

14-96-348

На правах рукописи

A-528

АЛТЫНОВ
Владимир Алексеевич

СТРУКТУРА СПЕКТРОВ
РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ,
ВОЗБУЖДАЕМОГО В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ
МИШЕНЯХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ
С ЭНЕРГИЕЙ 1 МэВ/нуклон

Специальность: 01.04.07 — физика твердого тела

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ростов-на-Дону 1996

Работа выполнена в Объединенном Институте ядерных исследований и Научно-исследовательском институте физики при Ростовском государственном университете

Научные руководители :

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник

С.М.Блохин

А.Г.Артюх

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор
кандидат физико-математических наук,
доцент

И.Я.Никифоров

В.Ф.Волков

Ведущая организация : Научно-исследовательский институт ядерной физики при МГУ, г. Москва

Защита диссертации состоится "____" _____ 1996 г. в "____" часов на заседании диссертационного Совета Д 063.52.09 при Ростовском государственном университете по адресу : 344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 194, НИИ физики РГУ

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке РГУ (ул. Пушкинская, 148)

Автореферат разослан "____" _____ 1996 г.

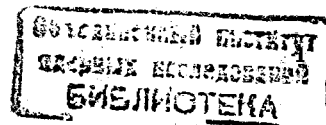
Ученый секретарь
диссертационного Совета Д 063.52.09,
кандидат физико-математических наук

Павлов А.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. В последние годы проводилось активное исследование рентгеновских спектров, возбуждаемых тяжелыми ионами. Первые эксперименты выявили перспективность использования таких спектров в различных областях науки и техники – для исследования механизма ион-атомных столкновений, идентификации продуктов ядерных реакций, диагностики ионного пучка, экспериментальной проверки квантовой электродинамики, исследования химической связи соединений, строения атомных оболочек, тонкой структуры рентгеновских спектров, высокочувствительного анализа состава вещества.

Основной особенностью спектров, возбужденных ионами, является большая интенсивность сателлитных пиков. Структура таких спектров, т.е. энергетическое положение спектральных линий, их ширина и соотношение интенсивностей, определяется сечением образования вакансий на внутренних электронных оболочках атомов и ионов, вероятностью радиационных переходов при заполнении образовавшихся вакансий, а также наличием внешних полей, в которых находится излучающий атом. Для успешного решения задач научного и прикладного характера необходимо исследование различных физических процессов, происходящих при ион-атомных столкновениях, и их адекватное математическое описание. Ряд аспектов указанных проблем достаточно хорошо изучен экспериментально и теоретически. В настоящее время предложены модели для определения сечений ионизации внутренних уровней при ион-атомных столкновениях – модель прямого кулоновского взаимодействия [1] и модель пересечения электронных уровней иона и атома мишени [2]; изучено спектральное распределение непрерывного рентгеновского излучения, возбуждаемого в таких столкновениях [3,4]. Вместе с тем следует отметить, что область применения указанных моделей ограничена низкими [2] или же сравнительно высокими [1] энергиями ионов. Область энергий ионов ≈ 1 МэВ/нуклон к настоящему времени мало изучена, особенно экспериментально. Однако, именно в этой области следует ожидать, что вероятности ионизации L – оболочек различной кратности будут соизмеримы друг с другом, и, следовательно, рентгеновские K – спектры, возбужденные ионами такой энергии, будут содержать сателлитные пики всех кратностей ионизации. Высокая информативность таких спектров обуславливает актуальность изучения механизмов их формирования.



Для правильной интерпретации экспериментальных результатов нуждаются в дальнейшем изучении и такие важные для спектроскопии вопросы, как влияние на форму спектров доплеровских эффектов, изменения величины электрического поля налетающего иона, а также изменения энергии иона при прохождении через массивную мишень.

В некоторых работах (см., напр. [5]) отмечена зависимость положения и интенсивности спектральных линий, возбужденных ионами, от химического окружения излучающего атома. Однако в этих экспериментах используют, как правило, кристалл-дифракционные спектрометры с плоским кристалл-анализатором [5]. Энергетическое разрешение таких приборов составляет ≈ 10 эВ, что не позволяет детально исследовать структуру спектров. В связи с этим разработка спектрометра с более высоким энергетическим разрешением является актуальной задачей. Вместе с тем, и сама процедура обработки рентгеновских спектров, возбуждаемых тяжелыми ионами, представляет собой более сложную задачу, чем обработка спектров, возбуждаемых традиционными методами.

Целью работы являлось изучение влияния различных механизмов на формирование тонкой структуры рентгеновских спектров сателлитов многократной ионизации, возбуждаемых ускоренными ионами в твердотельных мишенях. В соответствии с этой целью в процессе исследования решались следующие задачи:

– разработка аппаратного комплекса для регистрации рентгеновского излучения при ион-атомных столкновениях и программ обработки экспериментальных результатов;

– разработка моделей для оценки влияния эффекта Доплера и изменения величины электрического поля налетающего иона на положение и ширину спектральных линий;

– проведение экспериментальных измерений спектров K -излучения $3d$ -металлов и атомов серы и ее соединений, возбужденных ионами Xe и Ar .

– определение зависимости параметров спектров от условий их возбуждения и изменения химического состояния атомов мишени.

Основные положения, выносимые на защиту, заключаются в следующем:

1. Изменения химического состояния атомов в твердом теле ведет к перестройке тонкой структуры рентгеновских сателлитов многократной

KL^n ионизации, возникающей при возбуждении атомов ускоренными тяжелыми ионами.

2. Доплеровское уширение рентгеновских эмиссионных линий атомов мишени при ионной бомбардировке пропорционально кубу их атомного номера, величина этого уширения соизмерима с естественной шириной регистрируемой линии.

3. Влияние торможения бомбардирующих ионов в твердотельной мишени на распределение интенсивности испускаемого рентгеновского спектра по KL^n сателлитам может быть описано с использованием экспоненциальной аппроксимации зависимости сечения ионизации внутренних электронных оболочек от глубины проникновения ионов в мишень.

4. Ионизация (возбуждение) внутренних электронных оболочек атомов при бомбардировке твердотельных мишеней тяжелыми ионами с начальной энергией 1 МэВ/нуклон осуществляется под действием одновременно двух механизмов – прямого кулоновского взаимодействия партнеров по столкновению и пересечения электронных уровней ионов и атомов мишени.

Научная новизна работы. Создан аппаратный комплекс для регистрации с энергетическим разрешением ≈ 2 эВ рентгеновских спектров, возбуждаемых при ион-атомных столкновениях, и разработана методика исправления спектров большой энергетической протяженности. Проанализировано влияние эффекта Доплера, электрического поля налетающего иона, а также образования квазимолекулярных электронных уровней на форму спектров при ионной бомбардировке.

Впервые зарегистрированы $K\alpha$ спектры $3d$ -металлов, возбуждаемые ионами ксенона с энергией ≈ 1 МэВ/нуклон, и дано объяснение наблюдающимся закономерностям.

Впервые зарегистрированы $K\alpha$ спектры серы элементарной и в соединениях TiS_2 и FeS при возбуждении ионами ксенона. Показано, что при изменении химического окружения происходит изменение относительной интенсивности и сдвиг энергетического положения компонентов сателлитной структуры.

Практическая значимость работы. В результате проведенных исследований установлено, что рентгеновские спектры, возбужденные тяжелыми ионами, могут быть использованы для изучения электронного строения химических соединений элементов до III периода вклю-

чительно, поскольку изменение химического окружения излучающего атома приводит к надежно регистрируемым изменениям спектрального распределения интенсивности рентгеновского излучения.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались на I Всесоюзном совещании по ядерно-физическим методам анализа на заряженных частицах (г. Ташкент, 1978 г.), XIII Всесоюзном совещании по рентгеновской и электронной спектроскопии (г. Львов, 1981 г.), международном семинаре "International Seminar on High-Energy Ion-Atom Collisions Processes" (Debrecen, Hungary, 1981), Международной школе-семинаре по физике тяжелых ионов (г. Дубна, 1983 г.), XV Всесоюзном совещании по рентгеновской и электронной спектроскопии (г. Ленинград, 1988 г.), VI Всесоюзном семинаре по вторичной ионной и ионно-фотонной эмиссии (г. Харьков, 1991 г.), на международной конференции "16th International conference on atomic collisions in solids (Linz, Austria, 1995), на научных семинарах Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ и отдела рентгеновской и электронной спектроскопии НИИ физики РГУ.

Публикации и вклад автора. По результатам диссертации опубликовано 12 работ. Автор непосредственно участвовал в наладке и юстировке аппаратного комплекса, планировании и проведении всех экспериментов, им лично разработаны все программы математической обработки экспериментальных данных, предложена модель описания доплеровских эффектов на ширину рентгеновских эмиссионных линий при ионном возбуждении и выполнены расчеты по этой модели. Соискатель внес основной вклад в интерпретацию полученных результатов и формулировку выводов работы.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, 4 глав, заключения, списка цитируемой литературы и содержит 100 страниц машинописного текста, 21 рисунок, 9 таблиц. Список литературы включает 95 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность и сформулирована цель диссертационной работы. Указана практическая важность и научная новизна полученных результатов. Приведены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору известных из литературы экспери-

ментальных и теоретических результатов исследования рентгеновского излучения, возбуждаемого тяжелыми заряженными частицами. Рассмотрены особенности процессов ионизации (возбуждения) внутренних электронных уровней атомов мишени при ион-атомных столкновениях. Обсуждаются различные модели – борновское приближение плоских волн, приближение парных столкновений, полуклассическое приближение, применяемые для вычисления сечений ионизации (возбуждения). Особое внимание уделено вопросу о влиянии химического окружения на спектральное распределение интенсивности, в частности на положение максимумов сателлитов кратной ионизации. Обсуждаются особенности техники эксперимента при регистрации спектров, возбуждаемых ионами. Отмечается, что систематических исследований на пучках тяжелых ионов с использованием спектрометров высокого энергетического разрешения не проводилось.

Во второй главе описана методика регистрации и обработки спектров. При создании аппаратного комплекса мы руководствовались целью получить высокое значение регистрируемой интенсивности при хорошем энергетическом разрешении и низком уровне фона от рассеянного излучения. Анализ существующих рентгено-оптических схем показал, что этой цели можно достичь при использовании схемы горизонтальной фокусировки рентгеновского излучения по методу Иоганна [6] и вынесении источника излучения за пределы окружности Роуланда. В связи с этим для решения поставленных в диссертационной работе задач был сконструирован малогабаритный кристалл-дифракционный спектрометр со следующими характеристиками: кристалл-анализатор – кварц, плоскость (10 $\bar{1}$ 0); диаметр фокусирующей окружности – 200 мм; значения синусов углов дифракции могут изменяться в диапазоне 0.18 – 0.8, точность отсчета синуса угла дифракции составляет 0.00001; регистрация излучения производится проточным пропорциональным счетчиком, работающим на аргон-метановой газовой смеси. Для проведения юстировочных работ спектрометр оборудован отпаянной рентгеновской трубкой. Система мониторинга, обеспечивающая контроль интенсивности ионного пучка и нормировку регистрируемого рентгеновского излучения на выбранное число падающих ионов, включает в себя детектор рассеянных ионов, металлическую сетку с высокой прозрачностью и детектор интегральной интенсивности рентгеновского излучения, возбуждаемого в мишени. Энергетическое

разрешение спектрометра составляет ≈ 2 эВ в области $K\alpha$ излучения титана, что в несколько раз превосходит параметры зарубежных аналогов [5].

Обработка спектров производилась в два этапа. На первом этапе выполнялось исправление на искажения, вызванные изменением волновой дисперсии $\delta\lambda/\delta\varphi$ при сканировании протяженных (до 200 эВ) участков спектра. Изменение $\delta\lambda/\delta\varphi$ приводит к изменению интервала энергий рентгеновских квантов ΔE , регистрируемых при данном угле дифракции φ . Для используемой в настоящей работе рентгено-оптической схемы было получено следующее выражение зависимости ΔE от φ

$$\Delta E(\varphi) = \frac{n \cdot k \cdot H \cdot \cos \varphi}{2D \cdot R \cdot \sin^3 \varphi},$$

где n – порядок отражения, $k=12.398$ кэВ·Å, H – ширина входной щели спектрометра, D – межплоскостное расстояние кристалла-анализатора, R – радиус изгиба кристалла.

На втором этапе обработки производилось разложение спектров на компоненты. Число компонентов разложения определялось на основании расчетов методом Дирака-Хартри-Фока энергий радиационных переходов в многократно ионизированных атомах. Форма каждого компонента описывалась гауссианом, фон аппроксимировался параболой.

В третьей главе приведены результаты теоретического анализа влияния отдельных физических факторов на спектральное распределение интенсивности атомов мишени в ион-атомных столкновениях и проведено сравнительное обсуждение энергетической структуры возбужденных тяжелыми ионами $K\alpha$ -спектров атомов элементов 3-го и 4-го периодов.

Атомы мишени после столкновения приобретают скорость отдачи, величина и направление которой имеют случайное значение, что приводит к изменению энергии излучения вследствие эффекта Доплера. Для правильной интерпретации экспериментальных результатов необходимо учитывать доплеровские искажения, вносимые в спектр атомов мишени при ионной бомбардировке. В диссертации предлагается модель для расчета доплеровского профиля (ДП) бесконечно узкой спектральной линии в зависимости заряда ядра иона (Z_i) и мишени (Z_t), скорости иона на бесконечности (v), приведенной массы сталкивающихся частиц (μ) и энергии излучаемого фотона (ϵ_0). При вычи-

слениях принимаются во внимание все возможные траектории налетающего иона и учитываются вероятности рассеяния атомов мишени на разные углы. Для формы ДП ($p(\Delta)$) в работе получено следующее выражение

$$p(\Delta) = \frac{Z_i Z_t \alpha}{\mu v^2} \cdot \frac{d}{d\Delta} \int \int d\theta d\varphi \sin \theta \cos^{-3} \varphi,$$

в котором область интегрирования $\delta(\theta, \varphi)$ определяется соотношением

$$\delta(\theta, \varphi) < \Delta,$$

где

$$\delta = \epsilon/\epsilon_0 - 1 = \frac{(1 - 4 A^2 \cos^2 \theta)^{1/2}}{1 - A \sin 2\theta \cos \varphi} - 1.$$

В приведенных формулах $\alpha = 1.44 \times 10^{-13}$ МэВ·см, $A = m_i v / (m_i + m_t) c$, c – скорость света, ϵ – энергия зарегистрированного фотона в л-системе, m_i и m_t – массы иона и атома мишени соответственно, θ – угол рассеяния атома отдачи, φ – полярный угол.

Из полученных результатов следует, что при расположении детектора перпендикулярно к направлению пучка ионов, энергетическое положение спектральной линии не изменяется, но ее контур имеет симметричный вид с точками перегиба, расположенными симметрично относительно положения центра тяжести линии покоящегося атома на расстоянии $\Delta_n = \pm 2 Z_i Z_t \alpha / m_t v a_k$. Величина интервала $2\Delta_n$ может быть использована для оценки уширения спектральной линии, вызванного эффектом Доплера. График зависимости Δ_n от атомного номера мишени приведен на рис. 1. При увеличении атомного номера мишени Z_t абсолютная величина уширения $\epsilon_0 \cdot \Delta_n$ растет пропорционально Z_i^3 , оставаясь соизмеримой с естественной шириной линии.

Другим важным фактором, способным оказать влияние на форму спектральных линий, является электрическое поле налетающего иона, которое вызывает изменение энергий внутренних электронных уровней атома. Величина этих изменений зависит от межъядерного расстояния, и, следовательно, энергетическое распределение квантов, излучаемых при столкновении, имеет непрерывный характер. С использованием приближенных волновых функций получено аналитическое выражение

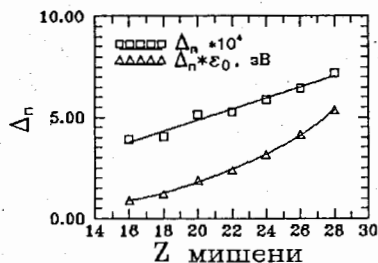


Рис. 1.

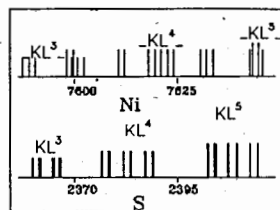


Рис. 2.

Рис. 1. Зависимость Δ_n от атомного номера мишени. ϵ_0 — энергия $K\alpha$ линии.

Рис. 2. Энергетическое положение компонентов $KL^3 - KL^5$ сателлитов серы и никеля.

для дифференциального сечения рентгеновского излучения $d\sigma/d\epsilon$ в зависимости от межъядерного расстояния R и скорости иона v_0

$$d\sigma/d\epsilon = \sigma_i \exp[-R(\delta\epsilon) a_0/v_0\tau_0]/2\delta\epsilon[1/R(\delta\epsilon) - \beta_{2p}]v_0\tau_r$$

$$\delta\epsilon = 0.667Z_i\beta_{2p}^3 R^2 \exp(-2\beta_{2p}R) \text{ Ry.}$$

В приведенных формулах использованы следующие обозначения: σ_i — сечение ионизации $1s$ -оболочки, β_{2p} — параметр волновой функции, определяемый из условия ее нормировки и величины среднего радиуса $2p$ -оболочки, a_0 — боровский радиус, τ_0, τ_r — соответственно полное и радиационное время жизни вакансий. Из вычислений по указанным формулам следует, что интенсивность исходной бесконечно узкой спектральной линии при воздействии поля налетающего иона ксенона с энергией 1 МэВ/нуклон будет сконцентрирована в спектральном интервале ($< 10^{-6}$ эВ). На основании проведенных расчетов сделан вывод, что практически ни уширение линии, ни ее сдвиг не будут иметь места.

Структура спектров, возбужденных ускоренными ионами, во многом определяется также мультиплетностью состояний, связанной с наличием вакансий одновременно в K - и L -оболочках. Конфигурации с одной вакансией в K -оболочке и n вакансиями в L -оболочке принято обозначать KL^n . Вакансии, возникающие в L -оболочке под воздействием ионного удара, могут быть распределены по ее подоболочкам

различными способами. Число вариантов распределения, и, следовательно, число возможных излучательных переходов, зависит от первоначального количества вакансий n . В силу этих причин ширины сателлитных пиков в зарегистрированном спектре будут отличаться друг от друга. Кроме того, с ростом числа n будет увеличиваться эффективный заряд ядра излучающего атома (иона), что приводит к уширению каждого из компонентов мультиплета при увеличении n . Поскольку в литературе отсутствуют данные об энергиях переходов в многократно ионизированных атомах, в настоящей работе были проведены расчеты этих энергий для титана, никеля, железа и серы при всех возможных распределениях n вакансий по подоболочкам L -оболочки ($n = 0 - 7$). Расчеты проводились по программе HEX [7] на ЭВМ CDC-6500. Анализ результатов расчета показал, что с ростом атомного номера излучателя происходит увеличение расстояния между крайними компонентами KL^n -мультиплета, а в некоторых случаях возможно частичное наложение компонент соседних сателлитов (см. рис. 2). Указанное наложение затрудняет определение положения центра тяжести и интегральной интенсивности неразрешенного мультиплета.

При торможении ионов в мишени происходит изменение величины сечения ионизации, что оказывает влияние на регистрируемую форму спектра. Для учета этого фактора проведено исследование возможности применения экспоненциальной аппроксимации зависимости сечения выхода рентгеновского излучения σ от x — глубины проникновения иона в образец

$$\sigma(x) = \sigma(0) \exp(-\nu x/\sin \varphi),$$

где φ — угол падения ионов на образец, ν — параметр аппроксимации.

Расчеты интенсивности K - и L -излучения, возбуждаемого ионами гелия, углерода и алюминия в диапазоне энергий 0.6-0.8 МэВ/а.с.м., выполненные с использованием аппроксимации, находятся в хорошем согласии с расчетами, проведенными путем численного интегрирования. В работе проведено изучение свойств параметров указанной аппроксимации, предложен способ вычисления этих параметров для образцов сложного состава, приведен количественный критерий массивного и тонкого образца. Предложенная аппроксимация позволяет вычислять эффективную энергию иона в массивном образце, что необходимо при сопоставлении экспериментальных спектров мишеней различного химического состава.

В четвертой главе представлены результаты экспериментального исследования рентгеновского излучения, возбуждаемого ускоренными тяжелыми ионами. Исследование проводилось на выведенных пучках циклотрона У-300 Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ. При выборе пар ион – мишень мы руководствовались целью получить информацию о влиянии на структуру спектров как условий ионизации, так и условий, при которых происходит заполнение вакансий на внутренних уровнях. Для изучения влияния процессов ионизации регистрировалось $K\alpha$ излучение однокомпонентных твердотельных мишеней (S, Ti, Fe, Ni), возбужденное ионами ксенона и аргона. Также проведено исследование $L\alpha$ излучения ионов ксенона при столкновениях с Al, Ti, Fe и Ni . Влияние химического окружения на спектр излучающего атома исследовалось на примере $SK\alpha$ излучения, возбужденного ионами ксенона в мишенях, состоящих из S_8, FeS и TiS_2 . Во всех экспериментах использовались массивные мишени, в которых происходило полное торможение ионного пучка.

Зарегистрированные $K\alpha$ спектры кроме основной (производящей) линии содержат сателлитные пики, связанные с наличием дополнительных вакансий в L -оболочке. Помимо общей структуры спектров, обусловленной многократной ионизацией атомов мишени, разрешающая способность аппаратуры позволила нам выявить дополнительные детали сателлитной структуры, отражающие мультиплетность сильно ионизированных состояний. Интерпретация спектров проводилась на основе результатов расчета энергий радиационных переходов в многократно ионизированных атомах, о которых говорилось выше. Все спектры исправлены на изменение волновой дисперсии $\delta\lambda/\delta\varphi$ при сканировании и из них вычтен фон. Проведено разложение спектров на компоненты, определены их интенсивность, ширина и энергетическое положение.

На рис. 3 и 4 представлены спектры $K\alpha$ излучения титана и серы, возбужденные ионами ксенона с энергией 125 МэВ и ионами аргона с энергией 25 МэВ. Для обеих мишеней (Ti и S) интегральная интенсивность спектров, возбужденных ионами ксенона, больше интенсивности спектров, возбужденных ионами аргона. Число сателлитов многократной ионизации также больше в случае возбуждения ксеноном. Наиболее интенсивным пиком в спектрах титана является KL^2 при возбуждении аргоном и KL^4 при возбуждении ксеноном. В спектрах серы, возбужденных ионами аргона, наиболее интенсивным является сател-

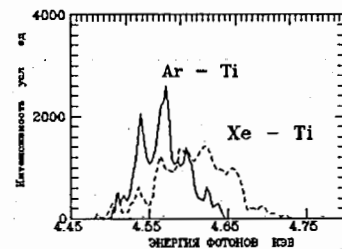


Рис. 3.

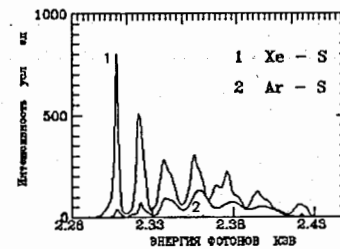


Рис. 4.

Рис. 3. $K\alpha$ спектры титана, возбужденные ионами Xe и Ar

Рис. 4. $K\alpha$ спектры серы, возбужденные ионами Xe и Ar

лит KL^3 . Указанные особенности качественно согласуются с моделью прямого кулоновского взаимодействия [1]. Однако, наряду с этим наблюдаются и существенные отклонения от этой модели. В спектрах, возбужденных ксеноном, распределение интенсивности излучения по сателлитам отличается от биномиального, особенно в спектрах серы. Происходит также изменение соотношения интенсивности компонентов сателлитов при изменении типа налетающего иона. Полученные результаты могут рассматриваться как указание на то, что при энергиях ионов ≈ 1 МэВ/нуклон образование вакансий на внутренних уровнях атомов и ионов происходит одновременно двумя путями – за счет прямого кулоновского взаимодействия и вследствие пересечения электронных уровней сталкивающихся частиц. При этом для правильного описания распределения интенсивности по компонентам KL^n -сателлитов необходимо учитывать структурное строение L -оболочки, а не рассматривать ее как единое целое.

Спектры $L\alpha$ излучения ионов ксенона, возбужденного в столкновениях с металлическими мишенями, имеют одинаковую структуру. Абсолютная интенсивность (I) зарегистрированных спектров Xe меняется с изменением Z мишени, достигая максимального значения для титана. Эти изменения могут быть вызваны следующими причинами: различием длин пробегов ионов и числа актов столкновения в разных мишенях (N), различием коэффициентов поглощения выходящего излучения материалом мишени (μ) и различной вероятностью квази-молекулярного механизма в результирующем сечении ионизации. По-

следний фактор определяется, в основном, разностью энергий между электронными уровнями иона и мишени (ΔE). В таблице 1 для всех использованных мишеней приведены параметры, характеризующие вклад в регистрируемую интенсивность каждого из перечисленных выше факторов. Данные таблицы позволяют сделать вывод, что характер изменения величины интенсивности зависит главным образом от значений μ и ΔE .

Таблица 1. Параметры, определяющие интенсивность $L\alpha$ -излучения ионов Xe в столкновениях с различными мишенями

мишень	I, усл. ед.	μ , $см^2 г^{-1}$	ΔE , кэВ	$N \times 10^{-19}$
Al	114	340	3.34	9.5
Ti	339	144	0.05	7.1
Fe	200	237	2.17	6.7
Ni	100	300	3.37	6.6

На рис. 5 приведены спектры $K\alpha$ излучения титана, меди и никеля, возбужденного ионами Xe с энергией 125 МэВ. С ростом атомного номера мишени в спектрах происходят следующие изменения: интегральная интенсивность спектров уменьшается, ширина сателлитов увеличивается, сдвигается максимум распределения интенсивности по сателлитам. Кроме того, происходит перераспределение относительной интенсивности компонентов сателлитов. Характер наблюдаемых изменений качественно согласуется с моделью прямого кулоновского взаимодействия. В тоже время на спектральное распределение интенсивности оказывает влияние также ионизация вследствие пересечения электронных уровней сталкивающихся частиц. Однако, сложная структура спектров переходных металлов, в частности наложение компонентов соседних сателлитов, является существенным ограничением для выяснения степени влияния химического окружения излучающего атома на эти спектры.

На рис. 6 представлены экспериментально зарегистрированные спектры рентгеновского $K\alpha$ излучения атомов S в сере элементарной и ее соединениях FeS и TiS_2 . Спектры разложены на компоненты в соответствии с расчетами ДХФС. Выявлено изменение в относительной интенсивности и энергетическом положении компонентов сателлитов при переходе от серы элементарной к ее соединениям. Величина сдви-

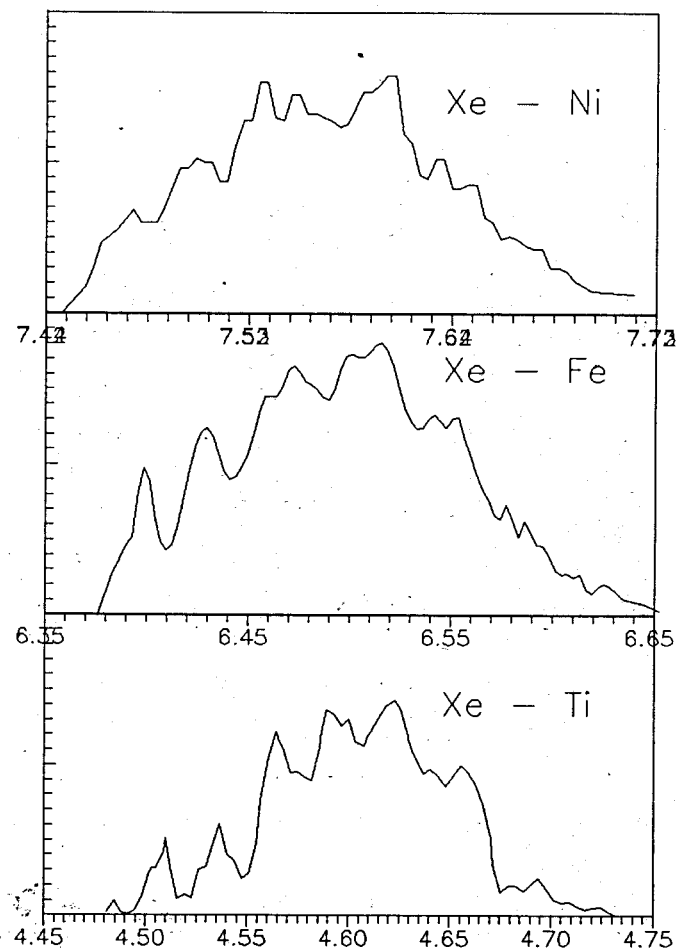


Рис. 5 $K\alpha$ спектры титана, железа и никеля, возбужденные ионами Xe

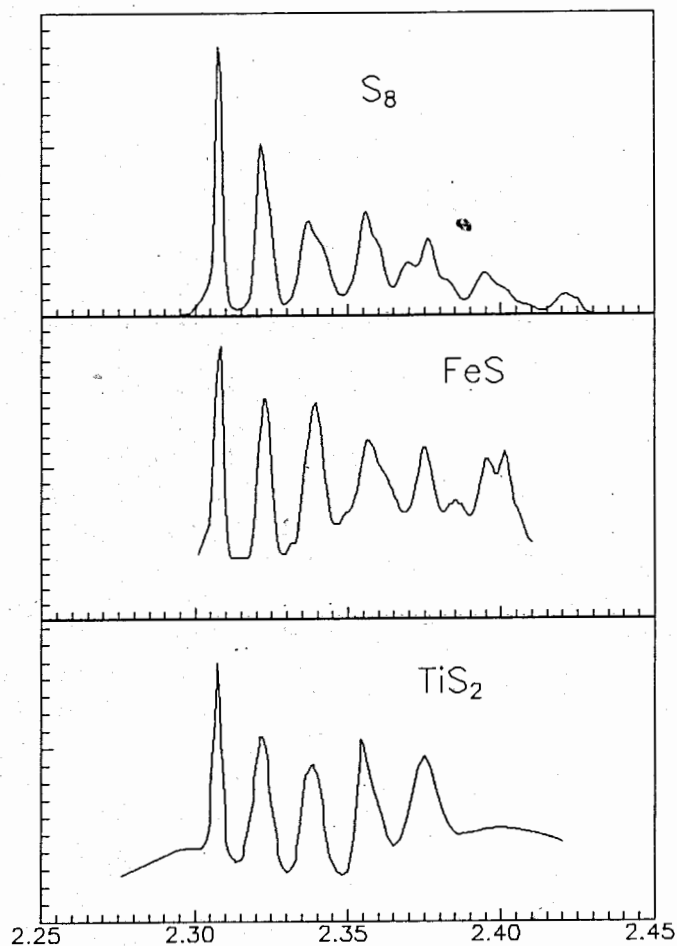


Рис. 6 $K\alpha$ спектры серы, возбужденные ионами He в S_8 -, FeS - и TiS_2 -мишенях

гов превышает величину аналогичных сдвигов, регистрируемых традиционными методами рентгеновской спектроскопии [8]. Отсутствие перекрытия спутников при многократной ионизации исследованных образцов позволяет предположить, что эти изменения вызваны изменением химического окружения излучающего атома.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Основные результаты, полученные при выполнении данной работы, заключаются в следующем:

1. На основе кристалл-дифракционного спектрометра создан аппаратный комплекс для регистрации рентгеновского излучения, возбуждаемого при ион-атомных столкновениях. Разрешающая способность прибора в 5–10 раз превосходит параметры зарубежных аналогов.
2. Разработаны алгоритмы и на их основе создан комплекс программ для обработки экспериментальных спектров большой энергетической протяженности, содержащих большое количество компонентов.
3. Проведен анализ факторов, определяющих форму рентгеновских спектров атомов мишени при ионной бомбардировке.

Показано, что:

- при расположении детектора излучения под углом 90° к направлению ионного пучка, наличие у атомов мишени скорости отдачи в момент излучения рентгеновских квантов не оказывает влияния на энергетическое положение спектральной линии, а приводит к ее уширению; проведены оценки величины такого уширения и расчеты формы доплеровского профиля для различных сталкивающихся пар;
- величина доплеровского уширения пропорциональна кубу атомного номера мишени и соизмерима с естественной шириной регистрируемой линии;

– кулоновское взаимодействие налетающего иона и ионизируемого атома не оказывает влияния на форму рентгеновского спектра в области характеристических радиационных переходов, соответствующих различной кратности ионизации атомов мишени.

4. Методом Дирака–Хартри–Фока–Слейтера проведены расчеты энергий рентгеновских переходов в многократно ионизированных атомах.

Из результатов расчета следует, что при высоких степенях ионизации в ряде случаев происходит частичное перекрывание мультиплетной структуры соседних сателлитов, которое необходимо учитывать при обработке экспериментальных данных для корректного определения интенсивности и энергетического положения центра тяжести сателлитов.

5. Впервые зарегистрированы с выявлением деталей сателлитной структуры $K\alpha$ спектры РХИ одноэлементных мишеней периода (сера, титан, железо, никель), возбужденные ионами Хе с энергией 1 МэВ/нуклон и ионами Ar с энергией 0.6 МэВ/нуклон, предложена интерпретация этих спектров.

Показано, что для правильного описания структуры сателлитов многократной ионизации необходимо учитывать структурное строение L -оболочки, а не рассматривать ее как единое целое. Полученные результаты позволяют также предположить, что в данной области энергий ионов действуют одновременно два механизма ионизации внутренних электронных оболочек – прямое кулоновское взаимодействие и пересечение электронных уровней ионов и атомов мишени.

6. Впервые зарегистрированы и проинтерпретированы $K\alpha$ спектры атомов серы в сере элементарной и в соединениях TiS_2 и FeS , возбужденные ионами Хе с энергией 1 МэВ/нуклон; дано объяснение наблюдающимся закономерностям.

В частности, показано, что при изменении химического окружения атомов серы в указанных мишенях происходит сдвиг энергетического положения и изменение относительной интенсивности

компонентов сателлитных пиков $SK\alpha$ излучения; из представленных результатов следует, что анализ соотношений интенсивности не только KL^n -сателлитов, но и их компонентов может служить чувствительным инструментом для исследования особенностей химической связи.

7. Показано, что влияние торможения бомбардирующих ионов в твердотельной мишени на распределение интенсивности испускаемого рентгеновского спектра по KL^n сателлитам может быть описано с использованием экспоненциальной аппроксимации зависимости сечения ионизации внутренних электронных оболочек от глубины проникновения ионов в образец; определены коэффициенты такой аппроксимации; на основе указанной аппроксимации предложен количественный критерий насыщенного и тонкого слоев исследуемой пробы.

Список цитируемой литературы

- [1] McGuire J.H. and Richard P., "Procedure for computing cross sections for single and multiple ionization of atoms in the binary-encounter approximation by the impact of heavy charged particles." // Phys. Rev. A, 1973, v. 8, p. 1374–1384.
- [2] W.E.Meyerhof, "K-vacancy sharing in near symmetric heavy ion collisions." // Phys. Rev. Lett., 1973, v. 31, p. 1341–1344.
- [3] Kaun K.-H., Frank W. and Manfrass P., "The structure of quasi-molecular KX-ray spectra from heavy ion collisions." // Dubna. 1976. 20 p. / JINR E7 – 9629./
- [4] Folkmann F., Armbruster P., Hagemann S. et al., "Emitter velocity and anisotropy for quasi-molecular radiation in I-Au collisions." // Z. Phys., 1976, Bd. A276, S. 15.
- [5] Watson R.L., Leeper A.K., Sonobe B.I. et al. "Effect of chemical environment on the intensities of $K\alpha$ x-ray satellites produced in heavy ion collisions." // Phys. Rev. A, 1977, v. 15, p. 914 – 924.
- [6] М.А.Блохин, Методы рентгено-спектральных исследований, М., Физматгиз, 1959, 386 с.

[7] Liberman D.A., Cromer D.T. and Waber J.T., "Relativistic self-consistent field program for atoms and ions." // *Comp. Phys. Comm.*, 1971, v. 2, p. 107–113.

[8] Баринский Р.Л. и Нефедов В.И., Рентгеноспектральное определение зарядов атомов в молекулах. М., Физматгиз, 1966, 200 с.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах :

1. Блохин С.М., Краснолуцкий В.П., Алтынов В.А., "Методика рентгеноспектрального анализа гомогенных образцов сложного состава при возбуждении излучения ускоренными ионами." // В кн. : Использование ускорителей в элементном анализе. Ташкент, "ФАН", 1980, с. 160 – 163.

2. Artukh A.G., Eremin A.V., Altnov V.A., Blokhin M.A., Blokhin S.M., Polyakov A.A., "Studie of the *Ti, Fe* and *NiKX*-Ray Spectra induced by about 1 MeV/nucleon *Xe* ions." // *АТОМКИ Közlemények*, 1981, v. 23, N 1, p. 24 – 26

3. Алтынов В.А., Блохин М.А., Блохин С.М., Поляков А.А., Артюх А.Г., Еремин А.В., "Структура рентгеновских спектров, возбужденных тяжелыми ионами." // *Известия АН СССР, серия физическая*, 1982, N 4, с. 745 – 748.

4. Алтынов В.А., Блохин С.М., Колесников В.В., "Анализ влияния некоторых физических факторов на спектральное распределение рентгеновского квазимолекулярного излучения." // В кн. : Труды XI Всесоюзного совещания по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., из-во МГУ, 1982, с. 545 – 549.

5. Алтынов В.А., Блохин С.М., Хайдаров Р.А., "Рентгеноспектральное определение малых примесей в металлах при возбуждении излучения ускоренными ионами." // *Заводская лаборатория*, 1983, N 2, с. 32–33.

6. Алтынов В.А., Блохин С.М., Бразевич Э., Бразевич Я., Лю Зай Ик, Осетинский Г.М., Пурэв А., "Элементный анализ толстых образцов при возбуждении рентгеновского излучения пучком протонов." // *Заводская лаборатория*, 1984, N 4, с. 18 – 21.

7. Алтынов В.А., Блохин С.М., "Анализ факторов, определяющих экспериментальную форму рентгеновских спектров, возбужденных тя-

желыми ионами." // В кн. : XV Всесоюзное совещание по рентгеновской и электронной спектроскопии. Тезисы докладов, Ленинград, 1988, т. 1, с. 7.

8. Алтынов В.А., Блохин С.М., "Особенности рентгеновского излучения атомов при ион-атомных столкновениях." // В кн. : Вторичная ионная и ионно-фотонная эмиссия. Тезисы докладов VI Всесоюзного семинара, Харьков, 1991, с. 120.

9. Алтынов В.А., "О форме рентгеновских спектров, возбужденных тяжелыми ионами." // Дубна, 1993, 16 с. / Сообщение ОИЯИ Р14-93-247./

10. Altnov V.A., Blokhin S.M., "Effect of Features of Inner Atomic Shells Excitation by Accelerated Ions on the Shape of the Emitted X-Ray Lines." // *X-Ray Spectrometry*, 1994, v. 23, p. 79 – 82.

11. Altnov V.A., Blokhin S.M., "The X-ray spectra of sulphur compounds excited by *Xe* ion impact." // 16th International conference on atomic collisions in solids, Linz, 1995.

12. Алтынов В.А., Блохин С.М., "О механизмах ионизации внутренних электронных оболочек при ион-атомных столкновениях." // Дубна, 1996, 8 с./ Сообщение ОИЯИ Р14-96-51.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 сентября 1996 года.