

Instytut Problemów Jądrowych im. Andrzeja Sołtana

**Jonizacja atomów Si tarczy aerożelowej
oraz wychwyt elektronu i jonizacja pocisków
 ^3He podczas procesów zderzeniowych**

Aneta Gójska

Praca doktorska
wykonana pod kierunkiem
dra hab. Marka Polasika, prof. UMK

Świerk 2011

PODZIĘKOWANIA

W pierwszej kolejności chciałabym podziękować mojej **Mamie** za to, że zawsze przy mnie była i obdarowywała nieprzebraną miłością, za to, że głównie dzięki Niej jestem kim jestem.

Składam podziękowania mojemu promotorowi Prof. Dr hab. **Markowi Polasikowi** za zainteresowanie i motywację, cierpliwość i poświęcony mi czas, a także życzliwą pomoc oraz cenne uwagi przy pisaniu pracy.

Chciałabym podziękować ś.p. Prof. Dr hab. **Ziemowidowi Sujkowskiemu**, który zainteresował mnie tematyką zderzeń atomowych, za czas poświęcony mojemu rozwojowi naukowemu, za liczne dyskusje i uwagi, będące podstawą do napisania tej pracy.

Pragnę podziękować Dr **Jackowi Rzakiewiczowi** za Jego zaangażowanie w przedstawionych w rozprawie badaniach, za opiekę i ciągłe motywowanie oraz wszelką pomoc uzyskaną od Niego w ciągu całego okresu naszej współpracy.

Dziękuję Dr **Oldze Rosmej** za umożliwienie wykonania i pomoc w trakcie realizacji eksperymentu, będącego podstawą niniejszej pracy oraz za opiekę podczas mojego pobytu w Instytucie GSI Darmstadt.

Dziękuję Dr **Danucie Chmielewskiej**, Dr **Katarzynie Słabkowskiej**, mgr **Karolowi Koziolowi** i Dr **Svetlanie Korosty** za pomoc i współpracę w realizacji omawianego w pracy eksperymentu i redagowaniu niniejszej rozprawy.

Dziękuję wszystkim, którzy wspierali mnie w dążeniu do celu, a których nie jestem w stanie tutaj wymienić, gdyż zajęłoby to wiele dodatkowych stron. Niemniej jednak pragnę wymienić kilka osób, których pominąć nie mogę: dziękuję **Agnieszce Drózd**, Prof. Dr hab. **Zbigniewowi Włodarczykowi**, Dr **Tadeuszowi Kozłowskiemu**, **Stefanowi Mikołajewskiemu** oraz wszystkim pracownikom Zakładu P-II.

Dziękuję także rodzinie za wsparcie, jakiego mi udzielili.

Niniejsza rozprawa doktorska opracowana jest na podstawie następujących publikacji:

1. J. Rządiewicz, A. Gojska, O. Rosmej, M. Polasik, K. Słabkowska, *Interpretation of the Si $K\alpha$ x-ray spectra accompanying the stopping of swift Ca ions in low-density SiO_2* , Phys. Rev. A 82 (2010) 012703
2. J. Rządiewicz, O. Rosmej, A. Blazevic, V.P. Efremov, A. Gójska, D.H.H. Hoffmann, S. Korostiy, M. Polasik, K. Słabkowska, A.E. Volkov, *Studies of the $K\alpha$ x-ray spectra of low-density SiO_2 aerogel induced by Ca projectiles for different penetration depths*, High Energy Density Physics 3 (2007) 233
3. A. Gójska, D. Chmielewska, J. Rządiewicz, Z. Sujkowski, T. Adachi, H. Fujita, Y. Fujita, K. Hara, Y. Haruyama, J. Kamiya, H. Ogawa, M. Saito, Y. Shimizu, Y. Shimbara, M. Tanaka, H. P. Yoshida, I. Katayama, *Radiative and non-radiative electron capture from carbon atoms by relativistic helium ions*, European Journal Physics A 27 (2006) 181
4. A. Gójska, D. Chmielewska, J. Rządiewicz, Z. Sujkowski, T. Adachi, H. Fujita, Y. Fujita, K. Hara, Y. Haruyama, J. Kamiya, H. Ogawa, M. Saito, Y. Shimizu, Y. Shimbara, M. Tanaka, H. P. Yoshida, I. Katayama, *Charge exchange processes for semi - relativistic helium ions ($\beta = 0.51$) in solid gold*, Nucl. Instrum. Methods B 235 (2005) 368

Publikacje autora, które nie weszły w skład niniejszej pracy:

1. S. Zając, J. Rządiewicz, O. Rosmej, M. Scholz, Zhao Yongtao, A. Gójska, M. Paduch and E. Zielińska *Spatially resolved high-resolution x-ray spectroscopy of high-current plasma-focus discharges* Review Of Scientific Instruments 81 (2010) 10E312
2. J. Rządiewicz, Th. Stöhlker, D. Banaś H. F. Beyer, C.Brandau, S.Fritzsche, A. Gójska, A. Gumberidze, S.Hagmann, C. Kozhuharov, T. Nandi, R. Reuschl, U. Spillmann, A.Surzhykov, S. Tashenov, *Study of the Intra-L Shell Transitions in Be-like Uranium*, Journal of Physics: Conference Series 58 (2007) 145
3. J. Rządiewicz, Th. Stöhlker, D. Banaś, H. F. Beyer, F. Bosch, C. Brandau, C. Z. Dong, S. Fritzsche, A. Gójska, A. Gumberidze, S. Hagmann, D. C. Ionescu, C. Kozhuharov, T. Nandi, R. Reuschl, D. Sierpowski, U. Spillmann, A. Surzhykov, S. Tashenov, M. Trassinelli, and S. Trotsenko, *Selective population of the $[1s2s]$ $S01$ and $[1s2s]$ $S13$ states of He-like uranium*, Phys. Rev. A 74 (2006) 1
4. J. Rządiewicz, D. Chmielewska, A. Gójska, Z. Sujkowski, M. Berset, J.-Cl. Dousse, Y.-P. Maillard, O. Mauron, P.A. Raboud, M. Polasik, J. Hoszowska and M. Pajek, *Probabilities for M-subshell ionization in near-central collisions of 20 MeV/amu carbon ions with Mo atoms*, Nucl. Instrum. Methods B 205 (2003) 128

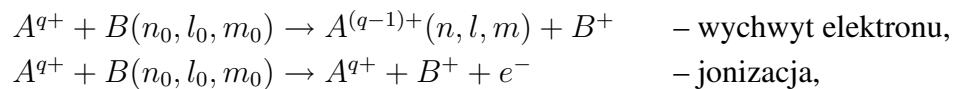
Spis treści

Wprowadzenie	9
1. Jonizacja atomów Si tarczy aerożelowej podczas procesów zderzeniowych	13
1.1. Opis procesów zachodzących podczas hamowania jonów w materii . .	13
1.1.1. Jonizacja tarczy w procesie hamowania pocisków	16
1.2. Deeksycytacja atomów wzbudzonych	20
1.2.1. Przejścia radiacyjne	20
1.2.2. Przejścia bezradiacyjne	21
1.2.3. Satelitarne przejścia rentgenowskie $K\alpha L^N$ w atomach krzemu	22
1.3. Opis eksperymentu	26
1.3.1. Idea eksperymentu	26
1.3.2. Akcelerator	27
1.3.3. Tarcza	29
1.3.4. Spektrometr krystaliczny	30
1.3.5. Rejestracja widm promieniowania rentgenowskiego	32
1.3.6. Stan ładunkowy jonów wapnia w zderzeniach z tarczą aerożelową	33
1.4. Analiza danych	34
1.4.1. Metoda analizy widm rentgenowskich	34
1.4.2. Obliczenia MCDF	36

1.4.3. Procesy przegrupowania	41
1.4.4. Prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L	45
1.5. Wyniki i dyskusja	51
1.5.1. Przesunięcia energetyczne linii satelitarnych	51
1.5.2. Pierwotny rozkład stanów KL^N wytworzonych w zderzeniach	53
1.5.3. Prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L	58
1.5.4. Efekty nanoplazmowe	60
1.6. Podsumowanie	63
2. Procesy wymiany ładunku w zderzeniach semi-relatywistycznych jonów z tarczami ciał stałych	67
2.1. Procesy wymiany ładunku w zderzeniach atomowych	67
2.2. Metodyka eksperymentu	71
2.2.1. Układ eksperymentalny	71
2.2.2. Wyznaczenie całkowitych przekrojów czynnych na jonizację pocisku i wychwyt elektronu	73
2.3. Dyskusja wyników eksperymentalnych	77
2.3.1. Przekrój czynny na jonizację jonów helu w funkcji liczby atomowej tarczy i w funkcji prędkości pocisku	77
2.3.2. Przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony helu w funkcji liczby atomowej tarczy i w funkcji prędkości pocisku	84
2.3.3. Radiacyjny wychwyt elektronu	91
2.4. Podsumowanie	95
2.5. Dodatki	97
2.5.1. Rachunki eikonalne	97
Bibliografia	97

Wprowadzenie

Zakres zainteresowań fizyki atomowej nie ogranicza się tylko do badania zjawisk związanych z atomami, ale obejmuje także fizykę jonów, elektronów, fotonów i ich wzajemne oddziaływanie. Do poznania struktury elektronowej atomów potrzebna jest zarówno wiedza teoretyczna jak i precyzyjne pomiary prowadzone z wysoką rozdzielczością energetyczną. Zrozumienie dynamiki wielociałowych systemów atomowych jest istotne ze względu na ich znaczenie dla naszego codziennego świata, funkcjonującego na podstawie reakcji fizycznych i chemicznych. Przykładem problemu dynamiki układów wielociałowych może być usunięcie elektronu z atomu, gdzie w procesie biorą udział co najmniej trzy cząstki, tj. jeden lub więcej elektronów tarczy, rdzeń tarczy i pocisk. Podstawowymi procesami są tu wychwyt elektronów i jonizacja. Wychwyt elektronu, nazywany również procesem wymiany ładunku oznacza, że pocisk (jon) przechwytuje do swoich stanów związanych elektron atomu tarczy. W przypadku jonizacji oddziaływanie pocisk-tarcza (jon-atom) powoduje usunięcie elektronu z tarczy do kontinuum. Ograniczając się do procesów jednoelektronowych zachodzących podczas zderzeń jon-atom, usunięcie elektronu atomu tarczy można sprowadzić do dwóch zdarzeń:



gdzie $(n_0; l_0; m_0)$ i (n, l, m) są zbiorem liczb kwantowych zwanych: główną (opisującą energię elektronu - numer orbity), poboczną (oznaczającą wartość bezwzględną orbitalnego momentu pędu) i magnetyczną (opisującą rzut orbitalnego momentu pędu na wybraną oś) przed i po kolizji. Względne znaczenie tych procesów zależy nie tylko od właściwości pocisku i tarczy, ale również w dużym stopniu od energii zderzenia. Prędkość pocisku v_p jest często porównywana do prędkości orbitalnej v_e elektronów tarczy. Stosunek prędkości pocisku do orbitalnej prędkości elektronu determinuje prawdopodobieństwo zajścia danego procesu ($v_p/v_e > 1$ - jonizacja, $v_p/v_e = 1$ - wychwyt elektronu).

Procesy jonizacji i wychwytu elektronów w zderzeniach jon-atom odgrywają znaczącą rolę w środowisku składającym się z neutralnych i wysoko naładowanych cząstek. Wiedza uzyskana z podstawowych badań zarówno teoretycznych i eksperymentalnych może być wykorzystana do analizy i zrozumienia takich środowisk. Przykładem środowiska, w których procesy wychwytu elektronów odgrywają kluczową rolę, jest wysokotemperaturowa plazma, w której występuje synteza termojądrowa. Środowisko takie może być wywołane przez człowieka w celu osiągnięcia kontrolowanej syntezy termojądrowej jako źródła energii (Tokamak). Wysokie temperatury ($10^8 - 10^9$ K) stosowane do uzyskania syntezy deuteru ($2H$) i trytu ($3H$) implikują obecność w plazmie domieszek wysoce naładowanych jonów. Ponieważ emisja fotonu po wychwycie elektronów daje informacje na temat składników obecnych w pla-

zmie, znajomość procesu może być wykorzystywana jako narzędzie diagnostyczne, pozwalające na uzyskanie informacji o gęstości, zanieczyszczeniu i temperaturze plazmy [1, 2, 3]. Innym przejawem efektów procesów wychwytu elektronu i jonizacji są uszkodzenia radiacyjne w ludzkiej tkance. Wewnątrz ścieżki pierwotnego promieniowania tworzone są cząstki wtórne (elektrony, jony). Oddziaływanie cząstek wtórnych ze strukturami biologicznymi, takimi jak DNA, może być przyczyną znacznych uszkodzeń biologicznych, co ma znaczenie w radioterapii nowotworowej [4, 5].

Głównym efektem jonizacji jest populacja stanów dziurowych, które najczęściej deekscytują do stanu podstawowego przez przejścia radiacyjne (lub bezradiacyjne). Uzyskane w eksperymencie widma promieniowania rentgenowskiego mogą być postrzegane jako „odciski palców” procesu, który towarzyszy oddziaływaniu jon-atom. Otrzymane informacje wykorzystane mogą być do badania własności procesów hamowania jonów w ośrodku hamującym.

Relaksacja wzbudzonych atomów tarczy jest złożonym zjawiskiem, które dzieli się na sekwencję zdarzeń, ostro rozdzielonych w czasie w skali od femto- do nanosekund [6]. Zderzenia jon-atom prowadzą do procesów wymiany ładunku pomiędzy pociskiem i atomami tarczy. Oddziaływanie z wysokim parametrem zderzenia prowadzi do jonizacji zewnętrznych powłok atomowych, podczas gdy zderzenia okołocentralne są odpowiedzialne za produkcję dziur w wewnętrznych powłokach atomów tarczy. Przejścia radiacyjne, które występują w skali kilku femtosekund po produkcji dziury w powłoce K, stanowią podstawę do uzyskania widm serii K zarówno poruszających się jonów jak i atomów tarczy. Promieniowanie rentgenowskie pocisku i tarczy zależy w dużym stopniu od ewolucji prędkości pocisku i jego stanu ładunkowego w funkcji głębokości penetracji w tarczy. Dlatego pomiary promieniowania rentgenowskiego z wysoką rozdzielczością energetyczną dają bezpośredni dostęp do badania stanu ładunkowego jonów oddziałujących wewnątrz ośrodka hamującego oraz stopnia jonizacji ścieżki jonu [7, 8].

W jednej z ostatnich prac Lankin i współpracownicy [9, 10, 11] zaproponowali model, w którym struktury nanoplazmowe powstają już na początku drogi hamowania jonu. Dlatego istotne znaczenie ma ”spojrzenie do wnętrza” ścieżki jonu w chwili tuż po oddziaływaniu jonów z atomami tarczy, gdyż po wstępnej jonizacji tarczy dochodzi do procesów relaksacji wzbudzonych atomów. Efekt plazmowy powstający wskutek jonizacji powłok zewnętrznych może być dodatkowo wzmacniany z powodu zderzenia ze swobodnymi elektronami, w wyniku których początkowo wzbudzony atom może być zjonizowany przed wypełnieniem dziury K. Oznacza to, że początkowe wzbudzenie atomu może faktycznie doprowadzić do powstania atomów o różnych stanach ładunkowych z dziurą K, a tym samym może prowadzić do emisji linii widmowych atomów tarczy o różnym stopniu jonizacji. Typowy czas życia dziury K dla atomów krzemu mieści się w zakresie 1.5-30 fs dla stanów KL^N (gdzie N oznacza liczbę dziur w powłoce L, $N=0,1,2,...8$). Dlatego promieniowanie serii K emitowane

z obszaru oddziaływania odzwierciedla wczesny etap tuż po wzbudzeniu układu spowodowanego oddziaływaniem jon-atom.

Dzięki obserwacjom przejść promieniowania rentgenowskiego z wysoko zjonizowanego stanu KL^N możliwy staje się dostęp do oceny wpływu procesów atomowych zachodzących w czasie pomiędzy zderzeniem a emisją promieniowania rentgenowskiego (procesy Augera, Coster-Kroniga) na strukturę widm serii K. Jednakże w przypadku wysoko zjonizowanych atomów znajdujących się we wzbogaconych w elektrony środowiskach chemicznych (np. SiO_2) ocena ta może być utrudniona ze względu na bardzo wysoką intensywność procesów deekscytacji, tzw. deekscytacji kaskadowych [12].

Pierwsza część pracy przedstawia szczegółową analizę widm rentgenowskich $K\alpha$ atomu tarczy (Si) indukowanych przez hamujące w tarczy aerożelowej SiO_2 jony wapnia o początkowej energii 11.4 MeV/u. Głównym problemem postawionym w tej pracy jest rola jonizacji atomów tarczy we wczesnych fazach hamowania szybkich jonów w materii. W celu określenia pierwotnego rozkładu stopnia jonizacji w różnych fazach procesu hamowania jonu zbadano charakterystyczne widma rentgenowskie zjonizowanych atomów tarczy wzdłuż drogi hamowania jonów. Widma rejestrowano za pomocą metody spektroskopowej cechującej się dużą rozdzielczością widmową i przestrzenną. Materiał o małej gęstości użyty w doświadczeniu miał decydujące znaczenie dla badań promieniowania rentgenowskiego krzemu, rejestrowanego bezpośrednio z obszaru oddziaływania.

Analiza widm rentgenowskich emitowanych przez ośrodek hamujący wykazała wysoki poziom jonizacji powłoki L, zwłaszcza w najpóźniejszym badanym okresie procesu hamowania. Wykazano również, że liczba populacji stanów wysoko zjonizowanych produkowana w zderzeniach jon-atom może ulec znacznemu zmniejszeniu w czasie między zderzeniem a emisją promieniowania rentgenowskiego ze względu na występowanie bardzo intensywnych procesów przegrupowania zachodzących w krzemie osadzonym w otoczeniu chemicznym (SiO_2). Co więcej, porównanie eksperymentalnych wartości przesunięć energetycznych linii satelitarnych $K\alpha L^N$ z obliczeniami wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Focka pozwala stwierdzić, że konfiguracja walencyjna atomu krzemu wzbogacona jest w elektrony, które przenoszone są z atomów tlenu do wysoko zjonizowanych atomów krzemu.

Druga część pracy przedstawia zestaw danych z eksperymentu wykonanego przy użyciu spektrometru magnetycznego o wysokiej rozdzielczości, dzięki czemu uzyskano przekroje czynne na wychwyt elektronu z atomu tarczy o różnej liczbie atomowej do pocisku ${}^3\text{He}^{++}$ rozpędzonego do energii 150 MeV/u i na jonizację pocisku ${}^3\text{He}^+$ w wyniku dalszej penetracji tarczy.

Zderzenia jonów z atomami prowadzą do szeregu zjawisk związanych z wymianą ładunku. Wiedza o tych zjawiskach jest ważna z punktu widzenia fizyki plazmy, fizyki akceleratorów i astrofizyki. Jon przechodzący przez ciało stałe oddziałuje z napotkanymi przez siebie atomami wchodzącymi w skład siatki krystalicznej. Oddziaływanie jonu z atomami zachodzi na całej drodze, wskutek czego dochodzi do wielokrotnego oddziaływania między pociskiem i atomami tarczy. W wyniku wielokrotnych procesów atomowych skład ładunkowy wiązki jonów zmienia się. W rezultacie pocisk gubi i chwyta elektrony napotkane podczas penetracji tarczy. Inaczej mówiąc dochodzi do procesów jonizacji pocisku i wychwytu elektronu. Procesowi wychwytu elektronu może towarzyszyć emisja fotonu i wtedy proces nazywany jest wychwytem radiacyjnym (REC), natomiast gdy podczas wychwytu nie dochodzi do emisji fotonu mamy do czynienia z wychwytem bezradiacyjnym (NREC). Istniejące opisy przekrojów czynnych na jonizację pochodzące z lat pięćdziesiątych (model Bohra i Gillespiego) nie dają pełnego i rzeczywistego odzwierciedlenia natury tego zjawiska. Teorie dotyczące wychwytu elektronu (OBK, Nikolaev) nie zawsze dobrze opisują ten proces [13, 14]. Poprawny opis wychwytu elektronu w reżimie wysokich energii pocisku daje teoria eikonalna uwzględniająca efekty relatywistyczne i wkład poszczególnych powłok do całkowitego przekroju czynnego.

W tej części pracy przedstawiono analizę oddziaływań jonów ${}^3\text{He}^{++}$ o energii początkowej 150 MeV/u z tarczami węgla, niklu srebra i złota z eksperymentu przeprowadzonego na cyklotronie RCNP w Osace. W pracy wyznaczono stosunek jednokrotnie do dwukrotnie zjonizowanych jonów helu opuszczających cienkie folie, $\text{He}^+/\text{He}^{++}$, w zależności od grubości folii. Ekstrapolując wyniki do zerowej grubości tarczy określono atomowe wartości przekroju czynnego na jonizację pocisku jak również na wychwyt elektronów atomów tarczy do stanów związanych jonu ${}^3\text{He}^{++}$. Uzyskane wyniki znacznie rozszerzają zakres istniejących badań dla obu procesów o dane dla semi-relatywistycznych prędkości pocisku.

Rozdział 1

Jonizacja atomów Si tarczy aerozelowej podczas procesów zderzeniowych

1.1. Opis procesów zachodzących podczas hamowania jonów w materii

Hamujące jony oddziałują z atomami tarczy poprzez pole elektromagnetyczne. W związku z powyższym, procesami mającymi znaczenie dla hamowania jonów w ośrodku hamującym są:

1. Oddziaływanie między ładunkiem jądra pocisku i ładunkiem atomu tarczy;
2. Oddziaływanie między ładunkiem jądra pocisku a elektronami tarczy;
3. Oddziaływanie między ładunkiem jądra tarczy a elektronami pocisku;
4. Oddziaływanie między elektronami pocisku i tarczy.

Jednym z parametrów determinujących rodzaj oddziaływania, które daje wkład do procesu hamowania jonu w ośrodku hamującym, jest prędkość pocisku. Jeżeli prędkość pocisku jest duża w porównaniu do prędkości elektronów na powłokach atomu tarczy pocisk traci swoją energię przeważnie przez wzbudzenie i jonizację atomu tarczy (procesy między ładunkiem jądrem pocisku a elektronami tarczy i między ładunkiem jądra tarczy a elektronami pocisku). W procesach oddziaływań między jądrem tarczy a elektronami pocisku energia kinetyczna pocisku jest przekazywana elektronom atomu tarczy, w wyniku czego atom ulega wzbudzeniu bądź jonizacji. Gdy prędkość jonu maleje

wzrasta wkład procesów elastycznych (procesy między ładunkiem jądra pocisku i ładunkiem atomu tarczy). Dla bardzo małych prędkości pocisku ($v_P \ll v_e$) elektronowe funkcje falowe pocisku i tarczy przekrywają się formułując kwasi-molekularne orbitaly (oddziaływanie między elektronami pocisku i tarczy). W niniejszej pracy procesy elastyczne nie są rozważane.

W wyniku zderzeń wiązka jonów ulega spowolnieniu (rozproszeniu) i progresywnie traci swoją energię. Oddziaływanie jonów w ośrodku hamującym jest złożone, ponieważ jony oddziałują z ujemnie naładowanymi elektronami i dodatnio naładowanymi jądrami atomów tarczy. Zderzenia elastyczne (jon - jądro atomu tarczy) determinują trajektorię wiązki w tarczy, natomiast zderzenia nieelastyczne (jon-elektron) determinują stratę energii jonów, co prowadzi do całkowitego zatrzymania się jonu, a zatem pozwala określić głębokość penetracji jonu w tarczy. Oba przypadki mogą być rozważane niezależnie. Zderzenia nieelastyczne powodujące straty energii jonu prowadzą do jonizacji atomu tarczy oraz wzbudzenia elektronów do wyższych stanów energetycznych, a w konsekwencji do uwolnienia energii w postaci promieniowania rentgenowskiego lub elektronów Augera. Wskutek strat energii jon zatrzymuje się w tarczy.

Podstawą teoretycznych rozważań dotyczących hamowania jonów w materii jest praca Bohra [15]. Na bazie mechaniki klasycznej opisał on zderzenie jon-atom jako proces binarny, w którym pocisk oddziałuje z elektronem, traktując w momencie zderzenia elektron jako cząstkę swobodną. Odległość między elektronem a pociskiem zdefiniowana jest przez parametr zderzenia b . W wyniku obliczeń Bohr otrzymał klasyczną formułę opisującą straty energii:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z_P^2 e^4 Z_T}{m_e v_P^2} \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}, \quad (1.1)$$

gdzie N jest liczbą elektronów w tarczy na jednostkę objętości, m_e jest masą elektronu, Z_P i Z_T są liczbą atomową pocisku i tarczy, v_P jest prędkością pocisku. Znak minus przez wyrażeniem z lewej strony równania oznacza, że straty energii pomniejszają wartość energii cząstki. Logarytmiczne wyrażenie we wzorze 1.1 ($\ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}}$) zwane jest logarytmem hamowania. Teoria Bohra poprawnie opisuje straty energii przy założeniu, że prędkość pocisku jest dużo mniejsza od prędkości światła $v_P \ll c$ i $1 < v_P/v_0 < Z_P^{2/3}$. Granice stosowności modelu Bohra doprowadziły do rozwoju teorii hamowania jonów. W roku 1930 Hans Bethe zaproponował formułę opartą na mechanice kwantowej:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z_P^2 e^4}{m_e v_P^2} B_{\text{Bethe}}, \quad (1.2)$$

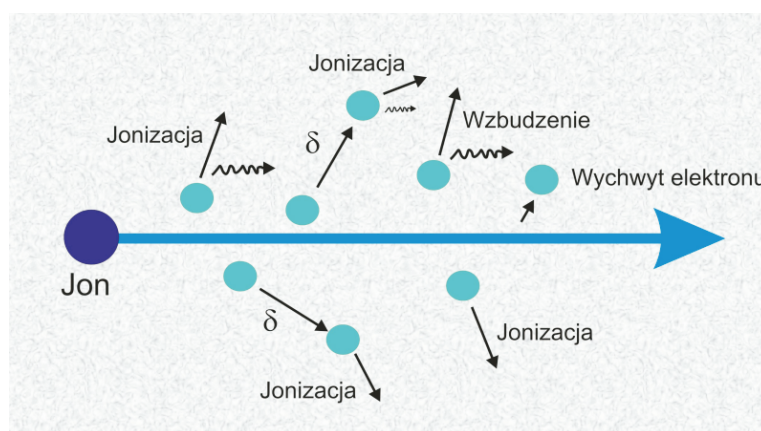
$$B_{\text{Bethe}} = Z_T \ln \frac{2m_e v_P^2}{I}, \quad (1.3)$$

gdzie I jest średnim potencjałem wzbudzenia na elektron.

Jak widać we wzorze 1.2, strata energii na jednostkę drogi w absorbencie jest wprost proporcjonalna do kwadratu ładunku cząstki padającej (Z_P^2) i odwrotnie proporcjonalna do kwadratu prędkości cząstki (dla $v_P \ll c$). Oznacza to, że w miarę przechodzenia cząstki przez absorbent straty energii będą bardzo szybko rosły. Cząstka będzie, na kolejnych odcinkach swego toru, deponować coraz to większe ilości energii w postaci zjonizowanych atomów, aż do zatrzymania się po przebyciu określonej drogi. W przypadku jonów wapnia penetrujących tarczę aerożelową strata energii w początkowej fazie hamowania ($E_P = 11.4 \text{ MeV/u}$) jest ok. dwa razy mniejsza niż w fazie końcowej ($E_P = 5.2 \text{ MeV/u}$). Wzór ten traci słuszność dla bardzo małych energii cząstek ($E_P \ll E_e$), gdyż nie uwzględnia występujących wtedy procesów chwytania przez cząstkę elektronów i ponownego ich oddawania, ale ten reżim energetyczny pocisku nie był rozważany w niniejszej pracy.

Podczas oddziaływania szybkich ciężkich jonów z materią zmienia się konfiguracja elektronowa tarczy i pocisku. Wyczerpujący opis teoretyczny dotyczący tych oddziaływań jest skomplikowany ponieważ podczas hamowania jonu formowane są różne stany ładunkowe pocisku. Procesy zachodzące podczas penetracji jonu w materii (rys. 1.1) dzielą się na:

- jonizacja pocisku;
- jonizacja tarczy;
- wychwyt elektronów tarczy do stanów związanych pocisku;
- wzbudzenia i deekscytacja elektronów pocisku i tarczy;
- produkcja elektronów delta i jonizacja wtórna.



Rysunek 1.1: *Tor pocisku penetrującego materię i procesy prowadzące do wyhamowania jonu.*

Prawdopodobieństwo zajścia procesu zderzeniowego charakteryzowane jest przez przekrój czynny σ , zdefiniowany jako miara efektywnej powierzchni tarczy na zajście danego procesu. Wielkość przekroju czynnego zależy od takich czynników jak położenie energetyczne jonizowanego poziomu, wielkość oddziaływania czy prędkość wzajemna poruszających się cząstek. W skali atomowej jednostką przekroju czynnego jest: $\pi a_0^2 \approx 0.88 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$, gdzie $a_0 = 5,29 \times 10^{-9} \text{ cm}$ jest promieniem Bohra. W zderzeniach zachodzących dla małych parametrów zderzenia (zderzenia około-centralne) produkcja dziury na wewnętrznych powłokach może być spowodowana przez bezpośrednią jonizację kulombowską bądź przez wychwyt elektronu atomu tarczy do wolnych stanów związanych pocisku. W przypadku jonów wapnia penetrujących tarczę aerożelową SiO_2 przekroje czynne na jonizację tarczy są znacznie większe od przekrojów czynnych na wychwyt elektronu. Przekrój czynny na jonizację powłoki L (σ_L^{ion}), rośnie z głębokością penetracji jonu w ośrodku hamującym, podobnie zachowuje się przekrój czynny na wychwyt elektronu z powłoki L tarczy do powłoki L pocisku (σ_{L-L}^{cap}), natomiast przekrój czynny na wychwyt elektronu z powłoki L do powłoki K (σ_{L-K}^{cap}) maleje. Wynika z tego, iż wraz z głębokością penetracji zaniedbywalny staje się wychwyt elektronu L-K, ale zwiększa się wpływ procesu wychwytu elektronu L-L. Wartości teoretycznych przekrojów czynnych można znaleźć w tab. 1.5 w rozdziale 1.4.4.

1.1.1. Jonizacja tarczy w procesie hamowania pocisków

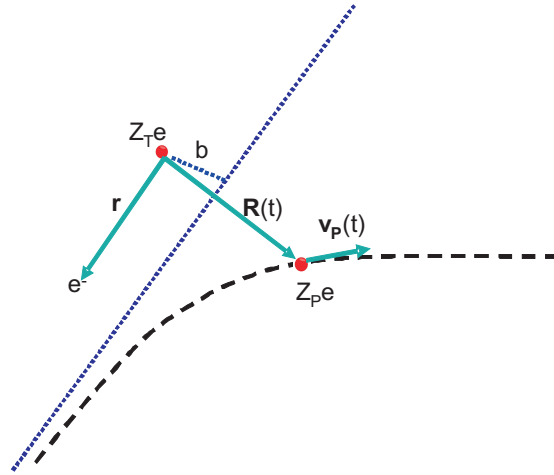
Jednym z pierwszych opisów jonizacji wewnętrznych powłok atomowych tarczy było przybliżenie PWBA (Plane Wave Born Approximation) [16, 17]. Teoria zakłada, że oddziaływanie między pociskiem a elektronami tarczy jest bardzo słabe, elektrony tarczy są „nieaktywne” podczas zderzenia, a pocisk traktowany jest punktowo i jego struktura elektronowa ma zaniedbywalny wpływ na oddziaływanie. Stosowalność tej teorii określona jest warunkami: $Z_P \ll Z_T$, $Z_P Z_T e^2 \ll \hbar v_P$. Model ten nie pozwala na obliczenie prawdopodobieństwa jonizacji w zależności od parametru zderzenia i dlatego nie był stosowany w tej pracy.

Zależny od parametru zderzenia opis jonizacji uzyskać można przy zastosowaniu przybliżenia półklasycznego SCA (Semiclassical Approximation) [18, 19]. W modelu tym pocisk traktowany jest jako klasyczna cząstka o dobrze zdefiniowanym parametrze zderzenia, a elektrony opisane są przez funkcje falowe. Stosowalność modelu półklasycznego określa warunek: $2Z_P Z_T e^2 / \hbar v_P \ll 1$. Prawdopodobieństwo jonizacji może być policzone w ramach nieperturbacyjnego modelu geometrycznego, GM (Geometrical Model) [20, 21, 22]. Stosowalność modelu geometrycznego określa warunek: $v_P \gg v_e$. W przypadku jonizacji atomów krzemu przez jony wapnia o energii 11.4 MeV/u $v_P/v_e(K) = 1.6$, $v_P/v_e(L) = 3.2$. W niniejszej pracy w celu porównania danych eksperymentalnych z modelami teoretycznymi zastosowano rachunki SCA i GM.

Przybliżenie SCA

Przybliżenie półklasyczne (SCA; Semiclassical Approximation) zostało wprowadzone w roku 1959 przez Banga i Hansteena, którzy obliczyli przekrój czynny na jonizację powłoki K indukowaną przez ciężkie jony poruszające się z małymi prędkościami [18]. Model ten pozwala na obliczenie nie tylko całkowitych prawdopodobieństw jonizacji, ale również prawdopodobieństw w funkcji parametru zderzenia b . Przybliżenie półklasyczne oparte jest na pierwszym rzędzie rachunku zaburzeń i opisywane jako przejście elektronu z początkowego stanu związanego do kontinuum. Teoria SCA [19] charakteryzuje się następującymi założeniami:

1. Pocisk jest naładowaną cząstką punktową ($Z_P e$) poruszającą się wzdłuż klasycznej trajektorii $R(b, t)$ opisanej parametrem zderzenia b (rys. 1.2);



Rysunek 1.2: Schemat procesu jonizacji kulombowskiej w zderzeniu jonu o liczbie atomowej Z_P poruszającego się z prędkością v_P z atomem tarczy o liczbie atomowej Z_T .

2. W procesie uczestniczy tylko jeden elektron (wpływ pozostałych elektronów traktowany jest jako ekranowanie ładunku jądra);
3. Stany elektronowe reprezentowane są przez wodoropodobne lub wieloelektronowe funkcje falowe;
4. Progowe energie na jonizację reprezentowane są przez eksperymentalne energie wiązania.

Zaburzenie wywołane przez poruszający się wzdłuż klasycznej trajektorii ładunek punktowy wyrażone jest przez [19]:

$$V(\vec{R}(b, t), \vec{r}) = \frac{-Z_P e^2}{\vec{r} - \vec{R}(b, t)}. \quad (1.4)$$

gdzie $R(b, t)$ jest wektorem położenia cząstki padającej w chwili t , a r jest odległością elektronu od jądra atomu tarczy. Amplituda przejścia elektronu ze stanu początkowego i opisywanego funkcją falową ψ_i do stanu końcowego f opisywanego funkcją falową ψ_f zapisana jest jako:

$$a_{if}(b) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E_i - E_f)t/\hbar} \langle \psi_i | V(\vec{R}(b, t), \vec{r}) | \psi_f \rangle, \quad (1.5)$$

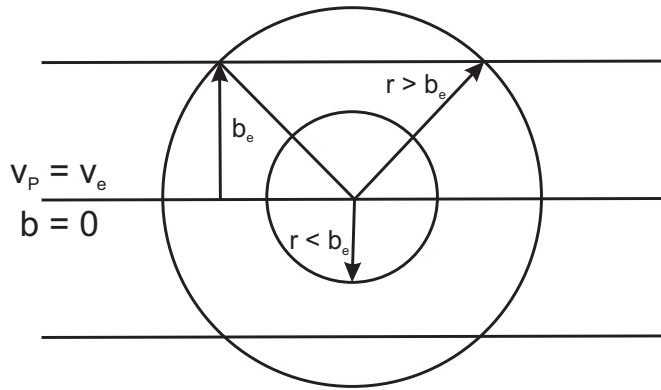
gdzie E_i jest energią wiązania elektronu, natomiast E_f jest energią końcową usuniętego elektronu. Prawdopodobieństwo jonizacji dla parametru zderzenia b jest dane wzorem:

$$p(b) = \sum_{E_f} |a_{if}(b)|^2. \quad (1.6)$$

Przybliżenie GM

Model geometryczny został zaproponowany początkowo do opisu prawdopodobieństwa jonizacji wewnętrznych powłok w wyniku około-centralnych ($b = 0$) zderzeń z protonami [20]. Następnie teorię rozwinęto tak, aby uwzględniała zarówno różne parametry zderzenia jak i jonizację atomów tarczy nie tylko przez protony, ale również przez obdarte z elektronów jony o różnej liczbie atomowej [21].

Całkowicie zjonizowany pocisk o ładunku Z_P i prędkości v_P wyższej niż prędkość elektronu na orbicie ($v_P \gg v_e$) porusza się w tarczy po trajektorii o zerowym parametrze zderzenia $b=0$ wzdłuż linii prostej (rys. 1.3).



Rysunek 1.3: Parametry i odległości używane w modelu geometrycznym.

Względna prędkość pocisk - elektron atomu tarczy, v , jest bliska prędkości pocisku. Dlatego przekaz energii do elektronu atomu tarczy, E , staje się funkcją parametru zderzenia b_e . Zgodnie z teorią rozproszenia Rutherforda, b_e może być zapisany w postaci:

$$0 = b_e(E_{max}) \leq b_e(E) \simeq \frac{Z_P}{v_P^2} \frac{2v_P^2 - E}{E} \leq b_e(E) b_e(I_{nl}), \quad (1.7)$$

gdzie I_{nl} jest energią jonizacji. W zakresie wysokich prędkości pocisku $b_e \equiv b_e(I_{nl}) \simeq 2Z_P/v_P v_e$ jest maksymalną wartością promienia cylindra wzdłuż trajektorii pocisku i wewnątrz którego elektron atomu tarczy uzyskuje energię $E \geq I_{nl}$. Prawdopodobieństwo jonizacji przy zerowym parametrze zderzenia dla stanu (n, l) może być zdefiniowane jako całka gęstości rozkładu ładunku ograniczonego przestrzenią cylindryczną determinowaną parametrem zderzenia, b_e . Inaczej mówiąc w modelu geometrycznym przyjmuje się, że poruszający się po prostoliniowej trajektorii pocisk penetruje "chmurę" jednego elektronu atomu tarczy i w wyniku zderzenia część tej "chmury" jest unoszona wzdłuż trajektorii pocisku [20, 21]. "Chmura" jednego elektronu tarczy rozważana jest jako rozkład ładunku określony przez funkcję falową stanu początkowego elektronu $\Psi_{nlm}(r)$. Model zakłada, że prawdopodobieństwo wyrzucenia części "chmury" zależy od odległości tej części od trajektorii jonu. Wyrzucona część "chmury" może być traktowana jako prawdopodobieństwo jonizacji na elektron. Prawdopodobieństwo jonizacji na elektron otrzymuje się z:

$$p_{nl}(0, b_e) = \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^2 \beta(r, I_{nl}) \quad (1.8)$$

gdzie R_{nl} jest radialną częścią funkcji falowej, $\beta = 1$ dla $b_e \leq r$ i $\beta = 1 - [1 - (b_e/r)^2]^{1/2}$ dla $b_e \geq r$.

W zderzeniu lekkich jonów prawdopodobieństwo jonizacji jest proporcjonalne do powierzchni w związku z czym można zapisać w postaci prostej formuły:

$$p_L(0) \simeq 1 - (1 - \frac{1}{2} b_e^2 \langle r^{-2} \rangle) = \text{constans} \left(\frac{Z_P}{v_P} \right)^2. \quad (1.9)$$

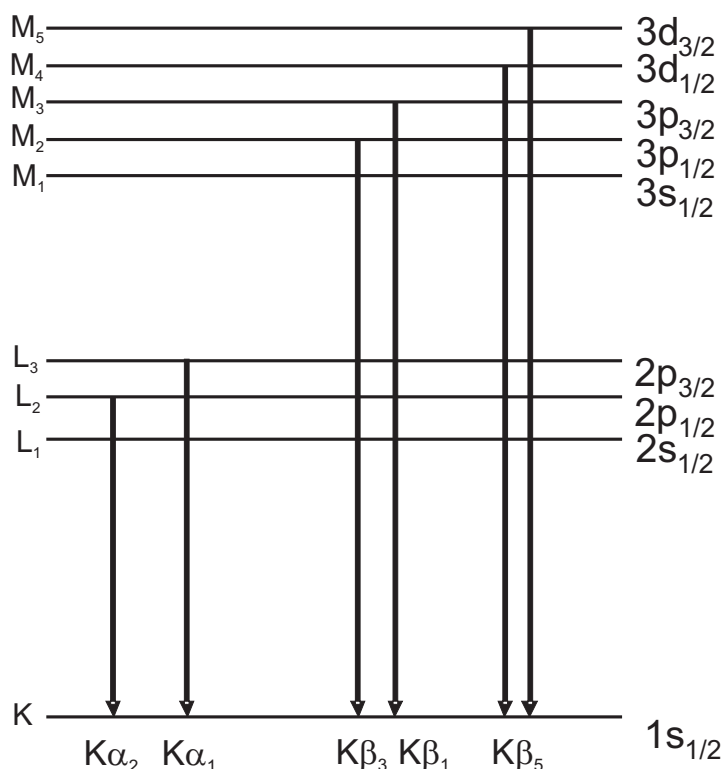
Teorie SCA i GM testowane były w wielu eksperymentach, w wielu pracach m.in. [23, 24, 25]. W pracy [23] wartości prawdopodobieństw jonizacji powłoki N atomów krzemu w wyniku zderzeń z jonami Bi o energii 8-36 MeV są zgodne z obliczeniami SCA, natomiast prawdopodobieństwo jonizacji powłoki M jest dobrze odwzorowane przez model GM. W pracy [24], w której wyznaczono prawdopodobieństwo jonizacji powłoki N_4 atomów złota bombardowanych jonami azotu i węgla o energii 0.4 - 1.8 MeV/u, wykazano, że przewidywania modelu SCA są zgodne z danymi eksperymentalnymi, natomiast model GM przeszacowuje dane eksperymentalne o czynnik ok. 2. W pracy [25] analizowano widma satelitarne $K\alpha$ Ca, Ti, Cr i Fe indukowane przez jony C, O, Ne o energii 2 - 19 MeV/u. Porównanie eksperymentalnego prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L z obliczeniami SCA pokazało, że dla jonów zderzających się z atomami niskim Z, teoria daje zadowalający opis procesu jonizacji w reżimie dużych prędkości pocisku, ale załamuje się przy prędkości pocisku równej prędkości elektronu na powłoce L. Różnice pomiędzy wartościami eksperymentalnymi i obliczonymi w reżimie dużych prędkości pocisku wyjaśniono tym, iż w obliczeniach SCA zastosowano nieodpowiednie funkcje falowe. Model geometryczny dobrze opisuje zależność od prędkości jonu, ale przeszacowuje wartości eksperymentalne.

1.2. Deekscytacja atomów wzbudzonych

Atom, z którego usunięty został elektron dąży do stanu równowagi poprzez zapelnienie powstałej w wewnętrznej powłoce dziury, ponieważ elektrony w atomie zajmują takie stany, by atom jako całość posiadał najniższą możliwą energię. Dążenie atomu do zajęcia najniższego stanu energetycznego powoduje niemal natychmiastowe zapelnianie dziur. Zapelnieniu dziury towarzyszy emisja promieniowania rentgenowskiego (przejścia radiacyjne) bądź elektronu (przejścia bezradiacyjne) z powłoki wyższej niż ta, w której znajduje się dziura.

1.2.1. Przejścia radiacyjne

Podczas przejść radiacyjnych zapelnieniu dziury w wewnętrznej powłoce towarzyszy emisja kwantu promieniowania rentgenowskiego. Energia fotonu określona jest przez różnicę między energią stanu początkowego atomu a energią stanu końcowego.



Rysunek 1.4: Schemat przejść promieniowania rentgenowskiego serii K.

Przejścia rentgenowskie są określone przez reguły wyboru. Ze wszystkich prawdopodobnych przejść elektronowych mogących zapelniać dziurę, możliwe są tylko takie, dla których spełnione są reguły wyboru. Reguły wyboru opisują możliwe zmiany liczb kwantowych w atomie (jonie) i odzwierciedlają prawa zachowania energii i pę-

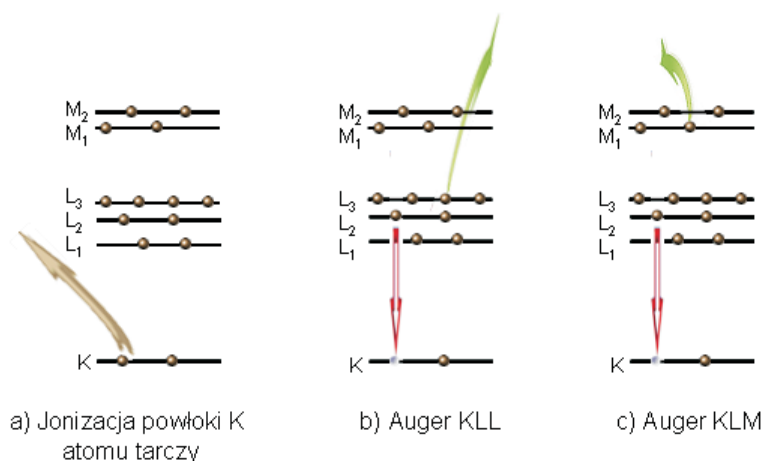
du w całkowitym układzie 'atom plus foton'. Przejścia dipolowe elektryczne spełniają reguły: $\Delta N \neq 0$; $\Delta l = \pm 1$; $\Delta j = 0, \pm 1$ (przy czym przejścia $j = 0 \rightarrow j = 0$ są przejściami wzbronionymi). Zabronione (znacznie mniej prawdopodobne) są przejścia kwadrupolowe, dla których $\Delta l = -2, 0$ lub 2 oraz $\Delta j = 0, 1$ lub 2 . Dozwolone przejścia przedstawione zostały na schemacie 1.4.

Niniejsza praca przedstawia analizy przeprowadzone w oparciu o przejścia radiacyjne $K\alpha$ i przejścia satelitarne opisane w rozdziale 1.2.3. Mimo, iż w pracy nie analizowano bezpośrednio przejść bezradiacyjnych, to pogłębiona analiza widm rentgenowskich (przejęć radiacyjnych) wymaga uwzględnienia procesów bezradiacyjnych odpowiedzialnych za przegrupowania elektronów zachodzących w czasie między zderzeniem a emisją fotonu. Procesy bezradiacyjne opisane zostały w kolejnym rozdziale.

1.2.2. Przejścia bezradiacyjne

Jeżeli procesowi zapełnienia dziury w wewnętrznej powłoce nie towarzyszy emisja kwantu X, energia uwolniona w wyniku przejścia elektronu z wyższej powłoki na powłokę niższą unoszona jest przez inny elektron, który jest emitowany do kontinuum. A zatem w procesach bezradiacyjnych biorą udział dwa elektrony, z czego jeden przechodzi z wyższego stanu energetycznego na niższy, drugi natomiast jest wzbudzany do kontinuum. Wśród procesów bezradiacyjnych rozróżnia się przejścia Augera, przejścia Coster-Kroniga oraz przejścia super Coster-Kroniga [26]. W wyniku przejścia Augera zmniejsza się liczba dziur w danej powłoce, natomiast przy procesach Coster-Kroniga liczba dziur w danej powłoce nie zostaje zmieniona, zmianie ulega natomiast ich rozmieszczenie. Na rysunku 1.5 przedstawiono schematy jonizacji oraz zapełnienia dziury w powłoce K wzbudzonego atomu krzemu (przejścia Augera).

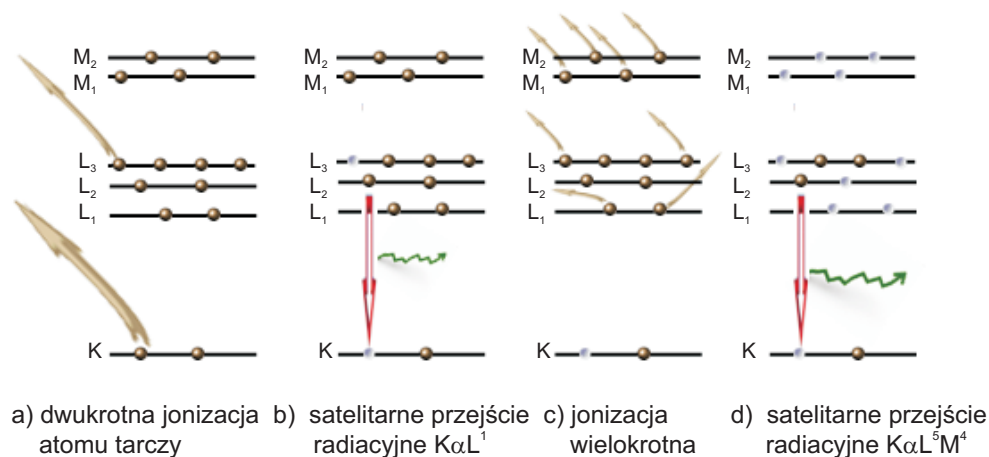
W przypadku wytworzenia dziury w powłoce K atomu krzemu mogą mieć miejsce procesy Augera KLL, KLM i KMM. Dla stanów nisko zjonizowanych dominującym procesem jest przejście KLL. Wraz ze wzrostem jonizacji proces KLL maleje, natomiast procesy KLM i KMM zaczynają wzrastać [12]. Jeżeli w wyniku zderzenia wytworzona została dodatkowa dziura w podpowłoce L_1 jest ona natychmiast zapełniana, przed zapełnieniem dziury K, w wyniku przejść Coster-Kroniga z podpowłok L_2 lub L_3 (z prawdopodobieństwem ($p_{L_1 \rightarrow L_{23}}^{CK} = 98\%$ [27])). W przypadku wytworzenia dodatkowych dziur w powłoce L, w czasie między zderzeniem a emisją promieniowania rentgenowskiego, mają również miejsce przejścia Augera $L_{23}MM$, które z kolei przenoszą dziury L_{23} do powłoki M. Przejścia zmieniające rozkład dziur w powłoce L nie odgrywałyby roli tylko w przypadku całkowitej jonizacji powłoki M.



Rysunek 1.5: Schematy wzbudzenia i deekscytacji atomu krzemu; a) jonizacja powłoki K atomu tarczy w wyniku zderzenia z pociskiem, b) przejście Augera KLL - przeniesienie elektronu z powłoki L do kontinuum, c) przejście Augera KLM - przeniesienie elektronu z powłoki M do kontinuum.

1.2.3. Satelitarne przejścia rentgenowskie $K\alpha L^N$ w atomach krzemu

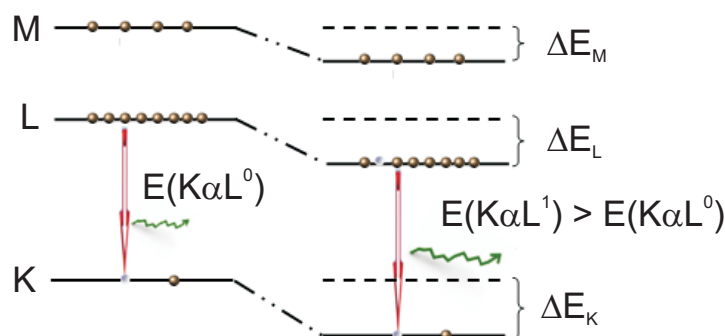
Pomiary spektroskopowe pozwalają na określenie rozkładu stanów KL^N bezpośrednio z analizy widm satelitarnych $K\alpha L^N$. Powstanie widm satelitarnych jest wynikiem jonizacji wielokrotnej (rys. 1.6). Struktura satelitarna widm rentgenowskich została po raz pierwszy zaobserwowana przez Siegbahna i Stenströma w 1916 roku w promieniowaniu charakterystycznym serii K [28].



Rysunek 1.6: Wielokrotna jonizacja i przejścia satelitarne.

Zderzenia jon-atom powodują wielokrotną jonizację atomów. Obecność dodatkowej dziury w powłoce L powoduje zaburzenie potencjału elektrostatycznego i tym samym powoduje wzrost energii wiązania dla każdego poziomu. Inaczej mówiąc kie-

dy w zderzeniu z wewnętrznymi powłok atomowych zostaje wyrzucony więcej niż jeden elektron zmniejsza się ekranowanie ładunku jądra i wszystkie poziomy energetyczne ulegają zmianie. W wyniku przesunięcia poziomów zwiększają się energie przejść rentgenowskich (rys. 1.7). Wartość przesunięcia energetycznego linii satelitarnej w stosunku do linii diagramowej rośnie wraz ze wzrostem liczby atomowej Z . W przypadku wielokrotnej jonizacji energie przejść rosną z liczbą dziur w powłoce L .



Rysunek 1.7: Przesunięcia poziomów energetycznych.

Przesunięcia energetyczne w przypadku dodatkowych dziur w powłoce L są znacznie większe niż w przypadku dodatkowych dziur w powłoce M . Dlatego w dyskutowanych w niniejszej pracy widmach rentgenowskich serii $K\alpha$ stosunkowo łatwe jest odseparowanie linii satelitarnych L od linii diagramowej. Nie można natomiast oddzielić linii satelitarnych M powstających w wyniku dodatkowej jonizacji powłoki M . Stopień jonizacji powłoki M można jednak określić w sposób pośredni, ponieważ wynikiem jonizacji powłoki M jest dodatkowe przesunięcie energii przejścia oraz poszerzenie linii satelitarnych $K\alpha L^N$ - proporcjonalne do liczby dziur w powłoce M . Znajomość stopnia jonizacji powłoki M pozwala na rozważania efektów chemicznych, które wpływają na zmianę gęstości elektronów walencyjnych [29, 30, 31] jak również na dyskusję efektów plazmowych [9, 32].

Gdy w wyniku zderzenia z jonem atom traci elektron z powłoki K i równocześnie elektrony z wyższych powłok możliwa jest szeroka gama procesów relaksacyjnych, które modyfikują rozkład dziur powłoki L , zachodzących przed emisją promieniowania rentgenowskiego. Procesy te w dużym stopniu uzależnione są od pozderzeniowej dostępności słabo związanych elektronów będących w otoczeniu danego atomu, a zatem są wrażliwe na środowisko chemiczne.

W 1922 roku Niels Bohr napisał [33], że od warunków chemicznych, w których znajduje się rozważany atom, zależy struktura progów absorpcji, natomiast nie mają one wpływu na emisję promieniowania charakterystycznego. W 1923 r. Siegbahn zasugerował, że istnieje zależność długości fali promieniowania rentgenowskiego od chemicznego otoczenia atomu. Podjęto zatem szereg eksperymentów, które wykazały różnice w energii promieniowania charakterystycznego atomów znajdujących się

w różnym otoczeniu chemicznym [34, 35, 36]. Tabela 1.1 przedstawia wyniki otrzymane przez Siegbahna [36] i Bäcklina [35] i Liu[37].

Tabela 1.1: Przesunięcia chemiczne otrzymane przez a) Siegbahna [35, 36], b) Liu [37].

Atom	Związek	Przesunięcie energetyczne (eV)
Al	Al ₂ O ₃	0.31 ^a
Si	SiO ₂	0.57 ^a
Si	SiO ₂	0.62 ^b
Si	SiB ₆	0.05 ^b
Si	SiC	0.19 ^b
Si	Si ₃ N ₄	0.45 ^b
P	P ₂ O ₅	0.89 ^a
S	Ba ₂ SO ₄	1.31 ^a

W roku 1964 [38] eksperymentalnie zaobserwowano przesunięcia energetyczne w widmach rentgenowskich między różnymi związkami siarki z tlenem. W prostym modelu założono, że elektrony są całkowicie przenoszone z atomu o mniejszej elektroujemności do tego, który ma większą elektroujemność (B - 2.0, C - 2.5, N - 3.1, O - 3.5). Innymi słowy elektron walencyjny “elektrododatniego” atomu będzie dążył do zapełnienia “pustej” powłoki atomu “elektroujemnego”. W wyniku tego zaburzenia poziomy energetyczne atomu są przesuwane i mogą się różnić w zależności od otoczenia chemicznego. Zaobserwowanie przemieszczenia poziomów atomowych spowodowanych środowiskiem chemicznym pozwala badać relacje energetyczne elektronów walencyjnych wchodzących w skład otoczenia chemicznego.

Energia promieniowania rentgenowskiego $K\alpha$ (w atomach jednokrotnie zjonizowanych) wzrasta wraz ze wzrostem elektroujemności sąsiednich atomów [39] (patrz związki krzemu w tab. 1.1). Jeżeli ilość elektronów w powłoce walencyjnej ulega zmianie z powodu obecności ligandów (atomów bezpośrednio przyłączonych do atomu centralnego) zmienia się potencjał elektrostatyczny odczuwany przez elektrony na wewnętrznych powłokach atomu. Zarówno w przypadku gdy atom traci elektrony walencyjne ($\text{Si}^0 \rightarrow \text{Si}^{4+}$), jak również gdy atom zyskuje ładunek walencyjny z otaczających go ligandów energie wiązania elektronów ulegają przesunięciu. Przesunięcie to jest tym większe im większa jest elektroujemność sąsiednich atomów. Badania dotyczące wpływu elektroujemności na przesunięcie chemiczne można znaleźć m.in. w pracach [37, 40].

Opisany powyżej efekt chemiczny dotyczy stanów nisko zjonizowanych. Dla atomów wielokrotnie zjonizowanych efekt chemiczny ma zupełnie inne konsekwencje. W roku 1978 Demarest i Watson badali widma satelitarne krzemu w otoczeniu chemicznym wodoru i fluoru i wykazali, że w przypadku wielokrotnej jonizacji konfiguracja elektronów walencyjnych dla atomów wysoko-zjonizowanych zmienia się z liczbą dziur w powłoce L [41]. Na podstawie energii przejść satelitarnych określono średni stopień jonizacji powłoki M w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego. Ponadto stwierdzono, iż międzyatomowy transfer elektronów dominuje nad szybkimi procesami przegrupowań, które zachodzą przed emisją promieniowania rentgenowskiego. Stwierdzono, że w układzie, w którym istnieje dostęp do elektronów walencyjnych ligandów następuje transfer elektronu z otoczenia chemicznego do powłoki M atomu centralnego. Jako dowód na istnienie przejść międzyatomowych przyjęto fakt, że obserwowany w widmach stopień jonizacji powłoki L atomów krzemu będących w otoczeniu chemicznym wodoru (SiH_4) jest mniejszy niż w innych związkach krzemu (SiF_4 , klaster Si). W pracy Hartmanna [42] wykazano, że po usunięciu zmniejszenie liczby elektronów rdzenia jest w pełni kompensowane przez transfer ładunku walencyjnego z otoczenia do rozważanego atomu. W stanach wysoko zjonizowanych liczba elektronów transferowanych do podpowłoki $3d$ jest niższa w przypadku SiH_4 niż w przypadku innych związków krzemu (SiF_4 , klaster Si). Związane jest to z tym, że w związku SiH_4 liczba elektronów walencyjnych ligandów jest ograniczona, a więc ograniczony jest transfer ładunku walencyjnego. A zatem stopień jonizacji powłoki L obserwowany w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego zależy od dostępności elektronów blisko położonych ligandów otaczających rozważany atom.

Tabela 1.2: Teoretyczne przesunięcia energetyczne linii satelitarnych $K\alpha L^N$ w stosunku do linii diagramowej $K\alpha L^0$ (eV) zaczerpnięte z pracy [41].

Związek	Przesunięcie energetyczne dla danego stanu KL^N [eV]					
	$K\alpha L^1$	$K\alpha L^2$	$K\alpha L^3$	$K\alpha L^4$	$K\alpha L^5$	$K\alpha L^6$
Si	11.4	24.1	38.9	54.2	69.5	87.0
SiF_4	12.2	25.4	39.8	54.7	69.0	85.4
SiH_4	14.7	28.4	44.0	59.8	75.8	91.6

Efekt chemiczny obserwowany jest zarówno w przesunięciach energetycznych linii satelitarnych jak również w zmianie rozkładu intensywności. Zmiana rozkładu wynika z procesów Augera LMM, które powodują zapełnienie dziury w powłoce L przed wypromieniowaniem kwantu X, stąd transformacja stanów KL^N do stanów KL^{N-1} i przesunięcie linii satelitarnych obserwowanych w widmie rentgenowskim w stronę niższych energii. Początkowo w dyskusjach przypisywano taki efekt przejściom międzyatomowym elektronów walencyjnych ligandów do powłoki L rozważanego atomu [43]. Niemniej jednak, jak pokazano w pracach Hartmanna [12, 42, 44], elektrony z są-

siednich atomów są transferowane do powłoki walencyjnej, a następnie przegrupowane do powłoki L. Przepływ ładunku walencyjnego z otoczenia do wielokrotnie zjonizowanych atomów kompensuje dodatni ładunek rdzenia i zwiększa ilość elektronów na powłoce walencyjnej. Wzrost ładunku walencyjnego przekłada się na stosunkowo duże zmiany energii poszczególnych linii satelitarnych i znacznie zwiększa wypełnienie dziur L w wyniku procesów Augera LVV (L-valence-valence). W widmach satelitarnych procesy Augera LVV powodują wzrost intensywności satelitów niższego rzędu i redukcję intensywności satelitów wyższego rzędu.

W pracach Hartmanna wykazano, że zmiana w konfiguracji elektronów z powłoki walencyjnej ze wzrostem liczby dziur w powłoce L zachodzi nie tylko w wyniku jonizacji atomów na zewnętrznych powłokach atomowych, ale także z powodu efektów międzyatomowych relaksacji w molekuale. W SiH_4 z powodu niskiej liczby elektronów walencyjnych ligandów, liczba elektronów walencyjnych nie może być zwiększona. W przypadku SiO_2 zmniejszenie ilości elektronów w wewnętrznych powłokach atomu krzemu jest w pełni kompensowane przez odpowiedni wzrost frakcji ładunkowej $3s$, $3p$ i $3d$ [12]. Inaczej mówiąc zmniejszenie ładunku w wewnętrznych powłokach atomowych związane z jonizacją powłoki L atomu krzemu inicjuje bardzo intensywny przepływ elektronów walencyjnych z ligandów tlenu otaczających atom krzemu [32]. Ponadto ewentualna jonizacja elektronów z podpowłok $3s$ i $3p$ jest kompensowana przez odpowiednie zwiększenie frakcji elektronowej $3d$. Stąd frakcja elektronowa $3d$ może działać jak bufor dla międzyatomowego przepływu ładunku walencyjnego. Wzrost ładunku walencyjnego redukuje przesunięcia energetyczne linii satelitarnych i znacznie zwiększa wypełnienie dziur L.

1.3. Opis eksperymentu

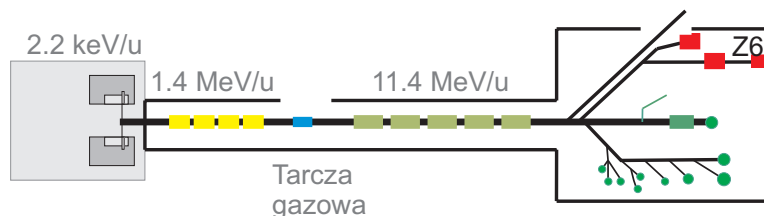
1.3.1. Idea eksperymentu

W omawianym eksperymencie mierzono widma rentgenowskie atomów krzemu znajdujących się w otoczeniu chemicznym SiO_2 . Ponieważ czas życia dziury na powłoce K dla atomów krzemu wynosi 1.5-30 fs rejestrowane promieniowanie rentgenowskie serii K emitowane z obszaru oddziaływania odzwierciedla wczesną fazę procesów zachodzących tuż po zderzeniu jon-atom. Ponadto, promieniowanie rentgenowskie serii K wymaga produkcji dziury w powłoce K w zderzeniu jon-atom i dlatego rozważania procesów hamowania są ograniczone do małych parametrów zderzenia (w skali atomu). Taka zależność od parametru zderzenia jest użyteczna do testowania teorii strat energii [45]. W procesach hamowania jonów istotną rolę odgrywa zarówno jonizacja atomu tarczy jak i wychwyt elektronu atomów tarczy do stanów związanych pociśku. Oba te procesy zależą od parametru zderzenia. Przy bardzo małych parametrach

zderzenia zmianie ulega kierunek pocisku. Przy dużym parametrze zderzenia pocisk przekazuje energię do elektronów walencyjnych, a jego kierunek nie ulega zmianie. Przy średnich parametrach zderzenia pocisk jonizuje wewnętrzne powłoki elektronowe, czego wynikiem jest późniejsza deekscytacja atomu i emisja promieniowania rentgenowskiego.

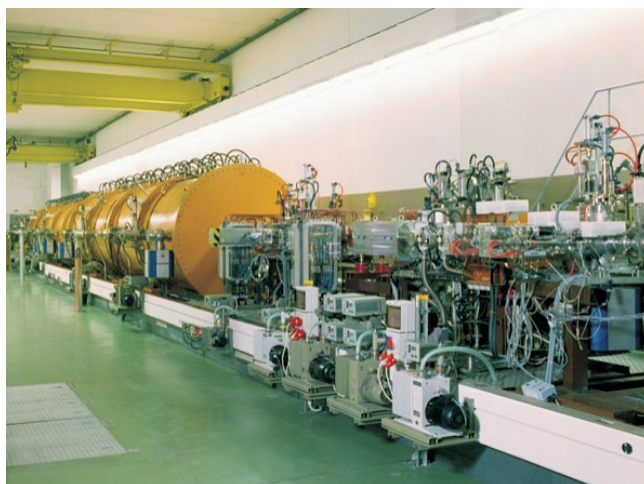
1.3.2. Akcelerator

Niniejsza praca przedstawia analizę widm rentgenowskich atomów krzemu indukowanych przez zderzenia jonów wapnia o energii początkowej 11.4 MeV/u z tarczą aerożelową SiO₂. Eksperyment przeprowadzony został w Instytucie GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH), Darmstadt, Niemcy. Wykorzystano akcelerator liniowy UNILAC (rys. 1.8, 1.9). UNILAC posiada trzy różne wtryskiwacze jonów [46]. Standardowy wtryskiwacz dostarcza energii wejściowej 2.2 keV/u. Następnie wiązka jonów jest przyspieszana od 2.2 keV/u do energii 1.4 MeV/u. Kolejną fazą jest skierowanie jonów na tarczę gazową. W tym miejscu jony podlegają zderzeniom i są obdzierane z elektronów do różnych stanów ładunkowych. Wybrane stany ładunkowe jonów są transportowane do dalszej akceleracji w części Alvarez, gdzie uzyskują energię 11.4 MeV/u. Wiązka jonów z akceleratora UNILAC jest rozprowadzana do stref eksperymentalnych, m.in. do strefy Z6 (rys. 1.10), gdzie znajduje się komora próżniowa, w której umieszczone zostały tarcza aerożelowa SiO₂ i spektrometr krystaliczny (rys. 1.11).

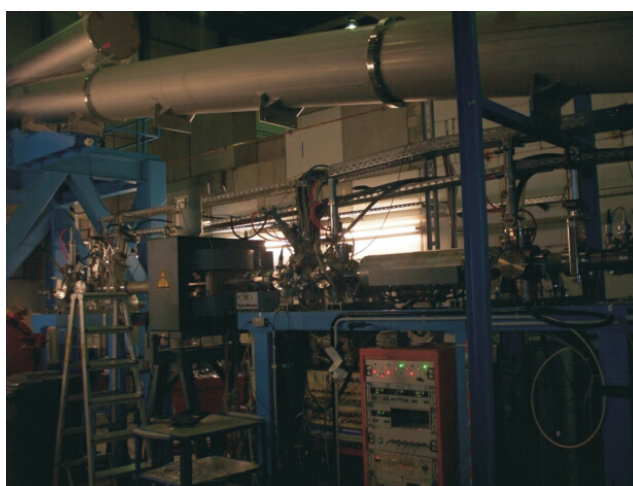


Rysunek 1.8: Schemat akceleratora UNILAC.

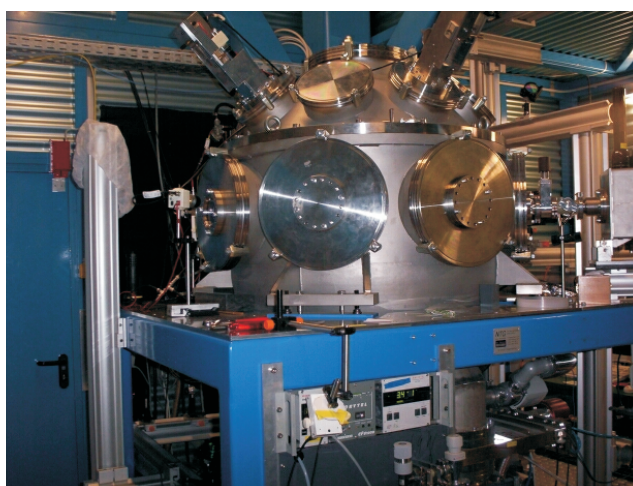
W omawianym eksperymencie wiązka jonów wapnia o średnicy 1 mm wprowadzona z akceleratora UNILAC dostarczona była do komory próżniowej (5×10^{-6} mbar) i skierowana na tarczę aerożelową SiO₂. Prąd wiązki wynosił 0.1-0.5 μ A. Czas trwania pulsu wynosił 2-5 ms z częstotnością 2-5 Hz. Czas naświetlania potrzebny do zebrania widm promieniowania rentgenowskiego tarczy wynosił 1.5-2 h.



Rysunek 1.9: Zdjęcie akceleratora UNILAC ([www – inj.gsi.de](http://www-inj.gsi.de)).



Rysunek 1.10: Zdjęcie Strefy Z6



Rysunek 1.11: Komora próżniowa stosowana w eksperymencie dedykowanym pomiarom widm rentgenowskich z wykorzystaniem spektrometru krystalicznego.

1.3.3. Tarcza

Ponieważ celem eksperymentu było przeprowadzenie badań poświęconych procesom towarzyszącym hamowaniu jonów w materii, użyto specjalnie dobranego materiału tarczy. W standardowych pomiarach, rozkład stanu ładunkowego wiązki jest zazwyczaj mierzony po tym, jak wiązka jonów opuści obszar oddziaływania. Długość drogi hamowania jonu o energii 5.9 MeV/u - 11.4 MeV/u w kwarcu, którego gęstość wynosi 2.20 g/cm^3 jest niezmiernie krótka: 50 - 100 μm [7, 47]. Celem wydłużenia drogi hamowania jonu kwarc zastąpiono materiałem o znacznie niższej gęstości - aerożelem SiO_2 (rys. 1.12) o średniej gęstości 0.023 g/cm^3 [48]. Możliwe stało się zatem zmierzenie widm promieniowania rentgenowskiego wzdłuż ok. 80% długości drogi hamowania jonu.



Rysunek 1.12: Zdjęcie aerogelu SiO_2 i jego struktura.

Aerożel SiO_2 jest przezroczystym materiałem, wyglądem przypominającym zamrznętą mgłę. Aerożel SiO_2 składa się ze związanych atomów krzemu i tlenu połączonych w struktury kropłowe o średnicy 1 - 10 nm i łączących się losowo ze sobą w trójwymiarową strukturę rozdzielonymi pustą przestrzenią ok. 30-50 nm [49]. Masę aerożelu w 90 - 99.8% stanowi powietrze. Egzotyczna nanometrowa struktura aerożelu sprawia, że długość drogi hamowania jonu zostaje wydłużona o 10 - 100 razy w porównaniu ze stałym kwarcem. Ważną zaletą jest również to, że nieorganiczny aerożel ma wysoką przepuszczalność promieniowania rentgenowskiego w zakresie energii fotonów obserwowanych w eksperymencie. W przeciwieństwie do kwarcu o grubości 100 μm , który w pełni absorbuje promieniowanie rentgenowskie o energii fotonów 1.730 - 1.830 keV, próbka aerożelu o gęstości 100 razy mniejszej i tej samej grubości pochłania tylko ok. 15% promieniowania o tej energii.

Promieniowanie serii K atomu tarczy Si w zakresie energii fotonów 1.7 - 1.8 keV wywołane zderzeniem jonów wapnia o początkowej energii 11.4 MeV/u z tarczą aerożelową SiO_2 o gęstości 0.023 g/cm^2 rejestrowane było przy użyciu spektrometru kryształicznego.

1.3.4. Spektrometr krystaliczny

Widma promieniowania rentgenowskiego atomu tarczy dyskutowane w tej pracy rejestrowane były przy użyciu spektrometru krystalicznego FSRR (Focusing Spectrometer with Spatial Resolution [50, 51, 52]) ze sferycznie wygiętym kryształem kwarcu ($2d = 8.492 \text{ \AA}$) (rys. 1.14, 1.13) w I rzędzie odbicia. Promień wygięcia kryształu równy był 100 mm. Rozmiar powierzchni krystalicznej miał wymiary $12 \times 45 \text{ mm}^2$. Kąt padania wiązki fotonów wynosił 52.6° . W przeprowadzonym eksperymencie odległość między źródłem a kryształem wynosiła 30 cm, natomiast między detektorem a kryształem 10 cm. Otrzymano powiększenie $M = 0.33$. Widmowa zdolność rozdzielcza wynosiła $\Delta E \sim 0.4 \text{ eV}$, natomiast przestrzenna zdolność rozdzielcza $\Delta x \sim 30 \text{ \mu m}$.

Urządzenie łączy dwa aspekty:

- w płaszczyźnie wertykalnej (skupiającej) kryształ odbija jak sferyczne lustro (rys. 1.13a).

$$\frac{1}{a} + \frac{1}{b} = \frac{2\sin\theta}{R}, \quad (1.10)$$

gdzie: a - dystans między źródłem a kryształem, b - dystans między kryształem a obrazem, R - promień krzywizny kryształu. Płaszczyzna wertykalna określona jest jako prostopadła do płaszczyzny horyzontalnej.

- w płaszczyźnie horyzontalnej (rozpraszającej), przy odbiciu od płaszczyzn krystalicznych dla danego kąta i energii promieniowania rentgenowskiego, kryształ pracuje na zasadzie interferencji konstruktywnej (rys. 1.13b). Kąt odbicia dla danej długości fali opisany jest przez prawo Bragga:

$$2d\sin\theta = n\lambda, \quad (1.11)$$

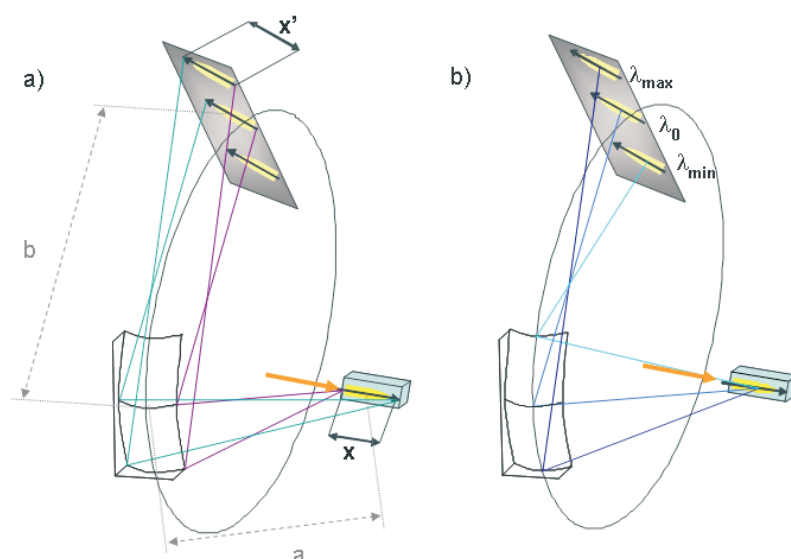
gdzie: n - rząd odbicia, d - dystans między płaszczyznami kryształu, λ - długość fali, θ - kąt Bragga. Płaszczyzna horyzontalna definiowana jest przez pozycję źródła, detektora i kryształu.

Układ posiada rozdzielczość widmową w płaszczyźnie rozpraszającej, a liniowe powiększenie w tej płaszczyźnie zdefiniowane jest przez stosunek:

$$M = \frac{b}{a}. \quad (1.12)$$

W układzie FSSR-2D detektor promieniowania rentgenowskiego umieszczony jest na zewnątrz okręgu Rowlanda. Zmiana pozycji detektora i umieszczenie go poza okręgiem Rolanda i ułożenie źródła w odległości:

$$a = \frac{Rb}{2R\sin\theta - R} \quad (1.13)$$

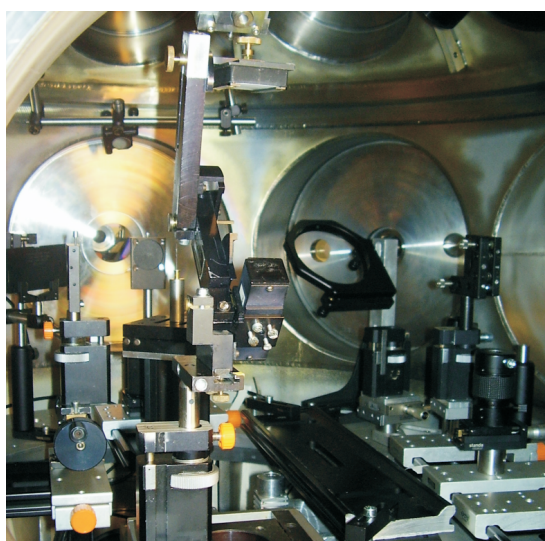


Rysunek 1.13: Spektrometr krystaliczny: *a* - w płaszczyźnie wertykalnej, *b* - w płaszczyźnie rozpraszającej.

proceeds to an increase in spatial resolving power both in the vertical plane as well as in the dispersing plane. The spectral resolving power FSSR-2D depends on the dimensions of the X-ray source. In the vertical plane the magnification is equal to: $M_s = \frac{b}{a}$. In the dispersing plane instead:

$$M_d = R \frac{a - \cos\theta(2a\cos\theta - R)}{(R\cos\theta - a)(2a\cos\theta - R)} \quad (1.14)$$

and it depends on the distance between the Rowland circle and the detector.

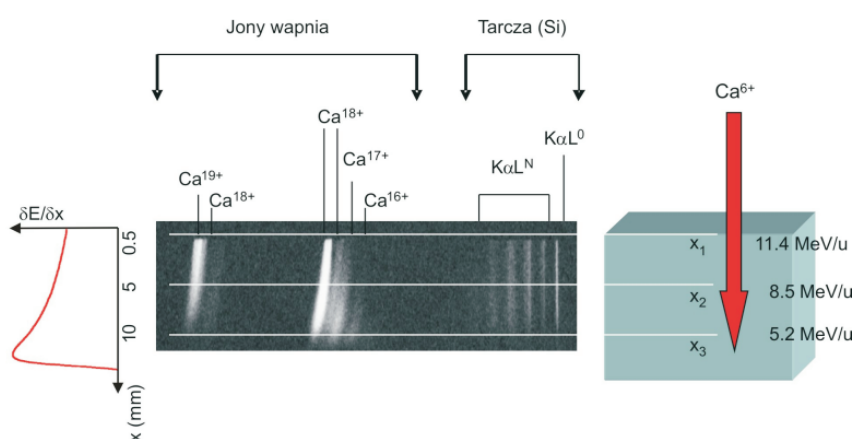


Rysunek 1.14: Zdjęcie spektrometru w komorze próżniowej.

1.3.5. Rejestracja widm promieniowania rentgenowskiego

Jako detektora promieniowania rentgenowskiego użyto kliszy fotograficznej KO-DAK RAR 2492, która posiada wysoką czułość w zakresie fotonów o energii 0.1 - 10 keV. Ilościowe pomiary widm promieniowania rentgenowskiego określone były przez liczbę oddziałujących fotonów, które aktywowały granulki bromku srebra emulsji fotograficznej. Małe rozmiary granulek ($1\ \mu\text{m}$) zapewniają wysoką rozdzielczość przestrzenną. Oprawka filmu była chroniona przez dwie warstwy filtrów polipropylenowych o grubości $1\ \mu\text{m}$ pokrytych z obu stron warstwą aluminium o grubości $0.2\ \mu\text{m}$. Taki rodzaj filtrów transmituje miękkie promieniowanie rentgenowskie i blokuje tło promieniowania fotonów o niższych energiach.

Technika spektroskopii rentgenowskiej pozwala na zbieranie ważnych informacji o procesach zachodzących podczas hamowania jonu w materii. Hamujący pocisk powoduje jonizację atomów tarczy. Wypromieniowane w wyniku deekscytacji kwanty promieniowania rentgenowskiego rejestrowane są na kliszy fotograficznej. Pocisk rozpoczyna penetrację tarczy z maksymalną prędkością. Następnie penetrując tarczę traci energię. Rysunek 1.15 przedstawia zarejestrowane linie widmowe tarczy oraz pocisku w różnych fazach hamowania jonu. Symbol E_1 odpowiada energii początkowej jonu 11.4 MeV/u i głębokości penetracji w ośrodku hamującym $x_1 \sim 0.5\ \text{mm}$, $E_2 = 8.5\text{-}7.6\ \text{MeV/u}$ i $x_2 \sim 5\ \text{mm}$, natomiast $E_3 = 5.2\text{-}4.0\ \text{MeV/u}$ i $x_3 \sim 10\ \text{mm}$. Jest to ostatni obszar, który może być badany metodą spektroskopową. Dla niższych energii jonizacja powłoki K jest mniej prawdopodobna w związku z czym obserwacja widm rentgenowskich tarczy staje się praktycznie niemożliwa.

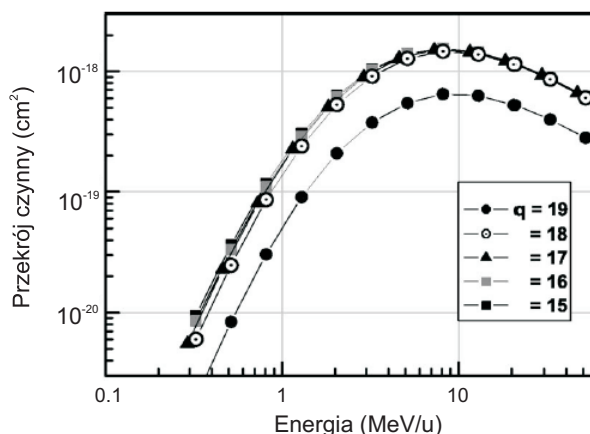


Rysunek 1.15: *Metodyka pomiaru emisji promieniowania rentgenowskiego jonów wapnia i zjonizowanego ośrodka hamującego (SiO₂).*

1.3.6. Stan ładunkowy jonów wapnia w zderzeniach z tarczą aerożelową

Spektroskopowe analizy procesu hamowania zostały uzupełnione przez pomiary strat energii i rozkładu stanu ładunkowego wiązki wzdłuż drogi hamowania. W ramach innego eksperymentu zbadano stan ładunkowy pocisku [7], który jest reprezentowany przez rozkład natężenia linii serii K pochodzących z różnych stanów ładunkowych jonu penetrującego tarczę. Widma serii K pocisku można obserwować jeżeli pocisk zostanie zjonizowany na powłoce K. Przekrój czynny na jonizację powłoki K pocisku silnie zależy od energii pocisku, wykazuje natomiast słabą zależność od stanu ładunkowego pocisku (1.16) [7]. Obliczenia wykonane programem LOSS wykazały słabą zależność od stanu ładunkowego, jedyne odstępstwo zauważono dla pocisku o $q = 19$, gdzie przekrój czynny jest mniejszy o współczynnik 2 (jon Ca^{+19} ma tylko jeden elektron), w pozostałych przypadkach ładunek jądrowy jest "przesłonięty" przez pozostałe elektrony. W pracy [7] pokazano, że przekrój czynny na jonizację powłoki K jonów wapnia penetrujących tarczę aerożelową SiO_2 osiąga maksimum dla energii ok. 8 MeV/u dla stanów ładunkowych $q = 15-19$.

Ponadto zbadano rozkład stanów ładunkowych jonów wapnia o początkowej energii 11.4 MeV/u po opuszczeniu tarczy aerożelowej SiO_2 . W eksperymencie zmierzono następujące frakcje stanów ładunkowych jonów wapnia wychodzących z tarczy (przy energii jonów $E=6.54$ MeV/u): $\text{Ca}^{+20} = 2.8\%$, $\text{Ca}^{+19} = 16.7\%$, $\text{Ca}^{+18} = 44.7\%$, $\text{Ca}^{+17} = 28\%$, $\text{Ca}^{+16} = 6.7\%$, $\text{Ca}^{+15} = 1.1\%$ [7]. Wyniki pomiarów eksperymentalnych jednoznacznie wskazują, iż powłoka K jonów wapnia penetrującego tarczę aerożelową SiO_2 jest w znacznej mierze zapełniona przez co najmniej jeden elektron.



Rysunek 1.16: Przekrój czynny na jonizację powłoki K jonów Ca^{q+} ($q = 15-19$) zderzających się z tarczą aerożelową SiO_2 w funkcji energii jonu, liczony przy użyciu kodu LOSS. Rysunek zaczerpnięto z pracy [7].

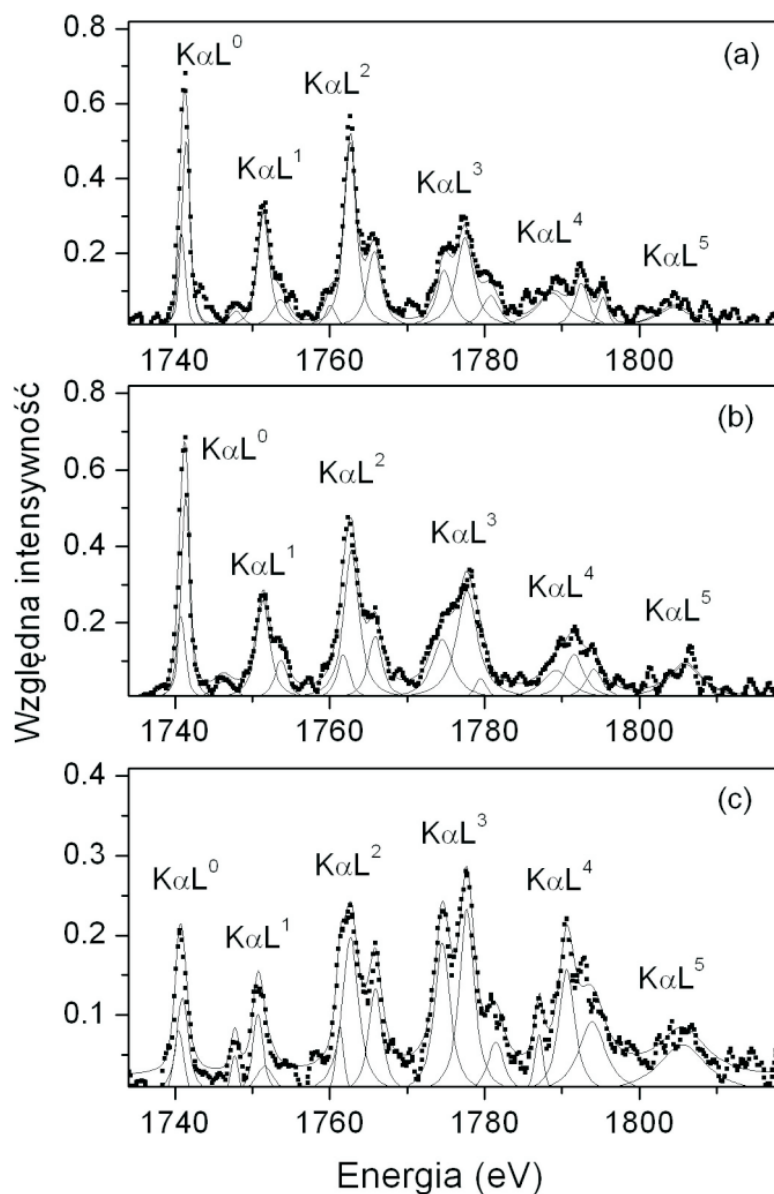
1.4. Analiza danych

1.4.1. Metoda analizy widm rentgenowskich

W wyniku deekscytacji atomów jednokrotnie zjonizowanych na powłoce K obserwowane są dwie linie diagramowe $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ (będące wynikiem przejścia elektronu $2p_{3/2} \rightarrow 1s$ i $2p_{1/2} \rightarrow 1s$). Ponieważ zderzenia ciężkich jonów z atomami prowadzą do wielokrotnej jonizacji, widma atomów tarczy zostają wzbogacone dodatkowymi liniami satelitarnymi. Używając procedury skanowania z zarejestrowanych na kliszy fotograficznej obrazów otrzymano trzy widma satelitarne. Widma (rysunek 1.17) odzwierciedlają promieniowanie rentgenowskie tarczy przy różnych energiach jonów wapnia hamujących w materiale (w różnych fazach hamowania jonów wapnia w aerozolu SiO_2). Pierwsze widmo przedstawia promieniowanie tarczy przy energii jonów 11.4 - 10.6 MeV/u i głębokości penetracji ~ 0.5 mm. Kolejne widma odpowiadają energii 8.5 - 7.6 MeV/u (~ 5 mm) i 5.2 - 4.0 MeV/u (~ 10 mm).

Widma promieniowania rentgenowskiego serii K analizowano przy użyciu programu wykorzystującego metodę najmniejszych kwadratów. Kształt widma jednokrotnie zjonizowanego atomu odzwierciedla funkcja Voigta będąca konwolucją funkcji Lorentza (reprezentującej kształt naturalny linii) i funkcji Gaussa (odpowiadającej poszerzeniu instrumentalnemu). Kształt widm wielokrotnie zjonizowanych atomów jest dużo bogatszy ze względu na obecność linii satelitarnych, ponieważ liczba możliwych przejść rentgenowskich rośnie wraz ze wzrostem liczby stanów początkowych i końcowych. Ze względu na otwartą powłokę walencyjną atomu krzemu kształt widm wielokrotnie zjonizowanych atomów charakteryzuje się bogatą i skomplikowaną strukturą. W przypadku atomów krzemu, nawet linia satelitarna pierwszego rzędu $K\alpha L^1$ odpowiadająca przejściu w obecności jednej dodatkowej dziury w powłoce L składa się z prawie 2000 składowych [53]. Analizy utrudnia fakt, że w przypadku wielokrotnej jonizacji widma stają się coraz bardziej złożone. Rozkład struktur wokół "uśrednionych" położeń linii $K\alpha L^N$ ulega poszerzeniu, co powoduje nakładanie się tych linii uniemożliwiając dokładne rozdzielenie widma.

Satelitarna struktura widma może być dodatkowo modyfikowana z powodu jonizacji powłoki M. Dodatkowe dziury w powłoce M przesuwają położenie linii satelitarnych $K\alpha L^N$ w stronę wyższych energii i poszerzają je. Zmiany w konfiguracji powłoki M mogłyby być dodatkowo spowodowane przez struktury plazmowe pojawiające się w bliskim sąsiedztwie trajektorii jonu ośrodka hamującego. Ponieważ elektrony powłoki M należą do powłoki walencyjnej atomu krzemu znajdującego się w otoczeniu atomów tlenu, w analizie danych należy wziąć pod uwagę zarówno efekt chemiczny jak i potencjalną możliwość powstawania struktur nanoplazmowych.



Rysunek 1.17: Widmo promieniowania rentgenowskiego tarczy aerożelowej SiO_2 w a) początkowej fazie hamowania jonu (głębokość penetracji ~ 0.5 mm, energia jonu wapnia 11.4 - 10.6 MeV/u); b) środkowej fazie hamowania jonu (głębokość penetracji ~ 5 mm, energia jonu wapnia 8.5 - 7.6 MeV/u); c) ostatniej możliwej do obserwacji fazy hamowania jonu (głębokość penetracji ~ 10 mm, energia jonu wapnia 5.2 - 4.0 MeV/u).

Widma satelitarne serii K mogą być rozłożone na dobrze odseparowane składowe widm $K\alpha L^0$ (linia diagramowa) i $K\alpha L^1, K\alpha L^2 \dots$ (grupy satelitarne) ponieważ różnice energii komponentów należących do danej struktury satelitarnej $K\alpha L^N$ są mniejsze niż naturalne szerokości linii. Z powodu złożonego kształtu linii satelitarnych $K\alpha L^N$

w procedurze dopasowania wszystkie struktury analizowano przy wykorzystaniu kilku profili Voigta. Każdy profil Voigta charakteryzuje się centroidem energii, intensywnością, zafixowaną szerokością Gaussa (1 eV) i szerokością Lorentza ograniczoną naturalną szerokością linii ($\Gamma_L = 0.48$ eV). Wartość szerokości Lorentza zaczerpnięta została z tablic [54] i mimo, że wartość ta odnosi się do układu jednoatomowego, odpowiadająca mu szerokość dla krzemu chemicznie związanego jest prawie identyczna (różnica jest mniejsza niż 0.1 eV [55]). Szerokość Gaussa wyznaczono z linii diagramowej $K\alpha$, dla której znana jest szerokość naturalna linii. Z procedury dopasowania otrzymano uśrednione przesunięcia energetyczne dla linii satelitarnych $K\alpha L^N$ krzemu znajdującego w otoczeniu tlenu (ze średnich ważonych różnic między centroidami profili Voigta) i ich względne intensywności (określono jako sumę powierzchni profili Voigta). Obie te wielkości są ściśle związane ze stopniem jonizacji powłoki L (intensywność) i M (przesunięcie). Niemniej jednak informacje te dotyczą momentu emisji promieniowania rentgenowskiego. W celu uzyskania informacji o procesach jonizacji w momencie zderzenia należy przeprowadzić pogłębione analizy opisane poniżej.

1.4.2. Obliczenia MCDF

W celu odtworzenia struktury satelitarnych widm rentgenowskich $K\alpha L^N$ indukowanych w procesie hamowania jonu obliczono energie i prawdopodobieństwa przejść przy użyciu wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Focka (MCDF - *MultiConfiguration Dirac-Fock*) z uwzględnieniem oddziaływania poprzecznego (Breita) i poprawek QED (energii własnej SE i polaryzacji próżni VP). Wg Tossela interpretacja widm promieniowania krzemu w tetradalnym wiązaniu z tlenem wymaga molekularnych obliczeń orbitalnych [56]. Jednakże obliczenia wykonane dla atomu krzemu są wystarczająco dokładne do dobrego odzwierciedlenia przejść serii K zachodzących w aerożelowej tarczy SiO_2 , ponieważ w zderzeniach ciężkich jonów produkowane są w atomie krzemu stany wysoko zjonizowane.

Wielokonfiguracyjna metoda Diraca-Focka, wykorzystana do obliczeń energii i prawdopodobieństw rentgenowskich przejść serii K analizowanych w tej rozprawie, została opisana szczegółowo w wielu publikacjach Granta i współpracowników [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63]. Model ten został zaadoptowany przez M. Polasika do obliczania struktury widm rentgenowskich i przedstawiony w wielu pracach, m.in. [64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73]. W tej pracy przedstawione zostaną tylko najważniejsze założenia tej teorii. W całym podrozdziale używane są jednostki atomowe.

W rachunkach MCDF, z których korzystano w tej pracy, relatywistyczny efektywny hamiltonian dla systemu N -elektronowego, nazywany hamiltonianem Diraca-Coulomba-Breita, jest wyrażany w postaci:

$$H = \sum_{i=1}^N h_D(i) + \sum_{j>i=1}^N C_{ij}, \quad (1.15)$$

gdzie $h_D(i)$ jest operatorem Diraca dla i -tego elektronu [58]:

$$h_D(i) = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1) c^2 + V_{nuc}(r_i). \quad (1.16)$$

W równaniu 1.16 $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ i β to czterowymiarowe macierze Diraca, c oznacza prędkość światła, $\mathbf{p}_i$ - pęd i -tego elektronu, r_i jest odległością i -tego elektronu od jądra, $V_{nuc}(r_i)$ to operator reprezentujący potencjał jądra.

Człon C_{ij} w równaniu 1.15 odpowiada za oddziaływania pomiędzy elektronami i -tym oraz j -tym wskutek wymiany jednego fotonu i przedstawiony jest wzorem [60]:

$$C_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} + T(r_{ij}), \quad (1.17)$$

gdzie r_{ij} - odległość między i -tym i j -tym elektronem, $\frac{1}{r_{ij}}$ jest operatorem oddziaływania kulombowskiego (opisującym wymianę fotonów spolaryzowanych podłużnie), a $T(r_{ij})$ jest operatorem Breita (opisującym wymianę fotonów spolaryzowanych poprzecznie) [61]:

$$T(r_{ij}) = -\frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} \cos(\omega r_{ij}) + (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla_i)(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \nabla_j) \frac{1 - \cos(\omega r_{ij})}{\omega^2 r_{ij}}, \quad (1.18)$$

gdzie ω jest liczbą falową wymienianego fotonu wirtualnego. Funkcja falowa $\Psi_s(JM^p)$ atomu N -elektronowego (ASF - *Atomic State Function*) opisująca stan określony liczbami kwantowymi wypadkowego całkowitego momentu pędu J , jego rzutu na wybrany kierunek M oraz parzystością p , ma w metodzie MCDF w formie wielokonfiguracyjnej postać [58, 61]:

$$\Psi_s(JM^p) = \sum_m c_m(s) \Phi(\gamma_m JM^p), \quad (1.19)$$

gdzie s numeruje stany, $\Phi(\gamma_m JM^p)$ to konfiguracyjne funkcje stanu (CSF - *Configuration State Function*), m jest liczbą CSF uwzględnionych w rozwinięciu, $c_m(s)$ to współczynniki mieszania konfiguracji dla stanu s , natomiast γ_m reprezentuje wszystkie informacje potrzebne do jednoznacznego zdefiniowania danej funkcji stanu CSF (tzn. informuje o liczbie obsadzeń orbitali oraz o sposobie sprzężenia całkowitych momentów pędu wszystkich podpowłok).

Obliczenia MCDF wykonano przy użyciu pakietu programu GRASP [63], opracowanego przez Granta i współpracowników, umożliwiającego relatywistyczne obliczenia MCDF z uwzględnieniem następujących poprawek do energii (mających duże znaczenie w przypadku ciężkich pierwiastków [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63]): poprawki Breita do operatora odpychania kulombowskiego oraz poprawek elektrodynamiki

kwantowej, QED (*Quantum ElectroDynamics*): poprawki na energię własną (emisja i reabsorpcja wirtualnego fotonu w polu elektromagnetycznym) - SE (*Self-Energy*) oraz na polaryzację próżni (kreacja i anihilacja pary elektron - pozyton) - VP (*Vacuum Polarization*). Poprawki QED (E_{SE} i E_{VP}) włączane są do obliczeń jako poprawki zaburzeniowe pierwszego rzędu po osiągnięciu samouzgodnienia i mają następującą postać [64]:

$$E_{SE} = \frac{Z^4 \alpha^3}{\pi} \sum_a F_a(Z\alpha) \frac{q_a}{n_a^3}, \quad (1.20)$$

$$E_{VP} = \sum_a q_a \int_0^\infty [P_a^2(r) + Q_a^2(r)] V_{VP}(r) dr, \quad (1.21)$$

gdzie sumy biegną po wszystkich zajętych orbitalach a ; α to stała struktury subtelnej; q_a - liczba obsadzeń dla orbitalu a ; n_a - główna liczba kwantowa tego orbitalu; $P_a(r)$ i $Q_a(r)$ - duża i mała radialna składowa orbitalu Diraca, zaś V_{VP} - potencjał polaryzacji próżni. Wartości $F_a(Z\alpha)$ oblicza się poprzez interpolację wyników dla orbitali wodoropodobnych. Prawdopodobieństwa emisji spontanicznej obliczono na podstawie formuł, opartych na dwóch cechowaniach: Coulomba [57] i Babushkina [74].

Obliczenia MCDF wykorzystywane w tej pracy wykonano dla diagramowych i satelitarnych przejść serii K obserwowanych w eksperymencie ($K\alpha L^0, K\alpha L^1, \dots K\alpha L^5$). W rachunkach założono, że przejścia satelitarne $K\alpha L^N$ odpowiadają przejściom zachodzącym ze stanów mających dziury $2p$. Dziury $2s$ są transferowane do podpowłok $2p$ przez bardzo intensywne przejścia Coster-Kroniga i wkład dziur $2s$ do rozkładu dziur L w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego może być zaniedbany [25]. Dlatego w obliczeniach MCDF jako stanu początkowego użyto następującej konfiguracji dziur: $1s^1 2s^0 2p^N$ ($N=0,1,2,\dots,5$) dla przejść $K\alpha L^0, K\alpha L^1, \dots$ i $K\alpha L^5$.

Pochodzenie linii diagramowych $K\alpha L^0$ różni się od pochodzenia linii satelitarnych. Wzmocnione przejścia diagramowe indukowane są głównie przez pojedynczą jonizację wywołaną przez elektrony lub fotony K absorbowane w tarczy [75], podczas gdy linie satelitarne pochodzą głównie z bezpośredniej jonizacji kulombowskiej w wyniku oddziaływania jon-atom. Dlatego, w przypadku linii diagramowych w obliczeniach MCDF użyto jako "podstawowego stanu" konfiguracji walencyjnej: $3s^2 3p^2$. W celu sprawdzenia zmian w konfiguracji w zewnętrznych powłokach spowodowanych bezpośrednią jonizacją kulombowską i przejściami przegrupowującymi LMM w obliczeniach MCDF użyto różnych konfiguracji walencyjnych dla przejść satelitarnych $K\alpha L^N$. Z powodu różnicy w ekranowaniu ładunku jądra energia fotonu wypromieniowanego na skutek przejścia elektronu z powłoki L na powłokę K będzie różna dla różnych konfiguracji dziur w innych powłokach.

Energia przejścia diagramowego jest równa:

$$E(K\alpha) = E_K - E_L. \quad (1.22)$$

Przesunięcie energetyczne linii satelitarnych W atomie z N dodatkowymi dziurami w powłoce L odpowiada różnicy energii linii satelitarnych $K\alpha L^N$ i energii linii diagramowej $K\alpha L^0$. Przesunięcia te są w przybliżeniu proporcjonalne do liczby dziur na danej powłoce:

$$\Delta E(K\alpha L^N) = E(K\alpha L^N) - E(K\alpha L^0), \quad (1.23)$$

gdzie $\Delta E(K\alpha L^N)$ jest przesunięciem energetycznym przejścia $K\alpha$ w atomie z N dodatkowymi dziurami. Teoretyczne przesunięcia energetyczne średniej pozycji linii grup satelitarnych (w stosunku do pozycji linii diagramowych ($E_{Si}(K\alpha L^1 M^0)=1740.41$ eV) oszacowano dla różnych konfiguracji walencyjnych następująco:

$$\Delta E(K\alpha L^N M^m) = E(K\alpha L^N M^m) - E(K\alpha L^0 M^0). \quad (1.24)$$

gdzie symbol M^m oznacza liczbę dziur w powłoce M (lub wzbogacenie w elektromy powłoki walencyjnej na skutek efektu chemicznego). Teoretyczne wartości przesunięć energetycznych przedstawione zostały w tabeli 1.3. W tabeli 1.3 symbol M^4 reprezentuje w pełni zjonizowaną powłokę M. Taka konfiguracja występuje w modelu relaksacyjnym niskotemperaturowej plazmy zaproponowanym przez Lankina [9]. Konfiguracja M^0 odpowiada “stanowi podstawowemu” $3s^2 3p^2$ (free-atomic valence configuration). Wyniki obliczeń prezentowane w ostatniej kolumnie oznaczone symbolem M^{chem} uwzględniają zmiany frakcji ładunkowej powłoki walencyjnej wynikające z efektu chemicznego. Należy tutaj podkreślić, że efekty chemiczne przejawiają się w zupełnie różny sposób dla nisko i wysoko zjonizowanych atomów krzemu znajdujących się w otoczeniu atomów tlenu.

Tabela 1.3: Teoretyczne przesunięcia energetyczne linii satelitarnych $K\alpha L^N$ w stosunku do linii diagramowej $K\alpha L^0$ (eV) dla różnych konfiguracji walencyjnych.

Typ przejścia	Konfiguracja walencyjna		
	M^4	M^0	M^{chem}
$K\alpha L^1$	16.8	11.9	10.2
$K\alpha L^2$	32.0	25.4	23.0
$K\alpha L^3$	48.8	40.4	37.3
$K\alpha L^4$	67.4	57.1	51.1
$K\alpha L^5$	88.0	75.8	68.0

W przypadku atomów Si z jedną dziurą na powłoce K efekt chemiczny zmniejsza liczbę elektronów walencyjnych poprzez przeniesienie ich do sąsiadujących atomów tlenu (wiązanie chemiczne). “Chemiczna jonizacja” zwiększa energię przejść diagramowych $K\alpha L^0$. Z powodu bezpośredniego związku między efektywnym ładunkiem walencyjnym i przesunięciem energetycznym jest ona określona przez elektroujemność sąsiadujących atomów [37]. Im wyższa elektroujemność tym większe przesunięcie energetyczne w stronę wyższych energii.

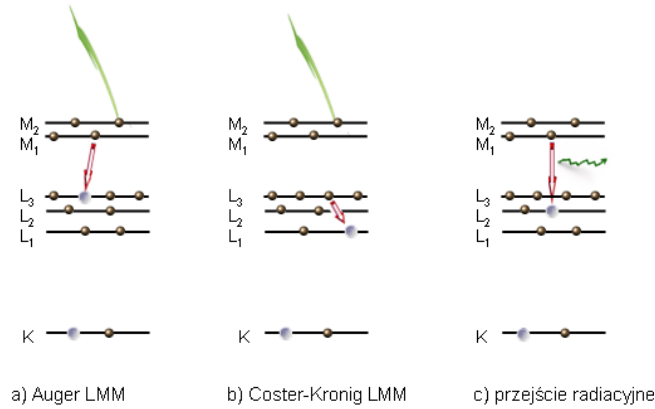
W przypadku związku SiO_2 atom krzemu gubi ~ 1.4 elektronów, które są przenoszone do sąsiadujących atomów tlenu [40]. Wynik ten został zaczerpnięty dla potrzeb rachunków energii przejść $K\alpha L^0$. Jako konfiguracji początkowej użyto liniowej kombinacji konfiguracji powłoki walencyjnej: $3s^1 3p^2$, $3s^2 3p^1$ i $3s^1 3p^1$ [53]. Przesunięcie chemiczne linii $K\alpha L^0$ w stosunku do czystego atomu krzemu wynosi: $\Delta E_{chem}=0.66$ eV ($E_{chem}(K\alpha L^0)=1741.07$ eV, co jest zgodne z wartościami otrzymanymi przez Zhenlina Liu (0.62 ± 0.01 eV) [37] oraz z wartościami uzyskanymi w eksperymencie, który na potrzeby niniejszej pracy został przeprowadzony w Instytucie Fizyki Uniwersytetu we Fribourgu (0.66 ± 0.01 eV).

Opis efektywnego ładunku walencyjnego przedstawiony powyżej jest prawdziwy jedynie dla stanów niskozjonizowanych i załamuje się w przypadku stanów wysoko zjonizowanych stanowiących początkową konfigurację dla przejść satelitarnych $K\alpha L^N$. Po wytworzeniu wielu dziur w powłoce L atomu krzemu, elektrony walencyjne związku SiO_2 , które początkowo są rozmieszczone w pobliżu elektroujemnych ligandów tlenu, są natychmiast przegrupowywane w stronę dodatnio naładowanego jądra atomu krzemu [12]. Przegrupowanie to powoduje wzbogacenie powłoki walencyjnej wysoko zjonizowanego atomu krzemu. Dlatego, w przeciwieństwie do stanów nisko zjonizowanych, efekt chemiczny redukuje energię przejść satelitarnych $K\alpha L^N$ wyższych rzędów powodując negatywne przesunięcie chemiczne. Efekt ten w dużej mierze zależy od liczby dziur w powłoce L. W celu uwzględnienia tego efektu w sposób ilościowy, obliczono przesunięcia energii dla różnych konfiguracji powłoki walencyjnej: $3s^2 3p^4$ dla przejść $K\alpha L^{1,2,3}$ i $3s^2 3p^6$ dla przejść $K\alpha L^{4,5}$.

Wpływ wzbogacania chemicznego konkuruje z innymi procesami, które również mogą modyfikować strukturę powłoki walencyjnej np. ze względu na gęstą nanoplazmę [9, 10, 11]. Dlatego szczegółowa analiza przesunięć energetycznych linii satelitarnych przynosi unikalne informacje na temat konfiguracji powłoki walencyjnej, co ma zasadnicze znaczenie nie tylko dla określenia intensywności przegrupowań, ale także dla badania tworzenia plazmy wzdłuż toru jonu przechodzącego przez materię skondensowaną.

1.4.3. Procesy przegrupowania

Analiza intensywności linii satelitarnych widma promieniowania rentgenowskiego pozwala na wyznaczenie pierwotnego rozkładu stanów KL^N wytworzonych w zderzeniu. Intensywności linii satelitarnych $K\alpha L^N$ obserwowane w zmierzonym widmie odzwierciedlają rozkład dziur w powłoce L w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego. W celu otrzymania pierwotnej konfiguracji dziur L (rozkład dziur L w momencie zderzenia) w analizach uwzględniono wszystkie procesy przegrupowań, które zachodzą między zderzeniem a wypromieniowaniem kwantu X, zmieniając liczbę dziur. Dominującymi procesami bezradiacyjnymi dla atomów o niskim Z są przejścia Augera, które zniekształcają obserwowane widmo promieniowania rentgenowskiego wskutek modyfikacji liczby dziur. Natomiast procesy Coster-Kroniga nie modyfikują liczby dziur L, ale mogą powodować ich redystrybucję między podpowłokami powłoki L.



Rysunek 1.18: Schemat przejść zmieniających rozkład dziur w powłoce L.

Prawdopodobieństwo, że dziura na powłoce L zostanie zapełniona przed emisją kwantu X dany jest wzorem:

$$R = \frac{\Gamma_{L_i}(1 - \sum_{i < j} f_{ij})}{\Gamma_K + \Gamma_{L_i}}, \quad (1.25)$$

gdzie f_{ij} jest współczynnikiem Coster-Kroniga, $\Gamma_K = \Gamma^R + \Gamma^A$ i $\Gamma_{L_i} = \Gamma_{L_i}^A + \Gamma_{L_i}^R + \Gamma_{L_i}^{CK}$ są całkowitymi szerokościami stanów atomowych K i L (Γ^R i Γ^A oznaczają szerokości przejść radiacyjnych i Augera, $\Gamma_{L_i}^A$, $\Gamma_{L_i}^R$, $\Gamma_{L_i}^{CK}$ reprezentują szerokości przejść Augera, radiacyjnych i Coster-Kroniga). Całkowity współczynnik przegrupowania R, dany jest przez sumę ważoną współczynników R_i dla poszczególnych podpowłok:

$$R = \sum_{i=1}^3 w_i R_i, \quad (1.26)$$

gdzie w_i są wagami zależnymi od prawdopodobieństwa jonizacji podpowłok L. Zakładając, że prawdopodobieństwa jonizacji podpowłok 2s i 2p, dla parametru zderzenia

$b=6000$ fm, są równe (w rzeczywistości wartości te są różne: $p_{2s} = 0.44$, $p_{2p} = 0.42$) współczynniki $w_{1,2} = 1/4$ i $w_3 = 1/2$ stosownie do liczby elektronów na danej powłoce L. Biorąc pod uwagę przejścia redukujące liczbę dziur (przejścia Augera LMM i przejścia radiacyjne $M \rightarrow L$) prawdopodobieństwo przegrupowania (wzór 1.25) można zapisać w postaci:

$$R_i = \frac{\Gamma_{L_i}^A + \Gamma_{L_i}^R}{\Gamma_K + \Gamma_{L_i}}. \quad (1.27)$$

W przypadku atomu krzemu każda dziura z powłoki L_1 jest natychmiast przenoszona do powłoki L_2 lub L_3 poprzez proces Coster-Kroniga. Dlatego wzór 1.27 można zredukować do formy:

$$R \approx R_{23} = \frac{\Gamma_{L_{23}}^A + \Gamma_{L_{23}}^R}{\Gamma_K + \Gamma_{L_{23}}}. \quad (1.28)$$

W obliczeniach dla atomów jednokrotnie zjonizowanych wartości szerokości dla przejść radiacyjnych i Augera zaczerpnięto dla $\Gamma_{K\alpha}^R$ z pracy [76], dla Γ_{KLL}^A , Γ_{KLM}^A z pracy [77], dla Γ_{KMM}^A z pracy [78]. W przypadku powłok L_{23} szerokości przejść radiacyjnych $M \rightarrow L_{23}$ i Augera LMM zaczerpnięto z pracy [27].

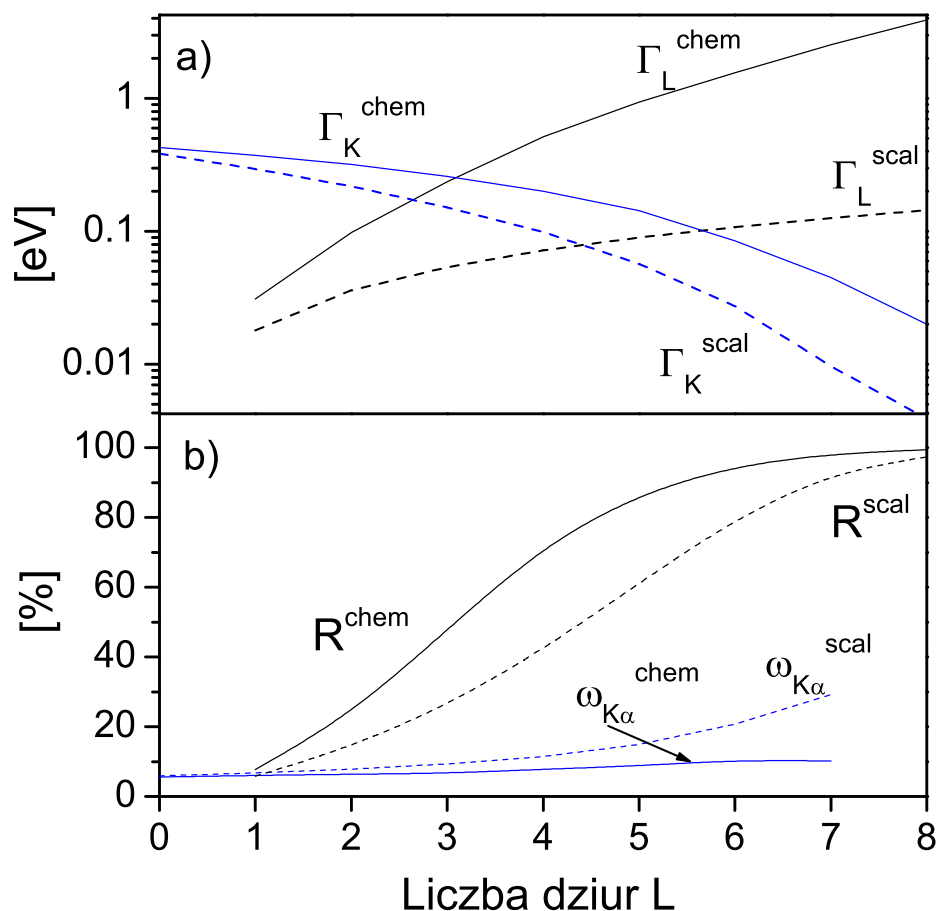
Prezentowane powyżej oszacowanie współczynnika przegrupowania może być stosowane jedynie dla atomów jednokrotnie zjonizowanych w powłoce L. W przypadku atomów wielokrotnie zjonizowanych należy wziąć pod uwagę zmiany szerokości pojawiające się w równaniu 1.28. Zmiany szerokości przejść przegrupowujących zachodzących w czasie między zderzeniem jon-atom a emisją fotonu silnie zależą od walencyjnej frakcji ładunkowej atomu krzemu. Frakcja ta powstaje na skutek jonizacji powłoki M. Powłoka walencyjna jest wrażliwa na środowisko chemiczne i dlatego silnie oddziałuje z ligandami. W związkach chemicznych stan walencyjny atomu ma istotny wpływ na parametry widma, takie jak względna intensywność linii, czy też położenie pików. W przypadku zmiany ładunku redukowana jest ekranowanie ładunku jądra, w związku z czym ulegają zmianie energie wiązania elektronów na zewnętrznych powłokach atomowych. Aby znaleźć fizyczny mechanizm zmian w widmie promieniowania serii K należy wziąć pod uwagę niektóre podstawowe sytuacje: 1. przeniesienie elektronów walencyjnych z jednego atomu do drugiego; 2. przegrupowania elektronów walencyjnych. Mamy zatem do czynienia ze zmianami w gęstości elektronowej. Wzrost gęstości ładunku walencyjnego powinien powodować zwiększenie ekranowania elektronów walencyjnych. Gdy zwiększa się ekranowanie, zmniejsza się energia wiązania elektronów walencyjnych. Spadek energii wiązania elektronów walencyjnych nie wpływa znacząco na czas życia dziury na powłoce L. Skrócenie czasu życia dziury na powłoce L jest spowodowane głównie przez wzrost liczby elektronów na powłoce M. Z tego też powodu prawdopodobieństwa przejść Augera LMM są znacznie zwiększone. Ponadto na dziurową konfigurację walencyjną mogą mieć wpływ struktury niskotemperaturowej plazmy pojawiające się lokalnie w wyniku grzania tarczy.

Obliczone przy użyciu modelu lokalnego potencjału [12] współczynniki przegrupowania dla różnych konfiguracji walencyjnych przedstawione zostały w tabeli 1.4. Dla porównania przedstawiono również współczynniki przegrupowania policzone w oparciu o statystyczną metodę skalowania. W procedurze tej założono, że szerokości stanów skalują się w sposób statystyczny (są proporcjonalne do liczby elektronów dostępnych do przejścia radiacyjnego bądź bezradiacyjnego) [79, 80]: $\Gamma^R \propto \nu_p$, $\Gamma^A \propto \nu_a(\nu_a - 1)$, gdzie ν_p jest liczbą elektronów mogących brać udział w przejściu radiacyjnym, ν_a jest liczbą elektronów mogących brać udział w przejściu Augera np. $\Gamma_{KLL}^A \propto \nu_L(\nu_L - 1)$. Graficzne zestawienie współczynnika przegrupowania i współczynnika fluorescencji oraz szerokości otrzymanych przy użyciu procedury skalowania oraz szerokości oszacowanych przy użyciu procedury uwzględniającej efekty chemiczne przedstawiono na rysunku 1.19.

Tabela 1.4: Teoretyczne wartości współczynników przegrupowania R_N dla stanów KL^N atomu krzemu Si w różnych konfiguracjach walencyjnych (M^4 , M^0 , M^{chem}). M^{scal} obliczony metodą skalowania. Wartości współczynników przegrupowania dla konfiguracji M^0 , M^{chem} zaczerpnięto z pracy [12].

Współczynnik przegrupowania	Konfiguracja walencyjna			
	M^4	M^0	M^{chem}	M^{scal}
R_1	-	6.2	7.7	5.7
R_2	-	14.3	23.5	14.2
R_3	-	26.2	47.8	26.2
R_4	-	43.3	72.0	42.2
R_5	-	60.2	86.9	61.2
R_6	-	78.8	94.8	79.7
R_7	-	92.2	98.3	92.8
R_8	-	98.6	99.5	97.3

Dla całkowicie zjonizowanej powłoki walencyjnej (M^4) procesy przegrupowania są całkowicie stłumione, ponieważ w powłoce M brak jest elektronów, które mogłyby uczestniczyć w przegrupowaniu. Całkowicie zjonizowana konfiguracja walencyjna odpowiada sytuacji, w której silna jonizacja powłoki M lub/i powstanie struktur nanoplazmowych dominują nad efektami chemicznymi. Współczynniki przegrupowania osiągają największą wartość dla wzbogaconej elektronowej frakcji walencyjnej spowodowanej efektami chemicznymi. Ta konfiguracja odpowiada procesowi, w której wzbogacenie powłoki walencyjnej przewyższa wszystkie procesy, które mogą reduko-



Rysunek 1.19: (a) Szerokości naturalne K i szerokości przejść Augera LMM, (b) współczynniki fluorescencji $\omega_{K\alpha}$ oraz współczynniki przegrupowania dla stanów KL^N atom krzemu otrzymane przy użyciu metody skalowania (linie kreskowane) oraz przy użyciu metody zawierającej obliczenia efektu chemicznego (linie ciągłe) zaczerpnięte z [12].

wać liczbę elektronów w powłoce M. Znacząco mniejsze współczynniki przegrupowania otrzymane dla zapelnionej powłoki M (M^0) mogą równoważyć procesy wzbogacania powłoki M z procesami odpowiadającymi za redukcję liczby elektronów w powłoce M. W tabeli można również zobaczyć, że wartości współczynników przegrupowania policzonych metodą skalowania są bliskie wartościom otrzymanym przez Hartmanna dla konfiguracji M^0 „pojedynczego” atomu [12].

Znając intensywności linii satelitarnych i wartości współczynników przegrupowania wyznaczyć można rozkład dziur L w momencie zderzenia jon-atom. Intensywności X^N diagramowych i satelitarnych przejść $K\alpha L^N$ obserwowanych w eksperymencie związane są z pierwotnym rozkładem I^N następującymi relacjami:

$$X^0 = (I^0 + R_1 I^1 + R_1 R_2 I^2 + \dots + R_1 R_2 \dots R_8 I^8) \omega_{K\alpha}^0 \quad (1.29a)$$

$$X^1 = (I^1 + R_2 I^2 + \dots + R_2 \dots R_8 I^8) (1 - R_1) \omega_{K\alpha}^1 \quad (1.29b)$$

$$X^N = (I^N + R_{N+1} I^{N+1} + \dots + R_{N+1} \dots R_8 I^8) (1 - R_N) \omega_{K\alpha}^N \quad (1.29c)$$

$$X^7 = (I^7 + R_8 I^8) (1 - R_7) \omega_{K\alpha}^7 \quad (1.29d)$$

$$X^8 = I^8 (1 - R_8) \omega_{K\alpha}^8, \quad (1.29e)$$

gdzie $R_1, \dots, R_{N+7}$ są prawdopodobieństwami przegrupowania elektronu dla danej konfiguracji dziur w powłoce L, $\omega_{K\alpha}^N$ reprezentuje współczynnik fluorescencji przejścia $K\alpha$ z N dodatkowymi dziurami w powłoce L:

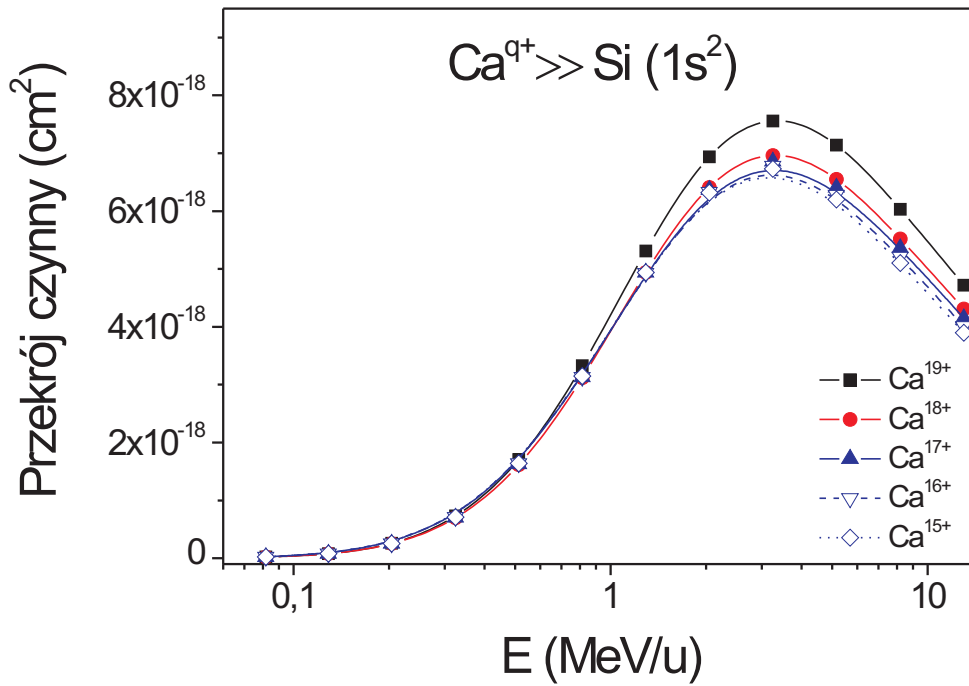
$$\omega_{K\alpha}^N = \frac{\Gamma_{K\alpha}^R(L^N)}{\Gamma_{K\alpha}^R(L^N) + \Gamma_{K\beta}^R(L^N) + \Gamma_K^A(L^N)}, \quad (1.30)$$

gdzie $\Gamma_{K\alpha}^R(L^N)$ i $\Gamma_{K\beta}^R(L^N)$ są szerokościami przejść radiacyjnych $K\alpha$ i $K\beta$, natomiast szerokość $\Gamma_K^A(L^N)$ odpowiada przejściom Augera K w obecności N dziur w powłoce L.

1.4.4. Prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L

Obserwowany rozkład linii satelitarnych promieniowania rentgenowskiego odzwierciedla rozkład stanów KL^N w momencie emisji fotonu. Intensywność promieniowania serii K silnie zależy od produkcji dziur w wewnętrznych powłokach atomowych. Przekrój czynny na produkcję dziury w powłoce K atomu krzemu bombardowanego przez jony wapnia zależy zarówno od energii jonu jak i jego stanu ładunkowego (rysunek 1.20). Przekroje czynne na jonizację otrzymano z obliczeń przy użyciu kodu LOSS [81], bazującego na nierelatywistycznym przybliżeniu Borna, przy założeniu, że względna prędkość v oddziałujących cząstek jest dość wysoka: $v > 2.2 \times 10^8$ cm/s, tak że jądro i elektrony tarczy są traktowane jakby były w spoczynku. Ponadto kod LOSS uwzględnia strukturę atomową tarczy. Otrzymane wartości przekrojów czynnych są względnie duże dla energii od 2 do 10 MeV/u i zmieniają się od 5×10^{-18} do 7×10^{-18} cm². Przy niższych wartościach energii jonów wapnia produkcja dziur w powłoce K atomu krzemu jest na tyle niska, że obserwacja widm rentgenowskich serii K jest praktycznie niemożliwa.

Wartości przekroju czynnego na jonizację powłoki K atomu krzemu przez jony wapnia pozwalają oszacować średnią drogę swobodną jonów wapnia w ośrodku hamującym: $l_K = 1/\sigma_K n_a$ gdzie σ_K jest przekrojem czynnym na jonizację



Rysunek 1.20: Zależność przekroju czynnego na jonizację atomu krzemu od energii jonów wapnia.

powłoki K (w cm^2), n_a jest gęstością atomów tarczy (w cm^{-3}). Z porównania średniej drogi swobodnej $l_K \sim 20\text{-}40$ nm z odległościami między atomami Si w kwarcu (0.23- 0.3 nm) można oszacować iż co setny atom ulega jonizacji K. Produkcji dziury w powłoce K w pojedynczym zderzeniu może towarzyszyć jonizacja powłok L i M. W ten sposób atom może osiągnąć wysoki stopień jonizacji. Podobne oszacowania dla powłok L i M ($l_L \sim 2\text{-}6$ nm i $l_M \sim 0.2\text{-}0.5$ nm) wskazują, że wokół trajektorii jonu co dziesiąty atom jest jonizowany na powłoce L i prawie każdy atom krzemu jest jonizowany na powłoce M. Prowadzi to do silnie niejednorodnego rozkładu stopnia jonizacji ośrodka hamującego wzdłuż trajektorii jonu bezpośrednio po zderzeniu jon-atom i w konsekwencji do skomplikowanej struktury widma promieniowania rentgenowskiego tarczy.

Zgodnie z wyliczeniami Monte-Carlo ok. 60% zjonizowanych elektronów tarczy krzemowej bombardowanej przez jony wapnia w początkowej fazie hamowania jonu (11.4 MeV/u) ma energię w zakresie 10 - 100 eV [82]. Elektrony te pozostają w granicach ścieżki jonu (track core) w wyniku silnego potencjału kulombowskiego wytwarzanego przez zjonizowane atomy. Pozostałe elektrony uciekają z obszaru oddziaływania i powodują jonizację atomów odległych od ścieżki jonu, co można zaobserwować w widmie promieniowania rentgenowskiego jako wzmocnienie linii diagramowej $K\alpha$.

Stopień jonizacji ścieżki jonu oraz liczba wolnych i szybkich elektronów determinuje procesy zachodzące w granicach ścieżki jonu. Jeśli ścieżka jonu jest silnie zjonizowana i nie zachodzi neutralizacja rdzenia, odpychanie silnie zjonizowanych atomów prowadzi do eksplozji kulombowskiej i zniszczenia struktury wokół ścieżki jonu [83, 84]. Jeżeli jednak jonizacja jest słaba, może dojść do szybkiej neutralizacji rdzenia wskutek powrotu zjonizowanych swobodnych elektronów. Stopień jonizacji atomów krzemu ścieżki wzdłuż toru ruchu jonu można określić za pomocą modelu statystycznego.

Jonizacja powłoki K atomu tarczy zachodzi dla trajektorii pocisku z parametrem zderzenia mniejszym niż średni promień powłoki K. Zderzenia prowadzące do produkcji dziury w powłoce K można traktować jako centralne w skali całego atomu. W przypadku bezpośredniej jonizacji zachodzącej w zderzeniach około-centralnych elektrony z powłoki L są wybijane z atomu głównie w sposób niezależny. Zakładając, że prawdopodobieństwo wybicia elektronu z różnych podpowłok powłoki L jest takie samo, należy oczekiwać, że rozkład dziur L jest rozkładem dwumianowym, a zatem przekrój czynny na wytworzenie stanu KL^N w zderzeniu z parametrem zderzenia b dany jest wzorem :

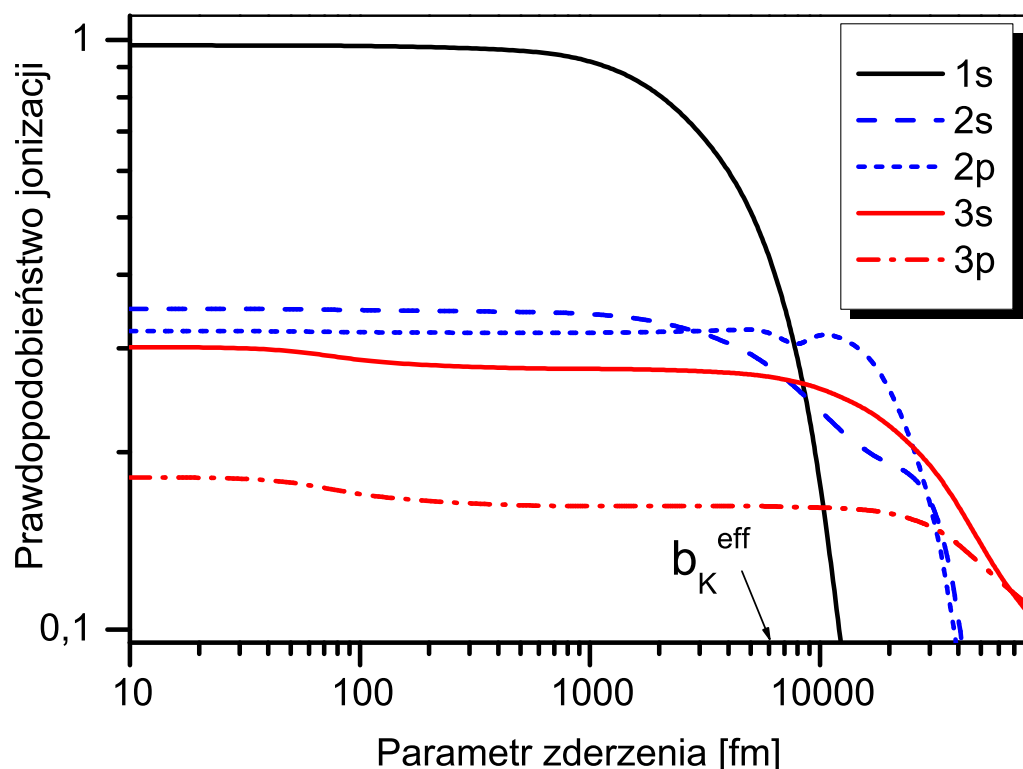
$$\sigma_{KL^N} = 2\pi \int_0^\infty 2p_K(b)(1 - p_K(b)) \times \left(\begin{matrix} 8 \\ N \end{matrix} \right) p_L^N(b)[1 - p_L(b)]^{8-N} b db, \quad (1.31)$$

gdzie p_K i p_L jest prawdopodobieństwem jonizacji powłoki K i L na elektron. Zależność prawdopodobieństwa jonizacji powłoki 1s oraz podpowłok 2s, 2p i 3s, 3p obliczonych przy użyciu modelu SCA-HYD (teoria SCA z wodoropodobnymi funkcjami falowymi) w module SA (separated atom) przedstawia rysunek 1.21. Ponieważ prawdopodobieństwo jonizacji p_L jest stałe dla szerokiego zakresu wartości parametru zderzenia rozkład stanów KL^N można opisać rozkładem dwumianowym, w którym p_L jest scharakteryzowane przez jeden parametr $b^{eff} = 6000$ fm, przy którym $b \times p_K(b)$ osiąga maksimum. W związku z tym dla niskich parametrów zderzenia ($0 \leq b \leq b^{eff}$) równanie 1.31 można uprościć do postaci:

$$\sigma_{KL^N} = \left(\begin{matrix} 8 \\ N \end{matrix} \right) p_L^N(b^{eff})[1 - p_L(b^{eff})]^{8-N} \times \sigma_K, \quad (1.32)$$

gdzie σ_K jest przekrojem czynnym na produkcję dziury w powłoce K.

Rozkład stanów KL^N można opisać rozkładem dwumianowym z jednym parametrem p_L tylko wtedy, gdy zanedbywalnie małe jest prawdopodobieństwo produkcji dziury poprzez proces wychwytu elektronu atomu tarczy do wolnych stanów związanych pocisku. Wkład wychwytu elektronu jest zanedbywalny gdy $Z_P \ll Z_T$ a istotną rolę zaczyna odgrywać, gdy $Z_P \geq Z_T$ i $v_P \approx v_e$. Proces wychwytu elektronu będzie powodował inny rozkład dziur L. Dlatego dwumianowy rozkład stanów KL^N powinien



Rysunek 1.21: Teoretyczna zależność prawdopodobieństwa jonizacji powłoki K oraz podpowłok L i M atomu krzemu przez jony wapnia o energii 11 MeV/u.

uwzględniać proces wychwytu elektronu i musi zostać zmodyfikowany [79, 25]. Przekrój czynny na produkcję dziury w powłoce L wytworzonej przez wychwyt elektronu z atomu krzemu do stanów związanych jonów wapnia (przy różnych energiach jonu), przedstawiony w tabeli 1.5, obliczono za pomocą nierelatywistycznej teorii eikonalnej [85]. Zakładając, że w zderzeniu centralnym stosunek prawdopodobieństwa wychwytu elektronu do prawdopodobieństwa jonizacji wprost są proporcjonalne do przekrojów czynnych na te procesy, można oszacować prawdopodobieństwo wychwytu elektronu dla niskich wartości parametrów zderzenia.

Wyniki z tabeli 1.5 wskazują, że wychwyt elektronu z powłoki L atomu krzemu do powłoki K jonu wapnia jest procesem bardzo słabym w porównaniu z bezpośrednią jonizacją powłoki L (więcej niż trzy rzędy wielkości) i nie odgrywa istotnej roli w procesie produkcji dziur L. Ponadto fakt, że stany ładunkowe jonów wapnia zderzających się z tarczą aerożelową SiO₂ są zdominowane przez jony Ca¹⁸⁺ (44.7%) i Ca¹⁷⁺ (28%) [7], a co za tym idzie brak jest wolnych stanów związanych powłoki K pocisku, wychwyt elektronu z powłoki L do powłoki K (L-K) staje się praktycznie niemożliwy.

Tabela 1.5: Teoretyczne przekroje czynne na wychwyt elektronu z powłoki L (teoria eikonalna) i bezpośredniej jonizacji (SCA) atomu krzemu przez całkowicie obdarte z elektronów jony wapnia [cm²].

Energia	$\sigma_{L \rightarrow K}^{EC}$	$\sigma_{L \rightarrow L,M}^{EC}$	σ_L^{DI}
~ 11 MeV/u	8.1×10^{-20}	2.0×10^{-19}	2.9×10^{-17}
~ 8 MeV/u	7.1×10^{-21}	7.7×10^{-19}	4.1×10^{-17}
~ 5 MeV/u	4.6×10^{-21}	6.6×10^{-18}	6.5×10^{-17}

Dlatego w obliczeniach uwzględniono jedynie wychwyt elektronu L-L i L-M:

$$p_L^{EC} \approx p_{L \rightarrow L}^{EC} + p_{L \rightarrow M}^{EC}. \quad (1.33)$$

Zakładając, że dziury w powłoce L mogą być produkowane niezależnie w procesie bezpośredniej jonizacji lub/i w procesie wychwytu elektronu, obydwie części rozkładów dziur L związanych z jonizacją wprost i z wychwytem elektronu, mogą być opisane przez rozkład dwumianowy. Rozkład dziur wytworzonych w wyniku bezpośredniej jonizacji powłoki L, w wyniku której usuwane jest n elektronów z l dostępnych:

$$P_{(n,l)}^{DI} = \binom{l}{n} \times (p_L^{DI})^n \times (1 - p_L^{DI})^{l-n}, \quad (1.34)$$

gdzie p_L^{DI} jest prawdopodobieństwem bezpośredniej jonizacji (na elektron). Adekwatnie, względna jonizacja powłoki L, w wyniku której atom traci n' elektronów z l' dostępnych na powłoce L wynikająca wychwytu elektronu L-L i L-M wynosi:

$$P_{(n',l')}^{EC} = \binom{l'}{n'} \times (p_L^{EC})^{n'} \times (1 - p_L^{EC})^{l'-n'}, \quad (1.35)$$

gdzie p_L^{EC} jest prawdopodobieństwem wychwytu elektronu (na elektron).

Zakładając, że populacja dziur L powstaje w wyniku dwóch nieskorelowanych procesów, prawdopodobieństwo wytworzenia N dziur w powłoce L w zderzeniu jon-atom dla danego parametru zderzenia b , może być zapisana w modelu dwukrokowym (bezpośrednia jonizacja poprzedzona wychwytem i odwrotnie):

$$\begin{aligned}
P_L^N = & \frac{1}{2} [P_{(0,8)}^{EC} P_{(N,8)}^{DI} + P_{(1,8)}^{EC} P_{(N-1,7)}^{DI} + P_{(2,8)}^{EC} P_{(N-2,6)}^{DI} \\
& + P_{(3,8)}^{EC} P_{(N-3,5)}^{DI} + \dots + P_{(N,8)}^{EC} P_{(0,8-N)}^{DI}] \\
& + \frac{1}{2} [P_{(0,8)}^{DI} P_{(N,8)}^{EC} + P_{(1,8)}^{DI} P_{(N-1,7)}^{EC} + P_{(2,8)}^{DI} P_{(N-2,6)}^{EC} \\
& + P_{(3,8)}^{DI} P_{(N-3,5)}^{EC} + \dots + P_{(N,8)}^{DI} P_{(0,8-N)}^{EC}],
\end{aligned} \tag{1.36}$$

gdzie $P_{(n,l)}^{DI}$ i $P_{(n',l')}^{EC}$ są rozkładami populacji dziur L otrzymanymi z rozkładów dwumianowych, natomiast $N = n + n'$ jest całkowitą liczbą dziur wytworzonych w powłoce L w wyniku procesów bezpośredniej jonizacji i wychwytu elektronu. Wyrażenie $P_L^{EC}(0, 8)P_L^{DI}(N, 8)$ oznacza, że żaden z 8 dostępnych elektronów nie został wychwycony przez pocisk, w związku z tym N elektronów z 8 zostało zjonizowanych w procesie bezpośredniej jonizacji kulombowskiej. Wyrażenie $P_L^{EC}(1, 8)P_L^{DI}(N - 1, 7)$ oznacza, że jeden elektron z 8 dostępnych został wychwycony do wolnych stanów związanych pocisku w związku z tym na powłoce L zostało dostępnych 7 elektronów, z których $(N - 1)$ zostało zjonizowanych w procesie bezpośredniej jonizacji kulombowskiej. Wyrażenie $P_L^{DI}(N, 8)P_L^{EC}(0, 8 - N)$ oznacza, że N elektronów zostało zjonizowanych, w związku z tym 0 elektronów zostało wychwyconych z $(8 - N)$ dostępnych itd.

Przy pomocy tego modelu oraz używając procedury dopasowania otrzymać można pierwotne rozkłady stanów KL^N . W celu otrzymania jednoznacznych wyników z procedury dopasowania, tylko jeden parametr może pozostać swobodny. Ponieważ dla rozważanych energii pocisku bezpośrednia jonizacja dominuje nad wychwytem elektronu z powłoki L, ustalone zostało prawdopodobieństwo wychwytu elektronu, natomiast prawdopodobieństwo jonizacji pozostało parametrem swobodnym. W ten sposób otrzymano pierwotne rozkłady stanów KL^N i prawdopodobieństwa jonizacji dla wszystkich faz procesu hamowania jonu wapnia w tarczy aerożelowej SiO_2 .

1.5. Wyniki i dyskusja

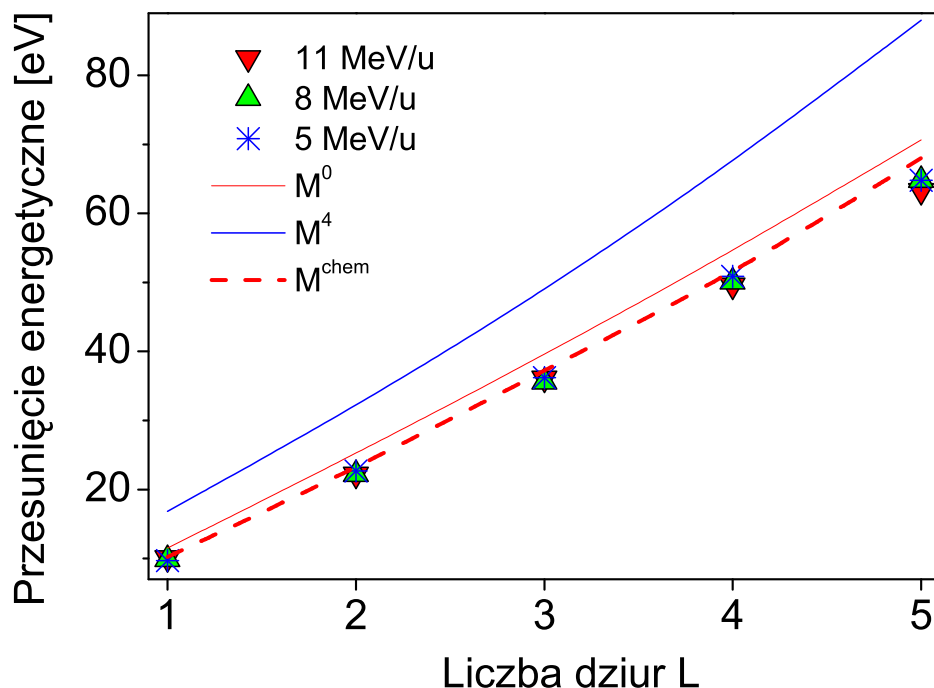
1.5.1. Przesunięcia energetyczne linii satelitarnych

Otrzymane w wyniku analiz przesunięcia energetyczne linii satelitarnych $K\alpha L^N$ (w stosunku do linii diagramowej $K\alpha L^0$) w trzech fazach hamowania jonów wapnia w tarczy aerożelowej SiO_2 pokazano na rysunku 1.22 (wczesna - $E_1 = 11.4\text{-}10.6$ MeV/u, średnia - $E_2 = 8.5\text{-}7.6$ MeV/u i końcowa - $E_3 = 5.2\text{-}4.0$ MeV/u). Wartości eksperymentalne porównano z obliczeniami teoretycznymi. Rozważano trzy modele teoretyczne: M^4 - odpowiada silnej jonizacji powłoki M (niebieska linia), M^0 - symbolizuje konfigurację dla atomu krzemu w stanie podstawowym $3s^23p^2$ (czerwona linia) i M^{chem} - konfiguracja uwzględniająca chemiczne otoczenie atomu krzemu. Wartości liczbowe przesunięć energetycznych mierzonych w różnych fazach hamowania jonów w aerożelowej tarczy SiO_2 podano w tabeli 1.6, natomiast wartości teoretyczne podano w rozdziale 1.2.3 w tabeli 1.3. Wartości przesunięć energetycznych obliczonych przy użyciu MCDF dla całkowicie zjonizowanej powłoki M są wyższe niż wartości eksperymentalne. Również rachunki dla konfiguracji M^0 ($3s^23p^2$) przeszacowują dane eksperymentalne. Rozbieżność między wartościami eksperymentalnymi a teoretycznymi dla M^4 rośnie wraz ze wzrostem stopnia jonizacji powłoki L.

Tabela 1.6: Średnie przesunięcia energetyczne linii satelitarnych $K\alpha L^N$ mierzone dla trzech różnych faz hamowania jonu (w eV).

Typ przejścia	Faza hamowania jonu		
	wczesna	średnia	końcowa
$K\alpha L^1$	10.1 ± 1.1	9.9 ± 0.9	9.7 ± 1.0
$K\alpha L^2$	22.2 ± 1.2	22.2 ± 0.8	22.7 ± 0.9
$K\alpha L^3$	36.1 ± 1.0	35.6 ± 0.9	36.2 ± 1.0
$K\alpha L^4$	49.6 ± 1.0	50.1 ± 1.0	50.9 ± 1.2
$K\alpha L^5$	63.3 ± 1.2	64.8 ± 1.2	64.8 ± 1.6

Obliczenia teoretyczne dla konfiguracji M^4 bardzo źle opisują dane eksperymentalne. Wyklucza to zatem powstawanie nanostruktur plazmowych. Rachunki dla M^0 poprawiają wynik, jednak nadal nie odzwierciedlają wartości eksperymentalnych. Obserwowane niezgodności między eksperymentem a obliczeniami dla konfiguracji M^4 i M^0 można wytłumaczyć tym, że w obliczeniach teoretycznych dla tych konfiguracji nie uwzględniono wpływu chemicznego otoczenia atomu krzemu.



Rysunek 1.22: Porównanie przesunięć energetycznych linii satelitarnych $K\alpha L^N$ otrzymanych dla trzech różnych energii pocisku $\sim 11 \text{ MeV/u}$, $\sim 8 \text{ MeV/u}$ i $\sim 5 \text{ MeV/u}$ z obliczeniami MCDF otrzymanymi dla różnych konfiguracji walencyjnych. Niebieska linia odzwierciedla obliczenia zapelnionej powłoki M (M^0), dla całkowicie zjonizowanej powłoki M (M^4), a czerwona, przerywana linia odpowiada chemicznie wzbogaconej konfiguracji walencyjnej (M^{chem}).

Rachunki teoretyczne uwzględniające wzbogacenie powłoki walencyjnej redukują wartości przesunięć energetycznych linii satelitarnych $K\alpha L^N$, co wyraźnie widać na rysunku 1.22 (kreskowana czerwona linia). Zgodność tych obliczeń z wynikami eksperymentalnymi wskazuje, że we wszystkich rozważanych fazach hamowania jonu powłoka walencyjna atomu krzemu w momencie przejścia rentgenowskiego serii K jest silnie wzbogacona przez elektrony. Elektrony te pochodzą z sąsiednich atomów tlenu. Zredukowane przesunięcia energetyczne świadczą, że ubytek elektronów powłoki M powodowany przez jonizację i procesy przegrupowania jest kompensowany przez napływ elektronów z powłoki walencyjnej związku SiO_2 .

W ostatniej fazie hamowania jonu wzrasta prawdopodobieństwo jonizacji powłoki walencyjnej. Większa jonizacja powłoki M atomu krzemu powinna powodować wzrost wartości przesunięć energetycznych linii satelitarnych $K\alpha L^N$. Można jednak zauważyć, że przesunięcia linii satelitarnych przy różnych energiach pocisku różnią się nieznacznie, a zatem walencyjna konfiguracja nie zmienia się z energią pocisku. Spowodowane jest to tym, że wielokrotnie zjonizowany na wewnętrznych powłokach atom krzemu stanowi silne centrum ładunku dodatniego w wieloelektronowym ukła-

dzie SiO_2 z siłami centralnymi silnie przyciągającymi elektrony ze stanów walencyjnych atomów związanych chemicznie z atomem krzemu. Prowadzi to do transformacji stanów walencyjnych krzemu i powstania wzbogaconej powłoki walencyjnej (głównie na podpowłokach $3p$ i $3d$). A zatem niska wartość eksperymentalnych wartości przesunięć energetycznych sugeruje, że powłoka walencyjna atomu krzemu została wzbogacona przez część elektronów przyciągniętych przez dodatnie centrum Si z ligandów tlenu. Widać zatem, że efekt wzbogacenia elektronowego dominuje nad jonizacją zewnętrznymi powłok atomowych we wszystkich fazach hamowania jonu.

1.5.2. Pierwotny rozkład stanów KL^N wytworzonych w zderzeniach

Względne intensywności przejść diagramowych i satelitarnych $K\alpha L^N$ w atomie krzemu indukowane przez hamujące w tarczy aerożelowej SiO_2 jony wapnia (z energią początkową 11.4 MeV/u) przedstawiono w tab. 1.7.

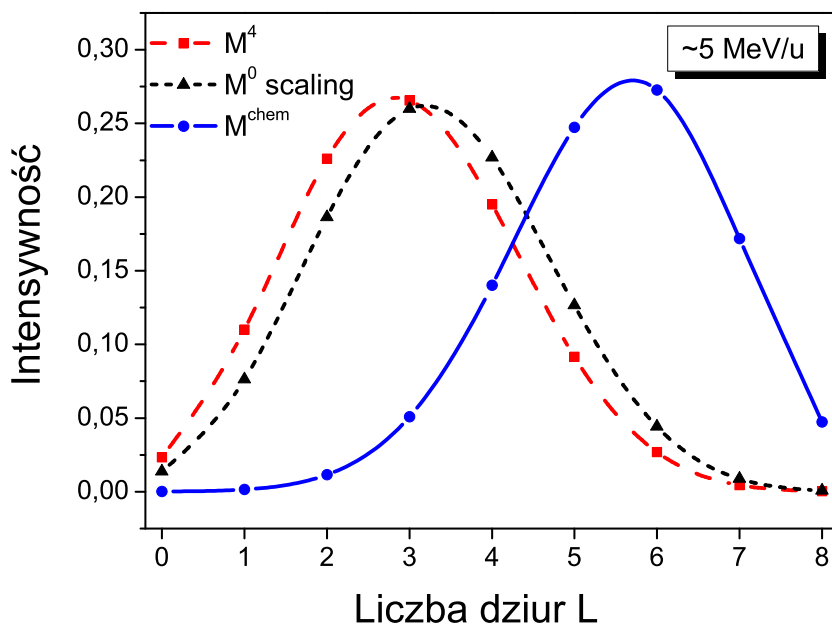
Tabela 1.7: Eksperymentalne intensywności linii diagramowej $K\alpha L^0$ i linii satelitarnych $K\alpha L^N$ mierzonych w różnych fazach procesu hamowania jonu (w %).

Intensywność linii $K\alpha L^N$	Faza hamowania jonu		
	wczesna	średnia	końcowa
X^0	14.1 ± 1.4	13.9 ± 1.4	7.3 ± 0.9
X^1	14.6 ± 1.8	13.9 ± 1.6	7.1 ± 1.0
X^2	25.6 ± 1.6	23.2 ± 1.5	20.3 ± 2.2
X^3	22.0 ± 1.9	24.1 ± 1.9	27.6 ± 2.9
X^4	14.8 ± 2.0	14.5 ± 1.9	20.9 ± 2.3
X^5	6.6 ± 1.8	7.8 ± 1.5	11.8 ± 1.6
X^6	2.2 ± 2.0	2.6 ± 2.0	4.9 ± 1.0

Z intensywności linii satelitarnych SiO_2 obserwowanych w widmie rentgenowskim $K\alpha L^N$ ($N=1,2,\dots,6$) otrzymano pierwotny rozkład dziur w różnych fazach procesu hamowania jonu. Zakładając, że dziury L są produkowane niezależnie w procesie jonizacji bezpośredniej lub/i w procesie wychwytu elektronu, w modelu statystycznym oba procesy odpowiadające za produkcję dziur L mogą być opisane przez rozkład dwumianowy ze swobodnym parametrem prawdopodobieństwa jonizacji i z ustalonym parametrem prawdopodobieństwa wychwytu elektronu. W ten sposób model reprodukuje pierwotny rozkład dziur L i prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L. Swobodny parametr dopasowania w tej procedurze jest średnim prawdopodobieństwem jonizacji

powłoki L na elektron, prawdopodobieństwo wychwytu elektronu jest natomiast oszacowane z teorii eikonalnej. W celu otrzymania pierwotnego rozkładu dziur i wartości prawdopodobieństw jonizacji powłoki L wyłączono z analiz przejścia diagramowe $K\alpha L^0$ ponieważ pojedyncza jonizacja powłoki K ma w znacznej mierze inne pochodzenie (jonizacja wtórna przez fotony i elektrony [75]) niż populacja stanów wielokrotnie zjonizowanych KL^N (jonizacja bezpośrednia w wyniku zderzenia jon-atom).

Na rysunku 1.23, przedstawiono pierwotny rozkład dziur L otrzymany przy różnych założeniach dotyczących konfiguracji walencyjnej. Wyniki te reprezentują rozkłady dla ostatniej fazy procesu hamowania, gdzie występuje najwyższy stopień jonizacji powłoki L jak również oczekiwana jest największa intensywność procesów przegrupowania. Przerywana czerwona linia odpowiada pierwotnemu rozkładowi dziur L otrzymanemu przy założeniu całkowicie zjonizowanej powłoki M. W tym przypadku procesy przegrupowania nie mogą mieć miejsca z powodu braku elektronów w powłoce M.



Rysunek 1.23: Pierwotny rozkład dziur w atomie krzemu indukowany przez jony wapnia w końowej fazie hamowania ($E \sim 5 \text{ MeV/u}$) otrzymany dla różnych konfiguracji walencyjnych. Niebieska linia odzwierciedla rozkład dziur L otrzymany dla wzbogaczonej chemicznie powłoki walencyjnej (M^{chem}), czerwona przerywana linia dla całkowicie zjonizowanej powłoki M (M^4), a czarna przerywana linia odpowiada rozkładowi dziur L przy użyciu procedury skalowania dla zapelnionej powłoki M (M^0).

Procedura statystycznego skalowania procesów przegrupowań pozwala na otrzymanie pierwotnego rozkładu dziur L nieco przesuniętego w stronę wyżej zjonizowanych stanów (czarna kropkowana linia na rysunku 1.23). W tym przypadku konfiguracja powłoki M została przyjęta jako $3s^23p^2$. Takie statystyczne skalowanie nie uwzględnia jednak międzyatomowego przepływu elektronów walencyjnych z ligandów tlenu do zjonizowanego krzemu. Ponieważ frakcja elektronów walencyjnych wysoko zjonizowanego krzemu nie jest uwzględniona w tym przybliżeniu, wysoki stopień jonizacji powłoki L nie może być odtworzony. Na rysunku 1.23 niebieska linia reprezentuje pierwotny rozkład dziur L otrzymany przy użyciu procedury przegrupowań uwzględniający chemiczne otoczenie powłoki walencyjnej (M^{chem}). Po uwzględnieniu poprawek “chemicznych” pierwotny rozkład dziur L przesuwają się mocno w stronę wyżej zjonizowanych stanów KL^N . W ten sposób otrzymuje się wysoki stopień jonizacji powłoki L.

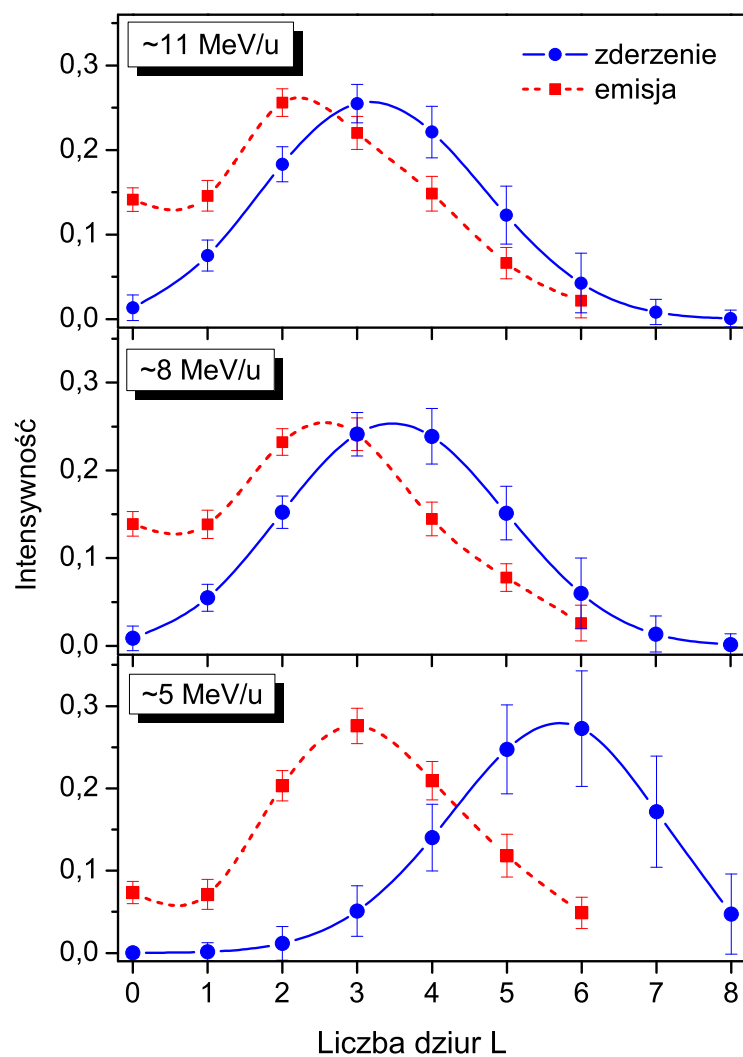
Poprawny wybór procesów przegrupowania rozważanego układu atomowego będącego w danym środowisku chemicznym wymaga precyzyjnej wiedzy o konfiguracji powłoki walencyjnej dla każdego stanu dziurowego KL^N produkowanego w zderzeniu jon-atom. Informacja ta może być wyprowadzona z eksperymentalnych przesunięć energetycznych satelitów $K\alpha L^N$, które zależą od konfiguracji powłoki walencyjnej. Niskie wartości przesunięć energetycznych satelitów $K\alpha L^N$ obserwowane w eksperymencie i dyskutowany szczegółowo w poprzednim rozdziale wskazują wyraźnie, że w przypadku związku SiO_2 powłoka walencyjna krzemu jest znacznie wzbogacana przez dodatkowe elektrony. Dlatego analizując proces przegrupowań chemicznych należy użyć procedury uwzględniającej efekt chemiczny. Dopiero wtedy prawidłowo odtwarza się pierwotny rozkład dziur L.

Wzbogacenie powłoki walencyjnej prowadzi do różnych konsekwencji dla kolejnych procesów przegrupowania i dla obserwowanych widm. Wyniki obliczeń Hartmanna [12] pokazały, że w silnie zjonizowanym atomie krzemu będącym w otoczeniu chemicznym tlenu (SiO_2) następuje silne wypełnienie podpowłok $3p$ i $3d$ dodatkowymi elektronami. Walencyjna konfiguracja Si zmienia się od $\sim 3s^23p^23d^1$ dla stanu KL^1 do $\sim 3s^23p^53d^4$ dla KL^7 . Jonizacja powłoki L atomu krzemu inicjuje bardzo intensywny przepływ elektronów z ligandów tlenu do powłoki walencyjnej Si. Co więcej zmniejszenie liczby elektronów w podpowłoce walencyjnej $3s$ i $3p$ krzemu spowodowane przez jonizację i/lub przez procesy przegrupowania może być natychmiast kompensowane przez napływ elektronów z otaczających atomów tlenu.

Elektronowe wzbogacenie atomu krzemu znajdującego się w chemicznym otoczeniu jest manifestowane przez ogromny wzrost współczynników deekscytacji dla przejść przegrupujących elektrony powłoki L zachodzących przed emisją promieniowania rentgenowskiego. Takie ekstremalne warunki atomowe indukują kaskadę procesów przegrupowania. Te efekty transformacji wysoko zjonizowanych stanów KL^N , redukują w widmie rentgenowskim przejścia satelitarne wyższego rzędu $K\alpha L^N$ ($N = 5, 6, 7$) (rys. 1.24).

Na rysunku 1.24 pierwotne rozkłady dziur L pokazane są razem z rozkładem dziur w momencie emisji promieniowania serii K. Wyniki przedstawiają pierwotną populację stanów dziurowych KL^N pojawiających się przy energiach jonów wapnia ~ 11 MeV/u, ~ 8 MeV/u i ~ 5 MeV/u. Można zaobserwować, że najwyższy stopień jonizacji występuje przy niskich energiach Ca ~ 5 MeV/u. “Chemiczne” procesy przegrupowania znacznie redukują pierwotny rozkład dziur L najbardziej zjonizowanych stanów dla wszystkich faz procesu hamowania. Szczególnie silna redukcja zachodzi w ostatniej fazie procesu hamowania, gdzie produkcja dziur L jest najbardziej intensywna. Podobny efekt wysokiej redukcji dziur L przed emisją promieniowania był obserwowany w poprzednich eksperymentalnych pracach dotyczących badań atomów o niskim Z znajdujących się we wzbogaconym elektronowo środowisku chemicznym [43, 86].

Jak już wspomniano, w celu otrzymania pierwotnego rozkładu dziur L, w analizach nie uwzględniono przejść diagramowych $K\alpha L^0$. W analizowanych widmach promieniowania rentgenowskiego otrzymanych w wyniku zderzenia jonów wapnia z tarczą aerożelową SiO_2 zauważyć można silne wzmocnienie intensywności linii diagramowej $K\alpha L^0$. Naładowana cząstka penetrująca materię powoduje jonizację ośrodka hamującego. Implikuje to transfer energii z naładowanej cząstki do elektronów, które mogą uzyskać energię kinetyczną wystarczającą do zjonizowania powłoki K. Proces ten znany jest pod nazwą jonizacji wtórnej, a elektrony powodujące jonizację wtórną zwane są elektronami delta. W przeciwieństwie do jonizacji pierwotnej, która zachodzi w pobliżu ścieżki jonu, jonizacja wtórna zachodzi na dużych odległościach od rdzenia ścieżki. Prawdopodobieństwo produkcji elektronów wtórnych rośnie ze wzrostem liczby atomowej pocisku nad liczbą atomową tarczy (w szczególności, gdy $Z_P > Z_T$, co ma miejsce w omawianym eksperymencie). Elektrony delta mają pik energetyczny ok. $4m_e E/M$, gdzie m_e jest masą elektronu, M i E są masą i energią jonu. Dla jonów wapnia o energii 11.4 MeV/u, 8.5 MeV/u i 5.2 MeV/u pik energetyczny wynosi 24.36 keV, 18.16 keV i 11.11 keV i jest 13, 10 i 6 razy większy niż energia wiązania elektronu K atomu krzemu, a zatem energia jest wystarczająca do wybicia elektronu z powłoki K do kontinuum. Dlatego wzmocnienie intensywności linii $K\alpha L^0$ obserwowane w widmach rentgenowskich tarczy aerożelowej SiO_2 może być przypisane właśnie elektronom delta.



Rysunek 1.24: Intensywności linii satelitarnych $K\alpha L^N$ (czerwone kwadraty i linia kreskowana) mierzone w widmach $K\alpha$ indukowanych w krzemie przez jony wapnia z energią początkową 11 MeV/u w trzech fazach hamowania jonu (początkowej - rysunek górny, środkowej - rysunek środkowy i końcowej - rysunek dolny) i odpowiadające im pierwotne rozkłady dziur L (niebieskie kółka i ciągła niebieska linia) otrzymane przy użyciu procedury uwzględniającej przegrupowania wynikające z “chemicznego” otoczenia atomów krzemu przez atomy tlenu.

1.5.3. Prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L

W tabeli 1.8 przedstawione są eksperymentalne i teoretyczne (SCA i GM) prawdopodobieństwa jonizacji atomów Si indukowane przez jony wapnia. Wartości te, mimo że dotyczą rozkładu pierwotnego (występującego w momencie zderzenia jon-atom) zostały uzyskane z dopasowania rozkładu intensywności satelitów $K\alpha L^N$ przy założeniu odpowiednich przegupowań oraz tego, że pierwotny rozkład dziur L jest rozkładem dwumianowym. Dla kompletności przedstawiono również, użyte w procedurze fitowania, prawdopodobieństwa wychwytu elektronu oszacowane z przekrojów czynnych z modelu eikonalnego [85]. Z powodu małego wkładu wychwytu elektronu do całkowitej produkcji dziur L można wywnioskować, że procedura dopasowania (z zafiksowanym prawdopodobieństwem wychwytu elektronu) właściwie odzwierciedla średnie prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L dla wszystkich faz procesu hamowania. W przypadku ostatniej fazy, przekrój czynny na wychwyt elektronu znacznie rośnie, co może prowadzić do większego wkładu wychwytu elektronu do produkcji dziur L. Z tego co wiemy, nie ma żadnych badań poświęconych, zależnym od parametru zderzenia, procesom wychwytu elektronu z powłoki L do powłok M i N w silnym perturbacyjnym obszarze oddziaływania rozważanym w tej pracy. Dlatego należy tu zasygnalizować, że w przypadku ostatniej fazy (~ 5 MeV/u) systematyczny błąd prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L może być nieco wyższy w porównaniu z błędami dla wczesnej i środkowej fazy.

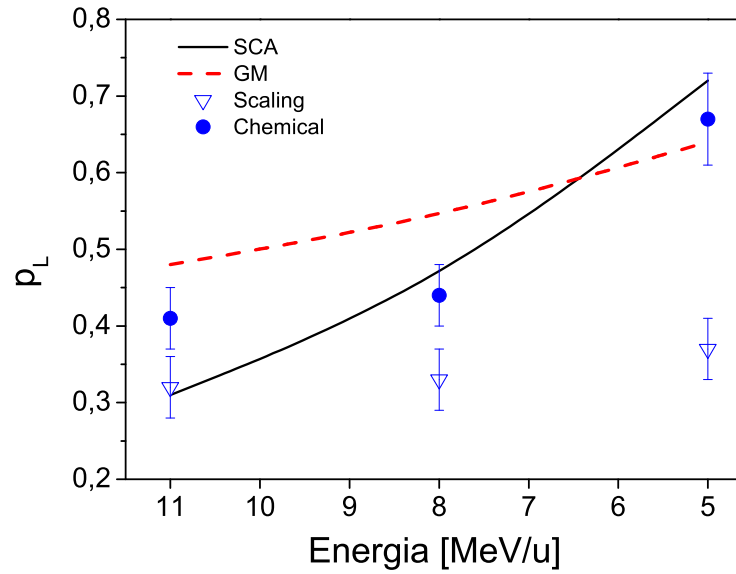
Wartości prawdopodobieństw jonizacji powłoki L otrzymane dla różnych procedur przegrupowania, które transformują intensywności satelitów $K\alpha L^N$ w pierwotny rozkład dziur L (i *vice versa*) mogą znacznie różnić się od siebie. Wyniki otrzymane przy użyciu uproszczonej metody skalowania przegrupowań są przedstawione w tabeli 1.8 ($(p_L^{DI})_{scal}$). Eksperymentalne wartości otrzymane po poprawkach uwzględniających wzmocnienie przegrupowań wskutek wzbogaconego elektronowo środowiska chemicznego atomu krzemu (SiO_2) umieszczone są w ostatniej kolumnie tabeli 1.8 ($(p_L^{DI})_{chem}$).

Dla lepszej ilustracji zaprezentowano prawdopodobieństwa jonizacji bezpośrednio otrzymane przez obie procedury w modelach teoretycznych SCA i GM w zależności od energii pocisku (rysunek 1.25). Rysunek 1.25 przedstawia zależność prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L (p_L) krzemu wzbudzanego przez jony wapnia o energiach 11 MeV/u, 8 MeV/u i 5 MeV/u. Wartości eksperymentalne prawdopodobieństwa jonizacji otrzymane przy użyciu procedury skalowania (trójkąty) jak również uwzględniając przegrupowania “chemiczne” (kółka) porównane zostały z wartościami obliczonymi wg teorii SCA (czarna linia ciągła) i GM (czerwona linia przerywana).

W przypadku zastosowania procedury skalowania wartość prawdopodobieństwo jonizacji powłoki L atomu krzemu nie zależy od energii pocisku, co jest sprzeczne z faktem, że przy niskich energiach pocisku wzrasta prawdopodobieństwo jonizacji

Tabela 1.8: Teoretyczne (SCA i GM) i eksperymentalne wartości prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L (na elektron) atomu krzemu indukowanej przez jony wapnia otrzymane z modelu uwzględniającego wychwyt elektronu z powłoki L oszacowanego z przekrojów czynnych z teorii eikonalnej [85] oraz przy użyciu procedury dopasowania.

Energia pocisku	Teoria			Eksperyment	
	$(p_L^{EC})_{eikonal}$	$(p_L^{DI})_{GM}$	$(p_L^{DI})_{SCA}$	$(p_L^{DI})_{scal}$	$(p_L^{DI})_{chem}$
~ 11 MeV/u	0.002	0.48	0.31	0.32 ± 0.04	0.41 ± 0.04
~ 8 MeV/u	0.008	0.54	0.45	0.33 ± 0.04	0.44 ± 0.04
~ 5 MeV/u	0.074	0.64	0.72	0.37 ± 0.04	0.67 ± 0.05



Rysunek 1.25: Porównanie eksperymentalnych wartości prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L (na elektron) atomu krzemu indukowanej przez jony wapnia w różnych fazach hamowania jonu z teoretycznymi wartościami oszacowanymi przy użyciu teorii SCA-HYD i GM w funkcji energii pocisku (energia na osi w skali od energii początkowej fazy hamowania jonu do końcowej fazy hamowania). Symbole (trójkąty i kółka) odzwierciedlają wartości eksperymentalne otrzymane w procedurze skalowania i w procedurze uwzględniającej przegrupowania “chemiczne”.

powłoki L, a zatem procedura skalowania nie jest w stanie reprodukcować silnej zależności między prawdopodobieństwami jonizacji powłoki L a energią pocisku, którą przewidują rachunki SCA i GM. Te wyraźne różnice między wartościami prawdo-

podobieństw bezpośredniej jonizacji L otrzymane po skalowaniu i poprawkach chemicznych są związane z tym, że procedura skalowania znacznie niedoszacowuje procesów przegrupowania zachodzących w wysoko-zjonizowanym atomie krzemu usytuowanym w chemicznym i/lub nano-plazmowym otoczeniu. W ten sposób procedura skalowania reprodukuje pierwotny rozkład dziur L nieprawidłowo przesunięty w stronę niższej liczby dziur L. W konsekwencji otrzymane wartości prawdopodobieństwa jonizacji powłoki L są sztucznie pomniejszone.

W przeciwieństwie do tego prawdopodobieństwa bezpośredniej jonizacji powłoki L określone przy użyciu chemicznej procedury przegrupowań są znacznie wyższe niż te, które zostały otrzymane za pomocą metody skalowania. Procedura chemiczna, która uwzględnia wzmocnione procesy przegrupowania zachodzące we wzbogaconym-elektronowo otoczeniu związku SiO_2 reprodukuje wysoki stopień jonizacji powłoki L w momencie zderzenia jon-atom. W wyniku tego wartości prawdopodobieństwa jonizacji bezpośredniej powłoki L są dużo większe niż otrzymane przy użyciu procedury skalowania. To odkrycie jeszcze raz potwierdza wielką ważność uwzględnienia efektów chemicznych wpływających na procesy przegrupowania, które zmieniają konfigurację walencyjną układów atomowych będących silnie zjonizowanymi.

1.5.4. Efekty nanoplazmowe

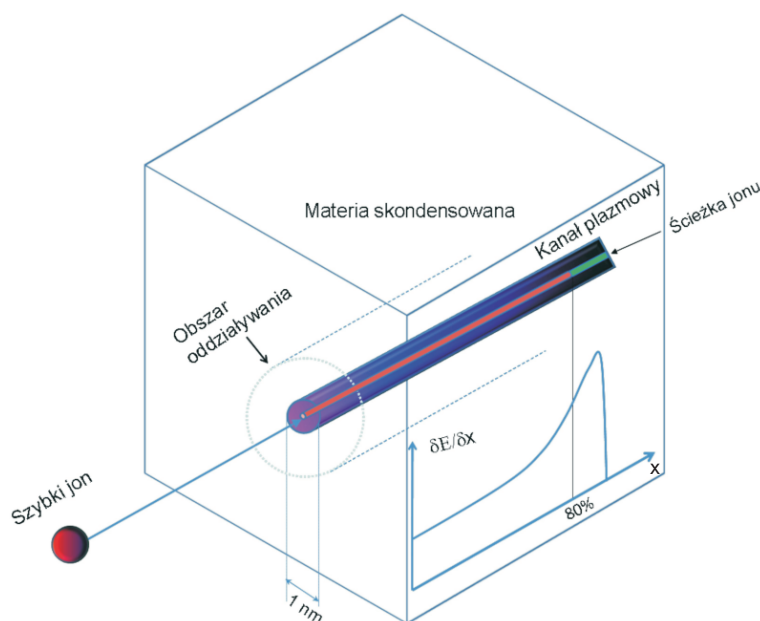
Ciężkie jony hamujące w ośrodku hamującym mogą przyczyniać się do utworzenia nanostruktur plazmowych. Lankin [9, 10] zaproponował model relaksacji niskotemperaturowej plazmy (10-50 eV) generowanej przez szybkie jony penetrujące materię skondensowaną. Model zakłada trzy etapy formowania nanostruktur plazmowych: (1) jonizacja atomu tarczy i populacja swobodnych elektronów w wyniku wielokrotnej jonizacji atomów tarczy (początkowe wzbudzenie ośrodka), (2) termalizacja swobodnych elektronów (etap szybkiej relaksacji) i (3) relaksacja stanów wzbudzonych atomów tarczy w wygenerowanej plazmie.

W fazie pierwszej swobodne elektrony i wielokrotnie zjonizowane atomy z jedną dziurą na powłoce K, N elektronami na powłoce L i w pełni zjonizowanej powłoce M są produkowane w bliskim obszarze ścieżki szybkich jonów. Zjonizowane na powłoce K atomy znajdują się w obszarze w pobliżu osi kanału i chociaż ich populacja jest stosunkowo niska są one odpowiedzialne za pojawienie się linii widmowych promieniowania rentgenowskiego. Czas trwania pierwszego etapu tworzenia plazmy w każdym punkcie toru jest określony jako $\tau_1 \sim a/v_P = 10^{-3} - 10^{-2}$ fs, gdzie a jest wielkością atomu, v_P prędkością pocisku. Pierwotny kanał plazmowy ma średnicę kilku nanometrów, a gęstość elektronów osiąga wartość $n_e \sim 10^{-23} \text{ cm}^3$ (dla stanu ładunkowego atomu tarczy = 2-6) [11]. W drugim etapie ($\tau_2 \geq 1$ fs) ustala się rozkład Maxwella swobodnych elektronów o temperaturze 10-50 eV. Rozprzestrzenia-

nie się chmury elektronowej w plazmie wytwarza ładunek dodatni w centrum ścieżki i podwójną warstwę elektronową wokół pierwotnego kanału plazmowego. Ostatnia faza ($\tau_3 \sim 10\text{-}20$ fs) jest fazą relaksacji. Rozważając relaksację stanów wzbudzonych w plazmie, należy uwzględnić wszystkie procesy, które zachodzą podczas zderzeń zjonizowanych atomów ze swobodnymi elektronami.

Plazma o stałej gęstości pojawiająca się w bliskim sąsiedztwie ścieżki jonów może wpływać na względne intensywności linii satelitarnych $K\alpha L^N$, które w "czystych" warunkach atomowych są sygnaturą pierwotnego rozkładu stanów KL^N indukowanych w zderzeniach jon-atom. W dyskutowanej w tej pracy analizie widm rentgenowskich mierzonych w różnych fazach hamowania jonu (przy różnych energiach pocisku), jedyny objaw powstania nanoplazmy wewnątrz toru jonu związany jest z poszerzeniem linii $K\alpha L^N$. W przypadku linii satelitarnej $K\alpha L^1$ szerokość wzrosła od ~ 4 eV w początkowej fazie hamowania do ~ 6 eV w najpóźniejszym etapie procesu hamowania.

Założenie związane z całkowitą jonizacją powłoki M jest nie zostało odzwierciedlone w eksperymencie. Wartości eksperymentalne przesunięć energetycznych linii satelitarnych odzwierciedlają silne wzbogacenie elektronów powłoki M w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego. Efekty nanoplazmowe mogą przyczyniać się do zmniejszenia energii przejścia $K\alpha L^N$ (tzw. przesunięcie ku czerwieni) spowodowanego przez ciśnienie gazu elektronowego na ścieżce rdzenia. Jednak nawet silne efekty nanoplazmowe nie mogą zmniejszyć wartości energii przejść $K\alpha L^N$ obserwowanych w omawianym eksperymencie. Na przykład, w przypadku $K\alpha L^4$ w Si energia przejścia może być zredukowana tylko 1-8 eV w środowisku plazmy w zakresach gęstości elektronów z 1×10^{23} do $5 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ i temperatury elektronów od 10 eV do 50 eV [32]. Tymczasem energie obserwowanej w eksperymencie linii satelitarnej $K\alpha L^4$ są zredukowane o ponad 16 eV w porównaniu z odpowiednimi energiami przejść $K\alpha L^4$ występujących w obecności całkowicie zjonizowanej powłoki M. Ponadto, jeśli ciśnienie gazu elektronowego byłoby jedynym czynnikiem odpowiedzialnym za zmniejszenie energii przejścia satelitarnego, wartości przesunięć energetycznych powinny, ze względu na wzrost gęstości i temperatury elektronów usuniętych z atomów tarczy, rosnać z głębokością penetracji jonów, zwłaszcza dla najniższych energii pocisku. Jednakże eksperymentalne wartości przesunięć energetycznych dla każdej grupy przejść satelitarnych $K\alpha L^N$ nie zależą od głębokości penetracji jonów, a co za tym idzie od ładunku i prędkości jonów. Co więcej, zmniejszenie liczby dziur powłoki L obserwowane w widmach satelitarnych $K\alpha L^N$ świadczy o niezwykle silnych procesach przegrupowania związanych z przejściami elektronów $M \rightarrow L$. Przejścia te nie mogą występować gdy na powłoce M nie ma elektronów. Stąd wniosek, że w momencie emisji rentgenowskiej powłoka M jest mocno wzbogacona w elektrony i efekty plazmowe mogą odgrywać co najwyżej drugorzędną rolę w redukcji przejść serii K wywołanych w ośrodku hamującym w badanej fazie procesu hamowania [32].



Rysunek 1.26: Przewidywany przez Lankina [9] kanał plazmowy tworzony przez szybkie jony hamujące w materii skondensowanej - obszar oznaczony na niebiesko. Na czerwono zaznaczono ścieżkę jonu, wzdłuż której obserwowano widma promieniowania rentgenowskiego (80% drogi hamowania jonu), zielony kolor - ścieżka jonu poza obserwacjami eksperymentalnymi.

Wzmocnienie elektronów walencyjnej powłoki obserwowane w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego wywołane przez pociski o energii ~ 5 MeV/u, sugeruje iż na początku i w pośrednich fazach hamowania procesu następuje neutralizacja rdzenia ścieżki jonów w czasie kilku femtosekund po jonizacji, co zapobiega eksplozji kulombowskiej (wysokoenergetyczne cząstki jonizują materiał wzdłuż toru swego ruchu i wypychają elektrony, a zjonizowane atomy ośrodka stają się silnie dodatnie, co prowadzi do ich gwałtownego rozepchnięcia) i odkształceniom materiału.

Kolejny wniosek przedstawiony przez Lankina [9, 10] dotyczy fazy relaksacji nanoplazmy, która znacząco przyczynia się do emisji promieniowania rentgenowskiego. Wykazano, że najbardziej intensywne linie widmowe są emitowane w ciągu pierwszych 7 fs po zderzeniu jon-atom. Ponadto słaba zależność między prawdopodobieństwami jonizacji powłoki L i energią pocisku jest dalszą konsekwencją całkowitej jonizacji powłoki M (zakładanej w modelu relaksacji w plazmie). Na podstawie tego założenia, procesy przegrupowania nie mogą być uwzględnione w obliczeniach. W ten sposób model niedostatecznie odzwierciedla najbardziej zjonizowane stany KL^N , zwłaszcza jeśli chodzi o najpóźniejsze badane fazy procesu hamowania (przy $E_p \sim 5$ MeV/u), gdzie atom tarczy błyskawicznie przechodzi do niższych stanów energetycznych poprzez tzw. kaskady przegrupowań.

1.6. Podsumowanie

W pierwszej części pracy przedstawiono wyniki pomiarów linii satelitarnych $K\alpha L^N$ w widmach rentgenowskich emitowanych z tarczy aerożelowej SiO_2 bombardowanej jonami wapnia o początkowej energii 11.4 MeV/u. Eksperyment przeprowadzony został w GSI-Darmstadt w Niemczech. Zastosowanie aerożelu SiO_2 o średniej gęstości 0.023 g/cm^3 wydłużyło drogę hamowania jonu do 100 razy w porównaniu ze stałym kwarcem. Dzięki temu zarejestrowano widma promieniowania rentgenowskiego wzdłuż ok. 80% długości drogi hamowania jonu wapnia. W eksperymencie wykorzystano technikę precyzyjnej spektroskopii rentgenowskiej. Do pomiaru widm satelitarnych użyto spektrometru krystalicznego FSSR. Dzięki zastosowaniu spektrometru krystalicznego z wygiętym kryształem i tarczy aerożelowej zarejestrowano satelitarne widma rentgenowskie tarczy zbierane bezpośrednio z obszaru oddziaływania z rozdzielczością przestrzenną wzdłuż trajektorii wiązki jonów. Otrzymano trzy widma rentgenowskie indukowane w trzech fazach hamowania jonu: wczesnej ($E=11.4\text{-}10.6 \text{ MeV/u}$ i $x\sim 0.5 \text{ mm}$), średniej ($E=8.5\text{-}7.6 \text{ MeV/u}$ i $x\sim 5 \text{ mm}$) i ostatniej ($E=5.2\text{-}4.0 \text{ MeV/u}$ i $x\sim 10 \text{ mm}$). W wyniku szczegółowej analizy określono przesunięcia energetyczne linii satelitarnych w stosunku do linii diagramowej i pierwotny rozkład dziur w powłoce L.

Uzyskane przesunięcia energetyczne linii satelitarnych $K\alpha L^N$ nie zależą od głębokości penetracji (energii) jonów wapnia. We wszystkich fazach hamowania jonu zaobserwowano niską wartość przesunięć energetycznych. Dane eksperymentalne przesunięć energetycznych porównano z obliczeniami teoretycznymi MCDF zakładającymi różną konfigurację powłoki walencyjnej atomu krzemu. Obliczenia zakładające całkowicie zjonizowaną powłokę M znacznie odbiegają od wartości eksperymentalnych. Rozbieżność rośnie wraz ze wzrostem stopnia jonizacji powłoki L. Otrzymane w eksperymencie przesunięcia energetyczne są bliskie przewidywaniom teoretycznym zakładającym niski stopień jonizacji powłoki M, jednakże również tutaj widoczne są rozbieżności między wartościami eksperymentalnymi a obliczeniami teoretycznymi. Niska wartość eksperymentalnych przesunięć energetycznych sugeruje, że powłoka walencyjna atomu krzemu została wzbogacona przez część elektronów przyciągniętych przez dodatnie centrum Si z atomów tlenu. Uwzględnienie w rachunkach MCDF wzbogacenia powłoki walencyjnej w elektrony pochodzące z ligandów tlenu redukuje wartości przesunięć energetycznych linii satelitarnych $K\alpha L^N$. Oznacza to, że we wszystkich fazach hamowania jonu powłoka walencyjna atomu krzemu w momencie przejścia rentgenowskiego serii K jest silnie wzbogacona przez elektrony z atomów tlenu. A zatem hipoteza powstawania nanostruktur plazmowych w najbliższym otoczeniu ścieżki jonu (model relaksacyjny niskotemperaturowej plazmy związany z całkowitą jonizacją powłoki M) nie została potwierdzona w omawianym eksperymencie.

Efekt wzbogacenia elektronowego dominuje nad jonizacją zewnętrznych powłok atomowych krzemu. Intensywny przepływ ładunku z ligandów tlenu prowadzi do silnych procesów przegrupowania w atomie krzemu, które mają wpływ nie tylko na energie, ale również na intensywność linii satelitarnych $K\alpha L^N$ w obserwowanych widmach rentgenowskich.

Otrzymane w procedurze dopasowania widm intensywności linii satelitarnych $K\alpha L^N$ odzwierciedlają rozkład dziur w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego. W celu otrzymania pierwotnego rozkładu dziur przeanalizowano procesy przegrupowania. Szczegółowa analiza intensywności linii satelitarnych widma promieniowania rentgenowskiego pozwoliła na wyznaczenie pierwotnego rozkładu stanów KL^N wytworzonych w zderzeniu z jonami wapnia w trzech fazach hamowania jonu: ~ 11 MeV/u, ~ 8 MeV/u i ~ 5 MeV/u. W analizie rozważono różne konfiguracje powłoki M atomu krzemu: konfigurację atomową $3s^23p^2$, całkowicie zjonizowaną powłokę M i konfigurację uwzględniającą chemiczne otoczenie atomu krzemu.

W pracy pokazano, że współczynniki przegrupowania determinujące pierwotny rozkład dziur w powłoce L silnie zależą od konfiguracji powłoki walencyjnej. Silnie zjonizowany atom krzemu przyciąga elektrony z ligandów tlenu do swojej powłoki walencyjnej. Dlatego w celu otrzymania wiarygodnego pierwotnego rozkładu dziur powłoki L należy zastosować procedurę uwzględniającą procesy przegrupowania zachodzące w otoczeniu chemicznym powłoki walencyjnej. Po uwzględnieniu w analizach efektów wzbogacenia elektronowego, które modyfikują strukturę powłoki walencyjnej, otrzymano pierwotny rozkład stanów KL^N , których populacja jest mocno zredukowana ze względu na występowanie bardzo intensywnych procesów przegrupowania (istotnych szczególnie w ostatniej fazie hamowania jonu). Efekty transformacji wysoko zjonizowanych stanów KL^N w stany ze zredukowaną liczbą dziur L przesuwają maksimum rozkładu dziur w powłoce L w stronę niższych energii widma. W ten sposób wykazano wysoki stopień jonizacji powłoki L w momencie zderzenia jon-atom w ostatniej fazie hamowania jonu.

W oparciu o dwumianowy rozkład stanów KL^N wyznaczono prawdopodobieństwo jonizacji powłoki L, które następnie porównano z teoretycznymi przewidywaniami SCA i GM. Rozkład ten wskazuje na znacznie wyższy stopień jonizacji powłoki L w momencie zderzenia niż ten, który obserwowany jest w momencie emisji promieniowania rentgenowskiego. Wyznaczone w oparciu o procedurę skalowania prawdopodobieństwo jonizacji powłoki L wykazuje słabą zależność od energii pocisku, co jest sprzeczne z przewidywaniami teoretycznymi. Procedura skalowania znacznie zaniża procesy przegrupowania, które zachodzą w wysoko zjonizowanych atomach Si znajdujących się w chemicznym lub nanoplazmowym otoczeniu. Natomiast uwzględnienie wzbogaconego elektronowo otoczenia chemicznego krzemu odzwierciedla zarówno zależność energetyczną pocisku jak i wysoki stopień jonizacji powłoki L atomów tarczy.

Po przeprowadzeniu szczegółowej analizy, uwzględniającej efekty chemiczne wynioskowano, że wzbogacenie elektronowe związane ze środowiskiem chemicznym ma istotny wpływ na procesy zachodzące w zderzeniach jonów z atomami usytuowanymi w otoczeniu innych pierwiastków. Co więcej charakter efektu chemicznego zmienia się w sposób dramatyczny w przypadku wysokiej jonizacji powłoki L (w stosunku do przypadku atomów nisko zjonizowanych). W pracy wykazano, że w atomach o wysokim stopniu jonizacji następuje intensywny przepływ elektronów walencyjnych z tlenu do powłoki M atomu krzemu indukując bardzo silne procesy przegrupowania, mające zasadniczy wpływ na kształt rejestrowanych widm rentgenowskich. Wynik ten rzuca nowe światło na możliwość powstawania nanosturktur plazmowych w najbliższym otoczeniu ścieżki jonu wapnia. Przewidywania Lankina, że kanał nanoplazmowy tworzony jest wzdłuż całej drogi hamowania jonu, nie znalazły odzwierciedlenia w analizach widm rentgenowskich emitowanych z tarczy aerożelowej SiO_2 , zmierzonych wzdłuż 80% długości drogi hamowania jonów wapnia.

Rozdział 2

Procesy wymiany ładunku w zderzeniach semi-relatywistycznych jonów z tarczami ciał stałych

2.1. Procesy wymiany ładunku w zderzeniach atomowych

Zderzenia jon-atom prowadzą do procesów jonizacji pocisku i wychwytu elektronu. Przy dużych prędkościach pocisku dominują procesy jonizacji pocisku.

Przekrój czynny na jonizację pocisku zależy od parametru zderzenia b [87]:

$$d\sigma \approx 2\pi b db. \quad (2.1)$$

Gdy prędkość pocisku jest większa niż prędkość Bohra ($v_0 = 2.19 \times 10^8$ cm/s) proces jonizacji pocisku może być opisany w przybliżeniu pojedynczego zderzenia jon-atom i dlatego otwiera możliwości używania prostych teorii rozwiniętych dla opisu oddziaływań lekkich jonów z tarczą [88, 89]. Jednym z pierwszych i do dziś funkcjonujących opisów przekroju czynnego na jonizację pocisku jest klasyczny model Nielsa Bohra [88]. Model zakłada, że pocisk może zostać obdarty z elektronów, gdy energia orbitalna jest mniejsza bądź równa prędkości jonu. Przekrój czynny na jonizację pocisku, σ_{STRIP} (stripping) dany jest prostym wyrażeniem:

$$\sigma_{STRIP} \propto \frac{Z_T^2}{Z_P^2 v_P^2}, \quad (2.2)$$

gdzie Z_T , Z_P są liczbą atomową tarczy i pocisku, natomiast v_P jest prędkością poruszającego się jonu. W klasycznym przybliżeniu Bohra przekrój czynny na jonizację pocisku rozpatrywany jest w trzech zakresach liczby atomowej atomu tarczy: wysokie, średnie i niskie Z tarczy.

Atomy o wysokim Z można przybliżyć do idealnie sztywnej sfery, ponieważ poruszający się z dużą prędkością pocisk „widzi” atom tarczy jako powierzchnię koła o promieniu a_0 , gdzie $a_0 = 5,29 \times 10^{-9}$ cm jest promieniem Bohra.

Korzystając z przybliżenia idealnie sztywnej sfery przekrój czynny na jonizację pocisku zderzającego się z atomami o wysokim Z tarczy można wyrazić wzorem:

$$\sigma_{STRIP}^{BHZ} \approx \pi a_0^2. \quad (2.3)$$

W przypadku jonizacji pocisku oddziałującego z atomami o średniej liczbie atomowej stosowanie przybliżenia atomu do idealnie sztywnej sfery przestaje być satysfakcjonujące. Rozmiary tarczy stają się porównywalne, a nawet mniejsze od wartości parametru zderzenia. Dla dużych wartości parametru zderzenia istotne staje się ekranowanie ładunku jądra, co powoduje szybkie zanikanie potencjału $\sim 1/r$. Dlatego przekrój czynny na jonizację pocisku oddziałującego z atomami o średnim Z obliczony przy założeniu efektów ekranowania ładunku jądra wyraża się wzorem:

$$\sigma_{STRIP}^{BMZ} = \pi a_0^2 \frac{Z_T^{2/3}}{Z_P} \left(\frac{v_0}{v_P} \right). \quad (2.4)$$

W przypadku lekkich tarcz elektrony i jądro atomu tarczy mogą być rozważane niezależnie. Przekrój czynny na jonizację pocisku oddziałującego z atomami o niskim Z wyrażony jest przez:

$$\sigma_{STRIP}^{BLZ} = \pi a_0^2 \frac{4Z_T(Z_T + 1)}{Z_P^2} \left(\frac{v_0}{v} \right)^2. \quad (2.5)$$

Człon Z_T^2 pochodzi z rozpraszania przez jądro tarczy, natomiast Z_T związany jest z rozpraszaniem na elektronach atomu tarczy. Formuła ta oparta jest na przybliżeniu niezależnych cząstek. W przybliżeniu tym zaniedbana jest struktura materiału, wskutek czego ignorowane są oddziaływania elektron-elektron. Model Bohra jest przybliżeniem klasycznym. Przekrój czynny na jonizację szybkiego pocisku przez wieloelektrowe atomy wymaga bardziej precyzyjnego opisu. Szczegółowy opis procesu jonizacji podany został przez Gillespiego [90, 91]. W opisie Gillespiego przekrój czynny na jonizację szybko poruszającego się jonu, takiego jak ${}^3\text{He}^+$, penetrującego tarczę, dany jest wyrażeniem:

$$\sigma_{STRIP} = 8\pi a_0^2 I \left(\frac{v_0}{v_P} \right)^2, \quad (2.6)$$

gdzie I jest wielkością zwaną siłą zderzenia (collision strength). Siła zderzenia, I , opisana jest całką po przekazach pędu K :

$$I = \int_0^\infty |F_0^{(2)}(K)|^2 |F_0^{(2)}(K)|^2 \frac{d(a_0 K)}{(a_0 K)}, \quad (2.7)$$

gdzie funkcja $F_0^{(j)}(K)$ jest zdefiniowana jako:

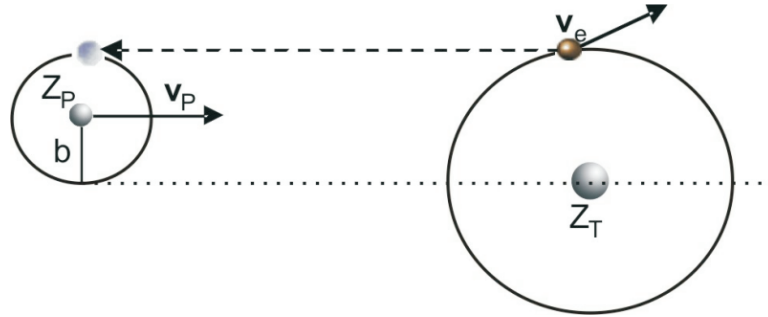
$$F_0^{(j)}(K) = Z_N^{(j)} - \langle 0 | \sum_{l=1}^{Z_e^{(j)}} \exp \left(i \vec{K} \bullet \vec{r}_l^{(j)} \right) | 0 \rangle_j, \quad (2.8)$$

gdzie $Z_e^{(i)}$ jest liczbą elektronów w j -tej cząstce, natomiast $Z_N^{(i)}$ jest ładunkiem tej cząstki. Fenomenologiczną formułę opisującą siłę zderzenia zależną od Z_T znaleźć można w pracy Dennisa [92]:

$$I = I_G \approx \frac{1.24}{Z_P^2} Z_T (1 + 0.105 Z_T - 5.4 * 10^{-4} Z_T^2). \quad (2.9)$$

Model Gillespiego wydaje się być najmocniej zaawansowaną teorią opisującą przekrój czynny na jonizację pocisku. Stosowność tego modelu jest ograniczona założeniami: (1) $Z_T > Z_P$, (2) $Z_T \ll \frac{\beta}{\alpha}$ i (3) $Z_T \ll \frac{v_P}{v_0}$, gdzie $\beta = \frac{v_P}{c}$, $\alpha = \frac{1}{137}$. W przypadku eksperymentu omawianego w niniejszej pracy warunek (1) jest spełniony dla każdej tarczy ($Z_T = 6, 28, 47, 79$). Warunki (2) i (3) są spełnione dla tarcz węgla, niklu i srebra, ale nie są spełnione w przypadku tarczy złota ($\frac{\beta}{\alpha} = 69.87$, $\frac{v_P}{v_0} = 69.41$).

Oddziaływanie pola kulombowskiego pocisku z atomami może doprowadzić do przechwycenia związanego elektronu atomu tarczy do nieobsadzonego stanu związanego pocisku (rys. 2.1). Procesy wychwytu elektronu odgrywają dominującą rolę przy stosunkowo małych prędkościach pocisku. Wychwyt elektronu jest problemem trójciałowym. Zasada zachowania energii wymaga aby bezradiacyjny wychwyt elektronu zachodził tylko dla elektronów związanych w atomie tarczy. Różnica energii i pędu zostaje przekazana atomowi tarczy i pociskowi. Wychwyt elektronu z atomu o ładunku Z_T do niezapelnionego stanu jonu o ładunku Z_P , poruszającego się z prędkością v_P opisuje reakcja: $Z_P^{q+} + Z_T^q \rightarrow Z_P^{(q-1)+} + Z_T^{q+1}$.



Rysunek 2.1: Schemat wychwytu elektronu atomu tarczy do pocisku.

Bezradiacyjny wychwyt elektronu jest dominującym procesem w zakresie dużych parametrów asymetrii zderzenia ($Z_P/Z_T \geq 1$) i w warunkach dopasowania prędkości takich, że prędkość pocisku v_P jest w przybliżeniu równa prędkości elektronu na orbicie atomu tarczy v_e ($v_P \approx v_e$). Zgodnie z klasycznym przybliżeniem Thomasa przy niskich energiach pocisku $\sigma_{CAP} \propto v_P^{-11}$ [93].

Jednym z pierwszych opisów procesu bezradiacyjnego wychwytu elektronu jest teoria Oppenheimera-Brinkmanna-Kramersa (OBK) [94, 95]. Teoria zakłada, że wychwyt elektronu jest konsekwencją bezpośredniego przeskoku elektronu ze stanu początkowego (atom tarczy) do stanu końcowego (pocisk). Teoria obowiązuje w obszarze

prędkości poza dopasowaniem $v_P \approx v_e$. Dla wodoropodobnych funkcji falowych przekrój czynny uwzględniający wychwyt elektronu z powłoki K atomu tarczy do powłoki K pocisku dany jest wzorem:

$$\sigma_{CAP}^{OBK} = \pi a_0^2 \frac{2^{18}}{5} Z_P^5 Z_T^5 \left(\frac{v_0}{v_P} \right)^{12}. \quad (2.10)$$

W teorii OBK istnieje silna zależność przekroju czynnego zarówno od liczb atomowych pocisku i tarczy jak również od prędkości pocisku. W drugim rzędzie teoria zakłada, że elektron oddziałuje zarówno z pociskiem jak i z jądrem tarczy. Obliczenia drugiego rzędu (B2) obniżają zatem wartość przekroju czynnego:

$$\sigma_{CAP}^{B2} = \sigma^{OBK} (0.295 + \frac{5\pi}{2^{11}} \frac{1}{Z_P + Z_T} \frac{v_0}{v_P}). \quad (2.11)$$

W obszarze gdzie $v_P \gg v_e$ przekroje czynne OBK znacznie przeszacowują dane eksperymentalne. Teoria OBK została zmodyfikowana przez Nikolaeva, który uwzględnił ekranowanie ładunku jądra, $Z_T^{eff} = Z_T - \Delta Z_T$ ($\Delta Z_T = 0.3$ dla powłoki K, 4.15 – dla powłoki L i 16.2 – dla powłoki M) [96, 97]. Ponadto przekrój czynny w rachunkach Nikolaeva zależy zarówno od tego, z której powłoki chwytny jest elektron jak i od tego, do której powłoki elektron zostanie przechwycony. Przekrój czynny na wychwyt elektronu ze stanu początkowego n_1 do stanu końcowego n_2 wyrażony jest wzorem:

$$\sigma_{CAP}^{NIK} = \frac{2^9 \pi}{5} \left(\frac{n_1 n_2}{v_P} \right)^2 \left(\frac{v_{1s}}{v_{2s}} \right)^5 \xi^{10}(\theta) \frac{\Phi_4 [1 - \theta] \xi^2(\theta)}{[1 + (1 - \theta) \xi^2(\theta)]}, \quad (2.12)$$

gdzie n_1, n_2 oznaczają główne liczby kwantowe schwytanego elektronu na orbicie pocisku i elektronu tarczy przed wychwytem. Prędkości $v_{1s} = v_0 Z_P / n_1$ i $v_{2s} = v_0 Z_T^{eff} / n_2$ są orbitalnymi prędkościami elektronu w pocisku i w tarczy, parametr $\xi(\theta)$ wyraża się przez:

$$\xi(\theta) = \frac{v_{2s}}{\sqrt{v_{1s}^2 + q^2(\theta)}}, \quad (2.13)$$

gdzie $\theta = E_i^b / E_i$, E_i^b jest energią wiązania elektronu [98], natomiast $E_i = Ry \frac{Z_T^{eff2}}{n^2}$, ($Ry = 13.6056981$ eV), $q(\theta)$ jest minimalnym przekazem pędu wyrażonym przez:

$$q(\theta) = \frac{1}{2} \left[v_P + \frac{v_{2s}^2 \theta - v_{1s}^2}{v_P} \right]. \quad (2.14)$$

Funkcja Φ_4 przybliżona jest przez równanie $\Phi_4 = (1 + 0.3t)^{-1}$ dla $t < 3$, gdzie $t = (1 - \theta) \xi^2$ [97].

Dużo pełniejszy opis przekroju czynnego na wychwyt elektronu uwzględniający relatywistyczną prędkość pocisku i relatywistyczny ruch elektronów atomu tarczy daje teoria eikonalna Eichlera [85, 99, 100]. Teoria ma zastosowanie w obszarach energetycznych, w których prędkość pocisku jest przynajmniej dwa razy większa od prędkości orbitalnej chwytnego elektronu. Teoria eikonalna opisuje przekrój czynny na wychwyt elektronu ze stanu związanego tarczy do pocisku. Stany początkowy

i końcowy scharakteryzowane są przez zestaw liczb kwantowych: $i = (Z_T, n'l'm')$ i $f = (Z_P, nlm)$, przez funkcje falowe stanów związanych: ϕ_i i ϕ_f oraz przez energie wiązania ε_i i ε_f . Założono, że pocisk porusza się ze stałą prędkością v_P wzdłuż trajektorii: $R(t) = b + vt$, gdzie b jest parametrem zderzenia. Oddziaływanie elektron-tarcza i elektron-pocisk dane jest przez $V_T(t) = -Z_T e/r$ i $V_P(t) = -Z_T e/|\vec{r} - \vec{R}(t)|$. W teorii eikonalnej przekrój czynny na wychwyt elektronu ze stanu 1s tarczy do stanu 1s pocisku dany jest wzorem [99]:

$$\sigma_{CAP}^{eik} = \frac{2^8 \pi Z_T^5 Z_P^5}{5 v_P (Z_T^2 + q^2)} f(\gamma) \frac{\pi \eta Z_T}{\sinh(\pi \eta Z_T)} e^{-2\pi \eta \arctan(q/Z_T)} S, \quad (2.15)$$

gdzie $S = S_{eik} + S_{mag} + S_{orb}$. S_{eik} jest właściwym eikonalnym przekrojem czynnym dla relatywistycznego pocisku i nierelatywistycznych elektronów, S_{mag} daje wkład do przekroju czynnego spowodowany przez oddziaływanie między polem magnetycznym a momentem magnetycznym elektronu, S_{orb} odpowiada relatywistycznej modyfikacji elektronowej orbity, $\eta = 1/v_P$, $f(\gamma) = (\gamma + 1)/2\gamma^2$, $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$. Dzięki teorii eikonalnej określono wkład poszczególnych powłok do całkowitego przekroju czynnego na wychwyt elektronu.

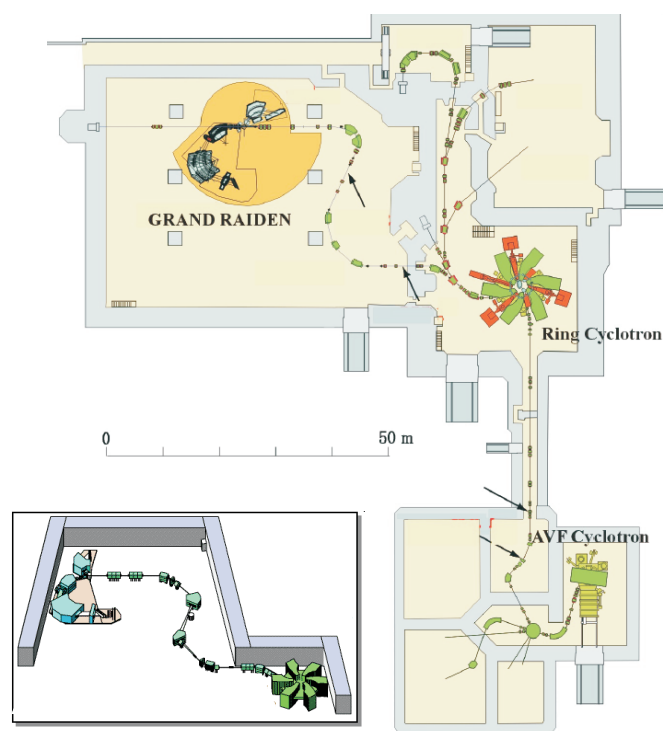
W Dodatkach do niniejszej pracy znajdują się tabele i wykresy przedstawiające rachunki najbardziej zaawansowanej teorii (rachunki eikonalne) opisujące przekrój czynny na wychwyt elektronu z atomu tarczy o różnej liczbie atomowej przez jony helu poruszające się z różnymi prędkościami.

2.2. Metodyka eksperymentu

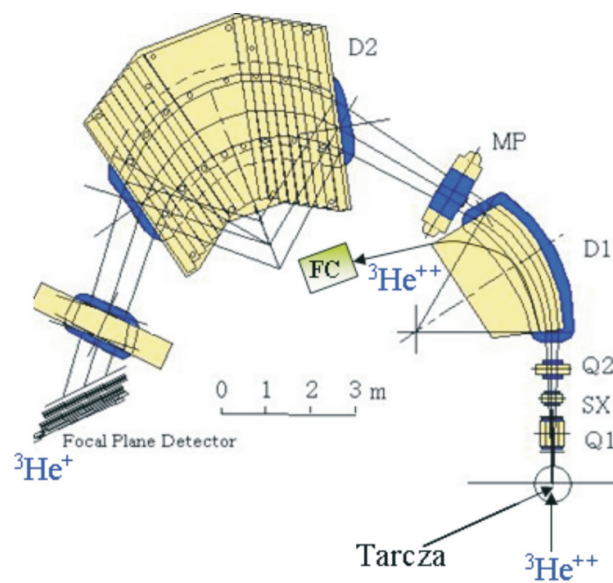
2.2.1. Układ eksperymentalny

Pomiary prezentowane w tej pracy zostały wykonane w Research Center for Nuclear Physics (RCNP) w Osace. Głównymi składnikami układu (rysunek 2.2) są cyklotron AVF i wysokiej rozdzielczości spektrometr magnetyczny GRAND RAIDEN (rysunek 2.3) [101].

Wiązka dwukrotnie zjonizowanego helu ($^3\text{He}^{++}$) przyspieszona była do energii 150 MeV/u i skierowana na tarcze węgla, niklu, srebra i złota. Celem eksperymentu było badanie reakcji jądrowej wymiany ładunku ($^3\text{He}, t$). W pomiarach zastosowano wysokiej rozdzielczości spektrometr magnetyczny, GRAND RAIDEN (rys. 2.3). Spektrometr magnetyczny GRAND RAIDEN składa się z dwóch zestawów kwadrupoli i dipoli magnetycznych o długości 34 m. Rozdzielczość pędowa spektrometru dla źródła o szerokości 1 mm wynosi $p/\Delta p = 2 \times 10^4$, sztywność magnetyczna wynosi 54 kGm i maksymalny kąt bryłowy jest równy 6 msr.



Rysunek 2.2: Układ eksperymentalny stosowany w pomiarach procesów wymiany ładunku między jonami helu i tarczami ciał stałych.



Rysunek 2.3: Schemat spektrografu GRAND RAIDEN.

Wiązka ${}^3\text{He}^{++}$ skierowana była tak, że uderzała w tarczę w komorze rozproszeniowej spektrografu, która była ustawiona pod kątem zero stopni w stosunku do kierunku wiązki. Pole magnetyczne było tak dopasowane, aby mierzyć produkty wychwytu elektronu ${}^3\text{He}^+$ w detektorze cząstek. Jony ${}^3\text{He}^{++}$ były rejestrowane za pomocą puszkii Faradaya, która umieszczona była na wewnętrznej ścianie komory próżniowej pierwszego dipola magnetycznego spektrometru.

W eksperymencie zmierzono stosunek intensywności jonów helu zjonizowanych jednokrotnie (${}^3\text{He}^+$) do dwukrotnie zjonizowanych (${}^3\text{He}^{++}$) w funkcji grubości tarczy. Grubości tarcz w $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ wynosiły (z dokładnością 5% - 10%):

C: 3, 5.6, 13, 13.1, 21, 65, 102, 2000, 3000

Ni: 13.98, 18.99, 2400

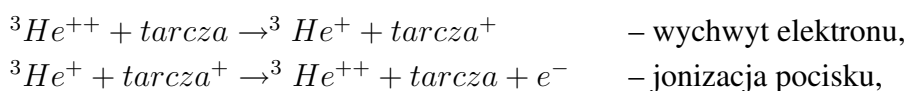
Ag: 15.55, 21.31, 42.52, 30000

Au: 5.51, 9.62, 22.72, 133.25, 1700.

2.2.2. Wyznaczenie całkowitych przekrojów czynnych na jonizację pocisku i wychwyt elektronu

Jony opuszczające tarczę znajdują się w różnych stanach ładunkowych. Stan ładunkowy jonów ustala się w wyniku sumy wielu oddziaływań z atomami tarczy, prowadzących dalej do wymiany ładunku. Mechanizm procesów wymiany ładunku może być wytłumaczony w prosty sposób: gdy jednokrotnie zjonizowany atom helu porusza się w materiale tarczy podlega on wielkiej liczbie zderzeń z atomami tarczy wskutek czego jony helu mogą przechwytywać elektrony atomu tarczy, a następnie są z tych elektronów obdzierane. Ogromna ilość zderzeń prowadzi do ustalenia się stanu równowagi ładunkowej, tzn. ustala się definitywna wartość dla frakcji wiązki jonów helu w danym stanie ładunkowym. W ustaleniu się równowagi ładunkowej biorą udział dwa procesy: wychwyt elektronu przez pocisk oraz jonizacja pocisku. W przypadku wychwytu elektronu stan ładunkowy jonu zwiększa się w wyniku przechwycenia elektronu z atomu tarczy, natomiast w procesie jonizacji pocisku jon zmniejsza swój stan ładunkowy. Zmiana stanu ładunkowego w materiale tarczy jest konsekwencją wielokrotnej kombinacji tych dwóch procesów.

W prezentowanej pracy wiązka ${}^3\text{He}^{++}$ przyspieszona do energii 150 MeV/u penetrowała folie węgla, niklu, srebra i złota. Oddziaływanie z atomami tarczy prowadziło do reakcji wymiany ładunku:



Po opuszczeniu ośrodka penetracji ustalił się stan ładunkowy wiązki (rys. 2.4). Liczba jonów jednokrotnie zjonizowanego helu ${}^3\text{He}^+$ odpowiada prawdopodobieństwu prze-

życia jonu helu, który wychwycił elektron atomu tarczy i opuścił tarczę zanim został obdarty z tego elektronu w konsekwencji kolejnego oddziaływania.

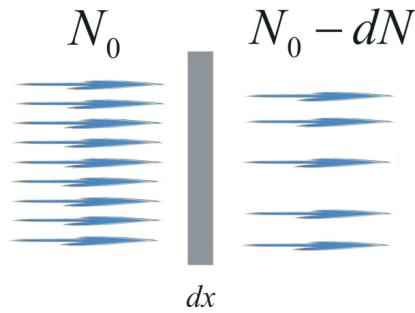


Rysunek 2.4: Stan ładunkowy helu po wyjściu z tarczy.

Jeżeli na tarczę o grubości dx , zawierającej n centrów rozpraszających, pada N jonów to z wiązki usuwanych jest dN cząstek (rysunek 2.5):

$$dN = -Nn\sigma dx, \quad (2.16)$$

$$N = N_0 \exp(-\sigma n dx). \quad (2.17)$$



Rysunek 2.5: Przejście jonów przez materię.

W czasie penetracji jonu w materii w każdej chwili każda cząstka znajduje się w jednym z dwóch stanów ładunkowych: $N = N_1 + N_2$, gdzie N_1 - oznacza ilość helu jednokrotnie zjonizowanego (${}^3\text{He}^+$), N_2 - ilość helu dwukrotnie zjonizowanego (${}^3\text{He}^{++}$). Frakcja cząstek w danym stanie ładunkowym wynosi:

$$F_{1,2} = \frac{N_{1,2}}{N}, \quad (2.18)$$

przy czym $F_1 + F_2 = 1$.

Frakcja cząstek w danym stanie ładunkowym zależy od przekrojów czynnych na wychwyt elektronu i na jonizację pocisku. Zmiana frakcji w tarczy na grubości x wyrażona jest przez równania różniczkowe:

$$\frac{dF_1}{dx} = N(\sigma_{CAP}F_2 - \sigma_{STRIP}F_1), \quad (2.19)$$

$$\frac{dF_2}{dx} = N(\sigma_{STRIP}F_1 - \sigma_{CAP}F_2). \quad (2.20)$$

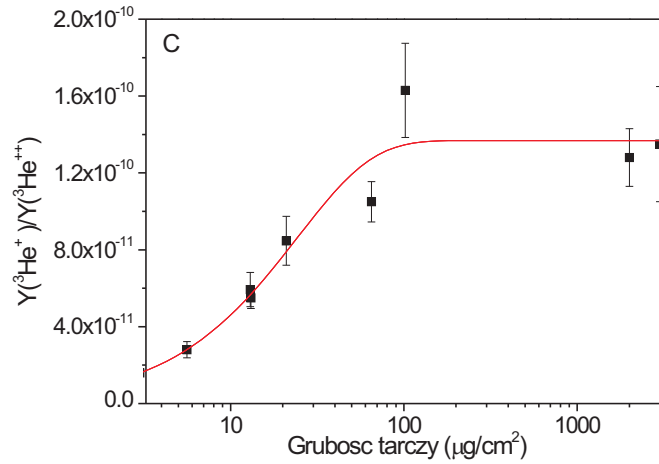
W stanie równowagi ładunkowej osiągnięta wartość danej frakcji stanu ładunkowego przestaje zmieniać się z grubością tarczy i dlatego $\frac{dF_{1,2}}{dx} = 0$ i stąd:

$$\frac{F_1}{F_2} = \frac{\sigma_{CAP}}{\sigma_{STRIP}}. \quad (2.21)$$

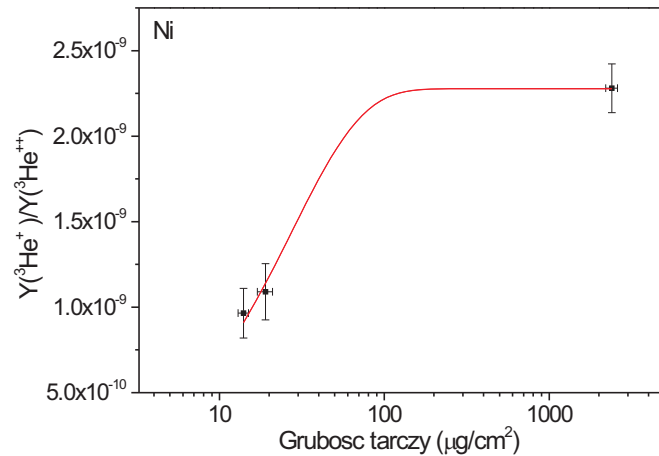
W prezentowanej pracy $F_1=Y(He^+)$, $F_2=Y(He^{++})$ wobec czego $Y(He^+)/Y(He^{++}) = \sigma_{CAP}/\sigma_{STRIP}$. Zmierzony stosunek intensywności $Y(^3He^+)/Y(^3He^{++})$ w funkcji grubości tarczy odzwierciedlony jest przez funkcję (rys. 2.6 - 2.9):

$$R = \frac{Y(^3He^+)}{Y(^3He^{++})} = a [1 - \exp(-bx)]. \quad (2.22)$$

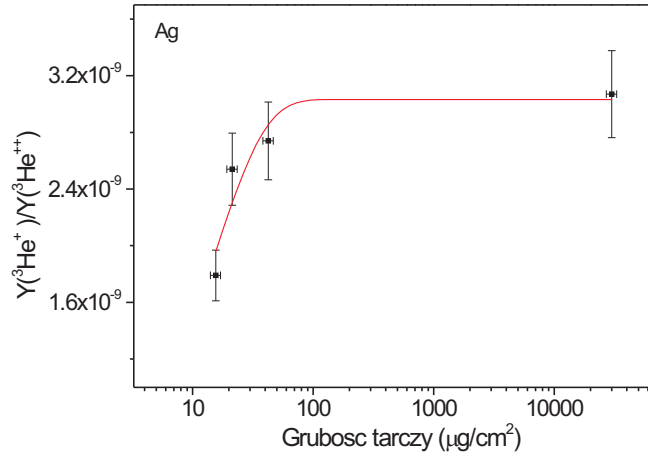
Korzystając ze związków: $a \sim \frac{\sigma_{CAP}}{\sigma_{STRIP}}$, $b \sim \sigma_{STRIP}$ wyznaczone zostały przekroje czynne na jonizację pocisku i na wychwyt elektronu (tabela 2.7).



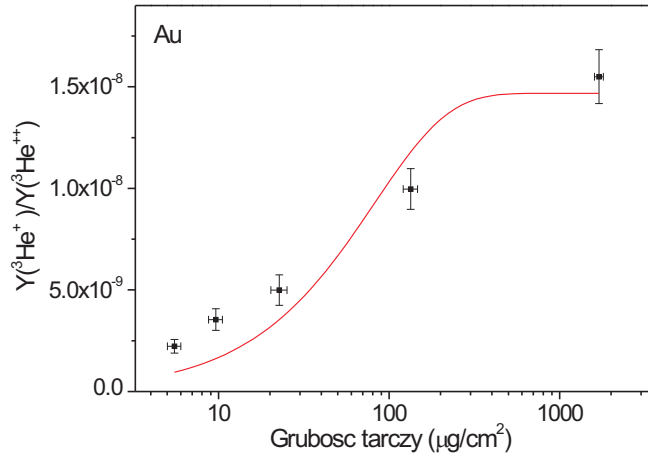
Rysunek 2.6: Stosunek jednokrotnie zjonizowanego helu do helu całkowicie obdarte-
go z elektronów $Y(^3He^+)/Y(^3He^{++})$ w funkcji grubości tarczy węglowej.



Rysunek 2.7: Stosunek $Y(^3He^+)/Y(^3He^{++})$ w funkcji grubości tarczy niklowej.



Rysunek 2.8: *Stosunek $Y(^3He^+)/Y(^3He^{++})$ w funkcji grubości tarczy srebra.*



Rysunek 2.9: *Stosunek $Y(^3He^+)/Y(^3He^{++})$ w funkcji grubości tarczy złota.*

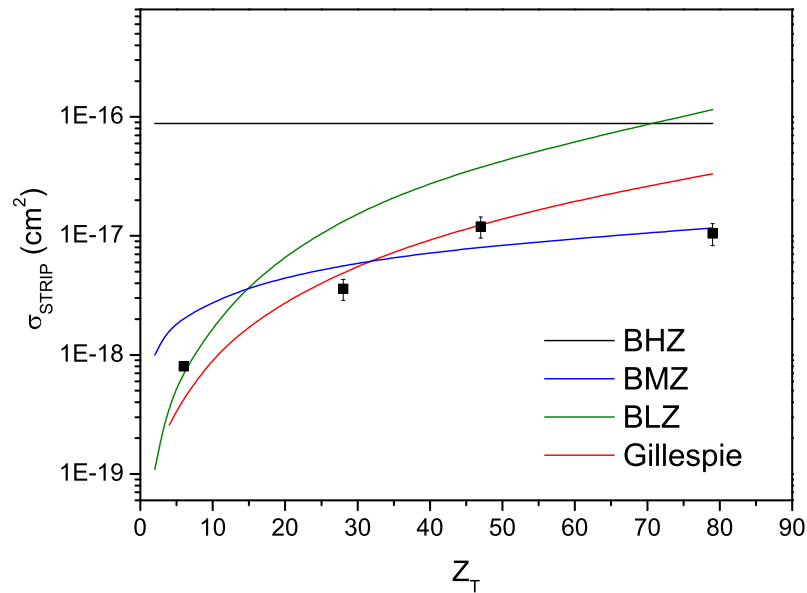
Tabela 2.1: Eksperymentalne przekroje czynne na jonizację pocisku i wychwyt elektronu przez jony helu o energii 150 MeV/u penetrujących tarcze węgla, niklu, srebra i złota.

Z	$\sigma_{ION} \text{ (cm}^2\text{)}$	$\sigma_{CAP} \text{ (cm}^2\text{)}$
6	$(8.21 \pm 0.60) \times 10^{-19}$	$(1.10 \pm 0.20) \times 10^{-28}$
28	$(3.52 \pm 0.29) \times 10^{-18}$	$(8.03 \pm 0.93) \times 10^{-27}$
47	$(1.20 \pm 0.25) \times 10^{-17}$	$(3.65 \pm 0.99) \times 10^{-26}$
79	$(1.05 \pm 0.19) \times 10^{-17}$	$(1.12 \pm 0.27) \times 10^{-25}$

2.3. Dyskusja wyników eksperymentalnych

2.3.1. Przekrój czynny na jonizację jonów helu w funkcji liczby atomowej tarczy i w funkcji prędkości pocisku

Przy dużej prędkości pocisku, tak jak w przypadku jonów helu o energii 150 MeV/u ($v_P = 15.2 \times 10^9$ cm/s) główną rolę odgrywają procesy jonizacji pocisku. Przekrój czynny na jonizację pocisku jest ok. 10^8 razy większy niż przekrój czynny na wychwyt elektronu. Przekrój czynny na proces jonizacji pocisku silnie zależy zarówno od prędkości pocisku jak i liczby atomowej pocisku i tarczy. Rysunek 2.10 przedstawia porównanie eksperymentalnych i teoretycznych przekrojów czynnych na jonizację pocisku He^+ o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy. Wartość przekroju czynnego na jonizację pocisku w opisie Bohra dla wysokich liczb atomowych tarczy (BHZ) jest stały dla wszystkich wartości Z_T . Jonizacja pocisku w wyniku przejścia przez tarczę węglową jest dobrze opisana przez model Bohra dla niskich Z tarczy (BLZ – zielona linia). W przypadku tarcz o średnim Z zgodność z danymi eksperymentalnymi wykazuje model Gillespiego (czerwona linia), natomiast opis Bohra dla średnich Z (BMZ – niebieska linia) nie odtwarza wartości eksperymentalnych otrzymanych dla niklu i srebra, natomiast niespodziewanie dobrze opisuje eksperymentalny przekrój czynny dla atomów złota.



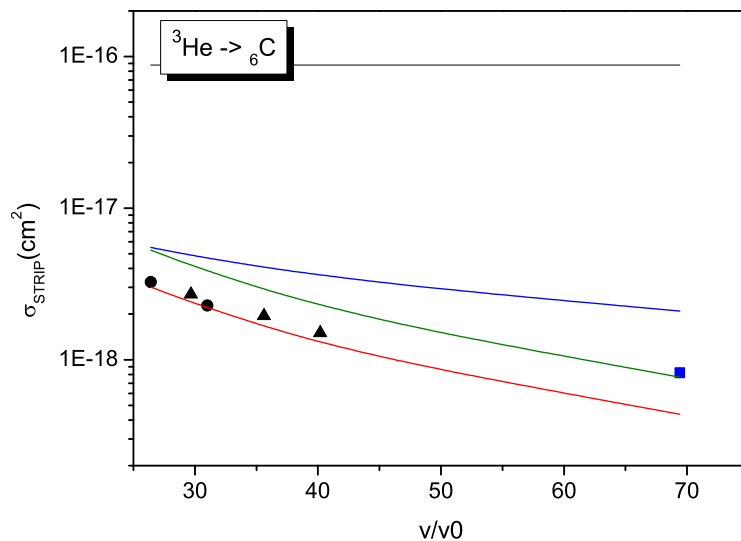
Rysunek 2.10: Przekrój czynny na jonizację pocisku (eksperymentalny i teoretyczny) dla pocisku helu o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy.

Tabela 2.2: Eksperymentalne i teoretyczne przekroje czynne (cm^2) na jonizację pocisku dla pocisku helu o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy.

Z	BLZ	BMZ	BHZ	Gillespie	Eksperyment
6	7.66×10^{-19}	2.09×10^{-18}	8.79×10^{-17}	4.37×10^{-19}	$(8.21 \pm 0.60) \times 10^{-19}$
28	1.48×10^{-17}	5.84×10^{-18}	8.79×10^{-17}	4.45×10^{-18}	$(3.52 \pm 0.29) \times 10^{-18}$
47	4.12×10^{-17}	8.24×10^{-18}	8.79×10^{-17}	1.01×10^{-17}	$(1.20 \pm 0.25) \times 10^{-17}$
79	1.15×10^{-16}	1.17×10^{-17}	8.79×10^{-17}	2.12×10^{-17}	$(1.05 \pm 0.19) \times 10^{-17}$

Przekrój czynny na jonizację pocisku w dużej mierze zależy od prędkości pocisku. Kiedy szybko poruszające się jony uderzają w tarczę zostają obdarte ze słabo związanych elektronów ($v_P \gg v_e$). Na rysunkach 2.11 - 2.14 i w tabelach 2.3 - 2.6 przedstawiono porównanie eksperymentalnego przekroju czynnego na jonizację pocisku w funkcji prędkości pocisku z modelami Bohra (BMZ – niebieska linia i BLZ – zielona linia) i Gillespiego (czerwona linia). Dane eksperymentalne w zakresie energii pocisku od 17.3 do 43.4 MeV/u zaczerpnięto z prac Katayamy [102, 103, 104].

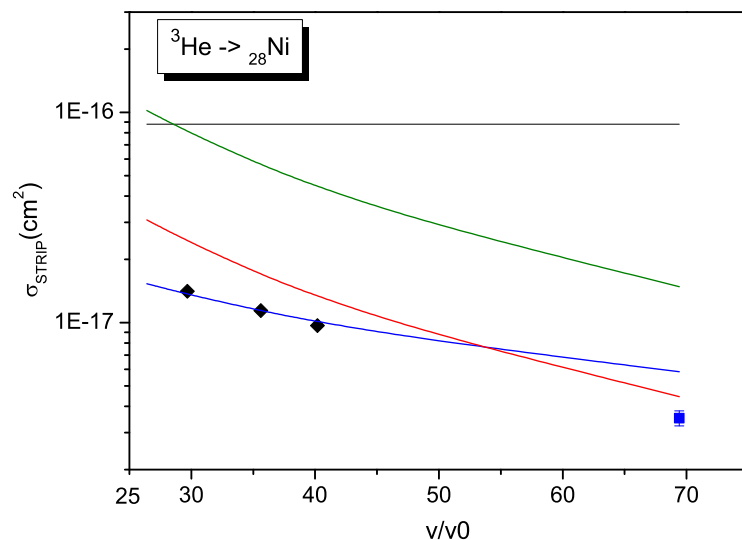
W przypadku modelu Bohra dla tarcz o wysokim Z przekrój czynny nie zależy od prędkości pocisku. W pozostałych przypadkach wszystkie modele wykazują podobną zależność od prędkości jonu. W przypadku tarczy węglowej dla niskich energii pocisku stwierdzono dobrą zgodność z modelem Gillespiego, natomiast dla jonów helu o energii 150 MeV/u wynik numeryczny tego modelu odbiega od wyniku eksperymentalnego. Zgodność otrzymano stosując obliczenia Bohra dla tarcz o niskim Z tarczy. Teoria BMZ, która powstała na potrzeby opisu procesu jonizacji pocisku poruszającego się z małymi prędkościami, dobrze odzwierciedla dane eksperymentalne otrzymane dla niskich energii pocisku w zakresie do 43.4 MeV/u (wyłączając tarczę węglową). Model ten przestaje być satysfakcjonujący przy wyższych energiach jonów (150 MeV/u, gdzie skraca się czas przejścia pocisku przez tarczę, a co za tym idzie redukowany jest wkład procesów wielokrotnych). W tym zakresie energii jonów helu oddziałujących z tarczami niklu i srebra dobrą zgodność otrzymano po zastosowaniu opisu Gillespiego. Dla tarczy złota ani model BHZ ani model Gillespiego stosujący parametryzację siły zderzenia (wzór 2.14), nie odzwierciedlają danych eksperymentalnych. Niespodziewanie zaobserwowano zgodność z obliczeniami Bohra dla średnich Z, mimo że złoto zaliczane jest do pierwiastków o dużym Z tarczy ($Z = 79$) [13]. Widać więc, że nawet najbardziej zaawansowana teoria opisująca jonizację pocisku, jaką jest teoria Gillespiego, wymaga dalszego rozwoju i weryfikacji.



Rysunek 2.11: *Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na jonizację pocisku dla pocisku ^3He penetrującego tarczę węglową w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: ● - z ref. [102], ▲ - z ref. [103], ■ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - model BHZ, niebieska - BMZ, zielona - BLZ, czerwona - model Gillespiego.*

Tabela 2.3: *Eksperymentalne i teoretyczne (Bohr i Gillespie) wartości przekrojów czynnych na jonizację pocisku przechodzącego przez tarcze węglową. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 7.3%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.*

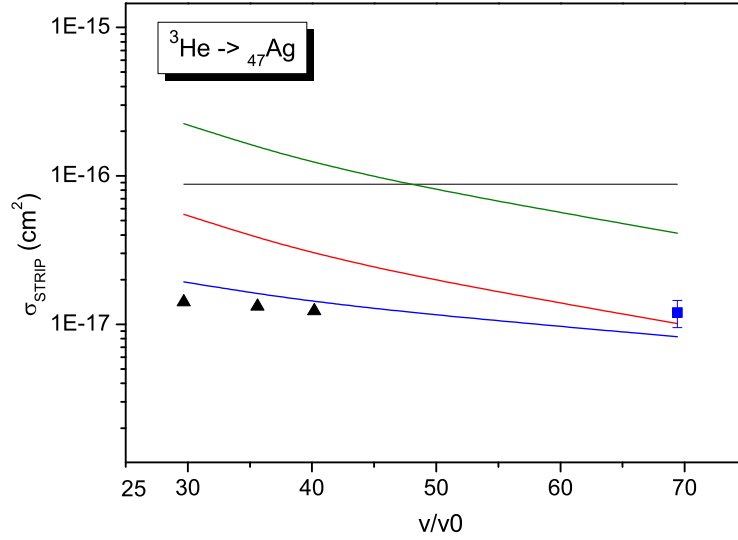
Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na jonizację [$\times 10^{-17} \text{ cm}^2$]			
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	BLZ	BMZ	Gillespie
17.3	0.19	26.4	0.33	0.53	0.55	0.30
22.6	0.21	29.7	0.27	0.42	0.49	0.24
24.0	0.23	31.0	0.23	0.38	0.47	0.22
33.1	0.26	35.6	0.20	0.29	0.41	0.17
43.4	0.29	40.2	0.15	0.23	0.36	0.13
150	0.51	69.4	0.08	0.08	0.21	0.04



Rysunek 2.12: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na jonizację pocisku dla pocisku ^3He penetrującego tarczę niklową w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: $\blacklozenge$ - z ref. [104], $\blacksquare$ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - model BHZ, niebieska - BMZ, zielona - BLZ, czerwona - model Gillespiego.

Tabela 2.4: Eksperymentalne i teoretyczne (Bohr i Gillespie) wartości przekrojów czynnych na jonizację pocisku przechodzącego przez tarcze niklową. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 8.2%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

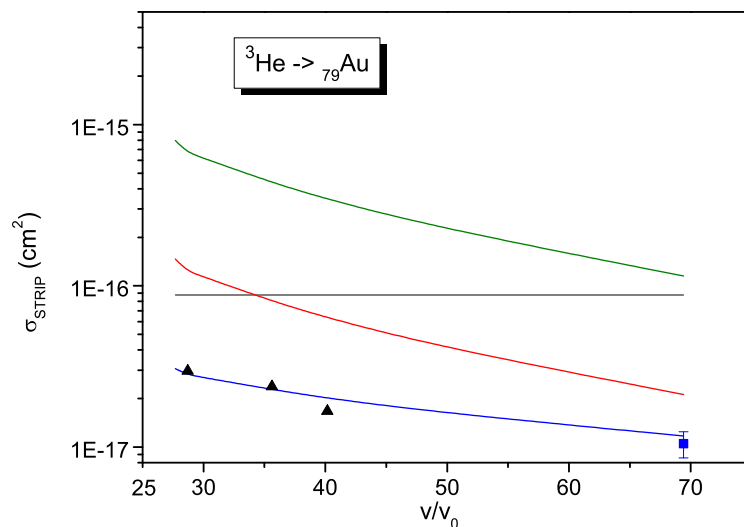
Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na jonizację [$\times 10^{-17} \text{ cm}^2$]			
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	BLZ	BMZ	Gillespie
29.7	0.21	29.4	1.40	8.10	1.36	2.44
33.1	0.26	35.6	1.14	5.62	1.14	1.69
43.4	0.29	40.2	0.97	4.42	1.01	1.33
150	0.51	69.4	0.36	1.48	0.58	0.44



Rysunek 2.13: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na jonizację pocisku dla pocisku ${}^3\text{He}$ penetrującego tarczę srebra w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: $\blacktriangle$ - z ref. [103], $\blacksquare$ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - model BHZ, niebieska - BMZ, zielona - BLZ, czerwona - model Gillespiego.

Tabela 2.5: Eksperymentalne i teoretyczne (Bohr i Gillespie) wartości przekrojów czynnych na jonizację pocisku przechodzącego przez tarcze srebra. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 20.8%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na jonizację [$\times 10^{-17} \text{ cm}^2$]			
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	BLZ	BMZ	Gillespie
22.6	0.21	29.7	1.41	22.50	1.93	5.51
33.1	0.26	35.6	1.32	15.63	1.61	3.83
43.4	0.29	40.2	1.23	12.28	1.42	3.01
150	0.51	69.4	1.20	4.12	0.82	1.01



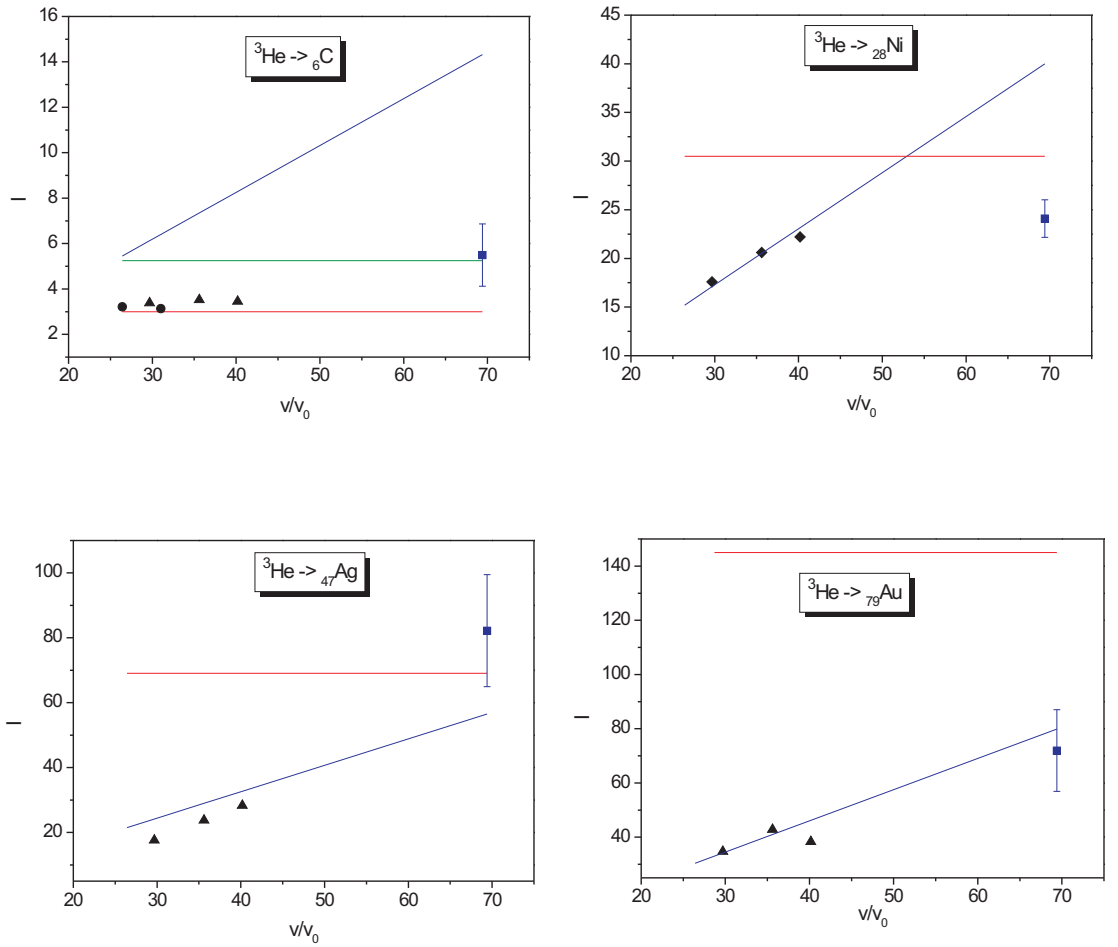
Rysunek 2.14: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na jonizację pocisku dla pocisku ^3He penetrującego tarczę złota w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: $\blacktriangle$ - z ref. [103], $\blacksquare$ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - model BHZ, niebieska - BMZ, zielona - BLZ, czerwona - model Gillespiego.

Tabela 2.6: Eksperymentalne i teoretyczne (Bohr i Gillespie) wartości przekrojów czynnych na jonizację pocisku przechodzącego przez tarcze złota. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 18.1%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na jonizację [$\times 10^{-17} \text{ cm}^2$]			
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	BLZ	BMZ	Gillespie
22.6	0.21	29.7	2.96	67.40	2.82	12.40
33.1	0.26	35.6	2.37	43.80	2.27	8.04
43.4	0.29	40.2	1.67	34.40	2.01	6.32
150	0.51	69.4	1.05	11.50	1.17	2.12

Zależność siły zderzenia w funkcji prędkości pocisku ($I = \frac{\sigma_{STRIP}}{8\pi a_0^2} \left(\frac{v_P}{v_0}\right)^2$) pokazano na rysunku 2.15 (gdzie BMZ – niebieska linia i BLZ – zielona linia, Gillespie – czerwona linia). Siła zderzenia liczona przy użyciu parametryzacji w modelu Gillespiego (wzór 2.14) nie wykazuje zależności od prędkości pocisku. Rachunki Gillespiego dobrze odzwierciedlają dane eksperymentalne dla zderzeń niskoenergetycznych jonów helu z tarczą węglową. W pozostałych przypadkach dane eksperymentalne są znacznie przeszacowane. Dość dobry opis daje natomiast model Bohra BMZ (wzór 2.23), dla którego siła zderzenia rośnie z prędkością pocisku:

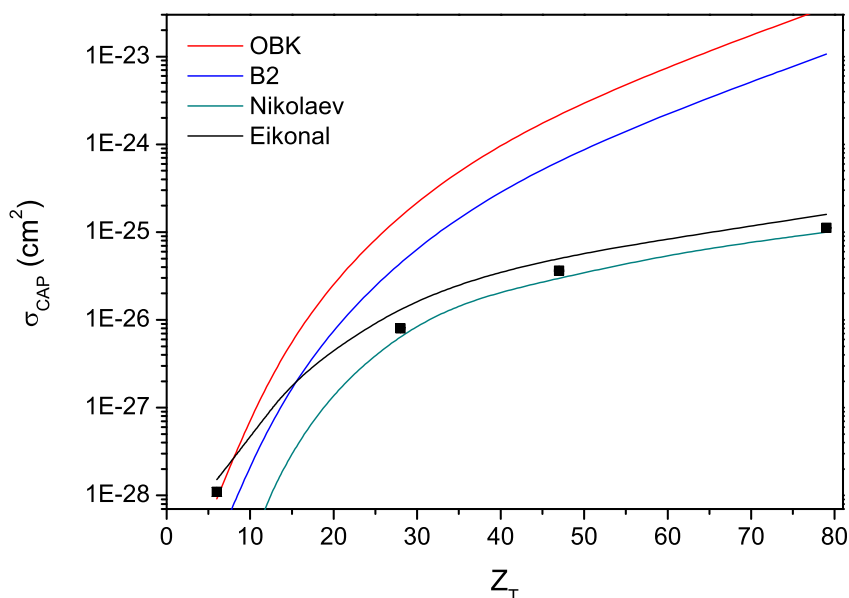
$$I^{BMZ} = \frac{Z^{2/3}}{8Z_P^2} \left(\frac{v_P}{v_0}\right). \quad (2.23)$$



Rysunek 2.15: Siła zderzenia dla pocisku ${}^3\text{He}$ penetrującego tarczę węgla, niklu, srebra i złota w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty w zakresie energii pocisku od 17.3 do 43.4 MeV/u pobrano z ref. [102, 103, 104], natomiast rachunki teoretyczne odzwierciedlone są liniami: niebieska – BMZ, zielona – BLZ, czerwona – model Gillespiego.

2.3.2. Przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony helu w funkcji liczby atomowej tarczy i w funkcji prędkości pocisku

Podczas przejścia wiązki jonów przez materię elektrony atomu tarczy mogą zostać przechwycone przez pocisk. Zgodnie z modelami teoretycznymi przekrój czynny na wychwyt elektronu powinien wzrastać z liczbą atomową tarczy i maleć wraz ze wzrostem prędkości jonu (czas oddziaływania z elektronem maleje ze wzrostem prędkości pocisku, a co za tym idzie maleje też przekrój czynny na wychwyt elektronu). Na rysunku 2.16 i tabeli 2.7 przedstawiono eksperymentalny przekrój czynny na wychwyt elektronu w zestawieniu z modelami teoretycznymi w funkcji liczby atomowej tarczy.

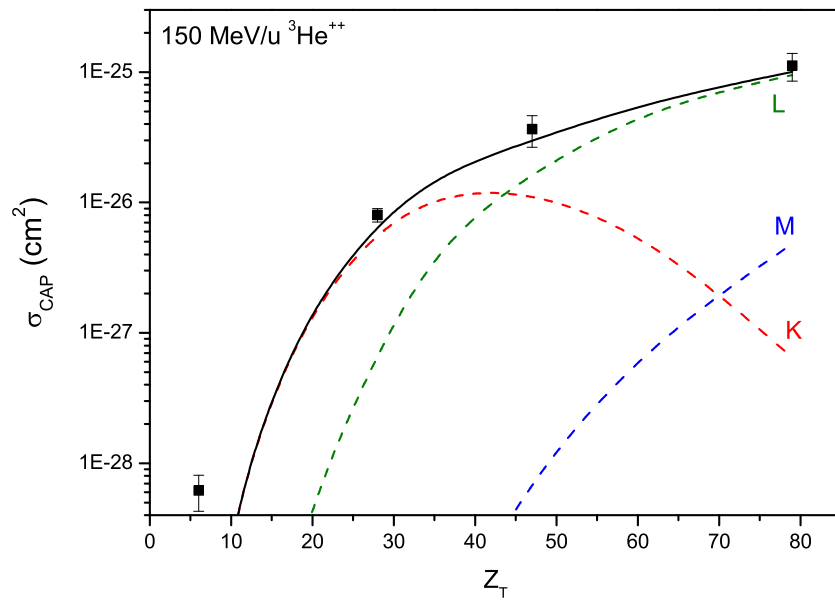


Rysunek 2.16: Przekrój czynny na wychwyt elektronu (eksperymentalny (■) i teoretyczny: OBK, B2, Nikolaev, eikonal) dla pocisku ^3He o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy.

Tabela 2.7: Eksperymentalne i teoretyczne przekroje czynne (cm^2) na wychwyt elektronu przez pocisk ^3He o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy.

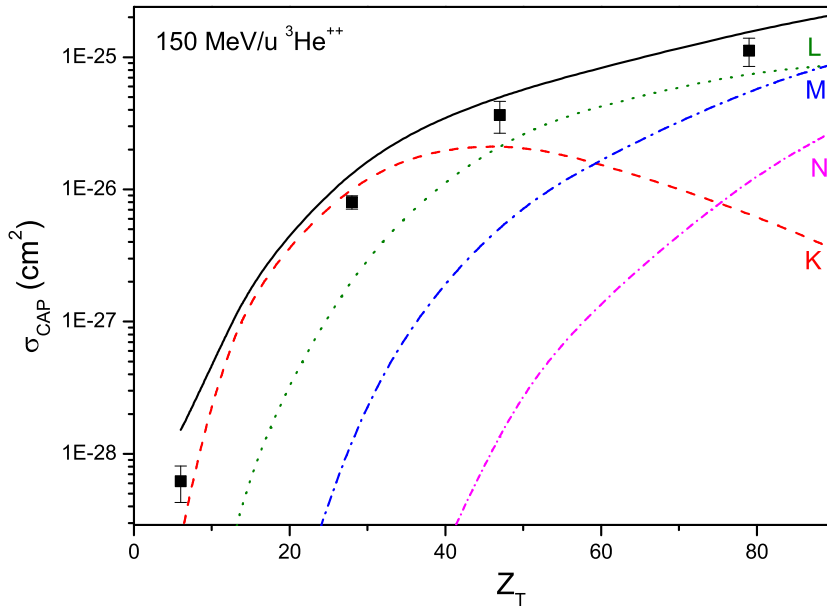
Z	OBK	B2	Nikolaev	Eikonal	Eksperyment
6	9.17×10^{-29}	2.71×10^{-29}	9.25×10^{-31}	1.52×10^{-28}	$(1.10 \pm 0.20) \times 10^{-28}$
28	2.03×10^{-25}	5.99×10^{-26}	7.05×10^{-27}	1.46×10^{-26}	$(8.03 \pm 0.93) \times 10^{-27}$
47	2.71×10^{-24}	7.98×10^{-25}	3.01×10^{-26}	5.05×10^{-26}	$(3.65 \pm 0.99) \times 10^{-26}$
79	3.63×10^{-23}	1.07×10^{-23}	1.00×10^{-25}	1.59×10^{-25}	$(1.12 \pm 0.27) \times 10^{-25}$

O ile teoria OBK dość dobrze odzwierciedla dane eksperymentalne dla tarcz o niskim Z , to dla wyższych Z_T rachunki znacznie przeszacowują dane eksperymentalne. W przypadku obliczeń wg wzoru Nikolaeva, które uwzględniają wychwyt elektronu z poszczególnych powłok atomowych (rys. 2.17), zaobserwowano dość dobrą zgodność z danymi otrzymanymi dla wyższych Z_T (≥ 28). W tym przypadku całkowity wkład do przekroju czynnego dają procesy bezradiacyjne ($\sigma_{CAP} \approx \sigma_{NREC}$). Na rysunku 2.18 przedstawiono wartości przekroju czynnego na wychwyt elektronu obliczonych wg teorii eikonalnej, które uwzględniają wkład pochodzący od wychwyty elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy.



Rysunek 2.17: Eksperymentalny i teoretyczny (Nikolaev) przekrój czynny na wychwyt elektronu dla pocisku ${}^3\text{He}$ o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy. Rysunek przedstawia wyniki obliczeń wg teorii Nikolaeva uwzględniające wkład pochodzący od wychwyty elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy. Linia czerwona pokazuje wkład od powłoki K, zielona - L, niebieska - M.

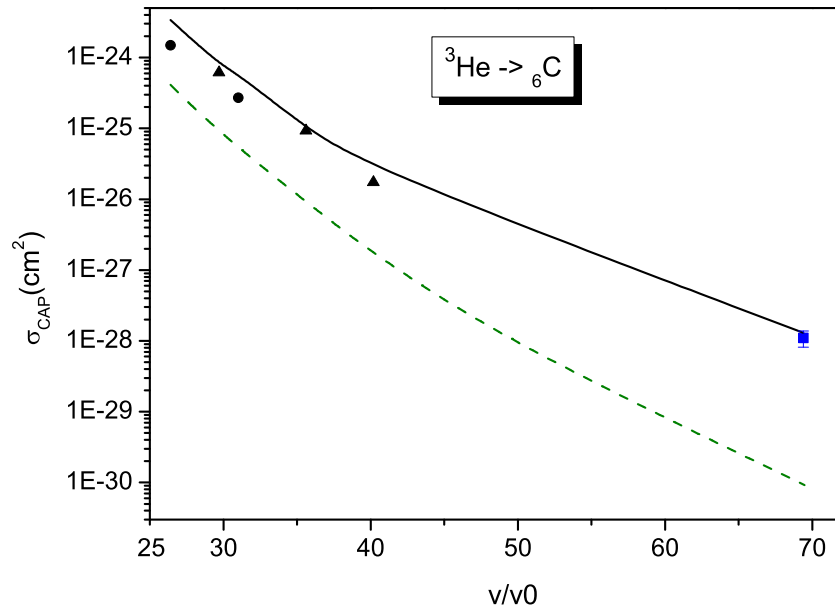
W przeciwieństwie do atomów o wysokim Z , elektrony w atomach o niskim Z mogą być traktowane jako cząstki swobodne, w związku z tym zasada zachowania energii wymaga, aby wychwytowi elektronu towarzyszyła emisja fotonu. Niezgodność rachunków Nikolaeva dla tarczy węglowej, wynika zatem z faktu, iż duży wkład w wychwyt elektronu dają tu procesy radiacyjne, które są zaniedbywane w obliczeniach. Radiacyjny wychwyt elektronu (REC) omówiony zostanie pokrótce w kolejnym rozdziale. Najdokładniejszy opis procesu wychwyty elektronu daje relatywistyczna teoria eikonalna. W opisie relatywistycznym uwzględnia się, że elektron ma spin $\frac{1}{2}$, a więc w rachunki włączone jest oddziaływanie spin-orbita. Ponadto, w przeciwieństwie do teorii nierelatywistycznych, w podejściu relatywistycznym uwzględniono fakt, iż elek-



Rysunek 2.18: *Eksperymentalny i teoretyczny (eikonal) przekrój czynny na wychwyt elektronu dla pocisku ^3He o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy. Rysunek przedstawia wyniki obliczeń wg teorii eikonalej uwzględniające wkład pochodzący od wychwytu elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy. Linia czerwona pokazuje wkład od powłoki K, zielona - L, niebieska - M, różowa - N.*

tron odczuwa zarówno pole elektryczne jak i pole magnetyczne pocisku. Dodatkowo w obliczeniach uwzględniono poprawki pochodzące z relatywistycznych modyfikacji powłok atomowych. Uwzględniając te efekty zależność przekroju czynnego od prędkości pocisku różni się znacznie od wyników nierelatywistycznych. W podejściu eikonalnym przekrój czynny na wychwyt elektronu maleje znacznie wolniej z energią pocisku (jak E_P^{-1}) niż w teoriach OBK. W każdym jednak przypadku przekrój czynny na wychwyt elektronu maleje bardzo szybko z prędkością pocisku (zarówno eksperymentalny jak i teoretyczny).

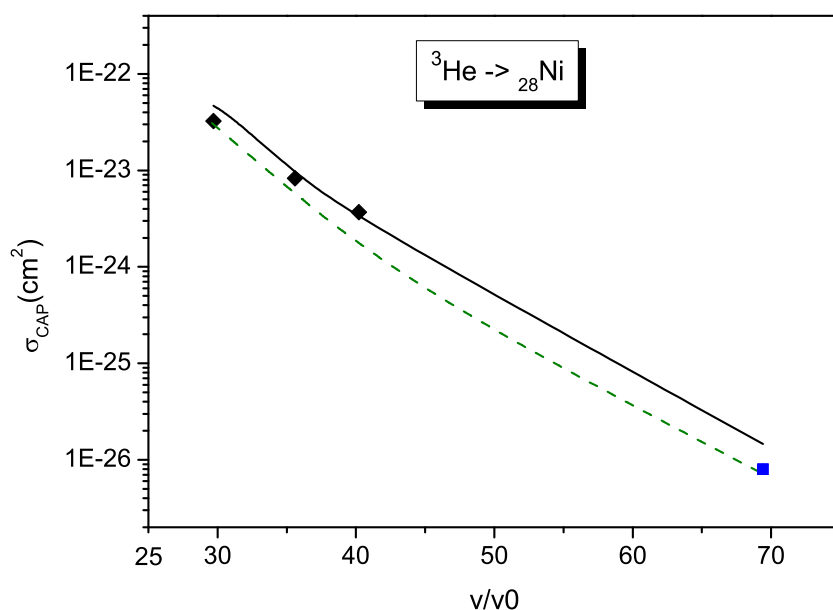
Na rysunkach 2.19 - 2.22 przedstawiono przekrój czynny na wychwyt elektronu w funkcji prędkości pocisku dla poszczególnych tarcz. Dane liczbowe przedstawiono odpowiednio w tabelach 2.8 - 2.11. Wyniki eksperymentalne porównano z teoriami: Nikolaeva (zielona przerywana linia) i eikonalną (czarna linia). Wartości eksperymentalne w zakresie energii pocisku od 17.3 do 43.4 MeV/u zaczerpnięto z prac Katayamy [102, 103, 104].



Rysunek 2.19: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony ^3He penetrujące tarczę węglową w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: ● - z ref. [102], ▲ - z ref. [103], ■ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - obliczenia eikonalne, linia zielona przerywana - obliczenia Nikolaeva.

Tabela 2.8: Eksperymentalne i teoretyczne (Nikolaev i Eikonal) wartości przekrojów czynnych na wychwyt elektronu przez pocisk helu penetrujący tarczę węglową. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 18.2%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

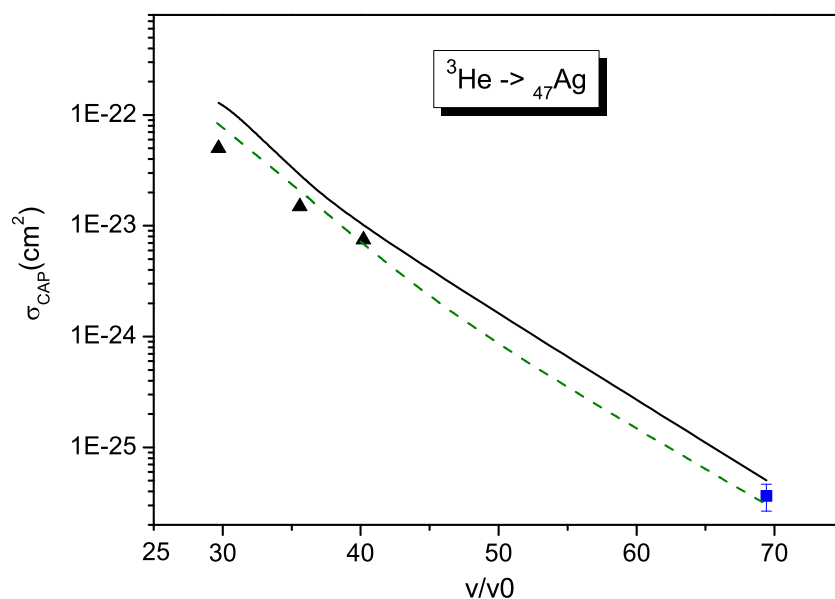
Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na wychwyt elektronu [$\times 10^{-27} \text{ cm}^2$]		
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	Nikolaev	Eikonal
17.3	0.19	26.4	1490	413	3380
22.6	0.21	29.7	616	91	807
24.0	0.23	31.0	272	54	583
33.1	0.26	35.6	92.4	8.2	100
43.4	0.29	40.2	17.3	1.62	22.8
150	0.51	69.4	0.11	0.001	0.13



Rysunek 2.20: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony ^3He penetrujące tarczę niklową w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: $\blacklozenge$ - [104], $\blacksquare$ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - obliczenia eikonalne, linia zielona przerywana - obliczenia Nikolaeva.

Tabela 2.9: Eksperymentalne i teoretyczne (Nikolaev i Eikonal) wartości przekrojów czynnych na wychwyt elektronu przez pocisk helu penetrujący tarczę niklową. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 11.6%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

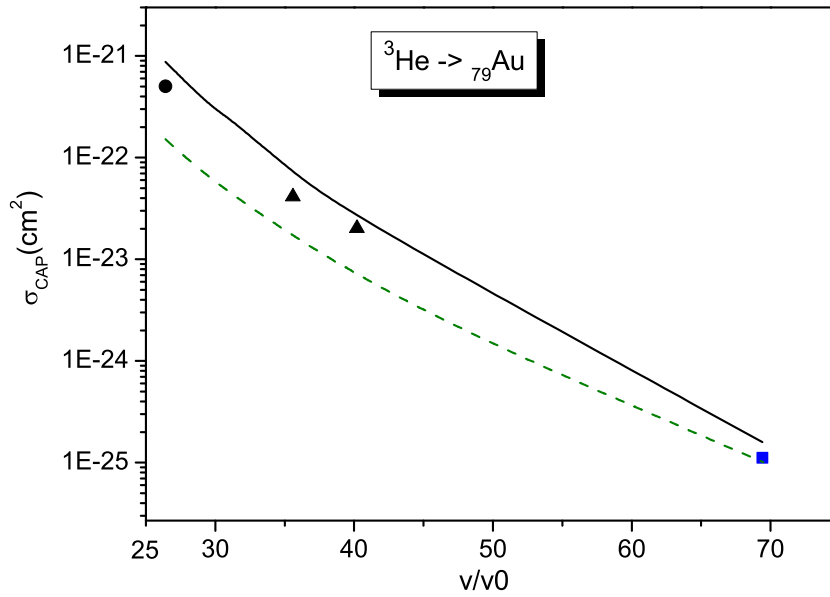
Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na wychwyt elektronu [$\times 10^{-27} \text{ cm}^2$]		
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	Nikolaev	Eikonal
22.6	0.21	29.7	32500	30822	46700
33.1	0.26	35.6	8260	5215	9350
43.4	0.29	40.2	3690	1671	3070
150	0.51	69.4	8.03	7.05	14.60



Rysunek 2.21: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony ^3He penetrujące tarczę srebra w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: $\blacktriangle$ - z ref. [103], $\blacksquare$ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - obliczenia eikonalne, linia zielona przerywana - obliczenia Nikolaeva.

Tabela 2.10: Eksperymentalne i teoretyczne (Nikolaev i Eikonal) wartości przekrojów czynnych na wychwyt elektronu przez pocisk helu penetrujący tarczę srebra. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 27.1%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na wychwyt elektronu [$\times 10^{-27} \text{ cm}^2$]		
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	Nikolaev	Eikonal
17.3	0.19	26.4	50100	129000	84328
33.1	0.26	35.6	14900	28100	19403
43.4	0.29	40.2	7470	9100	6594
150	0.51	69.4	36.5	50.5	30.1



Rysunek 2.22: Eksperymentalny i teoretyczny przekrój czynny na wychwyt elektronu przez jony ${}^3\text{He}$ penetrujące tarczę złotą w funkcji prędkości pocisku, gdzie punkty: ● - z ref. [102], ▲ - z ref. [103], ■ - eksperyment dyskutowany w tej pracy, linie: czarna - obliczenia eikonalne, linia zielona przerywana - obliczenia Nikolaeva.

Tabela 2.11: Eksperymentalne i teoretyczne (Nikolaev i Eikonal) wartości przekrojów czynnych na wychwyt elektronu przez pocisk helu penetrujący tarczę złotą. Wartość przekroju czynnego omawianego eksperymentu obarczona jest błędem 24.1%, błąd pozostałych wartości eksperymentalnych poniżej 10%.

Energia [MeV/u]	Prędkość		Przekrój czynny na wychwyt elektronu [$\times 10^{-27} \text{ cm}^2$]		
	v/c	v/v ₀	Eksperyment	Nikolaev	Eikonal
17.3	0.19	26.4	503000	152035	872000
33.1	0.26	35.6	41300	15803	71000
43.4	0.29	40.2	20200	6884	24800
150	0.51	69.4	112	101	159

Na rysunkach nie przedstawiono porównania z opisami OBK, w których przewidywana zależność przekroju czynnego na wychwyt elektronu od prędkości maleje jak $v_P^{-12} (E_P^{-6})$, ponieważ drastycznie przeszacowują one dane eksperymentalne.

Zarówno rachunki Nikolaeva jak i teoria eikonalna wykazują podobną zależność przekroju czynnego na wychwyt elektronu od prędkości jonu. W przypadku tarczy węglowej obliczenia Nikolaeva dość dobrze odzwierciedlają zależność od prędkości, ale niedoszacowują wartości eksperymentalnych dla wszystkich energii pocisku. Rozbieżność ta rośnie z prędkością pocisku. Powodem tego niedopasowania jest fakt, iż teoria ta nie uwzględnia radiacyjnego wychwytu elektronu, który daje dość duży wkład do całkowitego wychwytu elektronu z tarcz o małej liczbie atomowej. Dużo lepsze dopasowanie zaobserwowano dla teorii eikonalnej, w którym uwzględniono procesy radiacyjne. Wartości przekrojów czynnych na wychwyt elektronu z tarcz złota przez jony helu poruszającego się z prędkością $\beta=0.51$ wyznaczone z rachunków Nikolaeva dobrze odzwierciedlają wynik eksperymentalny, podczas gdy przy niższych prędkościach odbiegają od wartości eksperymentalnych o czynnik ok. 4. Teoria eikonalna znacznie lepiej opisuje proces wychwytu, niemniej jednak można zauważyć, że lekko przeszacowuje dane eksperymentalne. W pozostałych przypadkach obie teorie dają zbliżone rezultaty, aczkolwiek widać, że krzywa liczona przy zastosowaniu teorii eikonalnej leży bliżej punktów eksperymentalnych.

2.3.3. Radiacyjny wychwyt elektronu

Całkowity przekrój czynny na wychwyt elektronu zawiera dwa składniki: przekrój czynny na radiacyjny i bezradiacyjny wychwyt elektronu: $\sigma_{CAP}^{tot} = \sigma_{CAP}^{NREC} + \sigma_{CAP}^{REC}$. Radiacyjny wychwyt elektronu jest jednym z fundamentalnych procesów elektromagnetycznego oddziaływania cząstek naładowanych. W procesie tym elektron atomu tarczy chwytyany jest do stanów związanych pocisku, a nadmiar energii unoszony jest przez foton. Znaczenie radiacyjnego wychwytu elektronu dostrzeżono w wielu dziedzinach fizyki takich jak fizyka plazmy [105], astrofizyka [106, 107] czy też fizyka akceleratorów podczas chłodzenia wiązką elektronów [108].

Radiacyjny wychwyt elektronu (REC) staje się istotny w obszarze dużych prędkości pocisku i niskich Z tarczy [109]. Przekrój czynny na radiacyjny wychwyt elektronu jest proporcjonalny do liczby elektronów w atomie tarczy i pokazuje ostrą zależność zarówno od prędkości jak i liczby atomowej pocisku. W obszarze nierelatywistycznych prędkości pocisku:

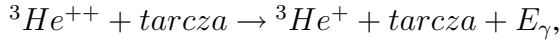
$$\sigma_{CAP}^{REC} \propto \frac{Z_T Z_P^5}{v_P^5}. \quad (2.24)$$

Przy wysokich prędkościach pocisku [99, 110]:

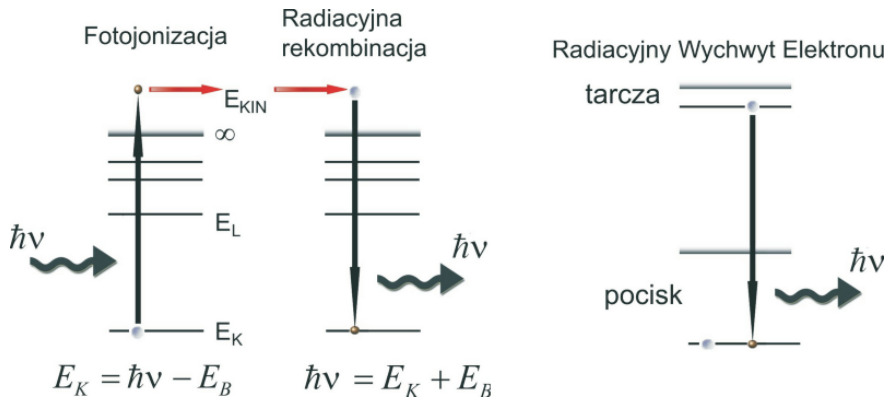
$$\sigma_{CAP}^{REC} \propto \frac{Z_T Z_P^5}{\gamma}, \quad (2.25)$$

gdzie $\gamma = 1/(1-\beta^2)^{1/2}$, $\beta = v_P/c$. Czynniki Z_T związany jest z tym, że każdy elektron tarczy ma takie same szanse na to, aby być wychwyconym przez pocisk.

Radiacyjny wychwyt elektronu z atomu tarczy o ładunku Z_T do związanego stanu jonu o liczbie atomowej Z_P można zapisać w postaci:



gdzie $E_\gamma = E_{KIN} + E_B$ jest energią emitowanego fotonu, która jest równa energii kinetycznej elektronu E_{KIN} plus energia wiązania elektronu E_B w stanie końcowym.



Rysunek 2.23: Schemat zjawiska fotoelektrycznego i radiacyjnej rekombinacji (odwróconego w czasie fotoefektu) oraz radiacyjnego wychwytu elektronu z atomu tarczy do nieobsadzonego stanu związanego pocisku.

Jeżeli energia kinetyczna elektronu w układzie pocisku jest większa niż energia wiązania elektronu w tarczy radiacyjny wychwyt elektronu odpowiada odwróconemu w czasie zjawisku fotoelektrycznemu (2.23). Odwrócony w czasie efekt fotoelektryczny nazywany jest radiacyjną rekombinacją (RR).

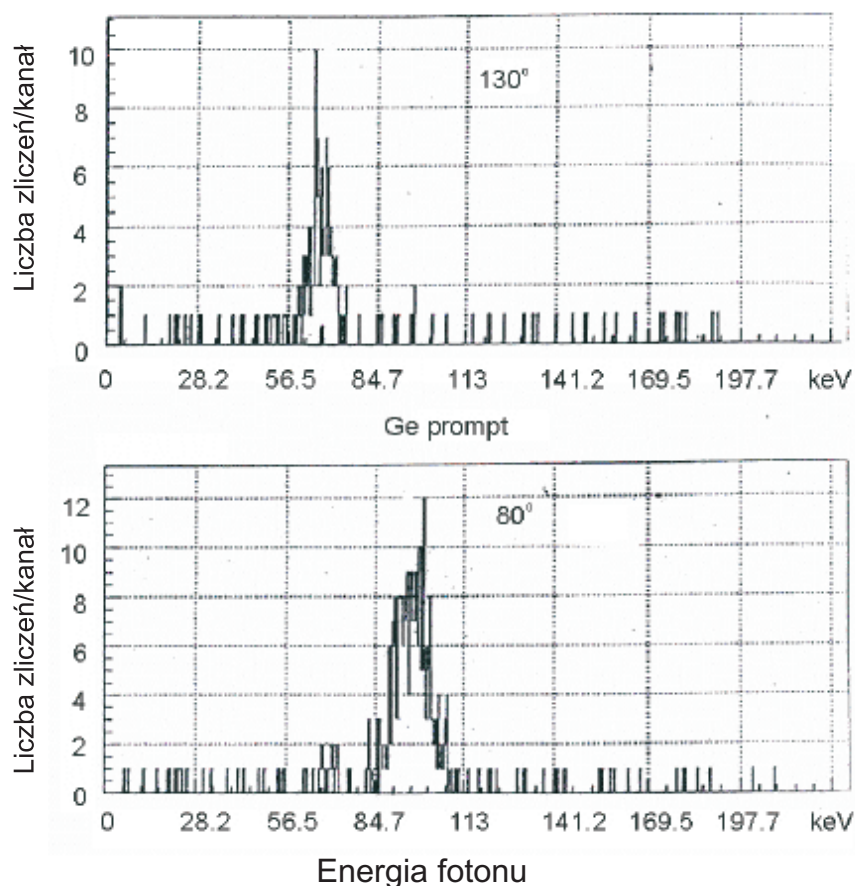
Elektrony w atomie o niskim Z mogą być traktowane jako elektrony swobodne, w związku z czym opis radiacyjnego wychwytu elektronu sprowadza się do opisu radiacyjnej rekombinacji zachodzącej dla elektronów swobodnych. Ponieważ radiacyjna rekombinacja jest procesem odwrotnym do fotoefektu, przekroje czynne dla obu procesów są spokrewnione. Znając różniczkowy przekrój czynny na zjawisko fotoelektryczne znaleźć można różniczkowy przekrój czynny na radiacyjną rekombinację elektronu. Ogólny opis przekroju czynnego na radiacyjny wychwyt elektronu wyprowadzony został przez Stobbe'a w roku 1930 (nierelatywistyczne przybliżenie).

nie dipolowe, DA) [111]. W nierelatywistycznym przybliżeniu dipolowym całkowity przekrój czynny na radiacyjny wychwyt elektronu do powłoki K dany jest wyrażeniem:

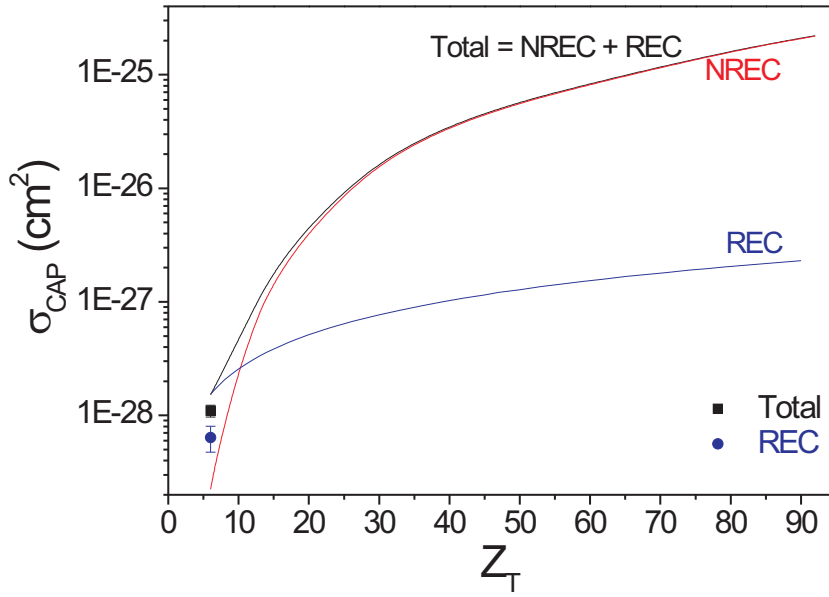
$$\sigma_{K-REC}^{Stobbe} = 9.165 * 10^{-21} \left(\frac{\nu^3}{1 + \nu^2} \right)^2 \frac{\exp(-4\nu \arctan(1/\nu))}{1 - \exp(-2\pi\nu)} \quad (2.26)$$

gdzie $\nu = \alpha Z_P / n\beta$ jest parametrem Sommerfeld'a.

Wkład radiacyjnego wychwytu elektronu do całkowitej wartości wychwytu wyznaczony został w eksperymencie koincydencyjnym. Jednokrotnie zjonizowane jony helu $^3\text{He}^+$ rejestrowano w koincydencji z emitowanymi fotonami. Zaniedbując energię wiązania w jonie helu energia fotonu ($E_{REC} = 84 \text{ keV}$) odpowiada energii elektronu w układzie pocisku. Emitowane fotony rejestrowane były przy użyciu detektorów germanowych zamontowanych na kątach: $\theta = 80^\circ$ i $\theta = 130^\circ$ w stosunku do kierunku wiązki. Widma fotonów pokazane zostały na rysunku 2.24.



Rysunek 2.24: Widma fotonów pochodzących z radiacyjnego wychwytu elektronu.



Rysunek 2.25: Całkowity teoretyczny przekrój czynny na wychwyt elektronu (linia czarna). Pokazano wkład od bezradiacyjnego (czerwona linia) i radiacyjnego (linia niebieska) wychwytu elektronu z atomu tarczy do nieobsadzonego stanu związanego pocisku ${}^3\text{He}^{++}$. Dla porównania przedstawiono wartości otrzymane w ramach omawianego eksperymentu.

Z pomiarów koincydencyjnych, w których jony ${}^3\text{He}^{++}$ o energii początkowej 150 MeV/u bombardowały tarczę węglową otrzymano wartość stosunku wychwytu radiacyjnego do całkowitego wychwytu elektronu: $\frac{\sigma_{REC}}{\sigma_{total}} = 0.58 \pm 0.08$ [112, 14]. Stąd otrzymano eksperymentalną wartość przekroju czynnego na radiacyjny wychwyt elektronu $\sigma_{REC} = (6.38 \pm 1.63) \times 10^{-29} \text{ cm}^2$. Teoretyczna wartość jest wyższa od wartości eksperymentalnej o czynnik 2.4. Teoretyczne wartości przekroju czynnego na radiacyjny wychwyt elektronu do pocisku helu ${}^3\text{He}^{++}$ w porównaniu z wartościami przekroju czynnego na bezradiacyjny wychwyt elektronu w funkcji liczby atomowej tarczy przedstawiono na rysunku 2.25. Pokazano zatem, że w zakresie dużych prędkości pocisku i niskich Z tarczy proces radiacyjnego wychwytu elektronu daje ogromny wkład do całkowitego przekroju czynnego na wychwyt elektronu.

2.4. Podsumowanie

W tej części pracy przedstawiono zestaw danych z eksperymentu przeprowadzonego w Research Center for Nuclear Physics (RCNP) w Osace na spektrometrze magnetycznym o wysokiej rozdzielczości. Uzyskano przekroje czynne na wychwyt elektronu z atomu tarczy o różnej liczbie atomowej do pocisku ${}^3\text{He}^{++}$ rozpędzonego do energii 150 MeV/u i na jonizację ${}^3\text{He}^+$ w wyniku dalszej penetracji tarczy. Dwukrotnie zjonizowane jony ${}^3\text{He}^{++}$ przyspieszane do energii 150 MeV/u skierowane były na tarcze: węgla ($Z=6$), niklu ($Z=28$), srebra ($Z=47$) i złota ($Z=79$). W wyniku wielokrotnego oddziaływania jonów z atomami tarczy zmieniał się stan ładunkowy wiązki, wskutek czego rejestrowane jony posiadały ładunek $(1+)$ i $(2+)$. Jony o różnym stanie ładunkowym były rozdzielane i rejestrowane w oddzielnych detektorach. Z zależności stosunku intensywności wiązki helu jednokrotnie do dwukrotnie zjonizowanego oszacowano przekroje czynne na jonizację pocisku i na wychwyt elektronu atomu tarczy do wolnych stanów pocisku. Zbadano zależność przekrojów czynnych od liczby atomowej tarczy i prędkości pocisku.

Porównanie danych eksperymentalnych z istniejącymi teoriami pokazuje, że sformułowane przez Bohra i Gillespiego opisy przekrojów czynnych na jonizację nie dają pełnego i rzeczywistego odzwierciedlenia natury tego zjawiska. Eksperymentalne wartości przekroju czynnego na jonizację pocisku o energii początkowej 150 MeV/u penetrującego tarczę węglową są zgodne z modelem Bohra dla niskich Z tarczy. W przypadku jonizacji szybkich pocisków helu wynikającej z oddziaływania jonu z atomami o średnim Z (niklu i srebra) najlepsze dopasowanie wykazuje teoria Gillespiego, wykorzystującej parametryzację siły zderzenia. Natomiast dla zderzeń z tarczami złota dobry opis uzyskuje się stosując model Bohra dla średnich Z tarczy. Rozszerzając wcześniejsze badania, w których prędkość pocisku wynosiła $0.29c$ (43.4 MeV/u) do prędkości pocisku równej $0.51c$, określono zależność przekrojów czynnych od prędkości pocisku. W przypadku tarczy węglowej dobry opis przekroju czynnego na jonizację pocisku poruszającego się z prędkościami $< 0.3c$ dostarcza model Gillespiego. W pozostałych przypadkach uzyskano zgodność z modelem Bohra dla średnich liczb atomowych tarczy. Istnieje zatem przesłanka do poprawy modeli teoretycznych opisujących jonizację pocisku.

W przypadku wychwytu elektronu stwierdzono, że teoria OBK znacznie przeszacowuje uzyskane w eksperymencie przekroje czynne. Opis przekroju czynnego na wychwyt elektronu zaproponowany przez Nikolaeva dość dobrze odzwierciedla dane eksperymentalne, załamuje się głównie w przypadku tarczy węglowej, co jest zrozumiałe, ponieważ nie uwzględnia radiacyjnego wychwytu elektronu, który ma istotne znaczenie w przypadku tarcz o niskim Z . Potwierdzono, że poprawny opis procesu wychwytu elektronu daje jedynie teoria eikonalna, uwzględniająca efekty relatywistyczne i wkład poszczególnych powłok do całkowitego przekroju czynnego.

W pracy wyznaczono przekrój czynny na radiacyjny wychwyt elektronu, który ma istotne znaczenie w przypadku dużych prędkości jonu i niskich Z tarczy. Poznanie procesów towarzyszących oddziaływaniu jonów helu ze swobodnymi elektronami jest ważne z punktu widzenia astrofizyki. Ok. 300 tys. lat po Wielkim Wybuchu mieszanka wodoru i helu, która wypełniała Wszechświat była prawie jednorodna. Kilkaset milionów lat później pierwsze obiekty zaczęły emitować światło. Rozpoczął się proces jonizacji, w wyniku którego część atomów utraciła elektrony. Neutralne atomy wodoru oraz neutralne i jednokrotnie zjonizowane atomy helu można obserwować dzięki wytwarzanym przez nie liniom widmowym. W latach dziewięćdziesiątych, na podstawie obserwacji linii absorpcyjnej 30,4 nm w widmie kwazara stwierdzono obecność w przestrzeni międzygalaktycznej jednokrotnie zjonizowanego helu, He^+ . Zaobserwowanie całkowicie zjonizowanej materii przy użyciu metod optycznych jest praktycznie niemożliwe, ale możliwa jest obserwacja fotonów pochodzących z wychwytu elektronu. Dzięki temu możliwe staje się badanie obecności takich jonów w przestrzeni międzygalaktycznej. Wyniki eksperymentu opisanego w tej pracy dostarczyły wartościowych informacji o przekroju czynnym na zajście procesu radiacyjnego wychwytu elektronu w interesującym dla astrofizyki zakresie energetycznym, gdzie energia elektronu ≤ 100 keV.

2.5. Dodatki

2.5.1. Rachunki eikonalne

Tabela 2.12: Teoretyczne (eikonal) przekroje czynne na wychwyt elektronu dla pocisku ${}^3\text{He}$ o energii 24 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy uwzględniające wkład pochodzący od wychwytu elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy (w cm^2).

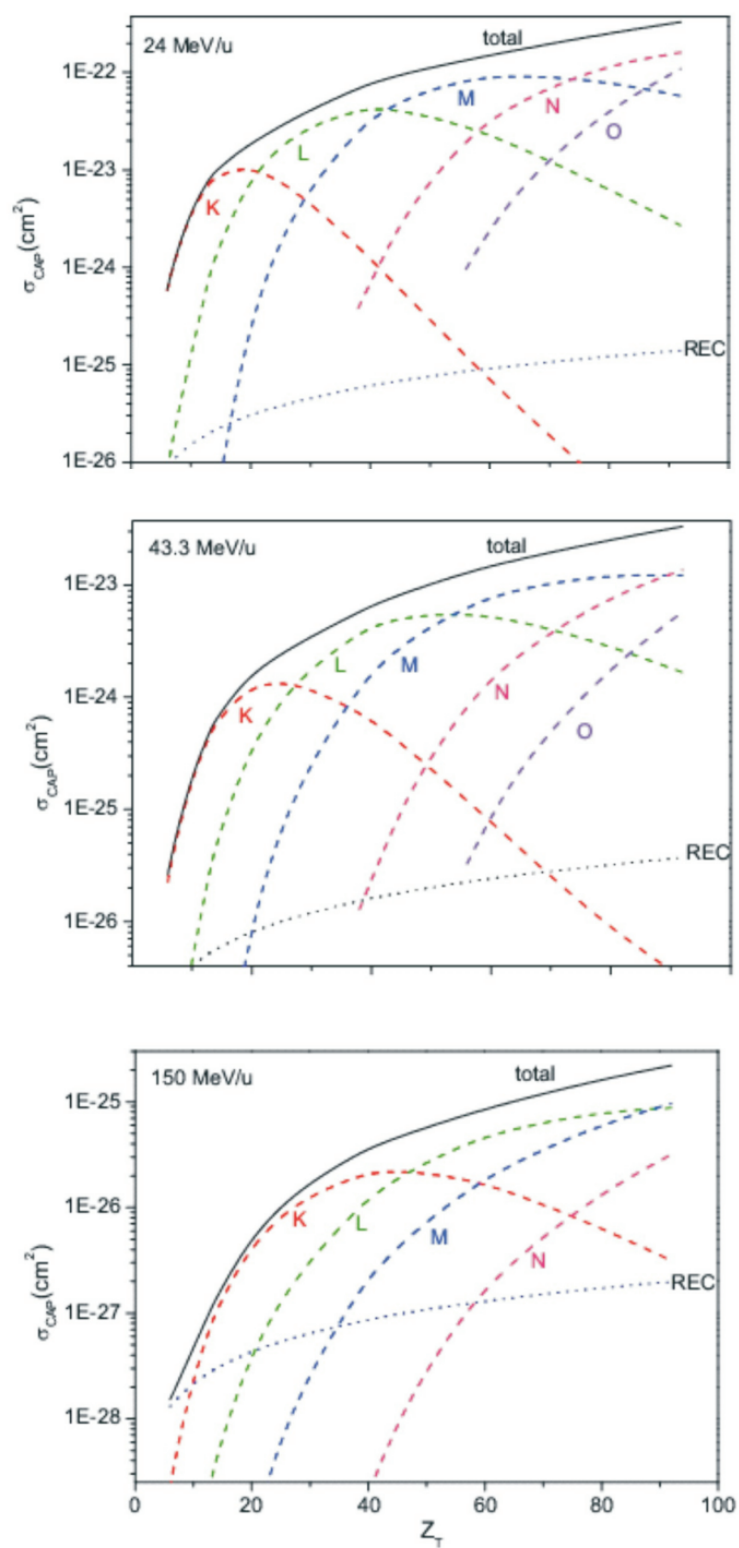
Z_P	Powłoka K	Powłoka L	Powłoka M	Powłoka N	Total	REC
6	7.96E-25	1.12E-26	8.16E-25	9.16E-27		
7	1.48E-24	2.68E-26	1.52E-24	1.07E-26		
10	5.03E-24	1.78E-25	5.22E-24	1.53E-26		
13	9.45E-24	1.12E-24	1.72E-27	1.06E-23	1.98E-26	
14	1.07E-23	1.76E-24	4.76E-27	1.25E-23	2.14E-26	
18	1.31E-23	6.69E-24	1.19E-25	1.99E-23	2.75E-26	
22	1.15E-23	1.57E-23	1.00E-24	2.82E-23	3.36E-26	
28	6.61E-24	3.35E-23	6.59E-24	4.67E-23	4.27E-26	
38	1.72E-24	5.18E-23	3.53E-23	5.36E-25	8.95E-23	5.80E-26
42	9.50E-25	5.16E-23	5.26E-23	1.74E-24	1.07E-22	6.41E-26
47	4.49E-25	4.66E-23	7.52E-23	6.38E-24	1.29E-22	7.17E-26
56	1.20E-25	3.21E-23	1.07E-22	2.87E-23	1.69E-22	8.55E-26
64	3.90E-26	2.02E-23	1.17E-22	6.60E-23	2.12E-22	9.77E-26
79	5.54E-27	7.16E-24	9.72E-23	1.54E-22	3.12E-22	1.21E-25
92	1.22E-27	2.72E-24	6.50E-23	2.02E-22	4.16E-22	1.40E-25

Tabela 2.13: Teoretyczne (eikonal) przekroje czynne na wychwyt elektronu dla pocisku ^3He o energii 43.3 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy uwzględniające wkład pochodzący od wychwytu elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy (w cm^2).

Z_P	Powłoka K	Powłoka L	Powłoka M	Powłoka N	Total	REC
6	2.24E-26	2.56E-28	2.51E-26	2.42E-27		
7	4.46E-26	6.20E-28	4.80E-26	2.82E-27		
10	1.90E-25	4.29E-27	1.99E-25	4.03E-27		
13	4.65E-25	2.92E-26	3.82E-29	5.00E-25	5.24E-27	
14	5.78E-25	4.72E-26	1.07E-28	6.31E-25	5.64E-27	
18	1.04E-24	2.05E-25	2.77E-27	1.25E-24	7.26E-27	
22	1.34E-24	5.60E-25	2.50E-26	1.94E-24	8.87E-27	
28	1.34E-24	1.53E-24	1.84E-25	3.07E-24	1.13E-26	
38	7.37E-25	3.81E-24	1.25E-24	1.28E-26	5.82E-24	1.53E-26
42	5.17E-25	4.62E-24	2.08E-24	4.32E-26	7.24E-24	1.69E-26
47	3.15E-25	5.32E-24	3.45E-24	1.70E-25	9.10E-24	1.89E-26
56	1.20E-25	5.57E-24	6.49E-24	8.88E-25	1.31E-23	2.26E-26
64	4.90E-26	4.93E-24	9.22E-24	2.37E-24	1.68E-23	2.58E-26
79	9.25E-27	3.01E-24	1.24E-23	7.64E-24	2.48E-23	3.18E-26
92	3.11E-27	1.67E-24	1.23E-23	1.37E-23	3.35E-23	3.71E-26

Tabela 2.14: Teoretyczne (eikonal) przekroje czynne na wychwyt elektronu dla pocisku ^3He o energii 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy uwzględniające wkład pochodzący od wychwytu elektronu z poszczególnych powłok atomu tarczy (w cm^2).

Z_P	Powłoka K	Powłoka L	Powłoka M	Powłoka N	Total	REC
6	2.18E-29	2.01E-31	1.52E-28	1.30E-28		
7	4.62E-29	4.93E-31	1.98E-28	1.51E-28		
10	2.46E-28	3.57E-30	4.66E-28	2.16E-28		
13	7.80E-28	2.63E-29	2.92E-32	1.09E-27	2.81E-28	
14	1.06E-27	4.37E-29	8.20E-32	1.41E-27	3.02E-28	
18	2.86E-27	2.15E-28	2.24E-30	3.46E-27	3.89E-28	
22	5.74E-27	6.81E-28	2.15E-29	6.92E-27	4.75E-28	
28	1.15E-26	2.40E-27	1.78E-28	1.46E-26	6.05E-28	
38	1.99E-26	9.69E-27	1.53E-27	1.06E-29	3.20E-26	8.21E-28
42	2.16E-26	1.45E-26	2.82E-27	3.71E-29	3.98E-26	9.07E-28
47	2.19E-26	2.20E-26	5.38E-27	1.57E-28	5.05E-26	1.02E-27
56	1.89E-26	3.87E-26	1.34E-26	9.43E-28	7.32E-26	1.21E-27
64	1.44E-26	5.47E-26	2.51E-26	2.92E-27	9.85E-26	1.38E-27
79	6.81E-27	7.91E-26	5.85E-26	1.29E-26	1.59E-25	1.71E-27
92	3.11E-27	8.78E-26	9.61E-26	3.18E-26	2.21E-25	1.99E-27



Rysunek 2.26: Przekrój czynny na wychwyt elektronu z atomu tarczy o różnej liczbie atomowej do pocisku (teoria eikonalna) dla pocisku ${}^3\text{He}^{++}$ o energii 24, 43.3 i 150 MeV/u w funkcji liczby atomowej tarczy.

Bibliografia

- [1] R. C. Isler and E. C. Crume, Phys. Rev. Lett. **41**, 1296 (1978)
- [2] J. E. Rice, E. S. Marmar, J. L. Terry, E. Kallne, and J. Kallne, Phys. Rev. Lett. **56**, 50 (1986)
- [3] E. Wolfrum, F. Aumayr, D. Wutte, H. Winter, E. Hintz, D. Rusbuldt, and R. Schorn, Rev. Sci. Instr. **64**, 2285 (1993)
- [4] H. Abdoul-Carime, M. A. Huels, E. Illenberger, and L. Manche, J. Am. Chem. Soc. **123**, 5354 (2001)
- [5] H. Abdoul-Carimea, M. A. Huelsa, E. Illenberger, and L. Sanchea, International Journal of Mass Spectrometry **228**, 703 (2003)
- [6] G. Schiwietz, K. Czerski, M. Roth, F. Staufenbiel, and P. Grande, Nuclear Instruments and Methods B **225**, 4 (2004)
- [7] O. Rosmej, A. Blazevic, S. Korostiy, R., Bock, D. Hoffmann, S. Pikuz, V. Efremov, V. Fortov, A. Fertman, T. Mutin, T. Pikuz, and A. Faenov, Phys. Rev. A **72**, 052901 (2005)
- [8] S. A. Pikuz, V. P. Efremov, O. Rosmej, A. Blazevic, S. Korostiy, A. Fertman, A. V. Shutov, H. E. Norman, and D. H. H. Hofmann, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 1 (2006)
- [9] A. V. Lankin, I. V. Morozov, G. E. Norman, S. A. Pikuz, and I. Y. Skobelev, Phys. Rev. E **79**, 036407 (2009)
- [10] A. V. Lankin, I. V. Morozov, G. E. Norman, and I. Y. Skobelev, Journal of Experimental and Theoretical Physics **106**, 608 (2008)
- [11] A. Faenov, A. V. Lankin, I. V. Morozov, G. E. Norman, S. A. Pikuz, and I. Y. Skobelev, Contrib. Plasma Phys. **49**, 467 (2009)
- [12] E. Hartmann, J. Phys. B: At. Mol. Phys **20**, 475 (1987)

- [13] A. Gójska, D. Chmielewska, J. Rządkiwicz, Z. Sujkowski, T. Adachi, H. Fujita, Y. Fujita, K. Hara, Y. Haruyama, J. Kamiya, H. Ogawa, M. Saito, Y. Shimizu, Y. Shimbara, M. Tanaka, H. P. Yoshida, and I. Katayama, *Nucl. Instrum. Methods B* **235**, 368 (2005)
- [14] A. Gójska, D. Chmielewska, J. Rządkiwicz, Z. Sujkowski, T. Adachi, H. Fujita, Y. Fujita, K. Hara, Y. Haruyama, J. Kamiya, H. Ogawa, M. Saito, Y. Shimizu, Y. Shimbara, M. Tanaka, H. P. Yoshida, and I. Katayama, *European Journal Physics A* **27**, 181 (2006)
- [15] N. Bohr, *Philos. Mag* **25**, 10 (1913)
- [16] R. Merzbacher and H. W. Lewis, “*Handbuch der physik*,” (Springer, Berlin, 1958)
- [17] R. Câmpeanu and S. Koch, *Z. Phys. A - Atoms and Nuclei* **299**, 95 (1981)
- [18] J. Bang and J.M.Hansteen, *Mat.Fys. Medd* **31** (1959)
- [19] L. Kocbach, J. M. Hansteen, and R. Gundersen, *Nucl. Instrum. Methods* **169**, 281 (1980)
- [20] B. Sulik, G. Hock, and D. Berényi, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17**, 3239 (1984)
- [21] B. Sulik, I. Kádár, S. Ricz, D. Varga, J. Végh, G. Hock, and D.Berényi, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **28**, 509 (1987)
- [22] G. Lapicki, *Radiat. Phys. Chem.* **76**, 475 (2007)
- [23] D. Banaś, M. Pajek, J. Semaniak, J. Braziewicz, A. Kubala-Kukuś, U. Majewska, T. Czyżewski, M. Jaskóła, W. Kretschmer, T. Mukoyama, and D. Trautmann, *NIM B* **195**, 233 (2002)
- [24] J. Semaniak, J. Braziewicz, M. Pajek, L. G. T. Czyżewski, M. Jaskóła, M. Hailer, R. Karschnick, W. Kretschmer, Z. Halabuka, and D. Trautmann, *Phys. Rev. A* **52**, 1125 (1995)
- [25] M. Kavčič, M. Budnar, A. Mühleisen, P. Pelicon, . Šmit, M. Žitnik, D. Castella, D. Corminboeuf, J.-C. Dousse, J. Hoszowska, P. A. Raboud, and K. Tökési, *Phys. Rev. A* **61**, 052711 (2000)
- [26] W. Bambynek, B. Crasemann, R. W. Fink, H. Freund, H. Mark, C. Swift, R. Price, and P. Rao, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 716 (1972)
- [27] E. J. McGuire, *Phys. Rev. A* **3**, 587 (1971)
- [28] M. Siegbahn and W. Stenström, *Phys. Zeit.* **17**, 48 (1916)

- [29] R. L. Kauffman, K. A. Jamison, T. J. Gray, and P. Richard, Phys. Rev. Lett **36**, 1074 (1976)
- [30] J. Hoszowska, J.-C. Dousse, D. Castella, D. Corminboeuf, J. Kern, Y.-P. Mail-lard, and P.-A. Raboud, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 3165 (2000)
- [31] A. G. Artukh, S. M. Blokhin, S. A. Prosandeev, and S. O. Chepurin, J. Phys. B: At. Mol. Phys **18**, 3737 (1985)
- [32] J. Rządkiwicz, A. Gójska, O. Rosmej, M. Polasik, and K. Słabkowska, Phys. Rev. A **82**, 012703 (2010)
- [33] N. Bohr, “The theory of spectra and atomic constitution,” (London, 1922)
- [34] B. Ray, Phil. Mag. **49**, 168 (1925)
- [35] E. Bäcklin, Z. Phys. **33**, 547 (1925)
- [36] M. Siegbahn, “Spektroskopie der röntgenstrahlen,” (Springer, Berlin, 1931)
- [37] Z. Liu, S. Sugata, K. Yuge, M. Nagasono, K. Tanaka, and J. Kawai, Phys. Rev. B **69**, 035106 (2004)
- [38] S. Hagström, C. Nordling, and K. Siegbahn, Z. Phys. **178**, 439 (1964)
- [39] V. I. Nefedov, “X-ray photoelectron spectroscopy of solid surfaces,” (Utrecht, 1922)
- [40] T. Okura, H. Inoue, T. Kanazawa, S. Endo, S. Fukushima, and Y. Gohshi, Spec-trochim. Acta, Part B **45**, 711 (1990)
- [41] J. Demarest and R. Watson, Phys. Rev. A **17**, 1302 (1978)
- [42] E. Hartmann, E. Arndt, and G. Brunner, J. Phys. B: At. Mol. Phys **13**, 2109 (1980)
- [43] R. L. Watson, A. K. Leeper, B. I. Sonobe, T. Chiao, and F. E. Jenson, Phys. Rev. A **15**, 914 (1977)
- [44] E. Hartmann, J. Phys. B: At. Mol. Phys **19**, 1899 (1989)
- [45] P. L. Grande and G. Schiwietz, Phys. Rev. A **47**, 1119 (1993)
- [46] P. Spädtke, “Ion source development and operation,” (Scientificreport GSI, Darmstadt, 2003)
- [47] O.N.Rosmej, J.Wieser, M.Geissel, F. Rosmej, A. Blazevic, J. Jacoby, E. De-wald, M. Roth, E. Brambrink, K. Weyrich, D. Hoffmann, T. Pikuz, A. Faenov, A. Magunov, I. Skobelev, N. Borisenko, V. Shevelko, A. Golubev, A. Fertman, V. Turtikov, and B. Sharkov, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. **495**, 29 (2002)

- [48] B. Demidov, V. Efremov, M. Ivkin, I. Ivonin, V. Petrov, and V. Fortov, *Tech. Phys.* **44**, 1413 (1999)
- [49] N. G. Borisenko and Y. A. Merkuliev, *Proc. (Tr.) P.N. Lebedev Phys. Inst.* **221** (1996)
- [50] Y. Faenov, A. Pikuz, A. Erko, B. Bryunetkin, V. Dyakin, G. Ivanenkov, A. Mingaleev, T. Pikuz, V. Romanova, and T. Shelkovenko, *Phys. Scr.* **50**, 333 (1994)
- [51] T. A. Pikuz, S. A. Pikuz, V. M. Romanova, and T. A. Shelkovenko, *J. X-ray Sci. Technol.* **5**, 323 (1995)
- [52] S. A. Pikuz, B. M. Song, T. A. Shelkovenko, K. M. Chandler, M. D. Mitchell, and D. A. Hammer, *Rev. of Sci. Instr.* **75**, 377 (2004)
- [53] K. Słabkowska and M. Polasik, *J. Phys. Conf. Ser.* **163**, 012040 (2009)
- [54] J. L. Campbell and T. Papp, *At. Data Nucl Data Tables* **77**, 1 (2001)
- [55] G. Graeffe, H. Juslen, and M. Karras, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **10**, 3219 (1977)
- [56] J. A. Tossel, *Geochimica et Cosmochimica Acta* **37**, 583 (1973)
- [57] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, and N. Pyper, *Comput. Phys. Commun.* **21**, 207 (1980)
- [58] I. P. Grant, B. J. McKenzie, and P. H. Norrington, *Comput. Phys. Commun.* **21**, 233 (1980)
- [59] I. P. Grant and B. J. McKenzie, *J. Phys. B* **13**, 2671 (1980)
- [60] J. Hata and I. Grant, *J. Phys. B* **16**, 3713 (1983)
- [61] I. Grant, *Int. J. Quantum Chem.* **25**, 23 (1984)
- [62] I. Grant, *J. Phys. B* **7**, 1458 (1974)
- [63] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johanson, F. A. Parpia, and E. P. Plummer, *Comput. Phys. Commun.* **55**, 425 (1989)
- [64] M. Polasik, *Phys. Rev. A* **39**, 616 (1989)
- [65] M. Polasik, *Phys. Rev. A* **39**, 5092 (1989)
- [66] M. Polasik, *Phys. Rev. A* **40**, 4361 (1989)
- [67] M. Polasik, *Phys. Rev. A* **41**, 3689 (1990)
- [68] M. Polasik, *Phys. Rev. A* **52**, 227 (1995)

- [69] M. Polasik, Phys. Rev. A **58**, 1840 (1998)
- [70] M. Polasik and M. Lewandowska-Robak, Phys. Rev. A **70**, 052502 (2004)
- [71] M. Polasik and M. Lewandowska-Robak, J. Phys. B **38**, 2407 (2005)
- [72] M. Polasik and M. Lewandowska-Robak, J. Phys. B **39**, 1169 (2006)
- [73] K. Słabkowska and M. Polasik, Rad. Phys. Chem. **75**, 1471 (2006)
- [74] F. A. Babushkin, Acta Phys. Polon. **25**, 749 (1964)
- [75] R. L. Watson, J. M. Blackadar, and V. Horvat, Phys. Rev. A **60**, 2959 (1999)
- [76] J. H. Scofield, Phys. Rev. A **9**, 1041 (1974)
- [77] E. J. McGuire, Phys. Rev. A **2**, 273 (1970)
- [78] V. O. Kostroun, M. H. Chen, and B. Crasemann, Phys. Rev. A **3**, 533 (1971)
- [79] P. Rymuza, Z. Sujkowski, M. Carlen, J.-C. Dousse, M. Gasser, J. Kern, B. Perny, and C. Rheme, Z. Phys. D: At., Mol. Clusters **14**, 37 (1989)
- [80] F. P. Larkins, J. Phys. B **4**, L29 (1971)
- [81] V. Shevelko, Tech. Phys. **46**, 1225 (2001)
- [82] N. Medvedev and A. Volkov, AIP Conf. Proc **999**, 238 (2008)
- [83] R. L. Fleischer, P. B. Price, R. M. Walker, and E. L. Hubbard, Phys. Rev. **156**, 353 (1967)
- [84] E. M. Bringa and R. E. Johnson, Phys. Rev. Lett. **88**, 165501 (2004)
- [85] J. K. Eichler, Phys. Rev. A **23**, 498 (1981)
- [86] R. L. Watson, T. Chiao, and F. E. Jenson, Phys. Rev. Lett. **35**, 254 (1975)
- [87] L. Landau and E. Lifszyc, “Mechanika, elektrodynamika,” (PWN-Polish Scientific, Warsaw, 1972)
- [88] N. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. **18**, 1 (1948)
- [89] M. Bianconi, G. Bentini, R. Lotti, and R. Nipoti, Nuclear Instruments and Methods B **193**, 66 (2002)
- [90] G. H. Gillespie, Phys. Rev. A. **18**, 1967 (1978)
- [91] G. H. Gillespie, Phys. Rev. A. **26**, 2421 (1982)

- [92] K. Dennis, H. Akimune, G. P. A. Berg, S. Chang, B. Davis, M. Fujiwara, M. N. Harakeh, J. Jänecke, J. Liu, K. Pham, D. A. Roberts, and E. J. Stephenson, *Phys. Rev. A* **50**, 3992 (1994)
- [93] J. McGuire and J. Eichler, *Phys. Rev. A* **28**, 2104 (1983)
- [94] J. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **31**, 349 (1928)
- [95] H. Brinkmann and H. Kramers, *Proc. Acad. Sci. Amsterdam* **33**, 973 (1930)
- [96] V. S. Nikolaev, *Zh. Eksp. Theor. Fiz.* **51**, 1263 (1966)
- [97] G. Lapicki and F. D. McDaniel, *Phys. Rev. A* **22**, 1896 (1980)
- [98] J. Bearden and A. Burr, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 125 (1967)
- [99] J. Eichler, *Phys. Rep.* **193**, 165 (1990)
- [100] J. Eichler and F. T. Chan, *Phys. Rev. A* **20**, 104 (1979)
- [101] H. Ikegami, S. Morinobu, I. Katayama, M. Fujiwara, and S. Yamabe, *Nuclear Instruments and Methods* **175**, 335 (1980)
- [102] I. Katayama, H. Ikegami, H. Ogawa, Y. Haruyama, M. Tozaki, A. Aoki, F. Fukuzawai, K. Yoshida, and I. Sugai, *Phys. Rev. A* **53**, 242 (1996)
- [103] I. Katayama, G. P. A. Berg, W. Hürlimann, S. A. Martin, J. Meissburger, W. Oelert, M. Rogge, J. G. M. Römer, J. Tain, B. Styczen, and G. Gaul, *Phys. Lett* **92A**, 385 (1982)
- [104] I. Katayama, G. P. A. Berg, S. A. Martin, J. Meissburger, W. Oelert, A. Retz, M. Rogge, J. G. M. Römer, G. Gaul, H. Hasai, J. Tain, and L. Zemlo, *Z. Phys. D* **3**, 77 (1986)
- [105] I. Kaganovich, E. Startsev, and R. Davidson, *Physics of Plasmas* **11**, 1229 (2004)
- [106] D. Chmielewska and Z. Sujkowski, *EPJ A* **27**, 333 (2006)
- [107] P. Jakobsen, A. Boksenberg, J. Deharveng, P. Greenfield, R. Jędrzejewski, and F. Paresce, *Nature* **370**, 35 (1974)
- [108] D. Liesen, H. Beyer, K. Finlayson, F. Bosch, M. Jung, O. Klepper, R. Moshhammer, K. Beckert, H. Eickhoff, B. Franzke, F. Nolden, P. Spadtke, M. Steck, G. Menzel, and R. Deslattes, *Z. Phys. D* **30**, 307 (1994)
- [109] J. Eichler, *Phys. Rep.* **193**, 167 (1990)
- [110] C. R. Vane, H. F. Krause, S. Datz, P. Grafström, H. Knudsen, C. Scheidenberger, and R. H. Schuch, *Phys. Rev. A* **62**, 010701 (2000)

- [111] M. Stobbe, *Ann. Phys* **7**, 661 (1930)
- [112] Z. Sujkowski, *Proceedings of the International Symposium on Advances in Nuclear Physics, Romania*, 91(2000)