УДК 539.184.56–539.184.27

УГЛОВАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ КАСКАДНЫХ ФОТОНОВ В ПРОЦЕССЕ ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ КАНАЛИРОВАННЫХ ИОНОВ

В. В. Балашов, А. В. Стысин

(*НИИЯФ*)

E-mail: balvse@anna19.npi.msu.su

Предложен метод для описания угловой корреляции каскадных фотонов в ходе диэлектронной рекомбинации быстрых ионов в условиях каналирования в ориентированных кристаллах, основанный на аппарате матрицы плотности. Выполнены теоретические расчеты, показывающие масштаб влияния взаимодействия электронной оболочки проходящего иона с электростатическим полем кристаллической решетки на форму угловой корреляции в разных условиях постановки корреляционного эксперимента.

Введение

В работе [1] был предложен метод описания угловой анизотропии и угловой корреляции каскадных фотонов в процессе диэлектронной рекомбинации быстрых ионов при прохождении через вещество, основанный на аппарате матрицы плотности. Он оказался удобным инструментом в теоретических исследованиях по более широкому кругу поляризационных и корреляционных явлений в физике атомных столкновений [2] и был использован в расчетах диэлектронной рекомбинации и радиационной рекомбинации тяжелых ионов [3, 4] в связи с программой новых исследований с многозарядными ионами и антипротонами в ускорительно-накопительном центре GSI (Дармштадт).

Недавно мы сделали шаг в сторону применения этого метода в физике кристаллов, рассмотрев на его основе возможные особенности угловой анизотропии и угловой корреляции каскадных фотонов в процессе радиационного захвата электрона при движении быстрого многозарядного иона сквозь ориентированную кристаллическую мишень [5]. Расширение этого направления исследований ведет к анализу корреляционных характеристик электромагнитного излучения каналированных ионов в процессе диэлектронной рекомбинации. Цель настоящего сообщения — показать качественные отличия рассматриваемого процесса от того же процесса диэлектронной рекомбинации в условиях неориентированной мишени. Эти отличия можно ожидать в силу требований, накладываемых на процесс свойствами симметрии электростатического поля кристалла, в котором движется каналированный ион. Для начала мы берем простые примеры рассматриваемого процесса, где эффекты симметрии выходят на первый план; развернутые расчеты с более детальным учетом других факторов взаимодействия иона со средой будут описаны отдельно. Как и ранее [5], мы отдаем предпочтение случаю плоскостного каналирования из-за более явного нарушения в этом случае аксиальной симметрии взаимодействия иона с мишенью, чем в случае осевого каналирования.

1. Кинетика диэлектронной рекомбинации каналированного иона

Изменения состояния электронной оболочки иона в процессе его прохождения через канал вызываются одновременным воздействием на нее электростатического поля решетки $\hat{V}^{\text{lattice}}$, поляризационной волны $\hat{V}^{\text{wake}}$, создаваемой в газе свободных электронов мишени самим проходящим ионом, и необратимыми процессами упругих и неупругих столкновений иона с электронами и атомами среды. В системе отсчета, связанной с ионом, с учетом его торможения по мере прохождения через мишень и криволинейности его траектории, все эти факторы зависят от времени. Мы описываем состояние электронной оболочки иона матрицей плотности $\hat{\rho}(t)$, подчиняющейся обобщенному кинетическому уравнению

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}_{\text{ion}}, \hat{\rho}] + \hat{R}\hat{\rho}, \tag{1}$$

с гамильтонианом

$$\hat{H}_{\text{ion}} = \hat{H}_{\text{ion}}^{\text{free}} + \hat{V}^{\text{lattice}} + \hat{V}^{\text{wake}}, \tag{2}$$

и оператором $\hat{R}$, отвечающим за столкновительные релаксационные процессы и спонтанное высвечивание образующихся возбужденных состояний иона. В базисе собственных состояний $|n\rangle = |1\rangle, \ldots, |N\rangle$ гамильтониана $\hat{H}_{\text{ion}}^{\text{free}}$ свободного иона уравнение (1) представляет собой систему связанных дифференциальных уравнений для элементов матрицы плотности $\langle n|\,\hat{\rho}(t)\,|n'\rangle$, которая решается с начальными условиями, определяемыми физической постановкой конкретной задачи. Выпишем эти уравнения в представлении взаимодействия $\rho_{nn'}(t) = \langle n|\,\hat{\rho}(t)\,|n'\rangle\, e^{i\omega_{nn'}t}$, $V_{nn'}(t) = \langle n|\,\hat{V}(t)\,|n'\rangle\, e^{i\omega_{nn'}t}$ (здесь $\omega_{nn'} = (E_n - E_{n'})/\hbar$) для элементов матрицы плотности, соответствующих промежуточному состоянию иона, через которое идет процесс диэлектронной рекомбинации:

$$\frac{\partial \rho_{nn'}(t)}{\partial t} = -i \cdot \sum_{m=1}^{N} \left[V_{nm}(t)\cdot\rho_{mn'}(t) - \rho_{nm}(t)\cdot V_{mn'}(t)\right] - \\ - \frac{1}{2}(\lambda_n + \lambda_{n'})\rho_{nn'}(t). \quad (3)$$

Здесь λ_n — скорость изменения заселенности состояния $|n\rangle$ за счет его спонтанного высвечивания, захвата электрона и ионизации иона. Для описания поляризационных и корреляционных характеристик процесса с участием состояний, задаваемых квантовыми числами их углового момента LM_L или JM_J, будем пользоваться представлением матрицы плотности в виде статистических тензоров [2]. Выбирая систему координат для проведения расчетов, направим ось x вдоль пучка ионов, а ось z (ось квантования) — перпендикулярно плоскости канала.

Дальнейшее рассмотрение проведем на примере последовательного испускания фотонов γ_1 и γ_2 в дипольных E1-переходах процесса диэлектронной рекомбинации гелиеподобного иона с зарядом ядра Z, идущего через автоионизационное состояние $2p^2 : {}^1S_0$:

$$I^{Z-1}({}^2S_{1/2}) + e \to I^{Z-2}(2p^2 : {}^1S_0) \to \\ \to I^{Z-2}(1s2p : {}^1P_1) + \gamma_1; \\ I^{Z-2}(1s2p : {}^1P_1) \to I^{Z-2}(1s^2 : {}^1S_0) + \gamma_2. \quad (4)$$

Пусть фотон γ_1 регистрируется в направлении $(\theta_{\gamma_1}, \phi_{\gamma_1})$ безотносительно к его поляризации. Далее всюду полярные углы θ_{γ_i} вылета фотонов отсчитываются от оси квантования; аксиальные углы ϕ_{γ_i} отсчитываются в плоскости (xy) от оси x. Параметры матрицы плотности (статистические тензоры) промежуточного состояния $1s2p : {}^1P_1$ в момент его образования и их зависимость от направления вылета фотона γ_1 определяются матрицей плотности автоионизационного состояния, из которого испускается фотон γ_1, и значениями углового момента состояний, между которыми осуществляется переход [2]. В рассматриваемом примере отличны от нуля только статистические тензоры с четными k

$$\rho_{kq}(\theta_{\gamma_1}, \phi_{\gamma_1}) = \sqrt{4\pi}(1 -1, 11|k0) Y^*_{kq}(\theta_{\gamma_1}, \phi_{\gamma_1}), \quad (5)$$

где $(1 -1, 11|k0)$ — коэффициент Клебша–Гордана, а $Y_{kq}(\theta, \phi)$ — сферическая функция. Будем сравнивать друг с другом два случая, рассматривая этот процесс в разреженной неупорядоченной среде (например, в газе) и, с другой стороны, в кристалле при каналировании. В первом случае (разреженная неупорядоченная среда, нет внешних полей) состояние $1s2p : {}^1P_1$ трехкратно вырождено, и его поляризационные характеристики, а следовательно, и угловое распределение фотона γ_2 остаются неизменными в течение всего времени высвечивания этого состояния. Угловая корреляция фотонов γ_1 и γ_2 рассчитывается по формулам каскадных переходов в изолированном атоме или ионе [2]:

$$W(\theta_{\gamma_1}, \phi_{\gamma_1}; \theta_{\gamma_2}, \phi_{\gamma_2}) = \\ = \frac{W_0}{4\pi}\left[1 + \sqrt{\frac{2\pi}{5}} \sum_{q=-2}^{2} A_{2q}(\theta_{\gamma_1}, \phi_{\gamma_1}) Y_{2q}(\theta_{\gamma_2}, \phi_{\gamma_2})\right], \quad (6)$$

где $A_{kq} = \rho_{kq}/\rho_{00}$ — приведенный статистический тензор.

Когда процесс (4) идет в кристалле, начальное значение матрицы плотности промежуточного состояния задается той же формулой (5), а далее ее эволюция во времени описывается уравнением (1). Рассмотрим, что при этом происходит в нашем примере, сосредоточив внимание на эффекте расщепления уровня $1s2p : {}^1P_1$ в поле кристаллической решетки $\hat{V}^{(\mathrm{lattice})}$, которое аппроксимируем непрерывным потенциалом Линдхарда $V_L(z)$. От более слабых эффектов, связанных с влиянием хаотических многократных столкновений и образованием поляризационной волны, отвлекаемся. В пространстве состояний свободного иона $1s2p : {}^1P_{1;M=0;\pm 1}$, коль скоро ось квантования направлена по нормали к плоскости канала, матрица потенциала Линдхарда диагональна, а его матричные элементы $\left\langle {}^1P_{1;M}\right|\hat{V}^{(\mathrm{lattice})}\left|{}^1P_{1;M}\right\rangle$ при $M = 1$ и $M = -1$ равны друг другу. В таких условиях все элементы матрицы плотности с $\Delta M = 0$ или ± 2 убывают в процессе высвечивания состояния $1s2p : {}^1P_1$ согласно закону радиоактивного распада $e^{-\lambda t}$ (наряду со скоростью радиационного распада λ будем также пользоваться понятиями радиационной ширины $\Gamma = \hbar\lambda$ и среднего времени жизни $\tau_{\gamma_2} = 1/\lambda$ уровня $1s2p : {}^1P_1$ по отношению к радиационному распаду). Для элементов с $\Delta M = \pm 1$ из уравнений (3) следует другой закон:

$$\left\langle {}^1P_{1;M=0}\right|\hat{\rho}(t)\left|{}^1P_{1;M=\pm 1}\right\rangle = \\ = \left\langle {}^1P_{1;M=0}\right|\hat{\rho}(t=0)\left|{}^1P_{1;M=\pm 1}\right\rangle \cdot e^{-\lambda t} e^{\mp i\frac{\Delta E}{\hbar}t}, \quad (7)$$

где

$$\Delta E = \left|\left\langle {}^1P_{1;M=\pm 1}\right|\hat{V}^{(\mathrm{lattice})}\left|{}^1P_{1;M=\pm 1}\right\rangle - \\ - \left\langle {}^1P_{1;M=0}\right|\hat{V}^{(\mathrm{lattice})}\left|{}^1P_{1;M=0}\right\rangle\right| \quad (8)$$

— расщепление уровня $1s2p : {}^1P_1$ в поле кристалла. Отсюда видно, что все статистические тензоры ρ_{2q} состояния $1s2p : {}^1P_1$ экспоненциально затухают по единому закону ($\sim e^{-\lambda t}$). Помимо этого те из них, где $q = \pm 1$, осциллируют во времени с периодом $T_{\text{osc}} = 2\pi\hbar/\Delta E$. В совокупности это приводит к тому, что форма угловой корреляции фотонов γ_1 и γ_2 меняется со временем в ходе высвечивания промежуточного состояния.

2. Расчеты и обсуждение

2.1. Зависимость влияния кристаллического поля на угловую корреляцию фотонов от атомного номера иона

На рис. 1 показана величина расщепления ΔE уровня $1s2p : {}^1P_1$ по проекции полного углового момента в гелиеподобных ионах от аргона Ar^{16+} (энергия возбуждения 3139.5 эВ) до железа Fe^{24+} (энергия возбуждения 6700.4 эВ) в центре ($z = 0$) плоскостного канала ($2\bar{2}0$) монокристалла кремния и при смещении иона в сторону стенки канала на расстояния $z = 0.3(\frac{d}{2})$ и $0.6(\frac{d}{2})$ (d — ширина канала). Расчет выполнен по примеру работ [6, 7] для непрерывного потенциала Линдхарда

$$V_L(z) = \frac{32\pi Z_{\text{target}}}{a^3} \sum_{j=1}^{3} a_j \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{16\pi^2 q^2}{3} \frac{1}{a^2} \langle r^2 \rangle\right\} \times \\ \times \frac{\exp\left\{-i\frac{4\sqrt{2}\pi q}{a} z\right\}}{\left(\frac{b_j}{a_{TF}}\right)^2 + \left(\frac{4\sqrt{2}\pi q}{a}\right)^2}, \quad (9)$$

с учетом структуры типа алмаза для кристалла кремния. В качестве модели потенциала изолированного атома использован известный двухчастичный потенциал Мольера с параметрами из работы [8]; для учета тепловых колебаний атомов решетки введен фактор Дебая–Валлера. На том же рис. 1 показана зависимость радиационной ширины Γ уровня $1s2p : {}^1P_1$ от атомного номера Z (кривая *4*). Во всем интервале Z от Ar^{16+} до Fe^{24+} величина расщепления ΔE составляет микроскопическую долю энергии фотона γ_2, и потому факт

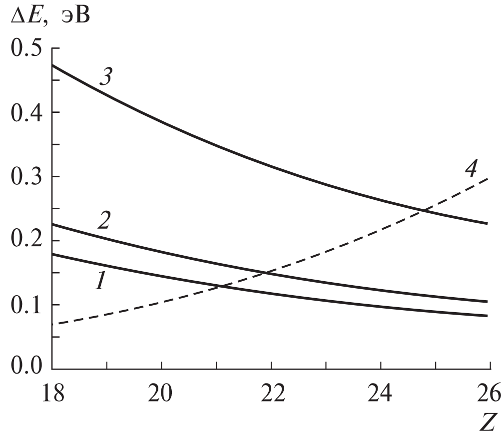

Рис. 1. Расщепление (8) уровня $1s2p : {}^1P_1$ в ионах от аргона Ar^{16+} до железа Fe^{24+} в плоскостном канале ($2\bar{2}0$) кристалла кремния: *1* — в центре канала; *2* — при отклонении от центра на 0.3 полуширины канала; *3* — при отклонении от центра на 0.6 полуширины канала; *4* — ход радиационной ширины Γ этого уровня

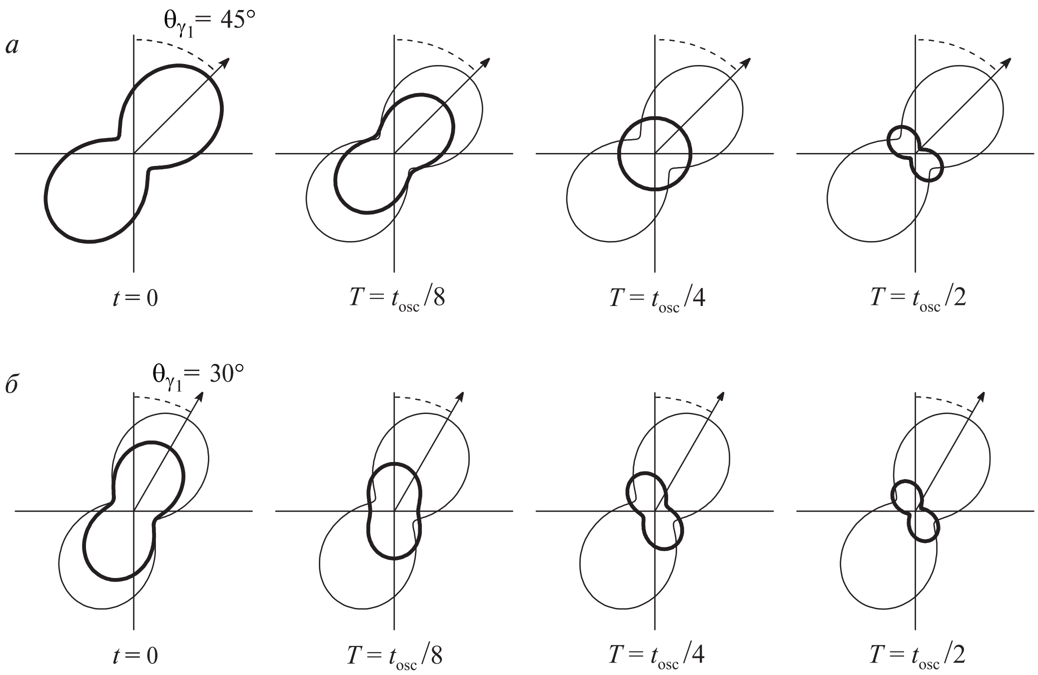

Рис. 2. Эволюция мгновенного углового распределения фотонов γ_2 в плоскости, перпендикулярной пучку ионов аргона Ar^{16+}, в центре канала при условии, что фотон γ_1 зарегистрирован в этой же плоскости под углом 45° (*а*) и 30° (*б*) к оси квантования. Кривые показаны для моментов времени $t = 0$, $t = T_{\text{osc}}/8$, $t = T_{\text{osc}}/4$ и $t = T_{\text{osc}}/2$. Тонкая линия на рисунках показывает угловое распределение в момент времени $t = 0$, стрелкой указано направление вылета фотона γ_1

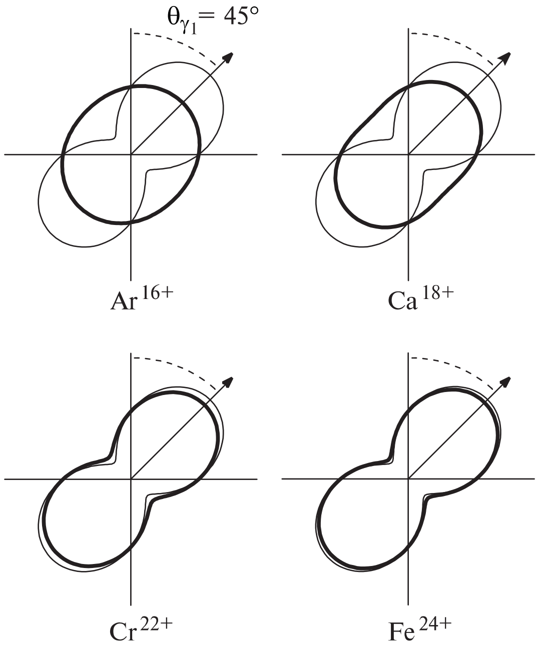

Рис. 3. Результирующее угловое распределение фотонов γ_2 за все время высвечивания состояния $1s2p:{}^1P_1$ в плоскости, перпендикулярной пучку ионов Ar^{16+}, Ca^{18+}, Cr^{22+}, Fe^{24+}, рассчитанное для случая, когда фотон γ_1 регистрируется в этой же плоскости под углом 45° к оси z. Тонкая кривая на рисунках соответствует случаю диэлектронной рекомбинации свободного иона, стрелкой указано направление вылета фотона γ_1

такого расщепления не может быть зафиксирован обычными средствами рентгеновской спектроскопии. Метод угловой корреляции в принципе предоставляет такую возможность. Обратимся сначала к данным рис. 1 и результатам расчетов (рис. 2 и 3) для ионов, находящихся в центре канала.

Характерные особенности эволюции мгновенного углового распределения фотонов γ_2 определяются законом эволюции элементов матрицы плотности (7) и качественно зависят от соотношения между временем высвечивания τ_{γ_2} и периодом осцилляций $T_{\rm osc}$ элементов матрицы плотности $\left\langle {}^1P_{1;M=0}\right|\hat\rho(t)\left|{}^1P_{1;M=\pm1}\right\rangle$. В районе аргона Ar^{16+} (рис. 2) радиационный переход $1s2p:{}^1P_1\to 1s^2:{}^1S_0+\gamma_2$ идет относительно медленно, и за время высвечивания форма мгновенного углового распределения существенно меняется. Из рис. 3 видно, что угловое распределение фотона γ_2, регистрируемое детектором за все время высвечивания (будем называть его «результирующим» угловым распределением), оказывается почти таким, как если бы матричные элементы $\left\langle {}^1P_{1;M=0}\right|\hat\rho(t=0)\left|{}^1P_{1;M=\pm1}\right\rangle$ отсутствовали в матрице плотности состояния с самого начала. Ион «забывает» о начальных значениях этих недиагональных матричных элементов; квантовые биения заселенностей подуровней состояния $1s2p:{}^1P_1$ разрушают возможный начальный эффект когерентности между ними. Из рис. 1 следует, что соотношение между временами высвечивания τ_{γ_2} состояния $1s2p:{}^1P_1$ и периодом осцилляций $T_{\rm osc}$ качественно меняется в середине рассматриваемого интервала Z. В районе железа Fe^{24+} радиационный распад идет столь быстро, что эффект биений едва успевает отразиться на эволюции матрицы плотности состояния $1s2p:{}^1P_1$ и угловая корреляция двух фотонов оказывается слабо чувствительной к влиянию поля кристалла. Качественно та же зависимость остается для ионов, смещенных от центра канала в сторону его стенок.

2.2. Влияние кристаллического поля на угловую корреляцию фотонов при различных условиях регистрации первого фотона

Расчеты на рис. 2,*а* и 3 соответствуют ситуации, когда фотон γ_1 регистрируется перпендикулярно пучку падающих ионов ($\phi_{\gamma_1}=90°$) под углом $\theta_{\gamma_1}=45°$ к оси квантования z. Отмеченные особенности угловой корреляции фотонов γ_1 и γ_2 сохраняются и при других углах регистрации фотона γ_1. Пример эволюции мгновенного углового распределения фотонов γ_2 для иона Ar^{16+} при регистрации фотона γ_1 под углом 30° приведен на рис. 2,*б*. Для того же иона на рис. 4 приведены расчеты результирующего углового распределения

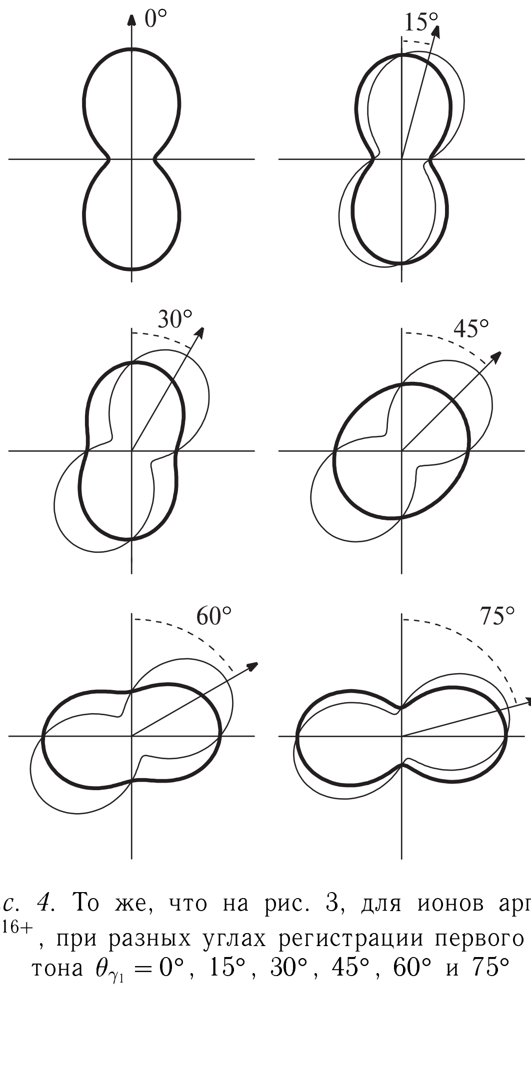

Рис. 4. То же, что на рис. 3, для ионов аргона Ar^{16+}, при разных углах регистрации первого фотона $\theta_{\gamma_1}=0°$, 15°, 30°, 45°, 60° и 75°

фотонов γ_2 для широкого набора углов регистрации фотона γ_1. Видно, что различие между характером угловой корреляции фотонов γ_1 и γ_2 при наблюдении процесса в условиях каналирования и на свободном ионе постепенно уменьшается по мере отклонения детектора первого фотона от угла 45° и полностью пропадает, когда этот фотон регистрируется либо в плоскости канала ($\theta_{\gamma_1} = 90°$), либо вдоль самой оси z. Это можно понять, исходя из общих симметрийных соображений. Действительно, регистрация первого фотона при $\theta_{\gamma_1} = 0°$ или 90° фиксирует промежуточное состояние иона $1s2p : {}^1P_1$, симметричное по отношению к отражению в плоскости канала. В таком случае матрица плотности $\hat{\rho}(t=0)$ и оператор возмущения $\hat{V}_L$ коммутируют между собой, а следовательно (см. (1)), поле кристалла не влияет на эволюцию матрицы плотности: высвечивание такого промежуточного состояния происходит одинаково как в кристалле, так и когда ион свободен.

Заключение

Эволюция промежуточного состояния многозарядного иона в процессе диэлектронной рекомбинации охватывает очень небольшой промежуток времени $\tau_{\gamma_2} = \hbar/\Gamma$ по сравнению со временем прохождения иона через мишени, обычно используемые в экспериментах по каналированию (в рассмотренных выше примерах $\tau_{\gamma_2}(\mathrm{Ar}^{16+}) = 9.3 \cdot 10^{-15}$ с, $\tau_{\gamma_2}(\mathrm{Fe}^{24+}) = 2.2 \cdot 10^{-15}$ с). Однако наше рассмотрение показывает, что теоретически метод угловых корреляций каскадных фотонов позволяет контролировать этот процесс. Наиболее благоприятные для этого условия следует искать среди ионов в районе $Z \sim 20$.

Авторы благодарны К. Ю. Бахминой и А. А. Соколику за помощь в расчетах и обсуждения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 06-02-17367) и проекта INTAS-GSI (грант 03-54-3604).

Литература

1. *Балашов В.В., Бодренко И.В., Долинов В.К.* и др. // Опт. и спектр. 1994. **77**. С. 891.
2. *Balashov V.V., Grum-Grzhimailo A.N., Kabachnik N.M.* Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. N. Y., 2000.
3. *Zakowicz S., Scheid W., Gruen N.* // J. Phys. B. 2004. **37**. P. 131.
4. *Surzhykov A., Jentschura U.D., Stohlker T., Fritzsche S.* // Phys. Rev. A. 2006. **73**. P. 032716.
5. *Bahmina K.Yu., Balashov V.V., Sokolik A.A., Stysin A.V.* // J. Phys. Conf. Series. 2007. **58**. P. 327.
6. *Balashov V.V., Bodrenko I.V.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2006. **245**. P. 52.
7. *Balashov V.V., Bodrenko I.V.* // Phys. Lett. A. 2006. **352**. P. 129.
8. *Оцуки Ё.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М., 1985.

Поступила в редакцию
25.12.06