ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 4

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.186

ВЫСТРОЕННОСТЬ ВАКАНСИИ ВО ВНУТРЕННИХ ОБОЛОЧКАХ АТОМОВ МОНОКРИСТАЛЛА, ОБРАЗОВАННЫХ КАНАЛИРОВАННЫМИ ИОНАМИ

В. Н. Кондратьев

(НИИЯФ)

Теоретически исследовано выстраивание вакансий во внутренних оболочках монокристалла, образованных каналированными ионами. Для осевого и плоскостного каналирования получены формулы, позволяющие рассчитывать выстроенность вакансий.

1. **Введение.** Метод рентгеноспектрального анализа с ионным возбуждением находит все более широкое применение для изучения эффекта каналирования (см., напр., работы [1—3] и библиографию в них). В последнее время появилась возможность практической реализации предложенных ранее [4] экспериментов по изучению поляризации характеристического рентгеновского излучения, возбуждаемого ионами в условиях каналирования [5]. Такие эксперименты могут дать информацию о распределении потока каналированных ионов [6, 7] и, например, о наличии регулярного движения в поперечной плоскости при осевом каналировании [8].

Степень линейной поляризации определяется поляризационным состоянием излучающего иона мишени [9] и выражается через тензоры выстроенности

$$\mathscr{A}_{2\varkappa}=\rho_{2\varkappa}(j,\ j)/\rho_{00}(j,\ j), \tag{1}$$

где $\rho_{k\varkappa}(j,\ j)$ — статистические тензоры [10]. При описании процесса ионизации пучок ионов удобно разбить на каналированную и деканалированную части [2, 3, 7]. Выстроенность вакансий, образованных деканалированными ионами, совпадает со случаем аморфной мишени и хорошо изучена [11]. При расчете вклада каналированной части пучка удобно использовать дипольное приближение для взаимодействия иона с выбиваемым электроном, которое применимо при больших параметрах столкновения и больших скоростях ионов [12, 13].

2. **Выстраивание вакансий в дипольном приближении.** Рассмотрим выстроенность вакансии, образованной в результате кулоновской ионизации атома классической частицей, имеющей заряд Q_1e, скорость v и прицельный параметр $b\gg a_{об}$ ($a_{об}$ — радиус оболочки). Будем описывать атом мишени в модели самосогласованного поля, считая оболочки заполненными. Тогда для статистических тензоров иона мишени имеем

$$\rho_{k\varkappa}(j,\ j,\ b)=\sum_{mm'l_1j_1m_1}(-1)^{j-m'}\langle jm,\ j-m'|k\varkappa\rangle\times$$

$$\times\int_0^\infty d\mathscr{E}\mathscr{F}_{jm}(\mathscr{E}l_1j_1m_1;\ b)\mathscr{F}^*_{jm'}(\mathscr{E}l_1j_1m_1;\ b), \tag{2}$$

где j и m — полный угловой момент ионизованной подоболочки и его проекция на ось квантования Z, за которую выберем направление пучка; $\mathscr{E}$, l_1, j_1 и m_1 — энергия выбитого электрона, его орбитальный момент, полный угловой момент и его проекция на ось квантования; $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | k\varkappa\rangle$ — коэффициент Клебша—Гордана ($k \leqslant 2j$; $-k \leqslant \varkappa \leqslant k$); $\mathcal{F}_{jm}(\mathscr{E} l_1 j_1 m_1;\ b)$ — амплитуда ионизации. Как видно из выражения (2), тензор нулевого ранга ρ_{00} дает сечение (вероятность) ионизации.

Для расчета амплитуды ионизации используем первый порядок теории возмущений, тогда амплитуда запишется в виде

$$\mathcal{F}_{jm}(\mathscr{E} l_1 j_1 m_1;\ b) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i w_{fi} t) \left\langle \mathscr{E} l_1 j_1 m_1 \left| \frac{Q_1 e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b(t)|} \right| nljm \right\rangle, \quad (3)$$

где n, l, j и m — квантовые числа связанного электрона в атоме, $w_{fi} = (\mathscr{E} + \mathscr{E}_B)/\hbar$; $\mathscr{E}_B$ — энергия связи в атоме электрона, $\mathbf{R}_b(t)$ — радиус-вектор иона. Будем полагать, что траектория иона прямолинейна ($\mathbf{R}_b(t) = (\mathbf{b}, vt)$), и считать, что сила кулоновского поля иона, действующая на электроны подоболочки, не зависит от координаты электрона. Тогда интеграл по времени в (3) берется аналитически, и в результате получаем

$$\mathcal{F}_{jm}(\mathscr{E} l_1 j_1 m_1;\ b) = \sqrt{2}\,\frac{Q_1 e^2}{\hbar v}\,\hat{l}\,\hat{j}\,(-1)^{l+j+1/2} \begin{Bmatrix} l_1 & j_1 & 1/2 \\ j & l & 1 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \langle l010 | l_1 0\rangle R_{nlj}^{\mathscr{E} l_1 j_1} \sum_M \langle 1Mjm | j_1 m_1\rangle\, q T_M(qb), \quad (4)$$

где

$$T_{\pm 1}(x) = \pm i K_1(x); \quad T_0(x) = \sqrt{2}\, K_0(x), \quad (4а)$$

а дипольный радиальный интеграл есть

$$R_{nlj}^{\mathscr{E} l_1 j_1} = \int\limits_0^{\infty} dr\, P^{+}_{\mathscr{E} l_1 j_1}(r)\, r P_{nlj}(r). \quad (4б)$$

Здесь $q = \dfrac{w_{fi}}{v}$; $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix}$ — коэффициент Рака; $\hat{j} = \sqrt{2j+1}$; $K_\nu(x)$ — функции Макдональда; $P_{nlj}(r)$ и $P_{\mathscr{E} lj}(r)$ — одночастичные радиальные функции электрона в связанном состоянии и непрерывном спектре.

Если теперь выражение (4) подставить в (2), то легко просуммировать по проекциям угловых моментов электрона m, m' и m_1. Воспользуемся нерелятивистским приближением для описания выбитого электрона. В этом случае дипольный радиальный интеграл (4б) не зависит от полных угловых моментов j и j_1 (эти индексы будем в дальнейшем опускать). Тогда можно просуммировать и по полному угловому моменту выбитого электрона. В результате для статистических тензоров получим

$$\rho_{k\varkappa}(j,\ j,\ b) = 2\left[\frac{Q_1 e^2}{\hbar v}\right]^2 C_k \int\limits_0^{\infty} d\mathscr{E}\, F_{nl}^k(\mathscr{E})\, q^2 B_{k\varkappa}(qb), \quad (5)$$

где

$$C_k = (2j+1)(-1)^{l+j+1/2} \begin{Bmatrix} l & k & l \\ j & 1/2 & j \end{Bmatrix}, \quad (5а)$$

$$B_{00}(x) = \left(2/\sqrt{3}\right)\left(K_0^2(x) + K_1^2(x)\right); \quad B_{20}(x) = \left(2/\sqrt{6}\right)\left(K_1^2(x) - \right.$$

$$\left. - 2K_0^2(x)\right); \quad B_{22}(x) = -K_1^2(x), \quad (5б)$$

$$F^k_{nl}(\mathscr{E}) = \begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & (l-1) & 1 \end{Bmatrix} l (R^{\mathscr{E}l-1}_{nl})^2 + \begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & (l+1) & 1 \end{Bmatrix} (l+1)(R^{\mathscr{E}l+1}_{nl})^2. \quad (5в)$$

Здесь дипольный радиальный интеграл $R^{\mathscr{E}l\pm1}_{nl}$ дается выражением, аналогичным (4б). В случае $k=\varkappa=0$ выражения (5) дают известную формулу для вероятности ионизации в дипольном приближении [12]. Таким образом, в дипольном приближении удается факторизовать подынтегральное выражение для тензоров выстроенности на $F_{nl}{}^k(\mathscr{E})$ — часть, зависящую от волновых функций выбиваемого электрона, и $B_{k\varkappa}(qb)$ — часть, зависящую от прицельного параметра, которая дается простыми аналитическими выражениями (5б). Формулы (5) являются по существу полуклассическим аналогом приближения Бете для тензоров выстроенности, которое использовалось для оценки выстраивания вакансий электронным ударом на ранней стадии теоретического изучения этого вопроса [14].

При столкновениях с прицельными параметрами, много большими адиабатического радиуса ($r_{ад}=\hbar v/\mathscr{E}_B$), нормированные тензоры выстроенности (1) практически не зависят от b. Действительно, если воспользоваться асимптотическим представлением функций Макдональда $\left(K_\nu(x\gg1)\approx\sqrt{\pi/2x}\exp(-x)\right)$, для тензоров выстроенности можно записать:

$$\rho_{k\varkappa}(j,\ j,\ b) \simeq \frac{\pi}{b}\left[\frac{Q_1e^2}{\hbar v}\right]^2 C_k\overline{B}_{k\varkappa}\int\limits_0^\infty d\mathscr{E}F^k_{nl}(\mathscr{E})\,q\exp(-2qb),$$

где $\overline{B}_{00}=4/\sqrt{3}$; $\overline{B}_{20}=-2/\sqrt{6}$; $\overline{B}_{22}=-1$. Как видно из этого выражения, основной вклад в интеграл при больших b дают энергии выбитого электрона, соответствующие минимальным q, т. е. $\mathscr{E}\simeq0$. Поэтому для оценки нормированных тензоров (1) достаточно рассмотреть подынтегральное выражение при $\mathscr{E}=0$. (Как показывают численные проверки, относительная ошибка в значении $\mathscr{A}_{2\varkappa}$ при этом не превышает 2%.) Тогда нормированные тензоры выстроенности выражаются через единственный параметр $\lambda=\sqrt{l/(l+1)}\,(R^{\mathscr{E}l-1}_{nl}/R^{\mathscr{E}l+1}_{nl})_{\mathscr{E}=0}$ следующим образом:

$$\mathscr{A}_{2\varkappa}|_{b\gg r_{ад}} = c\theta_\varkappa\frac{1+a\lambda^2}{1+\lambda^2}, \quad (6)$$

где

$$\theta_0=-0{,}5;\quad \theta_2=-\sqrt{6}/4\approx-0{,}61;\quad a=\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ 1 & (l-1) & 1 \end{Bmatrix}\times$$

$$\times\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ 1 & (l+1) & 1 \end{Bmatrix}^{-1}, \quad (6а)$$

$$c=(-1)^{l+j+1/2}(2l+1)\left(\frac{6j+3}{2}\right)^{1/2}\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ j & 1/2 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ 1 & (l+1) & 1 \end{Bmatrix}.$$

Коэффициенты a и c табулированы в работе [15]. Как видно из (6), величины компонент $\mathscr{A}_{2\varkappa}$ велики при $\lambda^2\gg1$ и минимальны при $\lambda^2\ll1$ ($\mathscr{A}^{\min}_{2\varkappa}=c\theta_\varkappa$). В водородоподобной модели всегда преобладают дипольные переходы $nl\to\mathscr{E}l+1$ и выполняется неравенство $\lambda<1$ [14, 16]. Поэтому водородоподобная модель дает малую величину выстроенности. Например, в случае $2p_{3/2}$ подоболочки $\lambda^2=1/32$, а компоненты тензоров выстроенности $\mathscr{A}_{20}\simeq-0{,}034$; $\mathscr{A}_{22}\simeq-0{,}042$ (см. таблицу в [15]). Отметим, что для реального атома учет взаимной экранировки поля ядра электронами может привести к ситуации, когда $\lambda>1$ [15, 16]. В результате выстроенность вакансий окажется значительной. Поэтому использование водородоподобной модели можно рассматривать как нижнюю оценку для параметров выстроенности вакансий. Однако даваемые и этой моделью величины $\mathscr{A}_{2\varkappa}$ вполне измеримы [5].

3. **Выстраивание вакансий во внутренних оболочках атомов при каналировании.** Интегральные тензоры выстроенности и сечение ионизации для каналированных ионов находятся путем усреднения дифференциальных по прицельному параметру величин по плотности распределения частиц в канале $G(\mathbf{b})$. Если пренебречь тепловыми колебаниями атомов, для статистических тензоров можно записать:

$$\rho_{k\varkappa}(j,\ j)=\int d^2b\exp(i\varkappa\varphi_b)\,\rho_{k\varkappa}(j,\ j,\ b)\,G(\mathbf{b})=$$

$$=2\left[\frac{Q_1e^2}{\hbar v}\right]^2C_k\int\limits_0^\infty d\mathscr{E}F_{nl}^k(\mathscr{E})\,q^2W_{k\varkappa}(q), \qquad (7)$$

где $\varphi_{\mathbf{b}}$ — азимутальный угол вектора $\mathbf{b}$, а топологический фактор

$$W_{k\varkappa}(q)=\int d^2b\exp(i\varkappa\varphi_{\mathbf{b}})\,B_{k\varkappa}(qb)\,G(\mathbf{b}). \qquad (8)$$

Таким образом, в (7) подынтегральное выражение для статистических тензоров вакансий, образованных каналированными ионами, также оказывается факторизованным. При этом вся информация об атоме заложена в дипольном факторе $F_{nl}{}^k(\mathscr{E})$, а информация о плотности распределения частиц в канале — в топологическом факторе $W_{k\varkappa}(q)$, и их можно рассматривать отдельно.

Формулы для тензоров выстроенности, аналогичные (7), (8), были получены ранее [6] на основе квантовомеханического подхода. В [6] рассмотрение ограничивалось случаем плоскостного каналирования, для которого задача расчета выстроенности вакансий была сведена к расчету атомного фактора, зависящего от волновых функций выбитого электрона, и структурного фактора, определяемого через плотность распределения частиц в плоскостном канале. Полученные в настоящей работе выражения для тензоров выстроенности (7), (8) являются общими и позволяют рассчитывать выстроенность вакансий как для осевого, так и для плоскостного каналирования. В качестве примеров в простых моделях получим формулы для топологического фактора, удобные для расчетов. Везде далее будем считать, что атом находится в узле решетки.

Осевое каналирование. Будем полагать, что толщина кристалла достаточна, чтобы установилось микроканоническое распределение в поперечной плоскости [17], когда ион с равной вероятностью можно обнаружить в любой точке доступной области $U(\mathbf{r})\leqslant E_\perp$, где $E_\perp=Mv_\perp{}^2/2+U(\mathbf{r})$ — полная энергия поперечного движения, а $U(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия иона в поле цепочки атомов. Когда r достаточно малы, $U(\mathbf{r})$ можно считать практически не зависящими от азимутального угла $\varphi_{\mathbf{r}}$. Тогда в силу азимутальной симметрии ненулевыми оказываются компоненты ρ_{00} и ρ_{20}, а для топологического фактора можно записать

$$W_{k\varkappa}(q)=2\pi\delta_{\varkappa0}\int dE_\perp\Pi(E_\perp)\,\varpi_{k0}(E_\perp,\ q), \qquad (9)$$

где $\Pi(E_\perp)$ — плотность распределения ионов по поперечным энергиям, а для $w_{k0}(E_\perp, q)$, интегрируя по распределению ионов с определенной $E_\perp$ [18], легко получить

$$w_{00}(E_\perp, q) = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{r_0^2}{q^2(r_0^2 - r_1^2)} (qr_1) K_0(qr_1) K_1(qr_1), \tag{9а}$$

$$w_{20}(E_\perp, q) = \frac{1}{\sqrt{2}} w_{00}(E_\perp, q) + \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{r_0^2 r_1^2}{(r_0^2 - r_1^2)} (K_0^2(qr_1) - K_1^2(qr_1)), \tag{9б}$$

где $r_0^2 = 1/(\pi N d)$, N — плотность атомов кристалла, d — расстояние между атомами цепочки, а r_1 определяется из условия $E_\perp = U(r_1) - U(r_0)$, т. е. r_1 — расстояние максимального сближения с цепочкой атомов для данной $E_\perp$. Таким образом, в случае осевого каналирования топологический фактор легко рассчитывается, если известно распределение ионов по поперечным энергиям $\Pi(E_\perp)$, которое хорошо изучено (см., напр., [18]).

В случае больших скоростей ионов, когда $(qr_1) \ll 1$, формулы (7), (9) дают для параметра $\mathscr{A}_{20}$ выражение, совпадающее с полученным в приближении Бете [14]. При малых скоростях, когда $(qr_1) \gg 1$, параметр $\mathscr{A}_{20}$ дается формулой (6), так как при этом выстроенность подоболочки практически не зависит от прицельного параметра. Для толщин кристаллов, при которых еще не установилось полное микроканоническое равновесие в поперечной плоскости, распределение потока ионов будет обладать азимутальной асимметрией [8]. При этом компонента $\mathscr{A}_{22}$ тензора выстроенности будет, вообще говоря, ненулевой. При больших скоростях ионов возможна ситуация, когда $\mathscr{A}_{20} \approx 0$ [10]. В этом случае выстроенность вакансий, а следовательно, линейная поляризация и угловая анизотропия характеристического рентгеновского излучения, будут полностью определяться компонентой $\mathscr{A}_{22}$, связанной с азимутальной асимметрией потока ионов. Чувствительность выстраивания вакансий к азимутальному распределению потока ионов можно увидеть на примере плоскостного каналирования, рассмотрение которого имеет самостоятельный интерес.

Плоскостное каналирование. В случае плоскостного каналирования плотность распределения частиц в канале не зависит от координаты y (ось Y направлена вдоль плоскости каналирования): $G(\mathbf{b}) = G(x)$. Топологический фактор при этом можно представить в виде

$$W_{k\varkappa}(q) = 2\pi \int dx\, G(x)\, w^p{}_{k\varkappa}(x;\ q). \tag{10}$$

Для $w^p{}_{k\varkappa}(x;\ q)$ в результате интегрирования по координате y получим

$$w_{00}^p(x,\ q) = \frac{2}{\sqrt{3}\, q} K_1(2q|x|), \tag{10а}$$

$$w_{20}^p(x,\ q) = \frac{1}{\sqrt{2}} w_{00}^p(x,\ q) - \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{q} I(2q|x|), \tag{10б}$$

$$w_{22}^p(x,\ q) = \frac{-1}{2q} I(2q|x|), \tag{10в}$$

где

$$I(t) = \int_t^\infty K_0(t)\, dt, \qquad K_0 \text{ — функция Макдональда (см., напр., [19]).}$$

Таким образом, топологический фактор в случае плоскостного каналирования легко рассчитывается, если известна плотность распределения частиц в плоскостном канале $G(x)$. В случае классических частиц (ионы) $G(x)$ можно легко найти, если задан межплоскостной потенциал (см., напр., [20]). Отметим, что формулы (7), (10) в случае $q|x|\gg 1$ совпадают с аналогичными выражениями для тензоров выстраивания в дипольном приближении [6]. Полученные при этом компоненты выстроенности $\mathcal{A}_{20}$ и $\mathcal{A}_{22}$ даются выражениями (7) и легко рассчитываются. Приведенные в п. 2 количественные оценки параметров $\mathcal{A}_{20}$ и $\mathcal{A}_{22}$ для $2p_{3/2}$ подоболочки при больших скоростях ионов хорошо согласуются с аналогичными величинами, рассчитанными в работе [6].

4. **Заключение.** Предложенный в настоящей работе метод расчета выстроенности вакансий во внутренних оболочках атомов, образованных каналированными ионами, позволяет легко получать компоненты выстроенности, а следовательно, поляризацию и угловое распределение последующего излучения для произвольного распределения потока частиц в канале. Проведенные в простейших случаях аналитические оценки компонент выстроенности для больших скоростей ионов хорошо согласуются с более аккуратными, но трудоемкими расчетами [6, 7]. Выстраивание в случае плоскостного каналирования показывает чувствительность этих явлений к азимутальному распределению потока ионов. Поэтому исследование выстраивания может стать одним из методов экспериментального изучения механизмов установления динамического хаоса в плоскости поперечного движения частиц для осевого каналирования. Однако этот вопрос требует специального исследования.

Автор благодарен д-ру физ.-мат. наук Н. М. Кабачнику за интерес к работе и постоянные плодотворные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Gemmel D. S.//Rev. Mod. Phys. 1974. **46**. P. 129. [2] Kosse A. I. et al.//Rad. Eff. 1983. **77**. P. 205. [3] Eremin N. V. et al.//Nucl. Instr. and Meth. 1986. **B13**. P. 81. [4] Vorobyev N. F., Petukhov V. P., Kabachnik N. M.//Ibid. 1984. **B2**. P. 316. [5] Балашова Л. Л. и др.//Приб. и техн. эксперимента. 1986. **3**. С. 214. [6] Vorobyev N. F., Kondratyev V. N., Kabachnik N. M.//Nucl. Instr. and Meth. 1987. **B27**. P. 374. [7] Еремин Н. В., Кабачник Н. М., Кондратьев В. Н.//Тр. XVI Всесоюз. совещ. по физ. взаимод. заряж. частиц с кристаллами. М., 1987. С. 84. [8] Khodyrev V. A.//Phys. Lett. 1985. **111A**. P. 67. [9] Mehlhorn W.//Phys. Lett. 1968. **26A**. P. 166. [10] Berezhko E. G., Kabachnik N. M.//J. Phys. B. 1977. **10**. P. 2467. [11] Hippler R.//Fundamental Processes of Atomic Collision Physics. N. Y., 1985. [12] Комаров Ф. Ф., Новиков А. П.//ЖТФ. 1981. **51**. С. 247. [13] Beloshitsky V. V., Kumakhov M. A.//Rad. Eff. 1978. **35**, P. 209. [14] McFarline S. C.//J. Phys. B. 1972. **5**. P. 1906. [15] Berezhko E. G., Kabachnik N. M., Rostovsky V. S.//J. Phys. B. 1978. **11**. P. 1749. [16] Berezhko E. G., Kabachnik N. M., Sizov V. V.//Ibid. P. 1819. [17] Appleton B. R., Erginsoy C., Gibson W. M.//Phys. Rev. 1967. **161**. P. 330. [18] Кумахов М. А., Ширмер Г. Атомные столкновения в кристаллах. М., 1980. [19] Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М., 1979. [20] Ellison J. A., Picraux S. T.//Phys. Rev. 1978. **B18**. P. 1028.

Поступила в редакцию
25.02.87