

9. Leawitt R.P. Pressure broadening and shifting in microwave and infrared spectra of molecules of arbitrary symmetry: An irreducible tensor approach // J. Chem. Phys. — 1980. — V. 73. — № 12. — P. 5432–5450.
10. Черкасов М.Р. Формализм квантовомеханического оператора Лиувилля в расчетах релаксационных параметров. — Томск: Изд-во ИОА СО АН СССР, 1975. — 47 с. (препринт № 26).
11. Гроссман В.Э., Броуэлл Э.В., Быков А.Д. и др. Экспериментальное и теоретическое исследование сдвигов линий H_2O давлением N_2 , O_2 и воздуха // Оптика атмосферы. — 1990. — Т. 3. — № 7. — С. 675–690.
12. Быков А.Д., Стройнова В.Н. Сдвиг центров линий поглощения H_2O в диапазоне 13550–13950 cm^{-1} // Оптика атмосферы и океана. — 2006. — Т. 19. — № 1. — С. 31–38.
13. Стройнова В.Н. Расчеты коэффициентов уширения линий поглощения H_2O в диапазоне 13550–13950 cm^{-1} // Оптика атмосферы и океана. — 2005. — Т. 18. — № 9. — С. 820–824.
14. Быков А.Д., Лазарев В.В., Пономарев Ю.Н., Стройнова В.Н. и др. Сдвиги линий поглощения H_2O в полосе $\nu_1+3\nu_3$, индуцированные давлением благородных газов // Оптика атмосферы и океана. — 1994. — Т. 4. — № 9. — С. 1207–1219.
15. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975. — 439 с.
16. Gray C.G., Gubbins K.E. Theory of molecular fluids. — New York: Oxford University Press, 1984. — 626 p.
17. Mengel M., Jensen Per. A theoretical study of the Stark effect in triatomic molecules: Application to H_2O // J. Mol. Spectrosc. — 1995. — V. 169. — P. 73–91.
18. Физические величины / Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мельникова. — М.: Энергоатомиздат, 1991. — 891 с.
19. Emelyanov D.S., Stroinova V.N. H_2O halfwidths and lineshifts in $3\nu_1+\nu_3$ band induced by Ar pressure // Proc. SPIE. — 2006. — V. 6580. — 65800N (7 pages).

Поступила 14.12.2007 г.

УДК 538.97:539.186:539.184

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОГО КОГЕРЕНТНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ИОНОВ ^{17+}Ar С УЧЕТОМ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

А.А. Бабаев, Ю.Л. Пивоваров

Томский политехнический университет
E-mail: krass58ad@mail.ru

Построена компьютерная модель, позволяющая изучать влияние тонкой структуры на характеристики резонансного когерентного возбуждения релятивистских водородоподобных ионов при плоскостном каналировании. Модель использована для описания резонансного когерентного возбуждения при плоскостном каналировании 390 МэВ/нуклон ионов ^{17+}Ar . Показано, что резонансные кривые характеризуются двумя близко расположенными пиками, обусловленными переходами электрона иона из основного состояния в состояния, соответствующие компонентам тонкой структуры возбужденного состояния. Получено достаточно хорошее согласие с экспериментом.

При плоскостном каналировании водородоподобных ионов ион движется в периодическом поле плоскостей кристалла. В системе покоя иона на орбитальный электрон действует периодическое во времени электрическое поле. Если частота такого воздействия совпадает с частотой перехода между уровнями энергии орбитального электрона, возможен резонансный переход электрона в соответствующее возбужденное состояние [1] — резонансное когерентное возбуждение (*resonant coherent excitation*, RCE).

Ранее исследовалось, главным образом, RCE при каналировании нерелятивистских ионов (см., например, [2–5]). Проведены первые эксперименты по наблюдению RCE тяжелых релятивистских ионов. Существуют экспериментальные данные [6] и теоретические оценки [7], указывающие на значительное влияние тонкой структуры уровней энергии орбитального электрода на форму резонансной кривой. Таким образом, представляет интерес полное теоретическое исследование и компьютерное моделирование RCE тяжелых реля-

тивистских ионов с учетом тонкой структуры уровней энергии орбитального электрона.

Рассмотрим движение релятивистского водородоподобного иона вдоль кристаллографической плоскости в режиме плоскостного каналирования. Пусть направление оси ОХ прямоугольной системы координат перпендикулярно плоскостям каналирования, а направления осей ОУ и ОZ совпадают с направлениями кристаллографических осей в плоскости каналирования. Электрическое поле кристалла в системе покоя иона представляется в виде суммы непрерывного потенциала и гармоник периодического электрического поля с частотами:

$$\omega_{kl} = 2\pi\gamma v \left(k \frac{\cos \varphi}{a_y} + l \frac{\sin \varphi}{a_z} \right),$$

где γ — релятивистский фактор; v — скорость иона; a_y и a_z — расстояния между атомами в плоскости; φ — угол между скоростью иона и направлением оси ОУ в плоскости; k и l — целые числа. Резонансный

переход между i -м и f -м уровнями энергии орбитального электрона наблюдается, если для некоторой гармоники периодического электрического поля выполняется условие

$$E_{if} = \hbar\omega_{kl} = 2\pi\hbar\gamma v \left(k \frac{\cos\varphi}{a_y} + l \frac{\sin\varphi}{a_z} \right), \quad (1)$$

где E_{if} – энергия перехода между i -м и f -м уровнями энергии; $\hbar$ – постоянная Планка.

При вычислениях потенциал атома вещества решетки аппроксимирован потенциалом Мольера. Учитывается потенциал только двух ближайших к траектории иона плоскостей кристалла.

Система уровней энергии орбитального электрона тяжелого иона в отсутствие внешнего поля определяется главным квантовым числом уровня, тонкой структурой уровня и лэмбовским сдвигом. Внешнее электрическое поле плоскостей кристалла приводит к возникновению эффекта Штарка, проявляющегося в сдвиге и расщеплении уровней энергии, причем степень влияния эффекта Штарка на положение уровней энергии зависит от расстояния иона от центра канала. Пусть H_b – гамильтониан системы электрон-ион, не учитывающий спин-орбитальное взаимодействие, эффект Штарка и лэмбовский сдвиг, ψ_b – собственные функции и ε_b – собственные значения энергии этого гамильтониана. Пусть V_1 – оператор, отвечающий за возникновение лэмбовского сдвига, тонкой структуры уровней энергии электрона иона, действие непрерывного потенциала кристаллических плоскостей на электрон иона.

Волновые функции и собственные значения энергии системы с учетом оператора определяются методами теории возмущений из уравнения Шредингера

$$(H_b + V_1)\psi_i = E_i\psi_i, \quad (2)$$

как мало отличающиеся от волновых функций ψ_b и энергий ε_b . Рассматривая резонансный переход электрона из основного в первое возбужденное состояние, необходимо отметить, что под влиянием возмущения V_1 основной уровень энергии не расщепляется, и ему соответствуют две волновые функции, различающиеся значением проекции полного момента орбитального электрона ($\pm 1/2$). Первый возбужденный уровень расщепляется на четыре подуровня, которым соответствуют восемь различных волновых функций.

В системе покоя иона на электрон действует внешнее периодическое во времени электрическое поле кристалла (действием магнитного поля, появляющегося в системе покоя иона, пренебрегаем). Квантовая динамика электрона иона описывается уравнением типа Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_b + V_1 + U)\Psi, \quad (3)$$

где U – оператор, описывающий взаимодействие электрона с внешним периодическим полем, со-

держит только ту гармонику, для которой выполняется условие резонанса (1). Под временем подразумевается собственное время в системе покоя иона. Уравнение (3) решается методами теории возмущений, взаимодействие U предполагается малым по сравнению с гамильтонианом $H_b + V_1$. Волновая функция Ψ ищется как суперпозиция волновых функций ψ_j , являющихся решением уравнения (2) с зависящими от времени коэффициентами:

$$\Psi = \sum_{j=1}^{10} a_j(t) \psi_j \exp(-iE_j t / \hbar). \quad (4)$$

Подстановка волновой функции (4) в уравнение (3) дает систему уравнений на коэффициенты $a_j(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial a_1}{\partial t} &= \sum_{j=3}^{10} \langle \psi_1 | U | \psi_j \rangle a_j e^{-i\Delta_j t}, \\ i\hbar \frac{\partial a_2}{\partial t} &= \sum_{j=3}^{10} \langle \psi_2 | U | \psi_j \rangle a_j e^{-i\Delta_j t}, \\ i\hbar \frac{\partial a_m}{\partial t} &= \langle \psi_1 | U | \psi_m \rangle^* a_1 e^{i\Delta_m t} + \\ &+ \langle \psi_2 | U | \psi_m \rangle^* a_2 e^{i\Delta_m t}; \quad m = 3-10. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $\langle \psi_i | U | \psi_j \rangle$ – матричный элемент волновых функций ψ_i и ψ_j с оператором периодического взаимодействия U , вычисленный в системе покоя иона в резонансном приближении; $\Delta_j = (E_j - E_1)/\hbar - \gamma v(k_y \cos\varphi + k_z \sin\varphi)$; k_y и k_z – вектора обратной решетки направлений ОУ и ОZ в плоскости. Индексы $i=1,2$ соответствуют волновым функциям основного состояния, $i=3-10$ – волновым функциям первого возбужденного состояния.

Решение (5) ищется в виде:

$$\begin{aligned} a_1(t) &= A_1 e^{i\Omega t}, \\ a_2(t) &= A_2 e^{i\Omega t}, \\ a_m(t) &= A_m e^{i(\Omega + \Delta_m)t}; \quad m = 3-10, \end{aligned} \quad (6)$$

где Ω – пока неизвестная величина.

Подставляя (6) в (5), получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \hbar\Omega A_1 + \sum_{j=3}^{10} A_j \langle \psi_1 | U | \psi_j \rangle &= 0, \\ \hbar\Omega A_2 + \sum_{j=3}^{10} A_j \langle \psi_2 | U | \psi_j \rangle &= 0, \\ \hbar(\Omega + \Delta_m) A_m + A_1 \langle \psi_1 | U | \psi_j \rangle^* + \\ + A_2 \langle \psi_2 | U | \psi_j \rangle^* &= 0; \quad m = 3-10. \end{aligned} \quad (7)$$

Система (7) дает десять различных значений Ω , которые будем обозначать Ω_j , $j=1-10$. В решении (6) необходимо учесть все значения Ω_j , каждому из которых соответствует свой набор величин A_j (первый индекс нумерует волновую функцию, к которой относится данный коэффициент, второй – частоту Ω_j). Поэтому решение (6) необходимо переписать в виде:

$$\begin{aligned}
a_1 &= \sum_{j=1}^{10} A_{1j} e^{i\Omega_j t}, \\
a_2 &= \sum_{j=1}^{10} A_{2j} e^{i\Omega_j t}, \\
a_k &= \sum_{j=1}^{10} A_{kj} e^{i(\Omega_j + \Delta_k)t}; \quad k = 3-10.
\end{aligned} \quad (8)$$

Амплитуды A_{ij} определяются из системы (7) с соответствующим Ω_j и начальным условием $a_i(0)=1, a_i(0)=0, i=2-10$, которое означает, что первоначально электрон иона находился в состоянии с определенным значением спина. Коэффициенты a_i нормируются условием:

$$\sum_{i=1}^{10} |a_i|^2 = 1.$$

Результат (8), полученный при решении системы (5), не учитывает возможную ионизацию иона при взаимодействии с электронами кристалла. Вероятность ионизации определяется как [8]:

$$P_{ion} = 1 - \exp\left(-\sum_{i=1}^{10} \gamma \rho(x) \sigma_i d \langle |a_i(t)|^2 \rangle\right), \quad (9)$$

где $\rho(x)$ – плотность электронов кристалла на траектории (траектория в данной модели предполагается прямолинейной, такая аппроксимация применима для больших энергий иона и тонких кристаллов); x – расстояние иона от центра канала; d – толщина кристалла; σ_i – сечение ионизации иона из i -го состояния при взаимодействии с электроном кристалла (определяется по формуле Лотца); $\langle |a_i(t)|^2 \rangle$ – среднее значение величины $|a_i(t)|^2$ на данной траектории. Вероятность перехода иона в первое возбужденное состояние определяется как:

$$P_{ex} = (1 - P_{ion}) \sum_{i=3}^{10} |a_i(t_{in})|^2, \quad (10)$$

t_{in} – время, проведенное ионом в кристалле. Вероятность сохранения зарядового состояния иона:

$$P_{surv} = 1 - P_{ion}. \quad (11)$$

Полученные значения вероятностей (9–11) необходимо усреднить по всем траекториям ионов в кристалле.

Рис. 1, 2 представляют результаты расчетов RCE при плоскостном каналировании 390 МэВ/нуклон ионов ^{17+}Ag вдоль (220) плоскостей кристалла кремния при толщине 21 мкм. Исследовано RCE для первой гармоники периодического потенциала кристалла ($k=l=1$ в (1)).

Полученные резонансные кривые характеризуются двумя близко расположенными пиками, обусловленными переходами электрона из основного состояния в состояния, соответствующие различным компонентам тонкой структуры первого возбужденного состояния, различающихся значением полного момента электрона (1/2 или 3/2). Совпадение в расположении пиков, рис. 1 (вероятность

возбуждения), и провалов, рис. 2 (вероятность сохранения зарядового состояния), обусловлено тем, что электрон в возбужденном состоянии обладает меньшей энергией связи, и, следовательно, легче, чем электрон в основном состоянии, покидает ион при взаимодействии с электронами мишени.

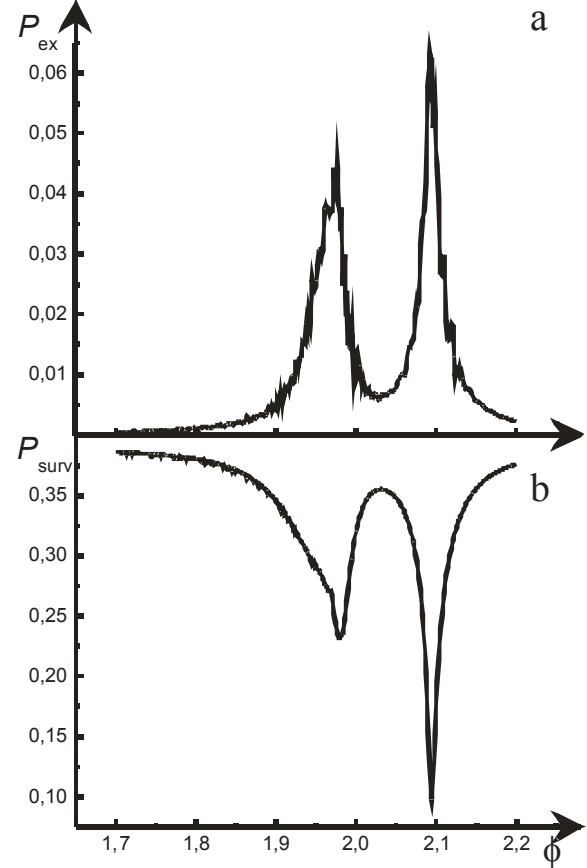


Рис. 1. Вероятность: а) возбуждения P_{ex} ; б) сохранения зарядового состояния иона P_{surv} при пролете его через кристалл Si в зависимости от угла (в градусах) между продольной скоростью иона и направлением оси OY в (220) плоскости

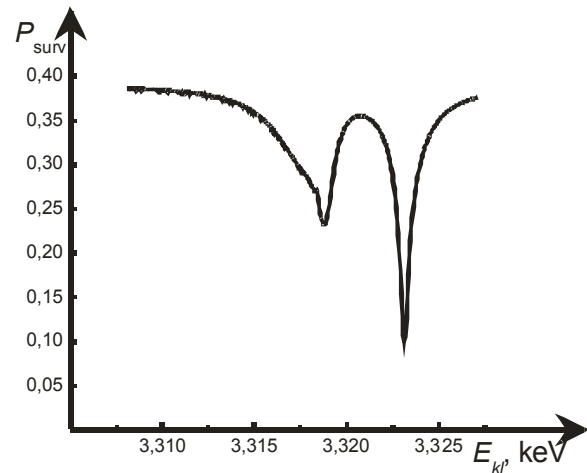


Рис. 2. Вероятность сохранения зарядового состояния иона P_{surv} при пролете через кристалл кремния в зависимости от энергии возмущающей гармоники ($E_{kl} = \hbar \omega_{kl}$)

Результаты численного расчета демонстрируют хорошее согласие с экспериментами [6, 9], проведенными при тех же условиях, хотя имеется некоторое смещение теоретической кривой, рис. 2, относительно экспериментальных данных [6]. Расчетные резонансные кривые (рис. 1, 2) имеют четко выраженную дублетную структуру, обусловленную, как указано выше,

тонкой структурой первого возбужденного состояния. Наличие третьего пика на экспериментальных кривых [6, 9] требует дополнительного изучения. Возможно, его появление связано с влиянием кильватерного потенциала, возникающего в результате действия электрического поля иона на электроны кристалла. Этот вопрос будет исследован в дальнейшем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Okorokov V.V., Tolchenkov D.L., Tolchenkov I.S. et al. The Coherent Excitation of Atoms Moving Through a Crystal Experimental Results // *Physical Letters A*. – 1973. – V. 43. – № 6. – P. 485–490.
2. Shindo S., Ohtsuki Y.H. Theory of the Okorokov Effect // *Physical Review B*. – 1976. – V. 14. – № 9. – P. 3929–3932.
3. Оцуки Ё.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. – М.: Мир, 1985. – 280 с.
4. Okorokov V.V. Comments on the Coherent Excitation: Some Problems // 8-th Japan-Russia Intern. Symp. on Interaction of Fast Charged Particles with Solids, Kyoto, Japan, 24–30 November 2002. – Kyoto: Quantum Science and Engineering Center, Kyoto University, 2003. – P. 207–211.
5. Кривошеев О.Е., Пивоваров Ю.Л. Резонансное когерентное возбуждение быстрых ионов Ne^{+9} в кристалле – компьютерный эксперимент // *Письма в ЖЭТФ*. – 1992. – Т. 56. – Вып. 5. – С. 246–250.
6. Azuma T., Ito T., Takabayashi Y. et al. Resonant Coherent Excitation of Hydrogen-Like Ar Ions to the $n=3$ States // *Physica Scripta*. – 2001. – V. 92. – P. 61–65.
7. Pivovarov Yu.L. Coherent Excitation of Hydrogen-Like Relativistic Heavy Ions in a Crystal: Structure of Electronic Levels and Resonance Width // *Nuclear Instruments Methods B*. – 1998. – № 145. – P. 96–101.
8. Ohtsuki Y.H., Yamashita Y. Peak Profiles of the Okorokov Effects for Heavy Ions in a Crystal // *Physical Review B*. – 1980. – V. 22. – № 3. – P. 1183–1189.
9. Azuma T., Ito T., Komaki K. et al. Impact Parameter Dependent Resonant Coherent Excitation of Relativistic Heavy Ions Planar Channeled in Crystals // *Physical Review Letters*. – 1999. – V. 83. – № 3. – P. 528–531.

Поступила 15.12.2006 г.

УДК 535.218

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ АДсорбЦИИ И РЕКОМБИНАЦИИ АТОМОВ ТВЕРДОМУ Телу ПРИ РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Ю.И. Тюрин, В.Д. Хоружий, С.Х. Шигалугов*, Ю.А. Сивов, Т.В. Смекалина

Томский политехнический университет

*Норильский индустриальный институт

E-mail: tyurin@fnsm.tpu.edu.ru

Рассмотрены элементарные механизмы возбуждения электронной (ионной) подсистемы твердых тел атомными частицами тепловой энергии: ионизационный механизм генерации электронно-дырочных пар, адиабатический и неадиабатический переходы, многоквантовый колебательно-электронный переход. Установлены особенности каждого из механизмов в зависимости от условий возбуждения. Получены аналитические закономерности, позволяющие сравнить эффективность генерации электронно-возбужденных состояний при различных механизмах возбуждения.

Введение

Наряду с одноквантовыми механизмами колебательно-фононной, колебательно-электронной и колебательно-колебательной релаксации возбужденных вновь образованных локализованных состояний на поверхности твердого тела, имеют место конкурирующие каналы высокоэнергетического захвата твердым телом в одном элементарном акте значительной части энергии, выделившейся в актах адсорбции, рекомбинации и иных химических превращений на поверхности.

Высокоэнергетическая аккомодация особенно эффективна при передаче энергии на электронные степени свободы кристалла. Генерация электронно-возбужденных состояний в твердых телах атомами и

молекулами наглядно проявляется в явлениях гетерогенной хемилюминесценции (ГХЛ) и хемоэмиссии, неравновесной хемопроводимости, вентильной хемоЭДС, хемомагнитоэлектрическом эффекте [1].

Рассмотрим элементарные механизмы возбуждения электронной подсистемы твердых тел атомами частицами тепловой энергии.

1. Ионизационный механизм генерации электронно-дырочных пар

Модель ионизационного механизма генерации неравновесных электронно-дырочных пар неоднократно использовалась для объяснения наблюдавшихся экспериментально особенностей ГХЛ и родственных эффектов [1, 2].