

О РЕЛАКСАЦИИ СРЕДЫ ПОСЛЕ ЕЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ ОДИНОЧНЫМИ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

А. В. Ланкин^{a,b}, И. В. Морозов^{a,b}, Г. Э. Норман^{a,b}, И. Ю. Скобелев^{a}*

*^aОбъединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

*^bМосковский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 14 ноября 2006 г.

Предложена плазменная модель релаксации среды в области треков тяжелых ионов в конденсированных средах, основанная на решении зависящих от времени уравнений радиационно-столкновительной кинетики. В качестве начального условия использовано состояние среды, описываемое классической моделью многократной ионизации атомов мишени полем быстрых многозарядных ионов. Релаксация в плазме изучалась с помощью молекулярно-динамического моделирования. Проведенные расчеты позволили определить области значений параметров среды, при которых плазменная модель фактически переходит в атомную или, напротив, атомная модель является слишком грубым приближением. Показано, что плазменная модель позволяет описать рентгеновские спектры, регистрируемые при взаимодействии пучков ионов с конденсированными мишенями. На основе модели предложен рентгеноспектральный метод диагностики плазмы в треке быстрого иона. Полученные результаты также могут быть использованы при исследовании начальной стадии дефектообразования в твердых телах под действием быстрых одиночных тяжелых ионов.

PACS: 52.20.-j, 52.70.La, 52.50.Gj

1. ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие быстрых одиночных тяжелых ионов с конденсированным веществом приводит к образованию треков в твердых телах [1, 2] и сопровождается, в частности, излучением рентгеновских спектральных линий, обусловленных радиационным распадом автоионизационных состояний многозарядных ионов вещества мишени. Это излучение несет в себе информацию о состоянии вещества в области взаимодействия и может быть использовано для его диагностики.

До сих пор интерпретация регистрируемых спектров основывалась на классической модели релаксации изолированного иона [3–6] (ниже мы будем называть ее «атомной моделью») суть которой состоит в следующем. Считается, что в процессе взаимодействия одиночного иона с атомом мишени вследствие многократной ионизации атома мишени ку-

лоновским полем налетающего иона возникают возбужденные ионы со спектроскопическим символом Z . Какая-то часть этих ионов имеет по крайней мере одну вакансию в K -оболочке. В дальнейшем K -вакансия заполняется за счет радиационных переходов из более высоких оболочек (L -, M -, ...), что и приводит к испусканию рентгеновского фотона. Основной чертой атомной модели является предположение о том, что образование возбужденного (автоионизационного) состояния иона Z при взаимодействии с полем налетающего иона может приводить к излучению только спектральной линии, обусловленной радиационным переходом в этом ионе. В рамках такой атомной модели интенсивности наблюдаемых рентгеновских линий пропорциональны сечениям соответствующих процессов многократной ионизации, умноженным на факторы ветвления $A^Z / (A^Z + \Gamma^Z)$, где A^Z — вероятность радиационного перехода, а Γ^Z — вероятность автоионизации.

Таким образом, в рамках атомной модели наблюдаемые рентгеновские спектры полностью определя-

*E-mail: skobelev@ihed.ras.ru

ются взаимодействием налетающего иона с атомом среды и оказываются никак не связанными с состоянием среды, возникшем после пролета возбуждающей частицы. Это означает, что атомная модель полностью игнорирует тот факт, что в возникшем после первоначального процесса ионизации плазموподобном состоянии вещества процессы релаксации возбужденного состояния иона могут быть гораздо более разнообразными. Например, за счет столкновений с образовавшимися свободными электронами, первоначально возникший ион Z может ионизоваться или рекомбинировать до того, как произойдет заполнение K -вакансии при радиационном переходе. Это означает, что первоначальное возбуждение иона Z может в действительности приводить к образованию целого распределения ионов с K -вакансиями по зарядовому состоянию и, следовательно, к излучению спектральных линий ионов с $Z' \neq Z$, а наблюдаемый рентгеновский спектр будет отражать не только характеристики взаимодействия налетающего иона с атомами среды, но и параметры (температуру, плотность) образованной плазмы.

Состояние плазмы сразу после ионизации является сильнонеравновесным. Это означает, что наряду с релаксацией возбужденных состояний ионов, приводящей к излучению рентгеновских спектральных линий, следует учесть эволюцию распределения электронов и ионов по скоростям, а также изменение концентрации плазмы с течением времени. Если времена плазменной релаксации окажутся сравнимыми с временами жизни возбужденных ионных уровней, это отразится на наблюдаемом рентгеновском излучении.

Сам по себе вывод о том, что в ионном канале образуется неравновесная неидеальная плазма, был сделан достаточно давно [7, 8]. Однако никаких конкретных оценок параметров этой плазмы не удалось сделать до сих пор.

В настоящей работе предпринята попытка построения более общей плазменной модели релаксации среды в области треков тяжелых ионов в конденсированных средах, основанной на решении зависящих от времени уравнений радиационно-столкновительной кинетики. При этом в качестве начального условия использовано состояние среды, описываемое классической атомной моделью. Проведенные расчеты позволили как определить области значений параметров среды, при которых плазменная модель фактически переходит в атомную, так и выяснить условия, для которых атомная модель является слишком грубым приближением. Полученные результаты использованы для интерпретации

рентгеновских спектров, зарегистрированных в работах [9–12] при взаимодействии пучков ионов Ni^{+14} с энергиями 3–11 МэВ/нуклон с аэрогельными мишенями SiO_2 плотностью 0.15 г/см^3 .

Процессы создания возбужденного состояния среды и ее релаксации можно разбить на три стадии, характеризующиеся различными временными масштабами: 1) образование возбужденных ионов и свободных электронов вследствие многократной ионизации атомов мишени налетающим быстрым многозарядным ионом (первоначальное возбуждение среды); 2) термализация свободных электронов (стадия быстрой релаксации); 3) релаксация возбужденных состояний ионов в образованной плазме. В разд. 2–4 мы последовательно рассмотрим перечисленные стадии, для определенности полагая, что налетающий быстрый многозарядный ион взаимодействует с твердотельной мишенью, состоящей из атомов с зарядом ядра 10–18, т. е. имеющих заполненные K - и L -оболочки и несколько электронов в M -оболочке. В разд. 5 проводится сравнение с экспериментальными данными, в разд. 6 — обсуждение полученных значений параметров плазменного канала.

2. ПЕРВОНАЧАЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ СРЕДЫ

2.1. Область ионизации

В процессе прохождения налетающего иона через среду он создает в точках трека, расположенных на различном расстоянии от его оси, возбужденные состояния разных типов. Тип возникающих состояний зависит как от значения энергии налетающего иона, так и от расстояния между ним и атомом мишени, т. е. от значения так называемого прицельного параметра. В области сравнительно больших прицельных параметров происходит ионизация только из M - и L -оболочек атома мишени и, следовательно, создаются только ионы с заполненной K -оболочкой, которые не могут давать вклад в рентгеновскую эмиссию. Ионы с K -вакансиями, т. е. ионы, находящиеся в автоионизационных состояниях, возникают только в центральной области трека, где значения прицельного параметра достаточно малы. Размер b этой области по порядку величины можно оценить по формуле, приведенной в обзоре [1]:

$$b \sim 2a_0 \frac{Z_p v_0}{v} \sqrt{\frac{Ry}{I}}, \quad (1)$$

где a_0 — боровский радиус, Z_p и v — заряд налетающего иона и его скорость, v_0 — атомная единица

скорости, $Ry = 13.6$ эВ, I — потенциал ионизации. Из соотношения (1) видно, что для многозарядных ионов с энергиями 1–10 МэВ/нуклон и мишеней с $Z \approx 10$ –20 размер b не превосходит 1 Å. Подчеркнем, что параметр b определяет не полный поперечный размер плазменного канала, а только ту его приосевую часть, которая содержит ионы с вакансией в K -оболочке. Полный диаметр плазмы будет определяться значениями потенциалов ионизации L - и M -оболочек и как следует из (1), может быть в 3–10 раз больше.

Длину области трека, в которой образуются ионы с K -вакансиями можно оценить из следующих соображений. Как показывают результаты экспериментов [9–12], рентгеновская эмиссия ионов мишени наблюдается при энергиях налетающих ионов, превышающих значение 2 МэВ/нуклон. Это означает, что, например, при начальной энергии налетающего иона 10 МэВ/нуклон длина области с K -вакансиями будет составлять не менее 80 % от всей длины трека, что при типичной длине трека в твердой мишени 100–200 мкм дает продольный размер L интересующей нас области 80–160 мкм.

Поскольку основная часть энергии налетающего иона теряется в центральной части трека, т. е. как раз в области образования K -вакансий (см., например, обзор [1]), это позволяет сделать грубую оценку средней энергии возникших в ней свободных электронов. Если, например, ион никеля с начальной энергией 10 МэВ/нуклон взаимодействует с твердотельной мишенью из SiO_2 , то основная часть его энергии передается молекулам SiO_2 , находящимся в цилиндрической области диаметром 1–1.5 Å и длиной 200 мкм. При этом энерговыделение в пересчете на одну молекулу мишени составляет порядка 7–15 кэВ. Из этой величины энергия 5–6 кэВ затрачивается на ионизацию атомов и возбуждение K -вакансии, а остаток (1–10 кэВ) передается возникшим свободным электронам. С учетом того, что при ионизации M - и L -оболочек атома кремния и двух атомов кислорода может образоваться 16–24 свободных электронов, их средняя энергия лежит в диапазоне 40–400 эВ. Отметим, что приведенная оценка является весьма грубой и безусловно завышенной, поскольку часть энергии иона поглощается в областях, находящихся дальше от оси трека или в области брегговского пика поглощения, где образования ионов с K -вакансиями не происходит. Как будет показано ниже (разд. 5), в действительности средняя энергия свободных электронов составляет 10–100 эВ.

2.2. Образование ионов с вакансией в K -оболочке

Помимо свободных электронов на стадии первоначального возбуждения среды образуются различные многозарядные ионы, имеющие одну вакансию в K -оболочке, n вакансий в L -оболочке и полностью ионизованную M -оболочку. Заселенности состояний с n вакансиями в L -оболочке, N_n , пропорциональны сечениям многократной ионизации атома мишени, σ_n , полем налетающего иона. В атомной модели для расчета сечения многократной ионизации обычно (см., например, [3–6]) используется квазиклассический метод параметра удара, в рамках которого его можно записать в виде

$$\sigma_n = \sigma(1s) \frac{8!}{n!(8-n)!} p_L^n(0) [1 - p_L(0)]^{8-n}, \quad (2)$$

где $\sigma(1s)$ — сечение ионизации $1s$ -электрона, $p_L(0)$ — вероятность ионизации L -электрона при столкновении с нулевым значением прицельного параметра и n — число вакансий в L -оболочке возникшего иона ($n = 0$ при образовании автоионизационного состояния в F-подобном ионе, $n = 1$ при образовании автоионизационного состояния в O-подобном ионе, и т. д.). При выводе формулы (2) предполагается, что вероятности ионизации $2s$ - и $2p$ -электронов одинаковы. Формулу (2) можно легко обобщить на случай, когда эти вероятности различаются. Если обозначить вероятности ионизации $2s$ - и $2p$ -электронов при столкновении с нулевым значением прицельного параметра как $p_{2s}(0)$ и $p_{2p}(0)$, то обобщенная формула для сечения многократной ионизации может быть записана следующим образом:

$$\sigma_n = \sigma(1s) \sum_{k_1+k_2=n} \frac{2!}{k_1!(1-k_1)!} \frac{6!}{k_2!(8-k_2)!} \times \\ \times p_{2s}^{k_1}(0) p_{2p}^{k_2}(0) [1-p_{2s}(0)]^{2-k_1} [1-p_{2p}(0)]^{6-k_2}. \quad (3)$$

Таким образом, для описания начальных условий достаточно знать значения вероятностей $p_{2s}(0)$ и $p_{2p}(0)$, которые являются функциями заряда налетающего иона, заряда ядра атома мишени и скорости налетающего иона. К сожалению, достаточно точный расчет этих величин представляет весьма сложную задачу, и опубликованных данных для столкновений Ni^{+14} с Si в настоящее время нет. Поэтому ниже будем полагать $p_{2s}(0) = p_{2p}(0) = p_L(0)$ и считать $p_L(0)$ первым свободным параметром задачи.

Длительность первой стадии формирования плазмы в каждой точке трека определяется фактически временем многократной ионизации атома

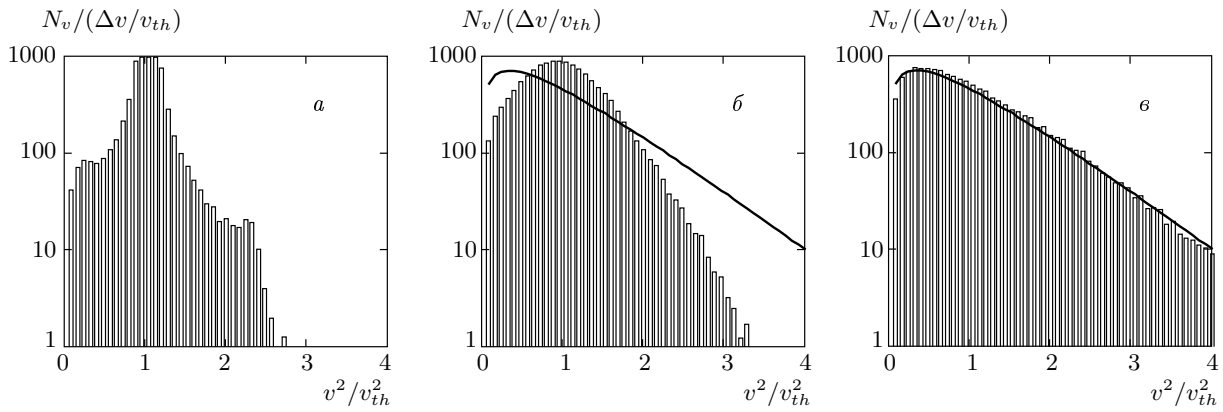


Рис. 1. Распределение электронов по скоростям в последовательные моменты времени $t = 0.01$ фс (а), 0.1 фс (б), 1 фс (в). Скорости нормированы на тепловую скорость для $T_e = 50$ эВ. В начальный момент $N_v \propto \delta(v - v_{th})$. Гистограмма — текущее распределение (Δv — шаг гистограммы), кривая — распределение Максвелла для температуры $T_e = 2E_k/3k_B$, где E_k — средняя кинетическая энергия электронов в данный момент времени, k_B — постоянная Больцмана

мишени и составляет $\tau_1 \sim a/v$, где a — размер атома. Для рассматриваемых в настоящей работе случаев величина τ_1 составляет 10^{-3} – 10^{-2} фс и, как будет видно из дальнейшего, существенно меньше продолжительности других стадий.

3. СТАДИЯ БЫСТРОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Рассмотрим задачу о релаксации плазмы. В частности, постараемся ответить на следующие вопросы: насколько уменьшится концентрация свободных электронов за счет диффузии из области трека; как скоро установится равновесное максвелловское распределение для электронов; на каких временах произойдет разрушение ионной решетки; какова скорость рекомбинации электронов на высоколежащие квазиклассические уровни.

Для простой оценки будем считать, что к моменту окончания ионизации, $t = \tau_1$, средний заряд ионов равен $Z = 2$, концентрация электронов $n_e = 2 \cdot 10^{23}$ см $^{-3}$, температура электронов $T_e = 50$ эВ. В этом случае параметр неидеальности электрон-электронного взаимодействия равен

$$\Gamma_{ee} = \left(\frac{4\pi n_e}{3}\right)^{1/3} \frac{e^2}{k_B T_e} = 0.27,$$

а формально вычисленное количество частиц в сфере Дебая —

$$N_D = \frac{4}{3}\pi r_D^3 n_e = 1.4,$$

где $r_D = \sqrt{k_B T / 4\pi n_e e^2}$ — радиус дебаевского экранирования. Этот результат говорит о том, что плазма является существенно неидеальной и приближение газовой плазмы здесь неприменимо. Релаксацию в такой плазме можно изучать с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики (МД).

В настоящей работе был применен метод МД для неравновесных процессов, описанный ранее [13]. На первом этапе система выводилась на равновесие с указанными параметрами n_e и T_e . Затем рассчитывалась достаточно длинная равновесная МД-траектория, на которой выбиралось 50–400 статистически независимых состояний. В каждом из этих состояний равновесие искусственно нарушалось, после чего выполнялось моделирование собственно релаксационного процесса. На последнем этапе выполнялось усреднение всех полученных зависимостей физических величин от времени, т.е. усреднение по ансамблю начальных состояний. Полное число частиц в основной МД-ячейке составляло $N = 1000$ – 2000 .

3.1. Релаксация скоростей электронов

Для определения времени установления максвелловского распределения электронов по скоростям рассмотрим начальное состояние, в котором все электроны имеют одинаковые по модулю скорости, равные тепловой скорости v_{th} при $T_e = 50$ эВ. Направление скоростей является случайным. На рис. 1 показана релаксация этого распределения. В момент

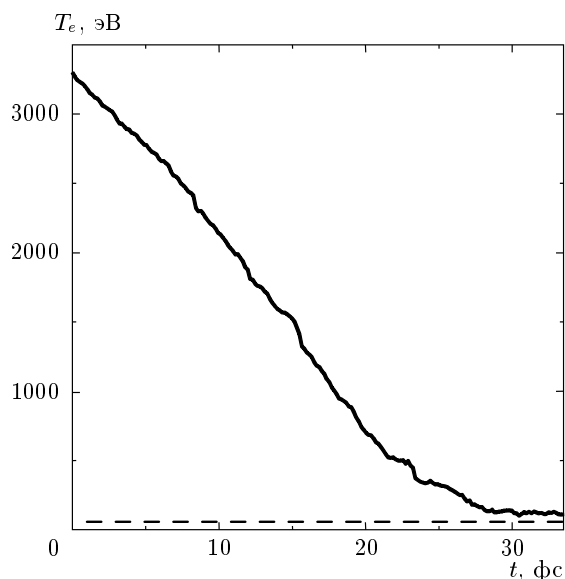


Рис. 2. Релаксация средней кинетической энергии «быстрых» электронов с начальной энергией, соответствующей $T_b(0) = 3.3$ кэВ (сплошная кривая). Штриховая линия — температура $T_e(0) = 50$ эВ основной плазмы

времени $t = 0.1$ фс распределение уже близко по форме к максвелловскому, однако наклон его экспоненциальной части не соответствует средней кинетической энергии электронов. Наконец, при $t = 1$ фс распределение хорошо совпадает с распределением Максвелла в данном диапазоне скоростей. Это время и можно считать характерным временем релаксации электронной функции распределения.

Как будет показано ниже, в плазме может находиться некоторое количество быстрых электронов со средней кинетической энергией пучка, соответствующей температуре $T_b \approx 3$ кэВ. На рис. 2 показана термализация таких электронов. Концентрация быстрых электронов составляла $0.001n_e$, поэтому они практически не оказывали влияния на температуру основной части плазмы. Как видно из рис. 2, характерное время термализации составило $t \approx 30$ фс.

3.2. Столкновительная рекомбинация

Для того чтобы можно было воспользоваться плазменной моделью для описания рентгеновских спектров вещества в треке, образованного быстрым ионом, необходимо, чтобы время рекомбинации плазмы было достаточно велико и, по крайней мере, превышало характерное время жизни излучающих уровней. Здесь, однако, надо отметить, что

плазма в треке является, с одной стороны, существенно неидеальной, а, с другой стороны, включает в себя ионы с зарядами, много большими единицы. Эти два фактора могут оказать существенное влияние на скорость рекомбинации, которая в данных условиях может протекать со скоростью, сильно отличающейся от скорости трехчастичной рекомбинации в идеальной плазме.

Изучение кинетики образования парных флуктуаций в неравновесной плазме может быть проведено непосредственно. С этой целью был использован следующий алгоритм, в котором первые три этапа являются предварительными.

1) Сначала система приводится в состояние равновесия при выбранном потенциале взаимодействия электронов и ионов. Полученная конечная конфигурация используется как начальная для последующего расчета.

2) Связанные пары исключаются следующим образом. Строится сравнительно короткая МД-траектория, на которой проводится поиск связанных состояний, существующих в начальный момент времени. Затем скорости частиц, образующих эти пары, увеличиваются, а скорости оставшихся частиц уменьшаются так, чтобы полная кинетическая энергия электронов сохранялась.

3) С использованием полученных таким образом новых начальных условий повторяют процедуру 2. Цикл проводится до тех пор, пока не удастся получить начальные условия без связанных состояний в начальный момент времени.

4) Затем рассчитывается МД-траектория и устанавливается зависимость числа электрон-ионных пар от времени. Поскольку эта зависимость оказывается близкой к экспоненциальной, скорость рекомбинации ν вычисляется как производная зависимости доли пар в системе от времени в нуле:

$$\nu = \left. \frac{d\alpha}{dt} \right|_{t=0}, \quad (4)$$

где α — доля пар в системе.

Расчеты были проведены для различных глубин потенциала и степеней неидеальности плазмы. Результаты говорят о том, что скорость рекомбинации от глубины потенциала практически не зависит, что свидетельствует о том, что при рекомбинации свободные электроны переходят сначала в слабосвязанные электрон-ионные пары и лишь потом на уровни с большей энергией связи.

Зависимость скорости рекомбинации от степени электрон-электронной неидеальности плазмы Γ_{ee} носит куполообразный характер, проходя максимум

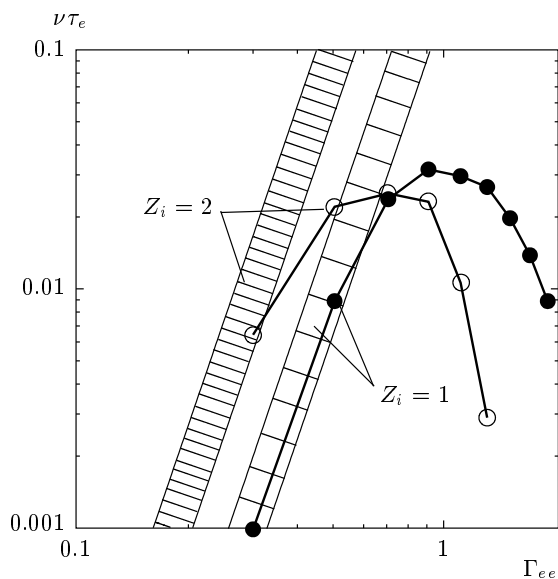


Рис. 3. Зависимость скорости рекомбинации от степени неидеальности плазмы при заряде ионов плазмы $Z_i = 1, 2$. Заштрихованные области соответствуют формуле (5); τ_e — период плазменных колебаний

при $\Gamma_{ee} \approx 0.9$ (рис. 3). При малых степенях неидеальности результаты расчета хорошо согласуются со скоростью трехчастичной рекомбинации для идеальной плазмы:

$$\nu = C e^{10} Z^3 m^{-1/2} n_e^2 T_e^{-9/2}, \quad (5)$$

где e и m — заряд и масса электрона, $C = 1-3$. Это говорит в пользу достоверности предложенного метода расчета. При высоких степенях неидеальности скорость рекомбинации оказывается значительно меньше скорости, предсказываемой формулой (5), и убывает с ростом неидеальности плазмы.

Кроме того, предварительно изучалась скорость рекомбинации в многозарядной неидеальной плазме. Результаты моделирования двухзарядной неидеальной плазмы показаны на рис. 3, где также представлены скорости рекомбинации для однозарядной плазмы. Обе зависимости имеют куполообразный характер, однако положение максимума для двухзарядной плазмы существенно смещено в область меньших степеней неидеальности плазмы. Хотя при малых неидеальностях ($\Gamma_{ee} < 0.7$) скорость рекомбинации в двухзарядной плазме выше, чем в однозарядной, в сильнонеидеальной плазме ситуация оказывается обратной, т. е. скорость рекомбинации для плазмы с двухзарядными ионами оказывается меньше, чем для плазмы с однозарядными. Стоит ука-

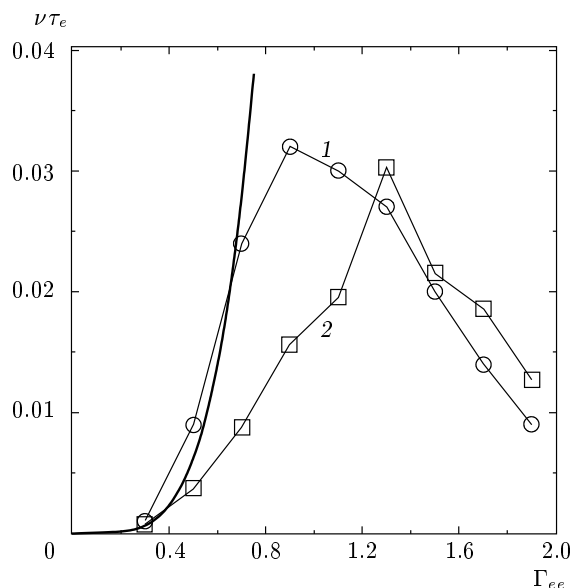


Рис. 4. Зависимость скорости рекомбинации от степени неидеальности плазмы при $Z_i = 1$ для случаев газообразной плазмы (1) и плазмы с ионами, фиксированными в кристаллической решетке (2); жирная кривая — экстраполяция формулы (5) для идеальной плазмы

зать, что отношение скоростей рекомбинации в однозарядной и двухзарядной плазме монотонно увеличивается с ростом неидеальности. При малой неидеальности скорость рекомбинации, как и для однозарядной плазмы, хорошо описывается формулой трехчастичной рекомбинации.

Необходимо также отметить, что скорость рекомбинации существенно зависит от характера расположения ионов в плазме. Результаты моделирования приведены на рис. 4 и показывают, что в слабонеидеальной плазме рекомбинация проходит существенно быстрее, чем в случае плазмы с ионами, фиксированными в узлах кубической кристаллической решетки. Данный эффект особенно ярко выражен при $\Gamma_{ee} < 1.4$, когда скорости рекомбинации различаются более чем в два раза. При более высоких степенях неидеальности эффект практически исчезает. Сам эффект зависимости скорости рекомбинации от расположения ионов обусловлен, вероятно, тем, что возникновение части пар связано с флуктуациями ионной плотности, которые в случае ионов, фиксированных в кристаллической решетке, оказываются невозможными.

Так же как в случае однозарядной плазмы, для двухзарядной плазмы наблюдается зависимость ско-

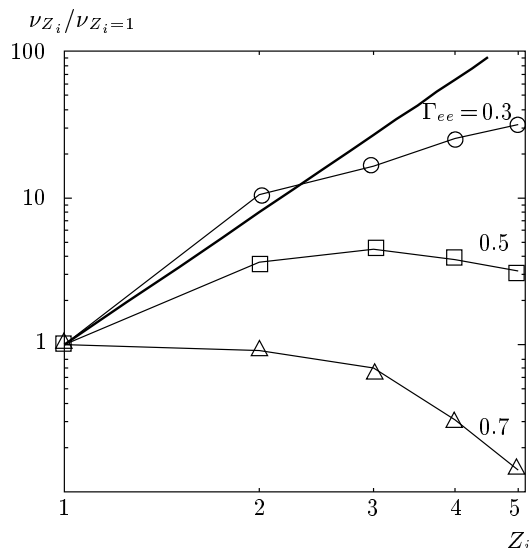


Рис. 5. Соотношение скоростей рекомбинации при различных значениях заряда иона. Жирная кривая соответствует случаю идеальной плазмы

рости рекомбинации от характера расположения ионов, т. е. при не слишком высоких степенях неидеальности ($\Gamma_{ee} < 0.7$) скорость рекомбинации в газовой плазме оказывается заметно выше скорости рекомбинации в плазме, где ионы фиксированы в узлах кристаллической решетки. При очень высоких степенях неидеальности этот эффект пропадает. Стоит отметить, что данный эффект для двухзарядной плазмы исчезает при несколько меньших степенях неидеальности, чем для однозарядной, что обусловлено большим межйонным расстоянием в двухзарядной плазме, чем в однозарядной, при той же электронной плотности. Другим возможным фактором, ведущим к исчезновению влияния ионной решетки при высоких степенях неидеальности плазмы, может являться межйонное взаимодействие, приводящее к возникновению ближнего порядка для случая газообразной плазмы. Последний фактор может иметь важное значение для плазмы с многозарядными ионами, так как в этом случае взаимодействие между ионами оказывается значительно сильнее взаимодействия между электронами и ионами.

Стоит также отметить, что с увеличением заряда ионов плазмы влияние роста электронной неидеальности на процесс рекомбинации усиливается. В результате уже при сравнительно низких степенях неидеальности плазмы ($\Gamma_{ee} \approx 0.3$) при высоких значениях заряда ионов наблюдается существенное от-

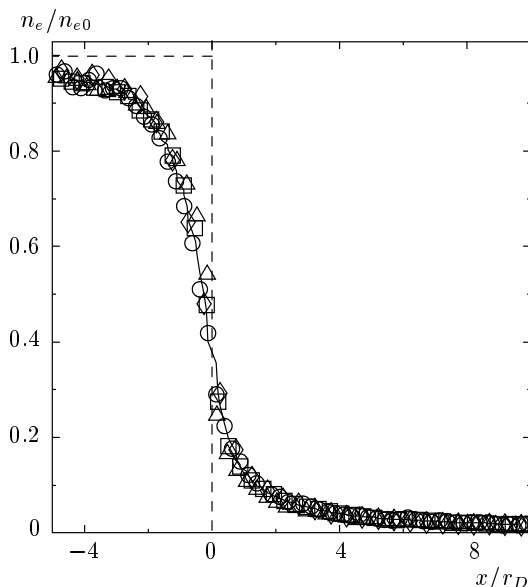


Рис. 6. Профиль концентрации электронов в области двойного электронного слоя. Концентрация нормирована на среднюю концентрацию до начала разлета электронов, x — поперечная пространственная координата. Штрихи — профиль концентрации ионов. Точки — МД-результаты для различных Γ_{ee} : кружки — $\Gamma_{ee} = 0.2$, треугольники — $\Gamma_{ee} = 0.5$, квадраты — $\Gamma_{ee} = 1$, ромбы — $\Gamma_{ee} = 2$; сплошная линия — усредненная зависимость

клонение скорости рекомбинации от случая идеальной плазмы. При дальнейшем росте степени неидеальности это отклонение усиливается (рис. 5) и ведет к сильному уменьшению скорости рекомбинации. При этом в сильнонеидеальной плазме скорость рекомбинации будет уменьшаться с ростом заряда иона. Такое увеличение влияния степени неидеальности на скорость рекомбинации при увеличении зарядов ионов, вероятно, обусловлено тем, что для плазмы с высоким значением заряда ионов степени электрон-ионной неидеальности оказываются значительно больше степеней электрон-электронной неидеальности Γ_{ee} .

Таким образом, характерное время рекомбинации для электронной степени неидеальности плазмы $\Gamma_{ee} = 0.7$ и температуры $T_e = 25$ эВ при среднем заряде ионов $Z_i = 6$ окажется 17 пс, что многократно превышает время, необходимое для высвечивания рентгеновского излучения.

3.3. Изменение пространственного распределения частиц

Рассмотрим в первую очередь изменение концентрации электронов. В целом плазма является электронейтральной, но за счет диффузии электронов из области трека возникает положительный заряд, препятствующий дальнейшему разлету электронов. На границе трека образуется двойной электрический слой (рис. 6). МД-расчеты для плазмы с неидеальностью $\Gamma_{ee} = 0.2\text{--}2$ показывают, что ширина d этого слоя зависит только от дебаевского радиуса r_D . Ионы считались неподвижными, однако в расчетах проводилось усреднение по различным положениям ионов. При $n_e = 10^{23} \text{ см}^{-3}$, $T_e = 50 \text{ эВ}$ ширина слоя составляет $d = 2 \text{ \AA}$, а время его установления $t = 1.2\tau_e = 0.3 \text{ фс}$, где τ_e — период электронных плазменных колебаний. Таким образом, ширина слоя имеет порядок межчастичного расстояния.

Время разлета плазмы определяется динамикой ионов, которые в начальный момент имеют достаточно низкую температуру ($T_i \ll T_e$), а затем нагреваются за счет преобразования кулоновской энергии их взаимодействия в кинетическую, а также за счет электрон-ионной релаксации. В частности, важным представляется вопрос о том, как быстро происходит плавление ионной решетки после ионизации.

В проведенных МД-расчетах ионы считались изначально неподвижными, $T_i(0) = 0$, и находящимися в узлах кубической кристаллической решетки. Для того чтобы уменьшить время расчета, было выбрано модельное соотношение масс ионов и электронов, равное $M/m = 100$. В работе [13] показано, что динамика электронов не зависит от M при $M/m \geq 100$, а характерные времена релаксации ионов реальной массы M_r можно получить домножением рассчитанных значений t на $\sqrt{M_r/M}$.

Для определения времени существования кристаллической решетки рассчитывался параметр Линдемана $\delta_L = \sqrt{\langle \Delta r^2 \rangle} / r_{nn}$, где Δr — смещение иона от узла решетки, r_{nn} — период решетки, в зависимости от времени (рис. 7). Время на графике рассчитано для ионов кремния ($M/m = 51573$). Изменение наклона кривой при $t \approx 1.5 \text{ пс}$ указывает на плавление ионной решетки. Это время значительно превышает времена электронной релаксации и, как будет показано ниже, время высвечивания рентгеновских спектральных линий, поэтому динамикой ионов здесь можно пренебречь.

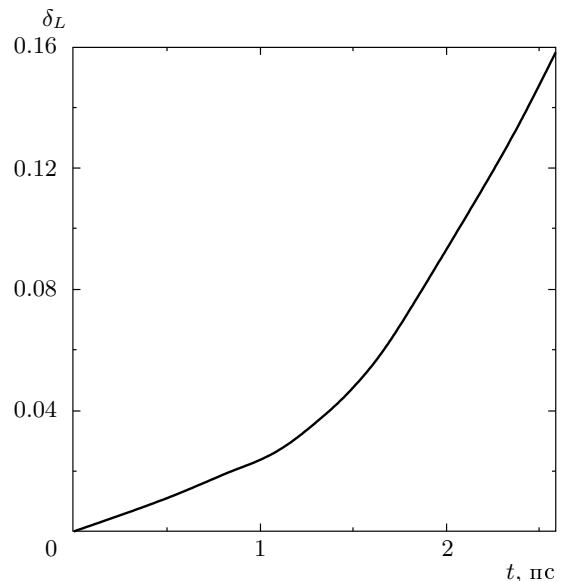


Рис. 7. Зависимость параметра Линдемана от времени при плавлении кристаллического кремния

4. РЕЛАКСАЦИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ИОНОВ

4.1. Система уравнений

Эволюция возникшего возбужденного состояния описывается стандартной системой зависящих от времени кинетических уравнений (6) (см., например, [14]):

$$\frac{dN_k^Z}{dt} = \sum_{m, Z'} K_{km}^{ZZ'} N_m^{Z'}, \quad (6)$$

где $N_k^Z(t)$ — населенность k -го состояния в ионе со спектроскопическим символом Z , $K_{km}^{ZZ'}$ — зависящая от температуры и плотности плазмы кинетическая матрица, недиагональные элементы которой дают вероятности перехода $(m, Z') \rightarrow (k, Z)$ в результате всех элементарных процессов, а диагональные элементы со знаком минус равны суммарной вероятности распада состояния (k, Z) .

Обычно при решении системы (6) используется так называемое квазистационарное приближение [14], в котором предполагается, что для возбужденных уровней производные по времени равны нулю. В этом приближении система (6) решается только для основных состояний, а населенности возбужденных определяются из решения существенно более простой системы алгебраических уравнений. Это соответствует случаю, когда скорости релаксации возбужденных уровней гораздо выше, чем

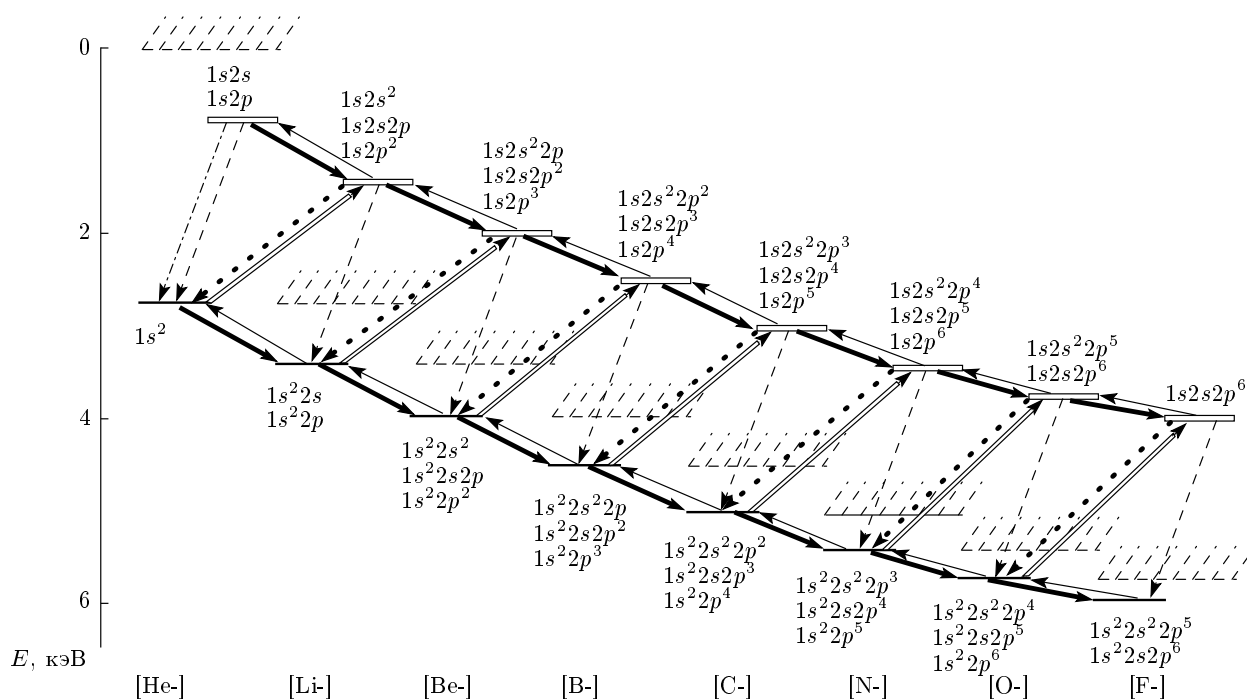


Рис. 8. Схема уровней и атомных процессов, учитываемых в плазменной модели релаксации: штриховые линии — радиационный распад, жирные точки — автоионизация, двойные сплошные — диэлектронный захват, тонкие сплошные — столкновительная ионизация, толстые сплошные — тройная рекомбинация, штрихпунктир — столкновительное девозбуждение

скорости релаксации основных состояний. В случае твердотельной плазмы такое приближение не является адекватным, и в настоящей работе система (6) решается как для основных, так и возбужденных (автоионизационных) состояний. При этом были использованы следующие предположения, позволяющие сократить число уравнений и тем самым существенно упростить задачу. Во-первых, в систему (6) включаются только основные конфигурации ионов и их наиболее низколежащие автоионизационные конфигурации; во-вторых, считается, что заселенности близлежащих уровней одного иона пропорциональны их статистическим весам, поскольку в твердотельной плазме вероятности столкновительных переходов между этими уровнями превышают вероятности радиационных и автоионизационных процессов. В результате вместо огромного числа термов, относящихся, например, к конфигурациям $1s2s^n2p^m(2S+1)L_{(2J+1)}$ вводится один уровень $1s2l^{(n+m)}$. Полученная таким образом упрощенная схема уровней, для которой и решалась система уравнений (6), показана на рис. 8. В кинетической матрице при этом учитываются следующие процессы: ионизация электронным ударом, тройная реком-

бинация, фоторекомбинация, радиационный распад, автоионизация и диэлектронный захват, и считается, что в ходе релаксационных процессов температура и плотность плазмы не меняются. Значения атомных констант (энергий уровней и вероятностей радиационных и автоионизационных переходов) и скоростей столкновительных переходов были взяты из [15, 16].

Ожидаемые значения температуры свободных электронов составляют 10–100 эВ. Для таких электронов времена термализации, как показано выше, не превосходят долей фемтосекунды. Однако в процессе автоионизации в плазме возникают электроны со значительно большими энергиями (1000–1400 эВ). Поскольку времена термализации таких электронов превышают фемтосекунду, следует рассматривать плазму с двумя фракциями электронов. Так как в начальный момент мы имеем шесть–семь свободных электронов на один атом мишени, а при автоионизации добавляется один электрон, фракция быстрых электронов будет составлять около 13–14%. Если низкотемпературную фракцию можно считать максвелловской, то функция распределения для более энергетичной фракции скорее будет иметь вид

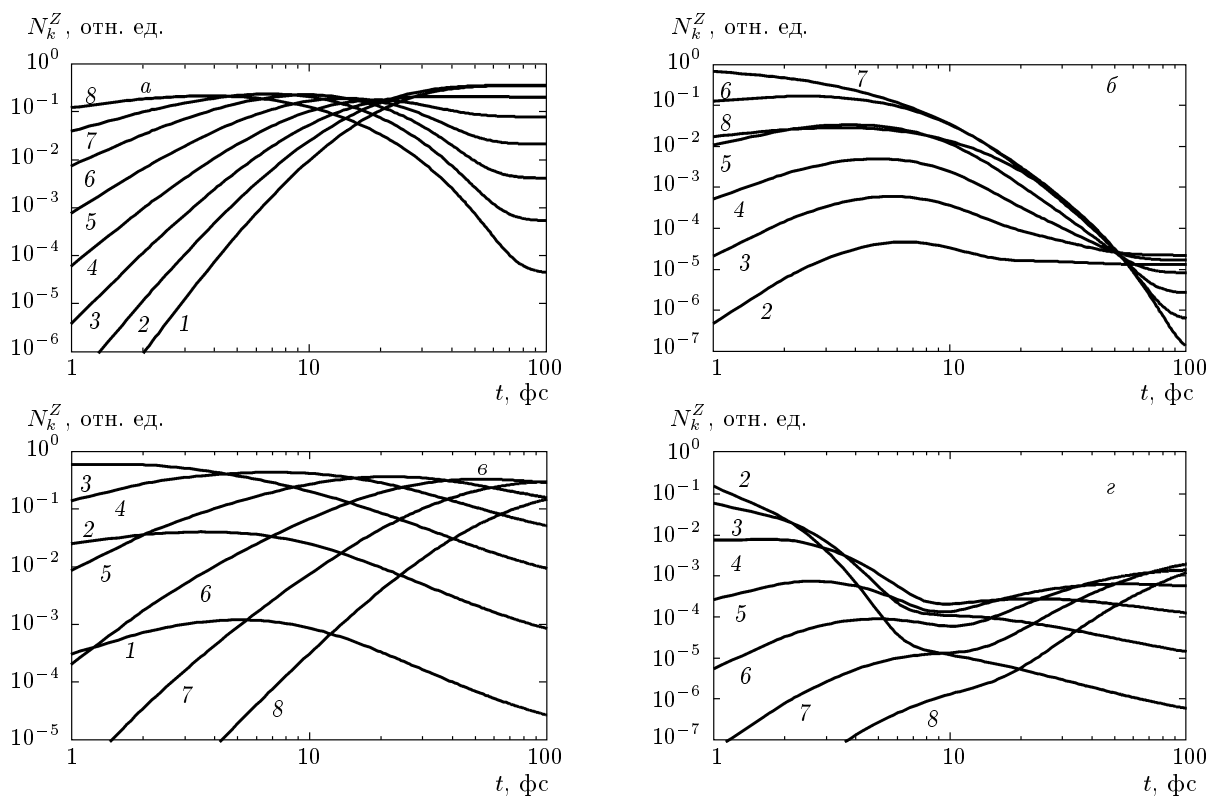


Рис. 9. Зависимости от времени населенностей основных (*а, в*) и автоионизационных (*б, г*) состояний ионов кремния различной кратности в плазме с $T_e = 10$ эВ (*а, б*), 100 эВ (*в, г*). 1 — Ne-подобный SiV; 2 — F-подобный SiVI; 3 — O-подобный SiVII; 4 — N-подобный SiVIII; 5 — C-подобный SiIX; 6 — B-подобный SiX; 7 — Be-подобный SiXI; 8 — Li-подобный SiXII. Первоначально возбуждено автоионизационное состояние Be-подобного иона SiXI (*а, б*) или F-подобного иона SiVI (*в, г*)

ступеньки, расположенной в области от 1100 до 1300 эВ, поскольку именно с такими энергиями должны возникать свободные электроны при автоионизации состояний с различным числом электронов в *L*-оболочке. Параметры высокоэнергетичной ступеньки мы зафиксируем, а температуру T_e низкоэнергетичной фракции будем рассматривать как второй свободный параметр и менять в диапазоне 10–300 эВ. Соответственно, все скорости элементарных столкновительных процессов, входящие в систему уравнений (6), рассчитывались именно для таких функций распределения электронов плазмы.

Следует заметить, что такое рассмотрение, безусловно, является приближенным, поскольку в ходе ионизационно-рекомбинационных процессов электроны могут переходить из одной фракции в другую, например, приобретая значительную энергию при процессах тройной рекомбинации или, наоборот, теряя ее при ионизации, делая тем самым указанное разделение весьма условным. Однако такой под-

ход представляется нам физически оправданным, так как позволяет качественно разделить электроны на фракции, одна из которых (низкотемпературная) отвечает преимущественно за ионизацию внешних электронов и рекомбинацию, а вторая (высокоэнергетичная) — за диэлектронный захват в автоионизационные состояния и, частично, за столкновительную ионизацию.

Полная интенсивность I^Z массива неразрешаемых спутных переходов, обусловленных радиационным распадом автоионизационных состояний иона со спектроскопическим символом Z и излучаемых за время существования плазмы, рассчитывалась по формуле

$$I^Z = \int_0^{\tau_{pl}} N_k^Z(t) A_k^Z dt, \tag{7}$$

где A_k^Z — вероятность радиационного распада автоионизационного состояния k , а τ_{pl} — время свечения плазмы.

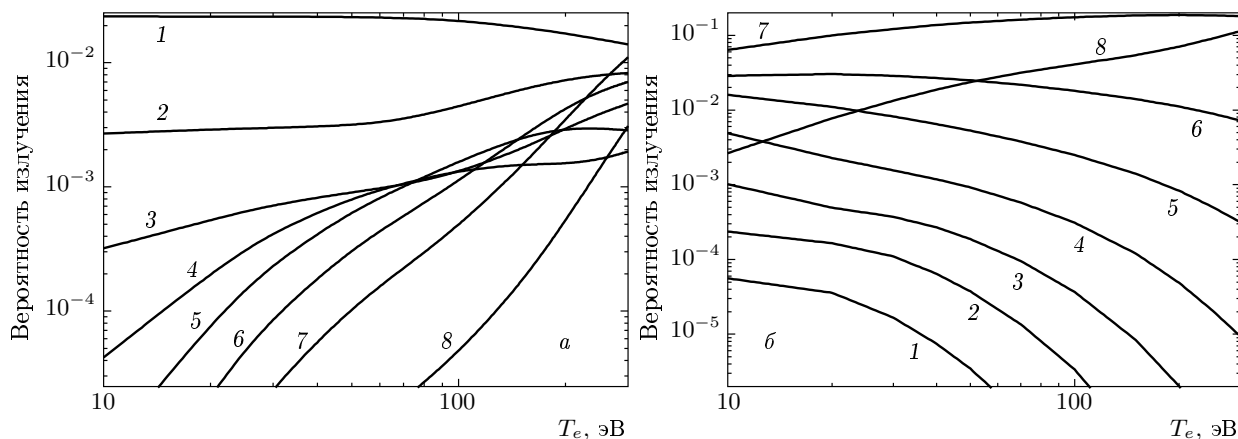


Рис. 10. Вероятность излучения фотона ионами кремния разных изоэлектронных последовательностей при первоначальном возбуждении автоионизационного состояния в F-подобном ионе SiVI (*a*) и Li-подобном ионе SiXII (*б*): 1 — F-подобный SiVI; 2 — O-подобный SiVII; 3 — N-подобный SiVIII; 4 — C-подобный SiIX; 5 — B-подобный SiX; 6 — Be-подобный SiXI; 7 — Li-подобный SiXII; 8 — He-подобный SiXIII

4.2. Временные зависимости заселенностей ионных уровней

Решение системы уравнений (6) позволяет, с одной стороны, проследить релаксацию первоначально возникшего состояния с *K*-вакансией в ионе Z_0 , а с другой, рассчитать эмиссионный спектр, который наблюдается при прохождении потока тяжелых ионов через конденсированную среду. В первом случае начальные условия имеют вид

$$N_k^Z(0) = \begin{cases} N, & Z = Z_0, \\ 0, & Z \neq Z_0 \end{cases} \quad (8)$$

(N — атомная плотность вещества мишени), а во втором случае значения $N_k^Z(0)$ пропорциональны сечениям многократной ионизации (2). Примеры результатов расчетов, проведенных для начальных условий типа (8), приведены на рис. 9, где показаны зависимости от времени относительных населенностей автоионизационных и основных состояний ионов кремния разной кратности в условиях, когда плазма является рекомбинационно-неравновесной (рис. 9*a,б*) и ионизационно-неравновесной (рис. 9*в,г*).

Как видно из рис. 9, выход населенностей основных состояний ионов на стационарные значения происходит за время порядка 100 фс, т.е. длительность этой стадии релаксации действительно существенно превышает длительность первых двух стадий формирования плазмы, рассмотренных выше в разд. 2 и 3. Следует подчеркнуть, что хотя населенности автоионизационных состояний, строго говоря, выхо-

дят на стационарные значения примерно за такие же времена, релаксация автоионизационных состояний наиболее представленных ионов происходит за время 10–20 фс, после чего населенности этих состояний становятся относительно малыми. Поскольку интенсивности рентгеновских спектральных линий пропорциональны населенностям автоионизационных состояний, основной вклад в рентгеновское излучение плазмы будет определяться временами $t \leq 10\text{--}20$ фс, когда плазма является не только сильнонеравновесной, но и сильнонестационарной. В соответствии с этим ниже при расчете спектров используется значение $\tau_{pl} = 20$ фс.

5. РАСЧЕТ ИЗЛУЧАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА И СОПОСТАВЛЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

5.1. Результаты расчета

Предположим, что в результате взаимодействия налетающего быстрого тяжелого иона с атомом мишени возникло автоионизационное состояние в ионе Z . Тогда в рамках классической атомной модели с вероятностью $A^Z/(A^Z + \Gamma^Z)$ этот ион может излучить рентгеновский фотон с длиной волны λ_Z , и никаких других излучательных процессов больше происходить не будет. В отличие от этого, в плазменной модели релаксации первоначально возникший ион может сначала перейти в другое ионизационное состояние Z' , а затем уже ион Z' может излучить фотон с длиной волны $\lambda_{Z'}$. Вероятность такого события можно определить из решения системы урав-

нений (6), и она будет зависеть как от значений Z , Z' , так и от температуры плазмы (поскольку плотность плазмы фиксирована). Примеры результатов расчетов приведены на рис. 10.

Из рис. 10 видно, что плазменная модель релаксации дает результаты, принципиально отличающиеся от результатов атомной модели. Хорошо видно, что практически при любых температурах плазмы релаксация первоначально образованного автоионизационного состояния в ионе Z может приводить к излучению фотона ионом $Z' \neq Z$. При высоких температурах плазмы $T_e = 100\text{--}300$ эВ это будет в первую очередь относиться к первоначально возбужденным состояниям в ионах низших кратностей. Например (рис. 10а), образование автоионизационного состояния в F-подобном ионе кремния может приводить к излучению сателлитных линий, обусловленных переходами в O-, N- и C-подобных ионах. При низких температурах $T_e < 50$ эВ указанный эффект проявляется, главным образом, на первоначально образованных автоионизационных состояниях ионов высоких кратностей. Например (рис. 10б), релаксация автоионизационного состояния литиеподобного иона кремния приводит к излучению сателлитных линий, обусловленных переходами в Be- и B-подобных ионах.

5.2. Сопоставление с экспериментом

Результаты наших расчетов можно сопоставить с экспериментальными данными, полученными недавно в работах [10–12] на линейном ускорителе тяжелых ионов UNILAC в GSI (Дармштадт, Германия). Исследовалось взаимодействие ионов Ni^{+14} с аэрогелевыми мишенями SiO_2 плотностью 0.15 г/см³. Общая толщина мишени выбиралась из условия полной остановки в ней ионного пучка. Использование аэрогелевой мишени позволяло увеличить длину трека примерно до 2 мм и тем самым упростить наблюдение спектров с пространственным разрешением, оставляя другие характеристики взаимодействия практически такими же, как в случае применения твердотельной мишени.

Ионы с энергиями 11.4 МэВ/нуклон ($v/c = 0.16$) фокусировались в пятно диаметром 1–2 мм на краю мишени. Интенсивность пучка составляла 0.2–0.5 мкА при общем времени экспозиции 2–3 ч. Небольшое значение среднего тока пучка статистически задавало интервал следования ионов, примерно равный 10 пс. В этом случае вероятность попадания двух ионов в один трек за время существования плазмы пренебрежимо мала, и можно рассмат-

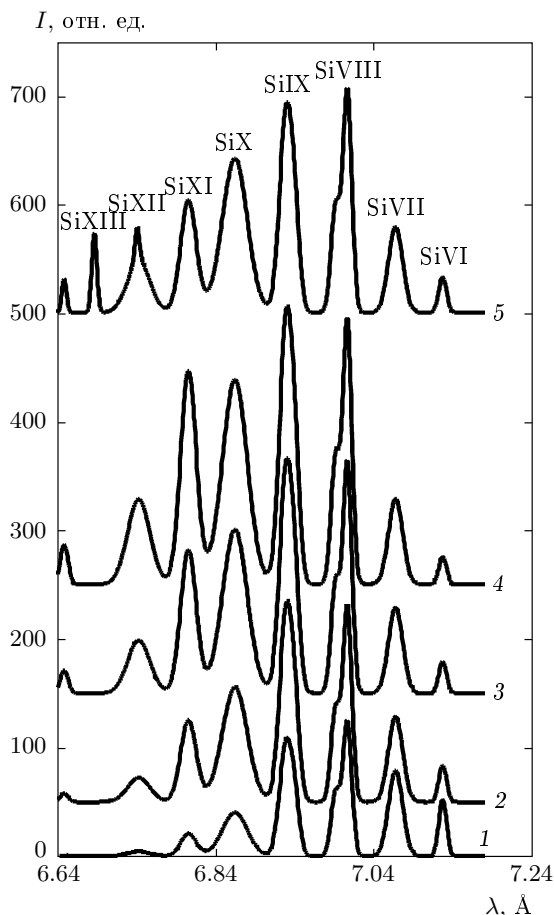


Рис. 11. Спектры излучения, рассчитанные по плазменной модели релаксации для $p_L(0) = 0.34$ и $T_e = 5$ эВ (кривая 1), 20 эВ (2), 100 эВ (3), 200 эВ (4), и спектр, полученный в рамках атомной модели при $p_L(0) = 0.34$ (5). Для наглядности спектры смещены по оси ординат

ривать весь процесс как формирование плазмы в треке одной единственной высокоэнергетичной заряженной частицей. Спектры рентгеновского излучения в области 6.1–7.3 Å регистрировались спектрографом со сферически изогнутым кристаллом кварца. Дисперсионная схема была настроена на работу во втором порядке отражения, что позволило одновременно наблюдать диэлектронные сателлиты линии He_α (вплоть до линии K_α нейтрального атома кремния) многозарядных ионов кремния. Спектры регистрировались с одномерным пространственным разрешением, причем направление распространения пучка налетающих тяжелых ионов внутри мишени лежало в плоскости пространственного разрешения.

Поскольку в экспериментах [10–12] спектры регистрировались интегрально по времени, наблюдае-

мый спектр является суммой спектров, излучавшихся при первоначальном возбуждении автоионизационных состояний различных ионов. В соответствии с этим, он описывается формулой (7), где населенности автоионизационных состояний берутся из решения системы кинетических уравнений (6) с начальными условиями, соответствующими формуле (2).

Необходимо отметить, что для иона каждой кратности массив спутанных линий обусловлен значительным числом радиационных переходов (примерно до сорока в случае С-подобного иона), сосредоточенных в достаточно узком спектральном интервале примерно 0.05 Å. Поскольку спектральное разрешение в экспериментах [10–12] не превышало 3000, эти линии не разрешались и наблюдались как широкие спектральные контуры с формой, определяемой не механизмами уширения отдельных спектральных линий, а распределением $g^Z A^Z(\lambda)$, где g^Z — статистический вес уровня. В настоящей работе спектральные функции, описывающие форму массивов неразрешаемых линий, были взяты из экспериментов [10–12] и аппроксимированы гауссианами, причем для О-, N- и С-подобных спутантов использовались суммы двух гауссовых функций. Примеры модельных спектров приведены на рис. 11 при различных значениях T_e . Видно, что спектры оказываются весьма чувствительными к температуре плазмы и, следовательно, могут быть использованы для ее измерения.

На рис. 12 приведены результаты сопоставления модельных спектров с наблюдавшимися в работах [10–12] для областей среды, в которых энергия налетающих ионов составляла 11, 6, 3 МэВ/нуклон. Модельные спектры рассчитывались при концентрации электронов в плазме $N_e = 4.5 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, которая соответствовала наблюдаемому среднему заряду излучающих ионов. Видно, что варьирование параметров $p_L(0)$ и T_e позволяет получить хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных и тем самым измерить не только температуру плазмы в области трека тяжелого иона, но и весьма важную для теории атомных столкновений вероятность ионизации L-электрона при столкновении с быстрым тяжелым ионом, имеющим нулевое значение прицельного параметра. Из приведенного рисунка также хорошо видно, что экспериментальные спектры не могут быть удовлетворительно описаны атомной моделью релаксации.

Следует отметить, что имеется расхождение модельных и экспериментальных спектров для линии с $\lambda = 7.13 \text{ Å}$. Дело в том, что примерно такую же длину волны имеют внутриоболочечные переходы $2p-1s$

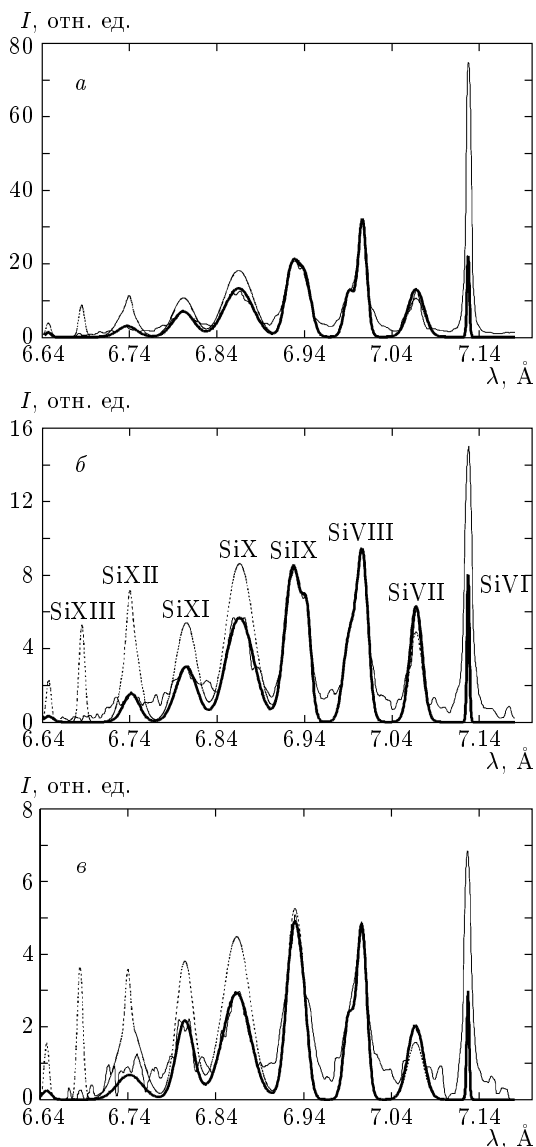


Рис. 12. Сравнение спектров, наблюдаемых из областей трека, находящихся на расстоянии 600 (а), 1000 (б) и 1400 мкм (в) от поверхности аэрогелевой мишени SiO₂ (тонкие сплошные линии) с расчетами по атомной (пунктирные линии), и плазменной (толстые сплошные линии) моделям релаксации. Атомная модель рассчитывалась при $p_L(0) = 0.335$ (а), 0.355 (б), 0.375 (в), плазменная модель — при $T_e = 14 \text{ эВ}$, $p_L(0) = 0.33$ (а), $T_e = 15 \text{ эВ}$, $p_L(0) = 0.335$ (б) и $T_e = 25 \text{ эВ}$, $p_L(0) = 0.34$ (в)

всех ионов от SiI (линия K_α нейтрального атома) до SiVI (F-подобный ион), а в расчетах ионы SiI–SiV не учитывались. Пренебрежение этими ионами вполне обосновано в рамках как плазменной модели релаксации, так и атомной модели, поскольку вероятность

образования иона с вакансией в K -оболочке и с электронами в M -оболочке при столкновении с тяжелой быстрой налетающей частицей пренебрежимо мала. Однако, как было замечено В. П. Ефремовым¹⁾, быстрые так называемые δ -электроны с энергиями в несколько килоэлектронвольт (см., например, [17]), которые в некотором количестве возникают в области трека, могут возбуждать линию K_{α} нейтрального кремния в областях вне трека быстрой частицы, поскольку длины их свободного пробега больше поперечного размера трека. Таким образом, наблюдаемая линия 7.13 \AA помимо сателлита F-подобного SiVI, излучаемого из области трека, содержит линии K_{α} атома SiI и иона SiIII, излучаемые из области вне трека, и ее интенсивность, естественно, оказывается выше, чем интенсивность одного сателлита. К сожалению, в настоящее время имеется недостаточно количественных данных относительно генерации δ -электронов, и включить их в модельный расчет пока не представляется возможным.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Проведенные расчеты позволяют более точно установить, какая часть стадии релаксации вносит определяющий вклад в рентгеновское излучение плазмы трека. На рис. 13 приведены зависимости интенсивностей спектральных линий ионов SiVI–SiXIII от величины τ_{pl} , рассчитанные при параметрах плазмы, соответствующих случаю, показанному на рис. 12б. Из рис. 13 хорошо видно, что вклад в излучение самых интенсивных сателлитных линий наиболее существен в первые 5–7 фс после пролета иона, а для самых слабых линий могут оказаться важными поздние ($t \approx 10$ –20 фс) стадии релаксации плазмы. Отметим, что если регистрация спектра излучения осуществляется без временного разрешения и динамический диапазон регистрации не слишком велик, то наблюдаемый спектр будет определяться практически полностью излучением плазмы за время 1–7 фс и, следовательно, нести информацию только о первых стадиях релаксации среды.

Следует подчеркнуть, что очень хорошее согласие наблюдаемых интенсивностей большого числа спектральных линий с расчетом по плазменной модели релаксации удается получить варьированием всего двух свободных параметров, $p_L(0)$ и T_e . Это, во-первых, свидетельствует об адекватности предложенной модели и, во-вторых, позволяет предложить

¹⁾ Частное сообщение.

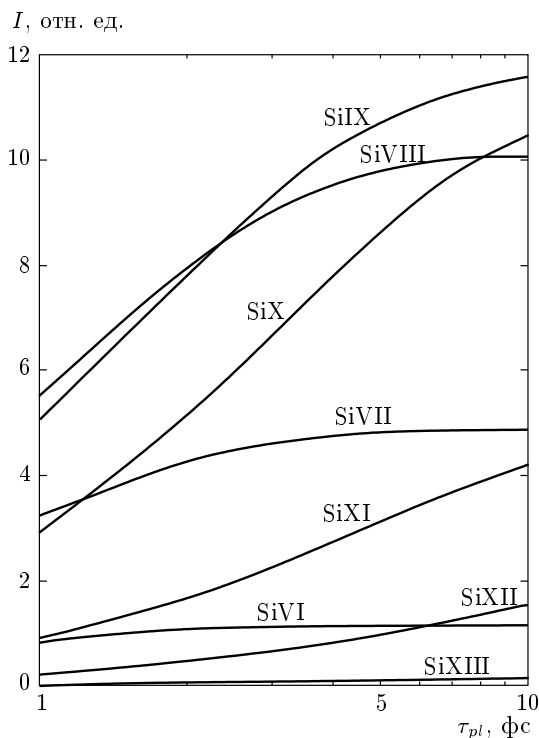


Рис. 13. Зависимости интенсивностей спектральных линий ионов кремния разной кратности от времени жизни плазмы, рассчитанные по плазменной модели релаксации при $T_e = 15 \text{ эВ}$, $p_L(0) = 0.335$

рентгеноспектральный метод диагностики плазмы в треке быстрого многозарядного иона. При этом данный метод дает возможность измерить не только температуру плазмы в области трека, но и значение вероятности ионизации с образованием вакансии в L -оболочке при столкновении с быстрым тяжелым ионом, имеющим нулевое значение прицельного параметра.

В таблице приведены измеренные таким способом значения $p_L(0)$ и T_e для рассмотренных выше экспериментов. Из таблицы видно, что величина $p_L(0)$ очень слабо зависит от энергии сталкивающихся ионов при $E \approx 3$ –11 МэВ/нуклон. Как значения величины $p_L(0)$, так и ее зависимость от энергии для столкновения ионов Ni^{+14} с атомами кремния ранее в литературе не приводились.

В отличие от $p_L(0)$, температура плазмы заметно возрастает при уменьшении энергии налетающего иона до $E \approx 3 \text{ МэВ/нуклон}$. Последнее обстоятельство отражает тот факт, что линейные потери энергии налетающим ионом Ni^{+14} растут при изменении E от 11 МэВ/нуклон до 3 МэВ/нуклон [12, 18]. Отметим, что найденные значения температуры 14–25 эВ

Результаты диагностики плазмы, образованной быстрыми ионами Ni^{+14} в аэрогелевой мишени SiO_2 с плотностью 0.15 г/см^3 (эксперименты [10–12])

Расстояние от поверхности мишени, мкм	Энергия иона в области взаимодействия, МэВ/нуклон	Измеренные значения	
		$p_L(0)$	T_e , эВ
600	11	0.33	14
1000	6	0.335	15
1400	3	0.34	25

оказываются в пределах грубых оценок, приведенных выше (п. 2.1), что свидетельствует о самосогласованности предложенной плазменной модели трека. Как и предполагалось, плазма оказалась неидеальной, что отмечалось и в обзоре [1].

Необходимо заметить, что кинетические расчеты были проведены для классической идеальной плазмы. Однако при столь низких измеренных значениях температуры плазмы, вообще говоря, может нарушаться как условие применимости Больцмановской статистики, так и условие идеальности плазмы. Согласно [19], Больцмановская статистика, а следовательно, и Максвелловское распределение свободных электронов по энергиям, применимы при выполнении условия

$$\varepsilon = N_e (\hbar^2 / m T_e)^{3/2} \ll 1. \quad (9)$$

При $T_e \approx 25$ эВ параметр $\varepsilon = 0.07$ и условие (9) выполняется с большим запасом. При $T_e = 14$ – 15 эВ параметр $\varepsilon = 0.16$ – 0.18 и эффекты вырождения могут начать сказываться на скоростях столкновительных переходов, входящих в кинетические уравнения. При столь низких температурах ионная кинетика определяется процессами радиационного и автоионизационного распада и фактически одним типом столкновительного процесса — тройной рекомбинацией. Поскольку сечение тройной рекомбинации уменьшается при увеличении энергии электрона, переход от Максвелловского распределения к распределению Ферми приводит к некоторому уменьшению скорости рекомбинации, и для достижения совпадения расчетных и экспериментальных спектров потребуется небольшое (поскольку параметр вырождения все-таки мал) понижение значений T_e .

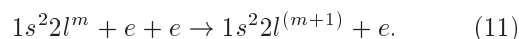
Более существенными, на наш взгляд, могли бы быть эффекты, связанные с неидеальностью плазмы. Влияние неидеальности на скорость тройной рекомбинации в многозарядной плазме было рассмотрено в работах [20, 21]. Формулы работы [21] могут быть использованы для оценок скорости рекомбинации в плазме, неидеальной по электрон-ионному взаимодействию. Мы воспользуемся ими, поскольку результаты п. 3.2 неприменимы к интересующему нас случаю рекомбинации с большой передачей энергии.

Согласно работе [21], влияние неидеальности плазмы по электрон-ионному взаимодействию становится существенным, когда величина

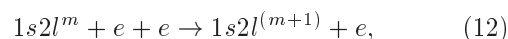
$$\frac{4\pi}{3} \left(\frac{0.78 Z e^2}{T_e} \right)^3 N_i = 2\gamma_{Ze}^3 \geq 1, \quad (10)$$

где $\gamma_{Ze} = Z e^2 N_i^{1/3} / T_e$ — параметр неидеальности по электрон-ионному взаимодействию, а N_i — концентрация рекомбинирующих ионов. Если условие (10) выполнено, то скорость тройной рекомбинации уменьшается в $\gamma_{Ze}^{5/2}$ раз по сравнению со скоростью рекомбинации в идеальной плазме [21].

При температурах плазмы 14–15 эВ условие (10) выполняется для рекомбинации из основных состояний ионов, т. е. для процессов типа



Например, при $T_e = 14$ эВ величина $2\gamma_{Ze}^3 = 8$ и неидеальность приводит к замедлению процесса рекомбинации плазмы в 3.9 раза, что качественно соответствует результатам МД-моделирования в п. 3.2. Однако для процессов типа



т. е. для рекомбинации из автоионизационных состояний, населенность которых мала (лишь малая часть первоначально образованных ионов имеет вакансию в K -оболочке), величина $2\gamma_{Ze}^3 \ll 1$, и эффекты неидеальности не сказываются на скоростях рекомбинации. Поскольку при низких температурах релаксация автоионизационных уровней зависит от скоростей процессов типа (12), для которых условие (10) не выполняется, эффекты неидеальности не сказываются на интенсивностях спутанных переходов.

При температурах плазмы около 25 эВ условие (10) не выполняется и в случае рекомбинации из основных состояний ионов. При этом в расчете скоростей тройной рекомбинации всех типов может использоваться приближение идеальной плазмы.

Таким образом, предложенная в настоящей работе плазменная модель релаксации оказывается безусловно применимой для описания областей трека с температурой $T_e \geq 20$ эВ, а при более низких температурах она правильно описывает релаксацию автоионизационных состояний ионов и формирование эмиссионного спектра плазмы, но занижает время релаксации зарядового состава. В этой области значений T_e корректное определение эволюции населенностей основных состояний ионов должно проводиться с учетом эффектов вырождения и неидеальности плазмы.

Используя полученные значения температуры плазмы, можно уточнить оценку поперечного размера плазменного канала. Считая, что вся энергия налетающего иона расходуется на ионизацию атомов мишени, для диаметра плазменного канала получаем значение примерно 3 \AA , что значительно превышает как дебаевский радиус, так и среднее межэлектронное расстояние.

Рассматриваемый плазменный объект во многом напоминает плазму, создаваемую при нагреве твердотельных или кластерных мишеней лазерными импульсами фемтосекундной длительности [22–24]. Принципиальным отличием является то обстоятельство, что в нашем случае начальное распределение ионов по возбужденным уровням определяется однократным воздействием внешней заряженной частицы (налетающего иона), а в лазерной плазме оно формируется свободными электронами, нагреваемыми лазером. Другим отличием являются времена жизни возникающей плазмы, которые могут различаться на несколько порядков.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена плазменная модель возбуждения твердых тел одиночными быстрыми ионами с полной энергией 0.1–1 ГэВ и последующей релаксации среды в области треков тяжелых ионов в конденсированных средах. Выделено три стадии формирования неравновесной неидеальной твердотельной наноплазмы в области трека.

На начальной стадии ($t \sim 10^{-2}$ фс) состояние среды описывается классической атомной моделью. Образуется ионизованный канал диаметром в несколько нанометров и с концентрацией электронов порядка 10^{23} см^{-3} ($Z = 2-6$). Ионы с K -вакансиями сосредоточены в области оси канала, их доля мала, но они дают рентгеновские спектры.

На второй стадии ($t \leq 1$ фс) происходит уста-

новление максвелловского распределения электронов при температуре порядка десятков электронвольт и вокруг наноканала формируется электрический двойной слой толщиной порядка межатомного расстояния среды.

Эволюция первоначально возникшего распределения ионов с K -вакансиями по зарядам на заключительной стадии (десятки фемтосекунд) описывается зависящими от времени уравнениями радиационно-столкновительной кинетики. Ионы сохраняют кристаллическую решетку, т. е. зонная структура не разрушается. Среда остается сильноионизованной.

Проведенные в рамках плазменной модели релаксации расчеты позволили описать рентгеновские спектры, зарегистрированные в работах [10–12] при взаимодействии пучков ионов Ni^{+14} с аэрогелевыми мишенями SiO_2 плотностью 0.15 г/см^3 . Это указывает на обоснованность и самосогласованность развитой плазменной модели.

Были оценены концентрация и температура электронов, найденные значения числа электронов в дебаевской сфере лежат в интервале 0.14–0.32.

Предложен рентгеноспектральный метод диагностики плазмы в треке быстрого многозарядного иона.

Полученные результаты могут быть использованы при исследовании дальнейшей эволюции плазменного канала: расплавления перегретой ионной решетки горячими электронами; двухтемпературной гидродинамики, ударной волны, рекомбинации, остывания, формирования латентного трека под действием многозарядных ионов (образование дефектов при нейтронном воздействии рассматривается, например, в работах [25, 26]), изменения свойств вещества при накоплении числа треков.

Авторы благодарны Б. М. Смирнову, В. С. Воробьеву, А. Я. Фаенову и С. А. Пикузу (мл.) за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-08-00738-а), Программ фундаментальных исследований РАН «Исследования вещества в экстремальных условиях» и «Фундаментальные проблемы релятивистской импульсной и стационарной электроники большой мощности» и Программы ОЭМПУ РАН «Интегрированные модели физической механики». Один из авторов (И. В. М.) выражает благодарность фонду CRDF, Министерству образования и науки РФ и Совету по грантам Президента РФ за финансовую поддержку, а другой автор (А. В. Л.) — фонду «Династия».

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Митерев, УФН **172**, 1131 (2002).
2. Ф. Ф. Комаров, УФН **173**, 1287 (2003).
3. R. L. Kauffman, J. H. McGuire, and P. Richard, Phys. Rev. A **8**, 1233 (1973).
4. R. L. Kauffman, C. W. Woods, K. A. Jamison, and P. Richard, Phys. Rev. A **11**, 872 (1975).
5. C. Schmiedekamp, B. L. Doyle, T. J. Gray et al., Phys. Rev. A **18**, 1892 (1978).
6. Y. Awaya, T. Kambara, and Y. Kanai, Int. J. Mass Spectrometry **192**, 49 (1999).
7. А. М. Митерев, Химия высоких энергий **14**, 483 (1980).
8. G. G. Ritchie and C. Claussen, Nucl. Instr. Meth. **198**, 133 (1982).
9. O. N. Rosmej, S. A. Pikuz, Jr., J. Wieser et al., Rev. Sci. Instr. **74**, 5039 (2003).
10. O. N. Rosmej, S. A. Pikuz Jr., A. D. Fertman et al., Phys. Rev. A **72**, 052901 (2005).
11. O. N. Rosmej, S. A. Pikuz Jr., S. Korostiy et al., Laser and Part. Beams **23**, 1 (2005).
12. S. A. Pikuz Jr, V. P. Efremov, O. Rosmej et al., J. Phys. **39A**, 4765 (2006).
13. И. В. Морозов, Г. Э. Норман, ЖЭТФ **127**, 412 (2005).
14. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
15. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Наука, Москва (1979).
16. А. Ya. Faenov, S. A. Pikuz, and A. S. Shlyaptseva, Phys. Scripta **49**, 41 (1994).
17. G. Schiwietz, J. P. Biersack, D. Schneider et al., Phys. Rev. B **41**, 6262 (1990).
18. J. F. Ziegler, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **219–220**, 1027 (2004).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976), с. 154.
20. Ю. К. Куриленков, ТВТ **18**, 1312 (1980).
21. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, ДАН СССР **296**, 576 (1987).
22. Н. А. Иногамов, А. М. Опарин, Ю. В. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **69**, 284 (1999).
23. J. Abdallah, Jr., G. Csanak, Y. Fukuda et al., Phys. Rev. A **68**, 063201 (2003).
24. B. Rethfeld, K. Sokolowski-Tinten, D. von der Linde, and S. I. Anisimov, Appl. Phys. A **79**, 767 (2004).
25. A. Gokhman, J. Boemert, and A. Ulbricht, J. Nucl. Mat. **34**, 195 (2004).
26. A. Gokhman and J. Bohmert, Radiat. Effects and Defect in Solids **158**, 499 (2003).