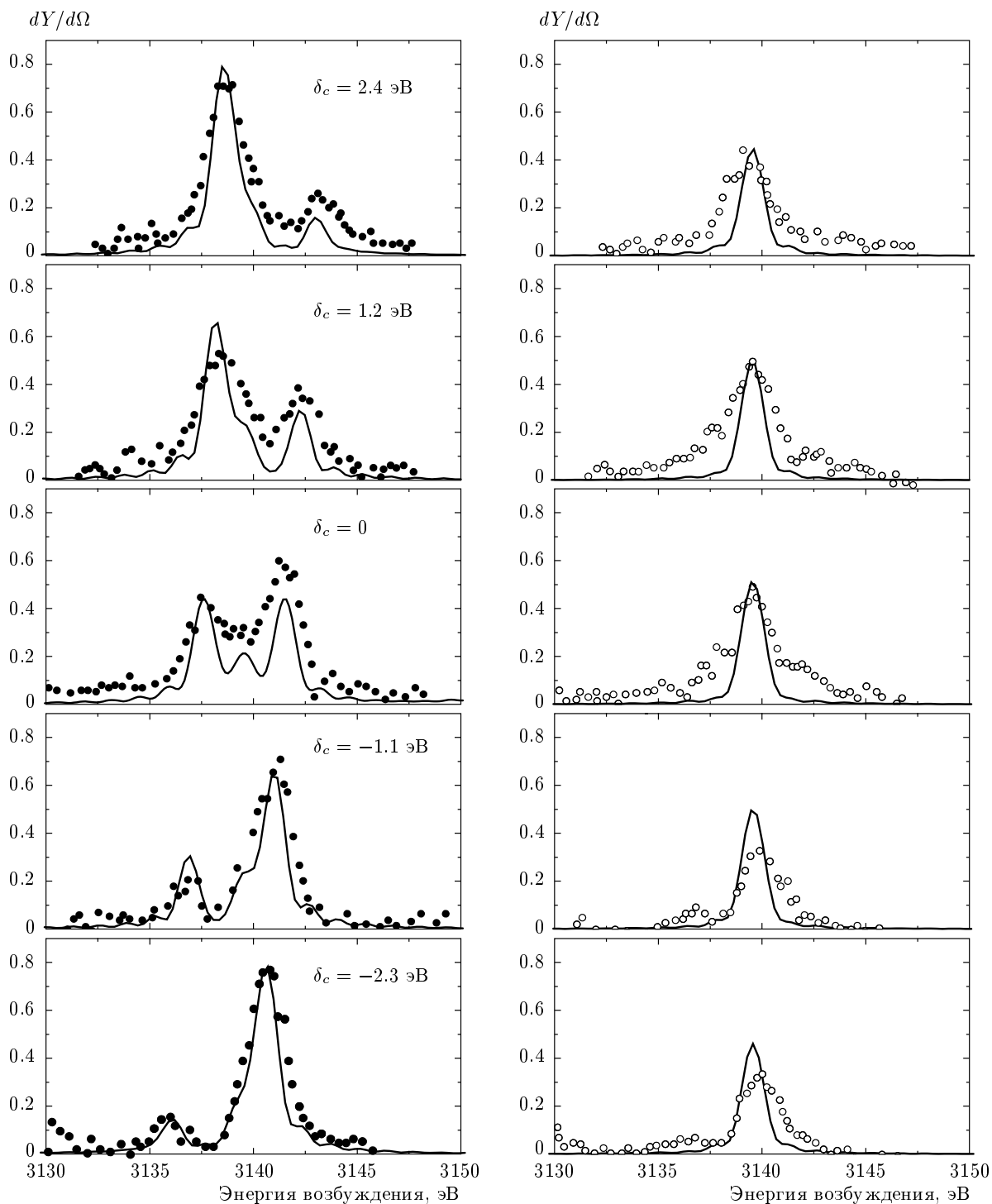


Рис. 4. Дифференциальный выход фотонов в горизонтальном (слева) и вертикальном (справа) направлениях при прохождении ионов Ar^{16+} через кристаллическую мишень кремния толщиной 1 мкм в условиях двойного резонанса на гармониках $(k_1, l_1, m_1) = (1, -1, -2)$ и $(k_2, l_2, m_2) = (1, -1, 0)$ для различных значений расстройки δ_c . Показан суммарный вклад фотонов, испущенных возбужденными ионами внутри мишени и после выхода из нее. Экспериментальные данные (точки) в отн. ед. взяты из работы [14]

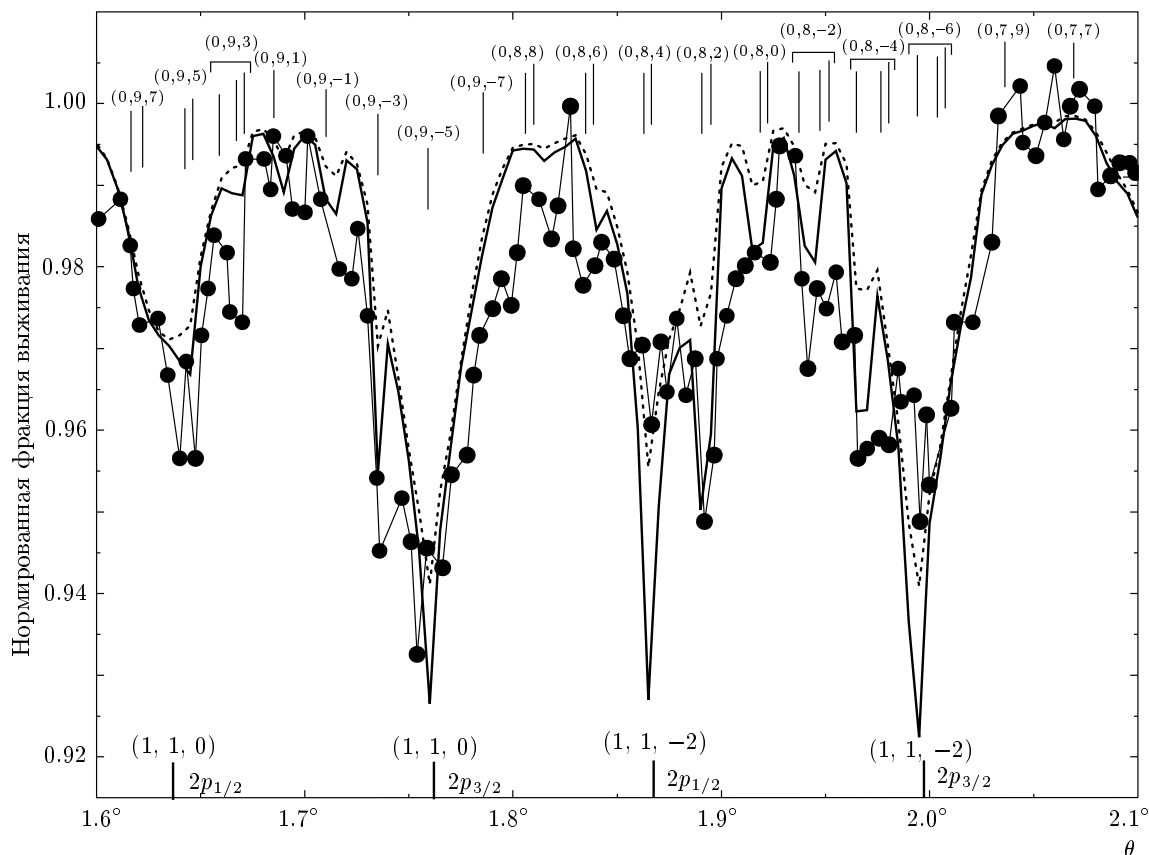


Рис. 5. Фракция выживания ионов Ar^{17+} при прохождении через кристаллическую мишень кремния толщиной 1 мкм для случая $\phi = 0.080^\circ$, рассчитанная с учетом двойных резонансов. Вертикальными линиями показаны теоретические положения резонансных провалов, рассчитанные согласно резонансному условию (5). Жирные сплошные линии отвечают случаю, когда множитель 0.45 вводится в сечения ионизации из состояний $n = 2, 3$, пунктирные линии — множитель 0.45 вводится только в сечения ионизации из состояний $n = 2$. Экспериментальные данные (точки, тонкая сплошная линия) взяты из работы [1]

варьировании угла ϕ отчетливо демонстрируют эффект Отлера–Таунса; однако в направлении V проявляется типичная картина одиночного резонанса. Качественное физическое объяснение этой разницы было дано в экспериментальной работе [2]. В первом случае регистрируются фотоны, идущие от состояния $1s2p^1P_1$ с проекцией $M = 0$ углового момента иона на нормаль к плоскости (220). Именно через него осуществляется динамическая связь состояния $1s2p^1P_1$ с состоянием $1s2s^1S_0$, результатом которой является наблюдаемое раздвоение резонанса при сканировании по частоте гармоники $(1, -1, -2)$. Два других состояния $1s2p^1P_{M=\pm 1}$ не чувствуют этой связи, поскольку при очень малом угле ϕ направления вектора $G'_{(0,0,2)}$ и нормали к плоскости (220) практически неразличимы и могут служить как единое направление оси квантования,

которое определяет правила отбора для матричных элементов поля, связывающего состояния $1s2p^1P_{M=0,\pm 1}$ с состоянием $1s2p^1P_1$. Результаты наших расчетов подтверждают такую трактовку.

3.2. Тонкая структура резонансов в процессе РСЕ водородоподобных ионов

Наблюдение РСЕ-резонансов на кривых фракции выживания релятивистских (с энергией 391 МэВ/нуклон) водородоподобных ионов аргона Ar^{17+} в кристалле кремния [1] было первой реализацией РСЕ вне условий каналирования. Теоретический анализ полученных в работе [1] результатов, выполненный по методу матрицы плотности в работе [15], где каждому резонансу была поставлена в соответствие одна определенная

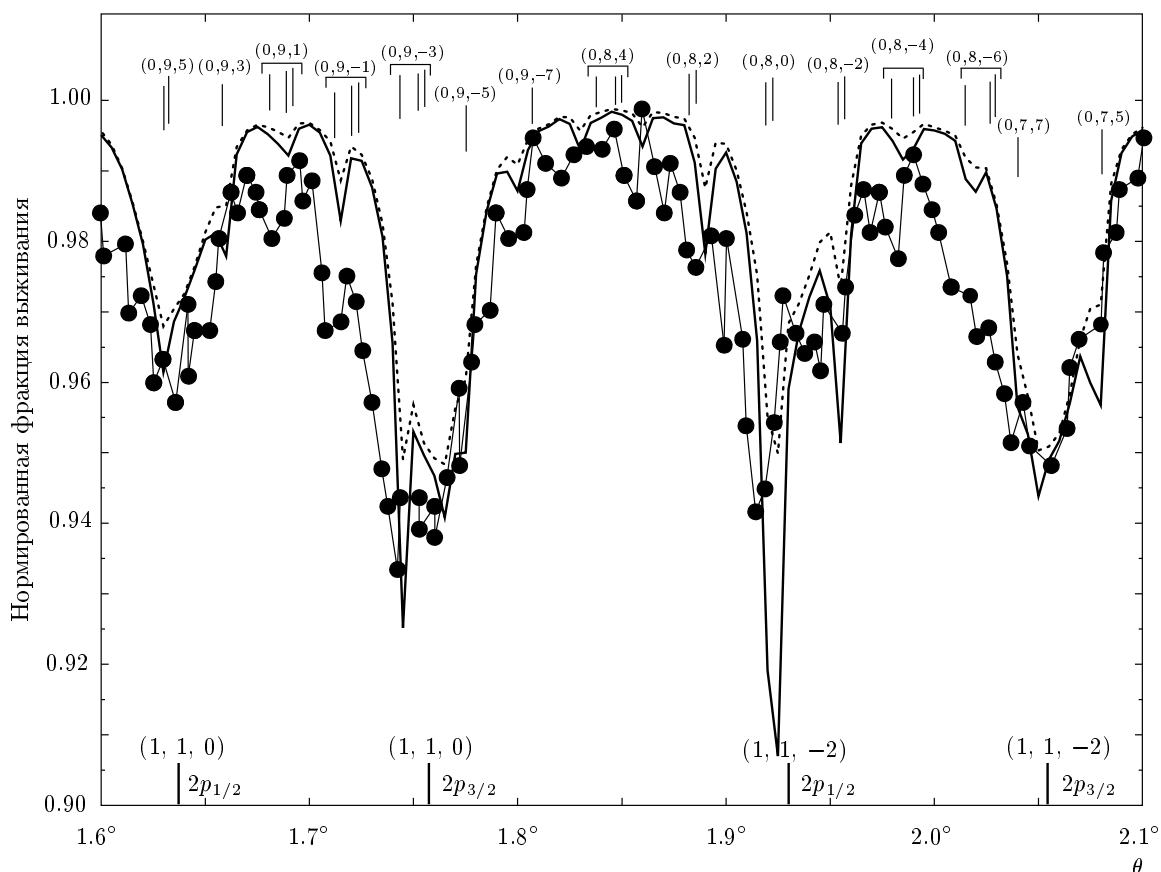


Рис. 6. То же, что на рис. 5, для случая $\phi = 0.100^\circ$

гармоника поля кристалла, привел к хорошему согласию с экспериментом в отношении общего хода резонансных кривых. При этом оставались заметные расхождения, относящиеся к деталям поведения экспериментальных и теоретических кривых. В настоящей работе, следуя предложению экспериментаторов [16], мы расширяем базис состояний для построения матрицы плотности иона и в дополнение к переходам $1s \rightarrow 2p_{1/2}$ и $1s \rightarrow 2p_{3/2}$ на гармониках $(1, 1, m)$ при $m = 0, \pm 2$ вводим в рассмотрение двойные переходы типа $1s \rightarrow 2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ через широкий набор гармоник (k, l, m) с $k = 0, l = 7, \dots, 10, m = -8, \dots, +8$, что открывает возбуждение состояний $3s_{1/2}, 3d_{3/2}$ и $3d_{5/2}$ вместе с состояниями $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$.

Новые переходы, создающие тонкую структуру резонансной кривой, довольно слабы, поскольку соответствуют высоким гармоникам кристаллического поля, интенсивность которых подавляется тепловыми колебаниями решетки. Однако их совокупный эффект значительно улучшает согласие резуль-

татов расчетов с экспериментом. На рис. 5 и 6 результаты расчета приведены соответственно для двух случаев ориентации мишени относительно пучка ионов: $\phi = 0.080^\circ$ и $\phi = 0.100^\circ$. Вертикальными линиями отмечены предполагаемые положения минимумов резонансных провалов фракции выживания ионов Ag^{17+} , рассчитанные согласно условию (5), примененному к обеим — первой ($1s \rightarrow n = 2$) и второй ($n = 2 \rightarrow n = 3$) — ступеням двухступенчатого перехода. На общем фоне резонансной кривой выделяется несколько случаев, когда двойной резонанс приводит к особенно явным изменениям профиля кривой (например, двойной резонанс $1s \rightarrow 2p_{1/2} \rightarrow 3s_{1/2}, 3d_{3/2}$ на гармониках $(1, 1, -2)$ и $(0, 8, 4)$). Это те случаи, где условие двойного резонанса выполняется особенно четко. При этом в целом нам не удается согласовать результаты расчета с экспериментом по общему уровню резонансной кривой без введения подгоночного множителя в сечения ионизации из возбужденных состояний $n = 2$ и $n = 3$, когда их исходные значения мы берем из

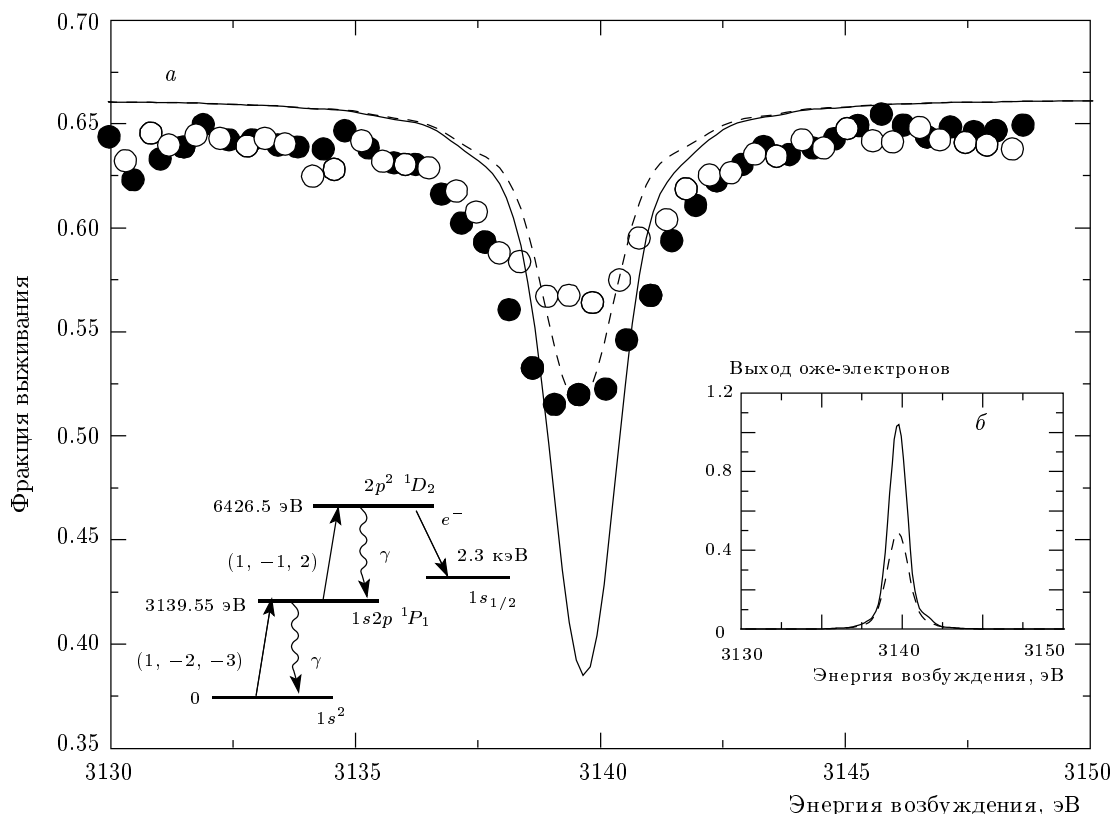


Рис. 7. а) Фракция выживания ионов Ar^{16+} в условиях одиночного резонанса $(k_1, l_1, m_1) = (1, -2, -3)$ ($\phi = -0.300^\circ$, белые кружки, штриховая линия) и при выполнении условия двойного резонанса $(k_2, l_2, m_2) = (1, -1, 2)$ ($\phi = -0.357^\circ$, черные кружки, сплошная линия). Экспериментальные данные взяты из работы [6]. б) Полный выход оже-электронов при распаде автоионизационного состояния $2p^2^1D_2$ внутри мишени (штриховая линия) и суммарный выход с учетом ионов, распадающихся после выхода из мишени (сплошная линия)

работы [17]. Жирные сплошные линии на рис. 5, 6 отвечают случаю, когда для обеих групп состояний этот множитель берется равным 0.45, пунктирные линии — когда множитель 0.45 вводится только в сечения ионизации из состояний $n = 2$.

3.3. Двойное резонансное когерентное возбуждение автоионизационных состояний гелиеподобных ионов

Возбуждение автоионизационных состояний каналированных ионов по методу двойного резонансного когерентного возбуждения в условиях каналирования уже исследовались ранее экспериментально и теоретически [5, 18]. Недавние измерения токийской группы [6] открывают возможности расширения такого подхода на процессы RCE без каналирования.

В эксперименте [6] резонансное возбуждение автоионизационного состояния гелиеподобных ионов Ar^{16+} с энергией 416 МэВ/нуклон наблюдалось при их прохождении через кристаллическую мишень кремния толщиной приблизительно 1 мкм. Переход из основного состояния $1s^2^1S_0$ в промежуточное состояние $1s2p^1P_1$ осуществлялся на гармонике $(k, l, m) = (1, -2, -3)$, а из промежуточного в дважды возбужденное состояние $2p^2^1D_2$ — на гармонике $(k, l, m) = (1, -1, 2)$ (см. рис. 7). Резонансное условие (5) для этих двух переходов ($\Delta E_1 = 3139.55$ эВ, $\Delta E_2 = 3286.95$ эВ) выполняется одновременно при углах ориентации ионного пучка относительно мишени, равных $\theta = 5.83^\circ$, $\phi = -0.357^\circ$. Измерение профиля фракции выживания в зависимости от θ было проведено при указанном значении ϕ и, кроме того, при значении $\phi = -0.300^\circ$. В последнем случае резонансные условия для каждой из двух рассматриваемых гармоник выполняются в разных диа-

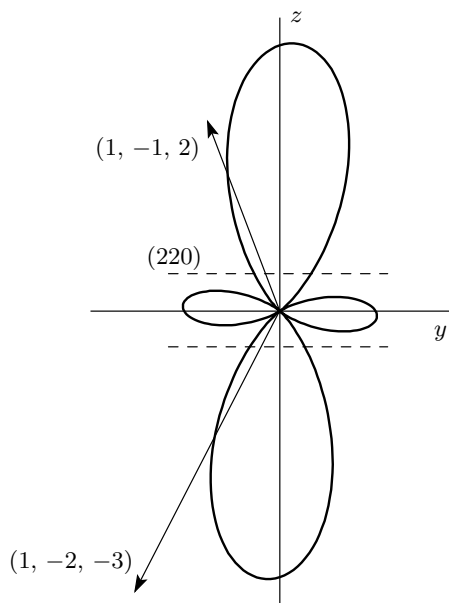


Рис. 8. Угловое распределение оже-электронов в плоскости, перпендикулярной пучку ионов. Стрелками показаны проекции векторов электрического поля на эту плоскость

пазонах углов θ и, следовательно, возможно только обычное одинарное резонансное возбуждение промежуточного уровня $1s2p^1P_1$.

Результаты расчетов фракции выживания (в абсолютных единицах) в условиях однократного и двойного резонансов в сравнении с экспериментальными данными приведены на рис. 7. В расчетах использовались сечения ионизации и возбуждения, вычисленные с помощью программного комплекса ЕТАСНА [17], а также данные [19] о скоростях высвечивания и оже-распада автоионизационных состояний иона Ar^{16+} . Результаты находятся в адекватном согласии с экспериментальными данными: хорошо воспроизводится уровень фона и относительная глубина резонансных провалов в случаях одинарного и двойного резонансов.

На рис. 7 показан также рассчитанный суммарный выход оже-электронов от спонтанного безрадиационного распада ионов внутри мишени и после нее в расчете на один входной ион. В максимуме резонанса выход составляет около 10 %, при этом максимальное углубление фракции выживания в условиях двойного резонанса составляет около 14 %.

Ожидаемое угловое распределение оже-электронов сильно анизотропно. Пример такого распределения, рассчитанного по субматрице состояния $2p^2^1D_2$, полученной из решения уравнения (6) с ис-

пользованием общих формул теории корреляционных и поляризационных явлений в атомных процессах [12], показан на рис. 8. Понять его особенности можно, используя дипольное приближение. В каскадном процессе возбуждения автоионизационного состояния $1s^2^1S_0 \rightarrow 1s2p^1P_1 \rightarrow 2p^2^1D_2$ каждый из двух электронов иона оказывается в состоянии с нулевой проекцией орбитального момента на направление вектора напряженности \mathbf{E}' электрического поля кристаллической гармоники, ответственной за его возбуждение. Угловое распределение оже-электронов, испущенных из таким образом приготовленного автоионизационного состояния, симметрично в плоскости, образованной векторами \mathbf{E}' электрического поля гармоник $(1, -2, -3)$ и $(1, -1, 2)$, а в самой плоскости зависит от угла β между направлениями этих двух векторов. Это распределение, записанное в специальной системе координат с осью квантования z' , направленной вдоль вектора \mathbf{E}' первой гармоники, и осью y' , перпендикулярной плоскости, в которой лежат векторы \mathbf{E}' обеих гармоник, имеет вид

$$W(\theta_e, \phi_e) \sim \left| -\frac{\sin \beta}{2} Y_{21}(\theta_e, \phi_e) + \sqrt{\frac{2}{3}} \cos \beta Y_{20}(\theta_e, \phi_e) + \frac{\sin \beta}{2} Y_{2-1}(\theta_e, \phi_e) \right|^2. \quad (10)$$

Данное выражение хорошо аппроксимирует форму распределения оже-электронов в системе покоя иона.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен единый, основанный на формализме матрицы плотности, подход для теоретического анализа и количественных расчетов основных характеристик процесса двойного резонансного когерентного возбуждения релятивистских многозарядных ионов в кристаллах вне условий каналирования. Выполненные расчеты для процессов возбуждения водородоподобных и гелиеподобных ионов аргона с энергией около 400 МэВ/нуклон в тонких кремниевых мишенях раскрывают связь резонансных особенностей зарядового распределения ионов (фракции выживания) на выходе из мишени, интенсивности и угловых распределений их характеристического рентгеновского излучения и оже-электронов с геометрическими и спектральными характеристиками электромагнитного поля кристалла. Результаты хорошо согласуются с данными соответствующих новейших экспериментов токийской группы.

Авторы благодарны Т. Азуме (Токийский Метрополитан университет) и его группе за полезные обсуждения и гостеприимство, оказанное нам в ходе наших визитов в ТМУ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 06-02-16367).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Kondo et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 135503 (2006).
2. Y. Nakai et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 113201 (2008).
3. В. В. О कोरोков, ЯФ **2**, 1009 (1965); Письма в ЖЭТФ **2**, 175 (1965).
4. Y. Nakano et al., J. Phys. Conf. Series **58**, 359 (2007).
5. В. В. Балашов, А. А. Соколик, А. В. Стысин, ЖЭТФ **134**, 164 (2008).
6. Y. Nakano et al., *HCI 2008 Book of Abstracts B-c18*.
7. В. В. Балашов, И. В. Бодренко, Вестник МГУ, физика, астрон. № 1, 27 (2001).
8. V. V. Balashov and I. V. Bodrenko, Phys. Lett. A **352**, 129 (2006); Nucl. Instr. Meth. B **245**, 52 (2006).
9. В. В. Балашов, А. А. Соколик, Опт. и спектр. **103**, 761 (2007).
10. К. Komaki et al., Nucl. Instr. Meth. B **146**, 19 (1998).
11. К. Блум, *Теория матрицы плотности и ее приложения*, Мир, Москва (1983).
12. V. V. Balashov, A. N. Grum-Grzhimailo, and N. M. Kabachnik, *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions*, Kluwer Acad., New York (2001).
13. S. H. Autler and C. H. Townes, Phys. Rev. **100**, 703 (1955).
14. Т. Азума, XVIII Междунар. конф. «Взаимодействие ионов с поверхностью» (ВИП-2007), Звенигород (2007).
15. V. V. Balashov, I. V. Bordenko, V. K. Dolinov, A. A. Sokolik, and A. V. Stysin, J. Phys. Conf. Ser. (в печати).
16. Т. Азума, частное сообщение.
17. J. P. Rozet, D. Vernhet, and C. Ste'phan, Nucl. Instr. Meth. B **107**, 67 (1996).
18. V. V. Balashov, A. A. Sokolik, and A. V. Stysin, Nucl. Instr. Meth. B **267**, 905 (2009).
19. L. A. Vainstein and U. I. Safronova, Atom. Data Nucl. Data Tabl. **21**, 49 (1978).