

УДК 537.534.74 537.533.74

ВЛИЯНИЕ НЕСФЕРИЧНОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБОЛОЧКИ ВОЗБУЖДЕННОГО ИОНА НА ЕГО ТОРМОЖЕНИЕ В ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

Л. Л. Балашова, А. А. Соколик
(НИИЯФ)

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

Рассмотрено влияние несферичности электронной оболочки ионов, возникающей при их возбуждении в ходе прохождения через вещество, на параметры их торможения. Количественные расчеты выполнены в рамках диэлектрической теории для тормозного эффективного заряда быстрых нерелятивистских ионов Li^+ при прохождении через углеродную мишень. Установлено существенное различие эффективных зарядов иона для случаев равномерного, вытянутого и сжатого (по отношению к направлению движения иона) распределений его электронной оболочки.

Введение

Возбуждение быстрых ионов в процессе их прохождения через вещество оказывает большое влияние на распределение зарядовых фракций ионного пучка и параметры его торможения [1–5]. Так, эффективный заряд иона, характеризующий тормозную способность среды по отношению к иону в том или ином конкретном («замороженном») состоянии, зависит от степени экранировки заряда ядра иона электронами его оболочки и, следовательно, от степени и характера его возбуждения. Недавно Цучида и Канеко [6], используя модель бинарных ион-атомных столкновений, обратили внимание на возможную зависимость эффективного заряда возбужденного иона от формы углового распределения его электронного облака. Мы расширяем начатое в работе [6] исследование применительно к процессам торможения быстрых ионов в твердом теле и плазме и, чтобы учесть коллективный отклик электронов среды на проходящий заряд, обращаемся вместо модели бинарных ион-атомных столкновений к диэлектрической теории торможения [7], взяв за основу ее наиболее известный вариант Брандта–Китагавы [8]. Рассмотрение проводится с использованием общей теории выстраивания углового момента атомов и ионов в процессах столкновений. Это позволяет, применив аппарат матрицы плотности, исследовать влияние угловой анизотропии электронного облака иона на его эффективный заряд применительно не только к «чистым», но и к смешанным состояниям.

Формализм

Рассмотрим торможение иона заряда $q = Z_1 - N$, где Z_1 — заряд его ядра и N — число связанных электронов, в промежутке между последовательными актами столкновений, приводящими к изменению его зарядового состояния или состояния возбуждения. Следуя принятой терминологии, будем называть такой ион «замороженным» в определенном

состоянии. Пусть \mathbf{v} — скорость иона, а $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ — диэлектрическая функция среды. Плотность заряда иона $\rho_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t)$ в системе координат мишени имеет вид

$$\rho_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t) = Z_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) - \rho_e(\mathbf{r} - \mathbf{v}t), \quad (1)$$

где $\rho_e(\mathbf{r}') — плотность заряда электронной оболочки иона, нормированная согласно условию$

$$\int \rho_e(\mathbf{r}') d^3 r' = N.$$

Индукцируемое движением иона электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, действуя на сам ион, приводит к его торможению с силой $\mathbf{F}_{\text{stopping}}(t)$, величина которой, т.е. тормозная способность среды $S_{\text{ion}} \equiv -\left(\frac{dE}{dx}\right) = |\mathbf{F}_{\text{stopping}}(t)|$, рассчитывается по формуле

$$F_{\text{stopping}}(t) = -e \frac{\mathbf{v}}{v} \int \rho_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) d^3 r. \quad (2)$$

Распределение напряженности электрического поля найдем из уравнений Максвелла:

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad \nabla \mathbf{D} = 4\pi e \rho_{\text{ion}}, \quad (3)$$

для этого перейдем от представления (\mathbf{r}, t) к (\mathbf{k}, ω) -представлению:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{ion}}(\mathbf{k}, \omega) &\equiv \int \rho_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d^3 r dt = \\ &= 2\pi [Z_1 - \rho_e(\mathbf{k})] \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\rho_e(\mathbf{k}) = \int \rho_e(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3 r \quad (5)$$

— формфактор электронного облака проходящего иона. Согласно (3), в (\mathbf{k}, ω) -представлении имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{i\mathbf{k}}{k^2} 4\pi e \rho_{\text{ion}}(\mathbf{k}, \omega), \\ \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} \mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega) = \\ &= -2\pi \frac{i\mathbf{k}}{k^2} 4\pi e \frac{[Z_1 - \rho_e(\mathbf{k})]}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}). \end{aligned} \quad (6)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} d^3 k d\omega = \\ &= -\frac{4\pi e}{(2\pi)^3} \int \frac{i\mathbf{k}}{k^2} [Z_1 - \rho_e(\mathbf{k})] \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}\mathbf{v})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)} d^3 k \end{aligned} \quad (7)$$

и, подставляя (1) и (6) в (2), получаем выражение для тормозной способности среды в виде интеграла в трехмерном пространстве импульсов:

$$S_{\text{ion}} = \frac{e^2}{2\pi^2 v} \int \frac{\mathbf{v}\mathbf{k}}{k^2} [Z_1 - \rho_e(\mathbf{k})]^2 \frac{i}{\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}\mathbf{v})} d^3 k. \quad (8)$$

В изотропной среде диэлектрическая функция $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ не зависит от направления вектора \mathbf{k} : $\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon(k, \omega)$. В такой среде заселение возбужденных состояний проходящего иона и форма углового распределения его электронного облака в этих состояниях характеризуются осевой симметрией относительно направления движения ионного пучка, а также в силу определенной четности состояний иона симметрией «вперед–назад» относительно этого направления. Величина анизотропии этого распределения прямо связана со степенью выстроенности углового момента иона \mathbf{J} относительно оси симметрии, при этом основной параметр выстроенности $A_{20}(J, J)$, отражающий степень квадрупольной деформации электронного облака, определяется относительной заселенностью $W(JM) = W(J, -M)$ магнитных подуровней $|JM\rangle$ рассматриваемого состояния [9]:

$$\begin{aligned} A_{20}(J, J) &= \left[\frac{5}{(2J+3)J(J+1)(2J-1)} \right]^{1/2} \times \\ &\times \sum_M [3M^2 - J(J+1)] \cdot W(JM), \\ \sum_M W(JM) &= 1. \end{aligned}$$

С учетом этих соображений общий вид углового распределения заряда электронов в ионе — в координатном и в импульсном представлениях — передается формулами

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \rho_e(r, \cos^2 \theta_r), \quad \rho_e(\mathbf{k}) = \rho_e(k, \cos^2 \theta_k).$$

Далее обратимся к формуле (4) и, применив соотношение

$$\omega = \mathbf{k}\mathbf{v} = kv \cdot \cos \theta_k,$$

перейдем при вычислении интеграла в (7) от угловой переменной θ_k к эквивалентной переменной ω :

$$\begin{aligned} d^3 k &= k^2 dk \sin \theta_k d\theta_k d\phi_k = \\ &= -k^2 dk d(\cos \theta_k) d\phi_k = -k^2 dk \frac{d\omega}{kv} d\phi_k \end{aligned}$$

с соответствующими пределами интегрирования

$$(\theta_k)_{\min} = 0 \rightarrow \omega = kv, \quad (\theta_k)_{\max} = 180^\circ \rightarrow \omega = -kv.$$

Наконец, воспользовавшись общими формулами Крамерса–Кронига [10]

$$\begin{aligned} \text{Re}[\epsilon(k, -\omega)] &= \overline{\text{Re}[\epsilon(k, \omega)]}, \\ \text{Im}[\epsilon(k, -\omega)] &= -\text{Im}[\epsilon(k, \omega)], \end{aligned} \quad (9)$$

получаем итоговую формулу для тормозной способности изотропной среды по отношению к проходящему сквозь нее иону:

$$\begin{aligned} S_{\text{ion}} &= \frac{2e^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} [Z_1 - \rho_e(k, (\frac{\omega}{kv})^2)]^2 \times \\ &\times \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \omega d\omega. \end{aligned} \quad (10)$$

Эта же формула после замены выражения в квадратной скобке на заряд $Z_p = 1$ дает тормозную способность среды по отношению к проходящему протону S_p . По определению их отношение есть квадрат эффективного заряда иона, «замороженного» в зарядовом состоянии q :

$$\begin{aligned} q_{\text{eff}} &= \sqrt{\frac{S_{\text{ion}}}{S_p}} = \\ &= \sqrt{\frac{\int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} [Z_1 - \rho_e(k, (\frac{\omega}{kv})^2)]^2 \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \omega d\omega}{\int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \omega d\omega}}. \end{aligned}$$

Заметим, что опустив в формулах (9), (10) аргумент $(\frac{\omega}{kv})^2$ в выражении $\rho_e(k, (\frac{\omega}{kv})^2)$, можно вынести множитель $[Z_1 - \rho_e(k)]^2$ за знак интеграла $\int \dots \omega d\omega$ и тем самым вернуться к обычным формулам диэлектрической теории торможения ионов, когда электронная оболочка иона полагается сферически-симметричной [8, 11, 12].

При больших скоростях проходящего иона вычислим диэлектрическую функцию среды по модели коллективных плазменных колебаний вырожденного электронного газа [13], когда тепловой разброс электронов, размазывающий границу Ферми, не учитывается:

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_g^2 + \frac{3}{5} k_F^2 k^2 + \frac{1}{4} k^4 - \omega(\omega + i\gamma)},$$

где параметры частоты плазмона $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}}$ и импульса Ферми $k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$ определяются плотностью числа электронов в рассматриваемой среде n_e ; параметр ω_g вводится для учета энергетической щели в спектрах диэлектриков и полупроводников; γ отвечает за затухание плазменных колебаний.

В пределе $\gamma \rightarrow 0$ выражение под интегралом в формулах (9), (10) принимает вид

$$\text{Im} \left[-\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right] = \frac{\pi \omega_p^2}{2A(k)} \delta[\omega - A(k)], \quad (11)$$

где для сокращения записи дальнейших формул мы, следуя работе [8], ввели дополнительное обозначение

$$A(k) = \sqrt{\Omega_0^2 + \frac{3}{5} k_F^2 k^2 + \frac{1}{4} k^4}, \quad \Omega_0^2 = \omega_p^2 + \omega_g^2. \quad (12)$$

Корни уравнения

$$\sqrt{\Omega_0^2 + \frac{3}{5} k_F^2 k^2 + \frac{1}{4} k^4} = \omega \quad (13)$$

при $\omega = kv$ определяют пределы интегрирования

$$k_{\pm} = \sqrt{2 \left(v^2 - \frac{3}{5} k_F^2 \right) \pm 2 \sqrt{\left(v^2 - \frac{3}{5} k_F^2 \right)^2 - \Omega_0^2}} \quad (14)$$

по переменной k в выражениях для тормозной способности среды и эффективного заряда иона, следующих из формул (9), (10):

$$S_{\text{ion}} = \frac{\omega_p^2}{v^2} \int_{k_-}^{k_+} \frac{dk}{k} \left[Z_1 - \rho_e \left(k, \left(\frac{A(k)}{kv} \right)^2 \right) \right]^2, \quad (15)$$

$$q_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\int_{k_-}^{k_+} \frac{dk}{k} \left[Z_1 - \rho_e \left(k, \left(\frac{A(k)}{kv} \right)^2 \right) \right]^2}{\ln \frac{k_+}{k_-}}}$$

Расчеты: эффективный заряд возбужденных ионов Li^+ в углеродной мишени

В качестве примера рассмотрим прохождение через углеродную мишень возбужденного гелие-подобного иона лития Li^+ в синглетном состоянии $1s2p:1P_1$ (его энергия возбуждения составляет 62 эВ [14]). Форма угловой анизотропии в распределении заряда электронов такого иона определяется выстроенностью его полного момента $J = 1$ (в рассматриваемом случае он совпадает с орбитальным моментом иона L). Мерой выстроенности служит параметр $A_{20}(1, 1)$. При выборе оси квантования вдоль направления проходящего потока он связан с относительной заселенностью $W(M)$ различных состояний $1s2p:1P_{1,M}$ формулой (8):

$$A_{20}(1, 1) = \sqrt{2}(W_1 - W_0),$$

а его предельные значения равны $A_{20}(1, 1)_{\text{min}} = -\sqrt{2}$ (случай заселения «чистого» состояния $1s2p:1P_{1,M=0}$) и $A_{20}(1, 1)_{\text{max}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (когда заселены состояния $1s2p:1P_{1,M=\pm 1}$, каждое с весом 50%).

Пространственное распределение электронов в общем случае смешанного состояния $1s2p:1P_1$ находим по известным правилам [9]:

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \times \left[R_{1s}^2(r) + R_{2p}^2(r) \left(1 - \sqrt{2} A_{20}(1, 1) P_2(\cos \theta_r) \right) \right],$$

где $R_{1s}(r)$ и $R_{2p}(r)$ — радиальные волновые функции электронов в соответствующих состояниях иона, а $P_2(\cos \theta)$ — полином Лежандра. Расчет отвечающего ему импульсного распределения (5) сводится к радиальным интегралам

$$I^{(\lambda=0)}(k) = \int_0^{\infty} [R_{1s}^2(r) + R_{2p}^2(r)] j_0(kr) r^2 dr,$$

$$I^{(\lambda=2)}(k) = \int_0^{\infty} R_{2p}^2(r) j_2(kr) r^2 dr,$$

$$\rho_e(k, \cos^2 \theta_k) = I^{(\lambda=0)}(k) + A_{20}(1, 1) \sqrt{2} P_2(\cos \theta_k) I^{(\lambda=2)}(k),$$

где $j_{\lambda}(kr)$ — сферические функции Бесселя. Для их вычисления воспользуемся водородоподобными функциями $R_{1s}(r) = Z^{3/2} \cdot 2e^{-Zr}$ и $R_{2p}(r) = \frac{(Z-1)^{5/2}}{2\sqrt{6}} r e^{-\frac{1}{2}(Z-1)r}$, считая, что из-за частичной экранировки ядра $1s$ -электроном $2p$ -электрон находится в кулоновском поле заряда $(Z-1)$.

Параметры частоты плазмона $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}}$ и импульса Ферми $k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$, нужные для вычислений (11)–(15) (при этом $\omega_g = 0$), найдем, отправляясь от средней плотности электронов n_e в твердой углеродной мишени:

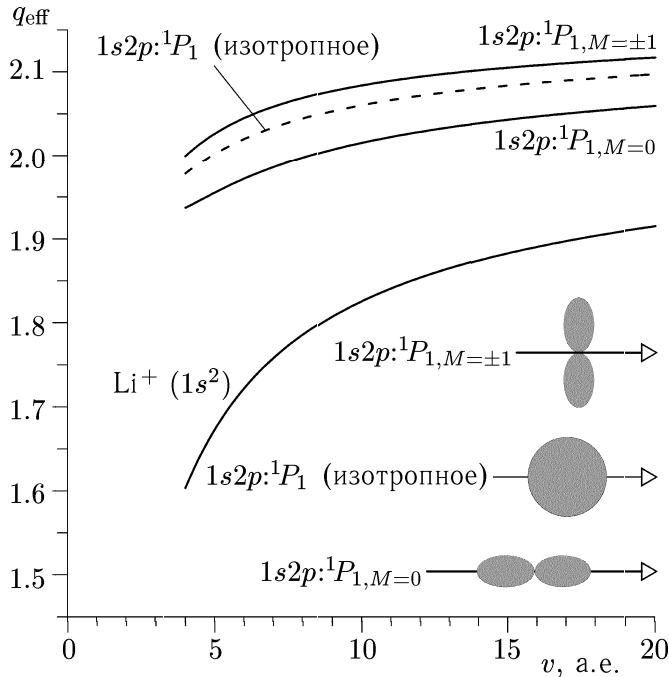
$$n_e = 0.052, \quad \omega_p = 0.810, \quad k_F = 1.160$$

(все в атомных единицах). Результаты расчетов показаны на рисунке.

В интервале скоростей $v = 4-20$ а.е. (что соответствует энергии иона Li^+ примерно от 3 до 70 МэВ) эффективный заряд иона монотонно возрастает с увеличением его скорости при любой форме углового распределения плотности его электронов. В случае, когда собственное электронное облако иона вытянуто вдоль направления его движения, торможение иона ослаблено по сравнению со случаем, когда все три состояния $1s2p:1P_1$ с $M = 0, \pm 1$ заселены равномерно. В противоположном случае ион тормозится сильнее, при этом отклонение от случая, когда распределение электронной плотности иона изотропно, менее значительно. В целом расхождение между значениями тормозных способностей мишени

$$S_{\text{ion}} = S_p (q_{\text{eff}})^2,$$

соответствующих предельно вытянутой и предельно сжатой формам распределения электронного облака



Эффективный заряд иона Li^+ в возбужденном состоянии $1s2p:1P_1$ при прохождении через углеродную мишень; нижняя кривая — предельно вытянутая ($M=0$; $A_{20} = -\sqrt{2}$), верхняя кривая — предельно сжатая вдоль направления движения иона ($M = \pm 1$; $A_{20} = 1/\sqrt{2}$) конфигурация электронного облака; пунктир — случай сферически-симметричного распределения заряда

иона Li^+ в состоянии $1s2p:1P_1$, составляет в рассмотренном интервале скоростей иона около 10%.

Заключение

В работе предложена общая теория учета несферичности электронной оболочки иона при исследовании его торможения в вырожденном электронном газе. Расчеты, выполненные в рамках диэлектрической теории торможения применительно к прохождению нерелятивистских ионов через твердотельные мишени, дают количественную оценку масштаба исследуемого эффекта, которая оказывается того же порядка, что была получена ранее Цучидой

и Канеко [6] в рамках модели бинарных ион-атомных столкновений. Тем самым дополнительно обосновывается итоговый вывод указанных авторов о важности использования теоретических результатов, относящихся к влиянию возбуждения ионов на их торможение при проведении компьютерного моделирования прохождения ионов через вещество.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 04-02-16742).

Литература

1. Bohr N., Lindhard J. // Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 1954. **28**. P. 7.
2. Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. **44**. P. 465.
3. Rozet J.P., Stephan C., Vernhet D. // Nucl. Instr. and Meth. 1996. **B107**. P. 67.
4. Vernhet D., Rozet J.P., Lamour E. et al. // Proc. of XXI Int. Conf. The Physics of Electronic and Atomic Collisions. N. Y., 2000. P. 666.
5. Balashov V.V. // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. 2003. **B205**. P. 813.
6. Tsuchida H., Kaneko T. // J. Phys. 1997. **B30**. P. 1747.
7. Bohr N. // Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 1948. **18**(8); Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество. М., 1950.
8. Brandt W., Kitagawa M. // Phys. Rev. 1982. **B25**. P. 5631.
9. Balashov V.V., Grum-Grzhimailo A.N., Kabachnik N.M. Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions. N. Y., 2000. P. 188.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М., 1992.
11. Yang Q. // Phys. Rev. 1994. **A49**. P. 1089.
12. Балашова Л.Л., Кабачник Н.М. // Изв. РАН. Сер. Физ. 1998. **62**. N 4. С. 763.
13. Echenique P.M., Ritchie R.H., Brandt W. // Phys. Rev. 1979. **B20**. P. 2567.
14. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. М., 1986.

Поступила в редакцию
16.11.04