Поляризационное тормозное излучение при столкновениях быстрых ионов с многоатомными мишенями

М. Я. Амусья, В. И. Матвеев[+]

Институт физики им. Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль

Физико-технический институт им. Иоффе, 194021С.-Петербург, Россия

[+]*Северный (Арктический) федеральный университет им. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия*

Поступила в редакцию 28 января 2013 г.

Рассмотрены процессы поляризационного тормозного излучения при столкновениях быстрых ионов с линейными цепочками, составленными из изолированных атомов. Получены интенсивности и угловые распределения спектров излучения для произвольного числа атомов в цепочке. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотонов приводят к заметному изменению спектральных угловых распределений поляризационного тормозного излучения по сравнению с распределениями при столкновениях с изолированным атомом. Результаты допускают стандартное обобщение на случаи поляризационного тормозного излучения при каналировании быстрых ионов над поверхностями и в твердотельных решетках.

DOI: 10.7868/S0370274X13070011

1. Введение. В данной работе впервые рассмотрено поляризационное тормозное излучение (ПТИ) не на изолированном атоме, а на многоатомной мишени. Такое излучение возникает за счет того, что налетающий заряд взаимодействует с атомом-мишенью, вызывая поляризацию, в основном дипольную, его электронной оболочки. Наведенный вектор поляризации изменяется в процессе столкновения по величине и направлению, тем самым приводя к электромагнитному излучению, которое может превосходить по интенсивности обычное тормозное излучение заряда в поле атома-мишени. Если мишень многоатомна, то налетающий ион может в зависимости от угла рассеяния поляризовать сразу несколько атомов мишени. В результате полная амплитуда ПТИ будет определяться суммарным дипольным моментом нескольких атомов мишени. В качестве снаряда мы выбрали ион, поскольку для него ПТИ абсолютно доминирует над обычным тормозным излучением.

Поляризационное тормозное излучение, сопровождающее столкновения быстрых ионов с отдельными атомами, хорошо изучено [1, 2]. Совершенно иначе обстоит дело с ПТИ, возникающим при столкновении иона с многоатомными мишенями. Например, при выборе в качестве мишеней регулярных многоатомных структур следует ожидать существенных изменений интенсивности и углового распределения поляризационных фотонов по сравнению с одноатомными мишенями из-за интерференционных эффектов. При этом при наличии пространственного разделения со спектрами обычного тормозного излучения можно ожидать значительного увеличения возможностей практических применений эффектов излучения поляризационных фотонов. Отметим, что поляризационное тормозное излучение может быть интерпретировано как процесс перерассеяния поля иона на атомных электронах. Таким образом, прослеживается аналогия с недавно описанными (см. [3]) эффектами интерференции при переизлучении ультракоротких импульсов электромагнитного поля линейными многоатомными цепочками.

В настоящей работе рассмотрено поляризационное тормозное излучение, сопровождающее столкновения быстрых ионов с линейными цепочками, составленными из изолированных атомов. Получены интенсивности и угловые распределения спектров излучения для произвольного числа атомов в цепочке. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения приводят к появлению преимущественного (параллельного линии цепочки), направления вылета фотонов. Другими словами, происходит заметное изменение спектральных интенсивностей и угловых распределений поляризационного тормозного излучения по сравнению с распределениями при столкновениях с изолированным атомом. Результаты допускают обобщение на случаи поляризационного тормозного излучения при рассеянии ионов над многоатомной поверхностью и каналировании быстрых ионов в твердотельных решетках.

2. Вывод формул. Рассмотрим сначала потенциал взаимодействия быстрого иона с электроном отдельного атома водорода. Пусть атом помещен в начало системы координат, а ион движется с постоянной нерелятивистской скоростью ν и параметром удара $\mathbf{b}$ по траектории $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$. Тогда взаимодействие иона с атомным электроном $V(t) = Z/|\mathbf{R} - \mathbf{r}|$, где $\mathbf{r}$ – координаты атомного электрона, Z – заряд иона (здесь и ниже используется атомная система единиц). Если атом сдвинут от начала системы координат на расстояние d, то его взаимодействие с ионом равно $V(t) = Z/|\mathbf{R} - (\mathbf{r} + \mathbf{d}|$, где $\mathbf{r}$ – координаты атомного электрона, отсчитываемые от ядра атома. Пусть N невзаимодействующих одинаковых одноэлектронных атомов расположено на одной прямой линии на равном расстоянии друг от друга так, что первый атом находится в начале системы координат, а каждый последующий смещен относительно предыдущего на расстояние $\mathbf{d}$ вдоль прямой линии. Обозначим как $\mathbf{r}_k$ координаты электрона, принадлежащего атому с номером k. Координаты $\mathbf{r}_k$ отсчитываются относительно ядра атома с номером k, где k принимает значения $k = 1, 2, \ldots, N$. Потенциал взаимодействия иона с атомными электронами такой цепочки атомов составляет

$$V = -\sum_{k=1}^{N} \frac{Z}{|\mathbf{R} - [\mathbf{r}_k + (k-1)\mathbf{d}]|}. \qquad (1)$$

В дипольном приближении, когда $|\mathbf{R} - (k-1)\mathbf{d}| \gg |\mathbf{r}_k|$, этот потенциал равен

$$V(t) = \sum_{k=1}^{N} V_k(t), \qquad (2)$$

где

$$V_k(t) = \frac{Z}{|\mathbf{R} - (k-1)\mathbf{d}|^3}[\mathbf{R} - (k-1)\mathbf{d}]\mathbf{r}_k. \qquad (3)$$

Нам понадобится фурье-образ этого потенциала:

$$\tilde{V}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} V(t) E^{i\omega t} dt = \sum_{k=1}^{N} \tilde{V}_k(\omega), \qquad (4)$$

где

$$\tilde{V}_k(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} V_k(t) e^{i\omega t} dt.$$

Пусть $\mathbf{d}$ направлен строго по скорости иона ν, или, что то же самое, ион движется параллельно цепочке атомов. В этом случае $\{\mathbf{R} - (k-1)\mathbf{d}\}^2 = [b^2 + v^2[t - (k-1)d/v]\}^2$ и легко получить, что

$$\tilde{V}_k(\omega) = -\frac{2Z}{vb}\mathbf{r}_k e^{i\omega(k-1)d/v}\mathbf{F}(\omega).$$

Здесь

$$\mathbf{F}(\omega) = -\frac{\omega b}{v}\left[\frac{\mathbf{v}}{v}K_0\left(\frac{\omega b}{v}\right) - i\frac{\mathbf{b}}{b}K_1\left(\frac{\omega b}{v}\right)\right],$$

где $K_0(x)$ и $K_1(x)$ – модифицированные функции Бесселя. Таким образом, фурье-образ потенциала (2) равен

$$\tilde{V}(\omega) = \sum_{k=1}^{N} \tilde{V}_k(\omega) = -\frac{2Z}{vb}\mathbf{F}(\omega)\sum_{k=1}^{N}\mathbf{r}_k e^{i\omega(k-1)d/v}. \qquad (5)$$

Нас интересует вероятность излучения одного фотона всеми атомными электронами цепочки при столкновении с движущимся со скоростью v ионом с зарядом Z. Будем вычислять амплитуду излучения фотона с импульсом $\boldsymbol{\kappa}$ и поляризацией σ во втором порядке теории возмущений по V и взаимодействию с полем излучения:

$$U = -\sum_{k=1}^{N}\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{1/2}\mathbf{u}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma} e^{-i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}_k} a^{+}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma}\hat{\mathbf{p}}_k, \qquad (6)$$

где $a^{+}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma}$ – оператор рождения фотона с частотой ω, импульсом $\boldsymbol{\kappa}$ и поляризацией σ, $\mathbf{u}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma}$ – единичный вектор поляризации, $\hat{\mathbf{p}}_k = -i\partial/\partial\mathbf{r}_k$ – операторы импульса атомных электронов, $\mathbf{R}_k = (k-1)\mathbf{d} + \mathbf{r}_k$ – координаты электрона атома k относительно начала системы координат. Координаты $\mathbf{r}_k$ отсчитываются относительно ядра атома с номером k $(k = 1, 2, \ldots, N)$.

Во втором порядке теории возмущений по потенциалу $V + U$ переходы с изменением состояний атомных электронов и с излучением фотона возможны лишь для "перекрестных" произведений VU или VU.

Ограничимся рассмотрением так называемого упругого поляризационного излучения, в котором вся энергия, теряемая налетающим ионом, испускается в виде одного фотона. Будем считать, что все атомы до и после столкновения находятся в основном состоянии. Тогда амплитуда испускания фотона равна

$$c^{(2)} = -i\sum_n \frac{V_{0,n}(\omega)U_{n,0}}{\omega + \omega_{n,0} - i\lambda} + i\sum_n \frac{U_{0,n}V_{n,0}(\omega)}{\omega + \omega_{0,n} + i\lambda}. \qquad (7)$$

Каждый атом считаем находящимся в основном состоянии $\varphi_0(\mathbf{r}_k)$ с энергией ε_0. Тогда волновая функция начального состояния всех N электронов вышеописанной цепочки из N невзаимодействующих одинаковых атомов равна

$$\Phi_0 = e^{-i\varepsilon_0 t}\varphi_0(\mathbf{r}_1)e^{-i\varepsilon_0 t}\varphi_0(\mathbf{r}_2)\times\ldots\times e^{-i\varepsilon_0 t}\varphi_0(\mathbf{r}_N), \qquad (8)$$

где координаты $\mathbf{r}_k$ отсчитываются относительно ядра атома с номером k, а энергия основного состояния есть $N\varepsilon_0$. Будем обозначать волновую функцию произвольного возбужденного состояния отдельного атома (имеющего номер k в цепочке) как $\varphi_{nk}(\mathbf{r}_k)$. Тогда волновая функция произвольных возбужденных состояний всех электронов вышеописанной цепочки из N невзаимодействующих одинаковых атомов равна

$$\Phi_n = e^{-i\varepsilon_{n1}t}\varphi_{n1}(\mathbf{r}_1)e^{-i\varepsilon_{n2}t}\varphi_{n2}(\mathbf{r}_2) \times \ldots \times \times e^{-i\varepsilon_{nN}t}\varphi_{nN}(\mathbf{r}_N), \qquad (9)$$

где $n = (n1, n2, \ldots, nN)$ – совокупность квантовых чисел для электронных состояний всех атомов цепочки. Энергия такого возбужденного состояния равна $\varepsilon_{n1} + \varepsilon_{n2} + \ldots + \varepsilon_{nN} - N\varepsilon_0$. Соответственно в (7) $\omega_{n,0} = \varepsilon_{n1} + \varepsilon_{n2} + \ldots + \varepsilon_{nN} - N\varepsilon_0$. В амплитуду (7) входят матричные элементы $V_{n,0} = V_{n1,n2,\ldots,nN;\,0,0,\ldots,0}$ и $U_{n,0} = U_{n1,n2,\ldots,nN;\,0,0,\ldots,0}$ от операторов, являющихся суммами одночастичных операторов. Матричные элементы от таких операторов отличаются от нуля только для переходов с изменением состояния какого-либо одного электрона. Поэтому нетрудно убедиться, что амплитуду (7) можно привести к виду

$$c^{(2)} = -\frac{2Z}{vb}\sqrt{2\pi\omega}\mathbf{u}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma}\mathbf{F}(\omega)\alpha(\omega) \times \times \sum_{k=1}^{N} e^{i\omega(k-1)d/v} \sum_{k'=1}^{N} e^{i\boldsymbol{\kappa}(k'-1)\mathbf{d}}\delta_{k,k'}, \qquad (10)$$

где $\alpha(\omega)$ – динамическая поляризуемость основного состояния атома-мишени, а два последних сомножителя представляют собой сумму геометрической прогрессии, так что

$$c^{(2)} = -\frac{2Z}{vb}\sqrt{2\pi\omega}\mathbf{u}_{\boldsymbol{\kappa}\sigma}\mathbf{F}(\omega)\alpha(\omega)\frac{1-e^{iN(\omega d/v-\mathbf{kd})}}{1-e^{i(\omega d/v-\mathbf{kd})}}. \qquad (11)$$

После суммирования $|c^{(2)}|^2$ по поляризациям фотона и интегрирования по углу вектора параметра удара и его длине (от нижнего значения b_0 до ∞) получаем сечение испускания (всеми атомными электронами цепочки) фотона с импульсом $\boldsymbol{\kappa}$ в телесный угол $d\Omega_{\boldsymbol{\kappa}}$, описанный вокруг направления вылета фотона:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega_{\mathbf{k}}} = \frac{2}{\pi}\frac{\omega^3}{c^3}\frac{Z^2}{v^2}|\alpha(\omega)|^2 \times \times \frac{\omega b_0}{2v}\left\{\left(1-\frac{3}{2}[\hat{\mathbf{v}}\times\hat{\mathbf{k}}]^2\right)\frac{\omega b_0}{v}K_0^2\left(\frac{\omega b_0}{v}\right) + + 2\left(1-\frac{1}{2}[\hat{\mathbf{v}}\times\hat{\mathbf{k}}]^2\right)K_0\left(\frac{\omega b_0}{v}\right)K_1\left(\frac{\omega b_0}{v}\right) - - \left(1-\frac{3}{2}[\hat{v}\times\hat{k}]^2\right)\frac{\omega b_0}{v}K_1^2\left(\frac{\omega b_0}{v}\right)\right\} \times \times \left|\frac{\sin(N\omega d/v - N\boldsymbol{\kappa}\mathbf{d})}{\sin(\omega d/v - \boldsymbol{\kappa}\mathbf{d})}\right|^2, \qquad (12)$$

где $\hat{\mathbf{v}}$ и $\hat{\mathbf{k}}$ – единичные векторы, направленные вдоль скорости иона и импульса фотона соответственно, $[\hat{\mathbf{v}}\times\hat{\mathbf{k}}]$ – их векторное произведение. Нетрудно убедиться в том, что выражение (12), как это и должно быть для сечения, положительно определено.

Оценка дифференциального сечения испускания тормозного фотона при характерных атомных частотах $\omega \approx 1$ и скоростях $v \ll Z$ имеет вид

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega_{\mathbf{k}}} = \frac{2}{\pi}\frac{\omega^3}{c^3}\frac{Z^2}{v^2}\left(1-\frac{1}{2}[\hat{\mathbf{v}}\times\hat{\mathbf{k}}]^2\right)|\alpha(\omega)|^2 \times \times \ln\left(\frac{2v}{\omega b_0\gamma}\right) \times \left[\frac{\sin(N\omega d/v - N\boldsymbol{\kappa}\mathbf{d})}{\sin(\omega d/v - \boldsymbol{\kappa}\mathbf{d})}\right]^2, \qquad (13)$$

где $\gamma = 1.781$. Как указывалось при получении формулы (11), величина b_0 имеет смысл наименьшего параметра удара, до которого справедливо дипольное приближение (3), и асимптотика при больших значениях аргумента для функций Бесселя, входящих в формулу (12). Другими словами, формула (13) получена с логарифмической точностью, когда не только аргумент у логарифмической функции велик по сравнению с единицей, но и само значение логарифма велико. Поэтому в (13) мы можем положить $b_0 \sim 1$ – порядка атомного размера и считать, что под знаком логарифма $2/(b_0\gamma) \approx 1$.

3. Обсуждение результатов. Поскольку $|\omega d/v - \boldsymbol{\kappa}\mathbf{d}| = \omega d/v(1 - \hat{\mathbf{k}}\mathbf{v}/c)$ (где единичный вектор $\hat{\mathbf{k}} = \boldsymbol{\kappa}/|\boldsymbol{\kappa}|$), в рассматриваемом нами нерелятивистском пределе слагаемым с $\boldsymbol{\kappa}\mathbf{d}$ в аргументах синусов в (13) можно пренебречь. Это приводит в упомянутом выше логарифмическом приближении к формуле

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega_k} = \frac{2}{\pi}\frac{\omega^3}{c^3}\frac{Z^2}{v^2}\left(1-\frac{1}{2}[\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{k}}]^2\right)|\alpha(\omega)|^2\ln\left(\frac{v}{\omega}\right) \times \times \left[\frac{\sin(N\omega d/v)}{\sin(\omega d/v)}\right]^2. \qquad (14)$$

Таким образом, полученное сечение отличается от сечения ПТИ одного изолированного атома лишь множителем $\eta = [(\sin N\omega d/v)/(\sin \omega d/v)]^2$, который может быть весьма значительным, если $N\omega d/v \cong 1$, а $\omega d/v \ll 1$. В этом случае фактором усиления становится величина $\eta \cong (v/\omega d)^2 \gg 1$, не зависящая от N. Если длина цепочки невелика, то при большой скорости снаряда и малой частоте ω возможно выполнение и условия $N\omega d/v \ll 1$, что ведет к $\eta \approx N^2$.

В действительности число атомов N в цепочке ограничивается требованием применимости использованной нами временной теории возмущений по потенциалу V, для чего необходима малость интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(t)dt \approx V\tau \approx (Z/b)Nb/v = NZ/v \ll 1. \qquad (15)$$

Следовательно, $N \ll v/Z$, что накладывает ограничение на максимальное число атомов в цепочке. Очевидно, что это результат использования теории возмущений, поскольку одновременное поляризующее действие налетающего иона на атомы цепочки при малых скоростях v оказывается больше, чем при больших v.

С ростом v эффекты интерференции начинают проявляться и в угловом распределении, там, где $|\omega d/v - \boldsymbol{\kappa}\mathbf{d}| \to 0$. Для фотонов, вылетающих в направлении оси цепочки, фактор усиления становится большим, т.е. $\eta \approx N^2$. Это проявляется лишь для скоростей налетающего иона, близких к световой, где на первый взгляд требуется релятивистский подход. Однако если рассматривать столкновение движущегося с релятивистской скоростью иона с легким нерелятивистским атомом и оставаться в рамках дипольного приближения, то и после столкновения атомные электроны будут нерелятивистскими. Другими словами, и при релятивистских скоростях приведенные выше формулы остаются справедливыми.

С помощью (13) или (14) можно оценить полную энергию радиационных потерь на излучение со стороны налетающего иона и тем самым найти коэффициент радиационного трения. Для этого следует проинтегрировать формулу (13) или (14) по всем телесным углам, умножить на частоту фотона и на число атомов, приходящихся на единицу длины цепочки, после чего проинтегрировать по всем частотам фотона. При интегрировании следует учесть, что верхний предел для частоты ω есть $\omega < v$. Надо иметь в виду, что в области применимости (14), когда $\omega/v \ll 1$, $\sin(\omega d/v) \approx \omega d/v$, поскольку $d \geq 1$.

Используем в качестве поляризуемости атома цепочки ее ассимптотическое выражение: $\alpha(\omega) \approx \approx N_C/\omega^2$, где N_C – число электронов в одном атоме цепочки. Будем считать это выражение справедливым вплоть до $\omega \geq I_C$, где I_C – потенциал ионизации атома цепочки. При $\omega \leq I_C$ положим $\alpha(\omega) \approx N_C/I_C^2$. Обозначая коэффициент трения через $K(v)$, получаем

$$K(v) = \int_0^v \omega \frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{Z^2 N_C^2}{c^3 I_C} \ln \frac{v}{I_C}. \qquad (16)$$

При выводе (15) для простоты положено $d = 1$. Оценка радиационной потери на всю длину цепочки получается умножением (16) на N. Примечательно, что вклад областей $0 < \omega < I_C$ и $I_C < \omega < v$ по порядку величины оказался одинаков.

Не должно удивлять отсутствие в выражении (16) для потерь энергии налетающим ионом на излучение фактора усиления, подобного N^2. Это обусловлено тем, что в $K(v)$ основной вклад вносят $\omega \approx I_C$, что соответствует взаимодействию налетающего иона с отдельными атомами. Понятно, что для такого излучения мишень–цепочка эквивалентна просто набору независимых атомов.

4. Выводы и заключительные замечания. Итак, мы показали, что интерференционные эффекты при генерации ПТИ при рассеянии ионов на цепочке атомов весьма сильны. Они приводят к увеличению интенсивности излучения и с ростом скорости к его преимущественной ориентации вдоль направления оси цепочки.

Приведенные выше формулы получены в предположении, что налетающий ион не имеет внутренней структуры и не может поляризоваться вследствие взаимодействия с цепочкой-мишенью. Обобщение рассмотренной модели на случай поляризуемого иона или даже нейтрального атома представляет значительный интерес. Оно может быть проведено с помощью методик, изложенных в [1] и [2].

Весьма интересно излучение, возникающее при движении двух цепочек разных атомов друг относительно друга.

Полученные результаты могут быть обобщены на случай рассеяния иона над многоатомной поверхностью, подобной листу графена, а также рассеяния иона на трехмерной кристаллической структуре. Определенный интерес представляет и излучение при движении иона параллельно оси нанотрубки как снаружи трубки, так и внутри нее.

В целом простая модель, предложенная в данном письме, позволяет получить интересные результаты и допускает перспективные обобщения.

1. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, М.: Энергоатомиздат, 1990, 210 с.
2. M. Ya. Amusia, Radiation Physics and Chemistry **75**, 1232 (2006).
3. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, Письма в ЖЭТФ **96**, 700 (2012).