

при термической диссоциации  $Zn^+$  (310 К) не наблюдается изменения концентрации известных дырочных центров за счет рекомбинации и электронных центров за счет перезахвата высвободившихся электронов. Обнаружение нового ПЦ  $Zn^+$  указывает на необходимость поиска специфических особенностей электронных возбуждений и люминесценции в  $BeO-Zn$ .

Авторы благодарят С. В. Горбунова, Т. Н. Кярнера, И. Н. Огородникова за помощь в работе и полезные дискуссии.

### Литература

- [1] Кружалов А. В., Анцыгин И. Н., Гиниятуллин К. Н. и др. Тез. докл. V Всес. симпозиума по люминесцентным приемникам и преобразователям ионизирующего излучения Таллин, 1985, с. 70—71.
- [2] Маслов В. А., Рылов Г. М., Мазуренко В. Г. и др. Расширенные тезисы Междунар. конф. по росту кристаллов. М., 1980, с. 268—269.
- [3] Гиниятуллин К. Н., Кружалов А. В., Шульгин Б. В. В кн.: Радиационно-стимулированные явления в твердых телах. Свердловск, 1982, с. 3—12.
- [4] Popescu F. F., Grecu V. V. Sol. St. Commun., 1973, v. 13, N 7, p. 749—751.

Уральский политехнический институт  
им. С. М. Кирова  
Свердловск

Поступило в Редакцию  
7 марта 1987 г.

УДК 539.186.3

Журнал технической физики, т. 58, в. 3, 1988

## О ВЛИЯНИИ КАСКАДНЫХ ПЕРЕХОДОВ НА ЗАСЕЛЕННОСТЬ ВОЗБУЖДЕННЫХ УРОВНЕЙ ПРИ НЕУПРУГИХ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

А. И. Бажин, В. Ю. Жадько, С. В. Теплов

В работе [1] была предложена статистическая модель возбуждения атома при неупругих атомных столкновениях средних энергий. В рамках подхода, изложенного в [1], вычисляется вероятность заселения возбужденного уровня в результате перехода электрона из основного состояния. Однако многие возбужденные состояния, особенно низколежащие, могут заселяться и за счет каскадных электронных переходов с вышележащих уровней. С этим фактом, в частности, связана большая интенсивность резонансных оптических атомных линий, чаще всего используемых в аналитических целях. Необходимость учета каскадного заселения возбужденных состояний связана и с тем, что структура каскада, используемая при расчете, позволяет учесть различные правила отбора и вероятность переходов, известные из спектроскопических таблиц, но игнорируемые в рамках статистического подхода. В настоящей работе произведен учет влияния каскадных переходов на заселенность возбужденных уровней, получаемую в рамках статистической модели [1].

Пусть  $N(t, Q)$  — число атомов, возбуждаемых в единицу времени в столкновениях, в которых атому неупруго передана энергия в единичном интервале вокруг  $Q$ ;  $n_l(t)$  — число атомов, находящихся в момент  $t$  в  $l$ -м возбужденном состоянии;  $P_l(Q)$  — плотность вероятности прямого возбуждения  $l$ -го состояния в неупругом столкновении;  $A_{lk}$  — вероятность перехода из  $l$ -го в  $k$ -е состояние в единицу времени;  $g_l$  — кратность  $l$ -го состояния. Для  $n_l(t)$  можно записать уравнение (взаимодействием с излучением пренебрегаем)

$$\frac{dn_l}{dt} = g_l N P_{0l} + \sum_{k>l}^m n_k A_{kl} - \sum_{k<l} n_l A_{lk}, \quad (1)$$

где индекс « $m$ » отвечает наиболее высоколежащему уровню, который требуется учесть при расчете. Если, например,  $l$ -й уровень относится к нейтральному атому, то при  $Q < E_i$   $m$  определяется из условия  $E_{\alpha\alpha}^m \leq Q < E_{\alpha\alpha}^{m+1}$ , где  $E_{\alpha\alpha}^m$ ,  $E_{\alpha\alpha}^{m+1}$  — энергии возбуждения  $m$ -го и  $(m+1)$ -го уровней,  $E_i$  — энергия ионизации. При  $Q \geq E_i$  суммирование по  $k$  в (1) проводится по всем возбужденным состояниям нейтрального атома, каскадно связанным с  $l$ -м уровнем.

В стационарном случае  $N=N(Q)$  и решение системы (для разных  $l$ ) уравнений (1) запишется в виде итерационной последовательности

$$n_l = \tau_l \left( NP_{0l}g_l + \sum_{k>l}^m n_k A_{kl} \right),$$

$$n_{l-1} = \tau_{l-1} \left( NP_{0,l-1}g_{l-1} + \sum_{k>l-1}^m n_k A_{k,l-1} \right),$$

.....

$$n_m = \tau_m NP_{0m}g_m, \quad (2)$$

где

$$\tau_l^{-1} = \sum_{k=0}^{l-1} A_{lk}.$$

Выражения (2) позволяют построить зависимость  $n_l(Q)$ . В качестве примера на рис. 1 приведен результат расчета зависимости  $n_l(Q)$  для уровня  $4s$  ( ${}^2S_{1/2}$ ) атома Al с энергией возбужде-

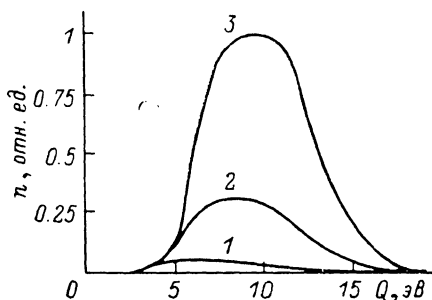


Рис. 1.

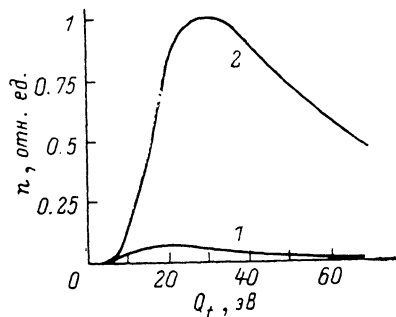


Рис. 2.

ния  $E_{ex}=3.14$  эВ: 1 — без учета каскадов, 2 — учтено 6 переходов непосредственно на рассматриваемый уровень, 3 — учтена возможность каскадного заселения и этих 6 уровней (что в сумме дает 20 переходов). Значения  $g_l$  и  $A_{lk}$ , необходимые для расчета, взяты из таблиц [2]. Как следует из результатов расчета, для уровня  $4s$  ( ${}^2S_{1/2}$ ) каскадное заселение играет определяющую роль при  $Q > 4$  эВ.

Поскольку обычно рассчитывается и измеряется величина полной неупругой потери энергии в столкновении  $Q_t$ , а не ее часть  $Q$ , то удобно использовать зависимость вероятности прямого возбуждения уровня от  $Q_t$ . Для этого необходимо несколько изменить величины, входящие в (1) и (2). Вместо  $P_{0l}(Q)$  введем величину  $\tilde{P}_{0l}(Q_t)$  — плотность вероятности возбуждения  $l$ -го состояния в столкновении, в котором энергия  $Q_t$  теряется неупруго

$$\tilde{P}_{0l}(Q_t) = \int_0^{Q_t} dQ \cdot f(Q, Q_t) P_{l,l}(Q). \quad (3)$$

Функция  $f(Q, Q_t)$  описана в работе [3], там же приведены численные значения ее параметров для различных пар сталкивающихся атомов. На рис. 2 приведена рассчитанная зависимость  $n_l(Q_t)$  для уровня  $4s$  ( ${}^2S_{1/2}$ ) атома Al при столкновении с атомом Ag: 1 — без учета каскадов, 2 — с учетом 20 каскадных переходов. Как видно, каскадное заселение уровня начинает доминировать при  $Q_t > 7$  эВ.

В качестве примера оценим, к чему приведет учет каскадного заселения при расчете относительной заселенности возбужденных в неупругих атомных столкновениях низких и средних ( $\sim 1 \div 10$  кэВ) энергий. Рассмотрим бомбардировку газовой мишени Al ионами Ag с энергией 12 кэВ. Методика расчета относительной заселенности описана в работе [4]. При попытке сравнения с экспериментом возникает ряд проблем.

Во-первых, нам неизвестны эксперименты на газовой мишени, в которых изучалась пара Ag—Al. Поэтому мы воспользовались результатом работы [5], в которой измерялась относительная интенсивность линий в спектре ионно-фотонной эмиссии при бомбардировке

поликристаллической твердотельной мишени Al пучком ионов Ag с энергией 12 кэВ. При этом сечение неупругих потерь энергии, которое используется в нашем расчете для газовой фазы, естественно будет отличаться от экспериментальных условий [5]. Для воспроизведения последних необходимо или выполнить моделирование процесса распыления на ЭВМ, или воспользоваться методикой, предложенной в работе [6]. Мы решили, однако, остаться в рамках расчета для газовой фазы, так как нас интересует прежде всего характер изменения относительной заселенности при учете каскадов. Кроме того, как отмечалось в работе [7], эта величина не слишком различается в спектрах свечения, возникающего при ионной бомбардировке твердотельных и газовых мишеней.

Во-вторых, необходимо выполнить расчет той величины, которая собственно извлекается из эксперимента. Если воспользоваться нашими обозначениями, то в работе [5] приведен (в произвольных единицах) график величины

$$\ln\left(\frac{Y}{g_l}\right) = \ln\left[\frac{N}{g_l}\left(\tilde{P}_{0l}g_l + \sum_{k>l} \frac{n_k A_{kl}}{N}\right)\right].$$

На рис. 3 приведены  $\ln(Y/g_l)$  зависимости от энергии возбуждения уровня  $E_{ex}$  атома

Al: 1 — эксперимент [5]; 2, 3 — расчет с учетом и без учета каскадов соответственно. Расчетные зависимости нормированы на экспериментальное значение  $\ln(Y/g_l)$  при  $E_{ex}=3.14$  эВ.

Как следует из сравнения расчетных и экспериментальной зависимостей, учет каскадного заселения весьма существенно сдвигает расчетные величины к экспериментальной. Оставшееся расхождение, вероятно, связано как с неучетом процесса распыления (т. е. не совсем точный выбор сечения неупругих потерь энергии), так и с тем, что при ионно-фотонной эмиссии возбуждение распыленных атомов может протекать не только в рамках рассмотренного механизма.

### Литература

- [1] Теплов С. В. ЖТФ, 1985, т. 55, № 1, с. 200—203.
- [2] Касабов Г. А., Елисеев В. В. Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы. М.: Атомиздат, 1973, с. 160.
- [3] Жадько В. Ю., Теплов С. В. ЖТФ, 1986, т. 56, № 7, с. 1422—1424.
- [4] Жадько В. Ю., Теплов С. В. ЖТФ, 1985, т. 55, № 6, с. 1207—1210.
- [5] Good-Zamin C. J., Shehata M. T., Squires D. B. et al. Rad. Eff., 1978, v. 35, N 1, p. 139—149.
- [6] Kelly R. Phys. Rev. B, 1982, v. 25, N 2, p. 700—712.
- [7] Snowdon K. J., Carter G., Armour D. G. et al. Rad. Eff. Lett., 1979, v. 43, N 2, p. 201—204.

Донецкий государственный университет

Поступило в Редакцию  
9 марта 1987 г.

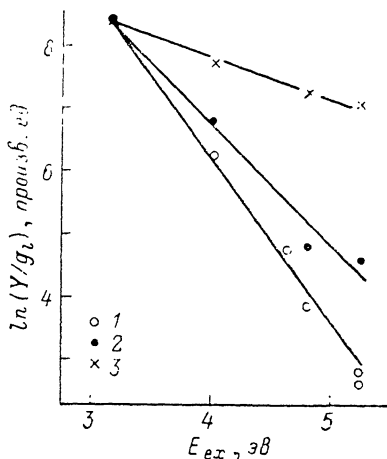


Рис. 3.