

02

## Зарядовое распределение ионов Кг, образуемых при рентгеновском облучении 1.3 keV

© С.В. Елфимов, Д.Л. Дорофеев, Б.А. Зон, В.Е. Чернов

Воронежский государственный университет,  
394018 Воронеж, Россия  
e-mail: zon@niif.vsu.ru

(Поступило в Редакцию 21 ноября 2016 г. В окончательной редакции 1 марта 2017 г.)

В модели эффективного атомного потенциала методом Монте-Карло рассчитано зарядовое распределение ионов Кг, образуемых при облучении нейтральных атомов рентгеновскими фотонами с энергией 1.3 keV. Результаты расчетов хорошо согласуются с недавними экспериментальными данными; полученные результаты могут использоваться при разработке и эксплуатации газовых детекторов, контролирующих интенсивность рентгеновских лазеров на свободных электронах.

DOI: 10.21883/JTF.2017.09.44901.2104

Быстрый прогресс в области рентгеновских лазеров на свободных электронах (X-ray free electron laser, XFEL) предъявляет растущие требования к методам диагностики и контроля параметров рентгеновского пучка [1,2]. Такие пучки, генерируемые в FEL в процессе усиления спонтанного излучения (self-amplified spontaneous emission, SASE), обычно носят стохастический характер, вследствие чего в экспериментах с этими пучками важную роль играет мониторинг абсолютного потока фотонов в режиме реального времени. Важным требованием к аппаратуре для такого мониторинга является также ее устойчивость по отношению к разрушению (деградации) материала детектора вследствие значительной мощности излучения, генерируемого в XFEL.

Вышеуказанным требованиям удовлетворяют газомониторинговые детекторы (gas-monitor detector, GMD), основанные на фотоионизации инертных газов и детектировании фотоэлектронов и фотоионов простыми металлическими электродами (цилиндрами Фарадея). GMD доказали свою эффективность для измерения интенсивности пучков в мягком рентгеновском диапазоне на FEL-установках FLASH (Hamburg) [3–5] и LCLS (Stanford) [6].

Важным фактором, определяющим адекватность работы GMD, является количество фотоионов, регистрируемое детектором. Оно определяется средним зарядом ионов, накапливаемом в цилиндре Фарадея. В свою очередь, средний заряд вычисляется из времяпролетных спектров и характеризует распределение ионов по кратности ионизации.

Как известно, в результате фотоионизации образуются лишь однократные ионы с вакансией во внутренней электронной оболочке. Образование же ионов более высокой кратности является результатом сложной цепочки процессов заполнения вакансии — Оже-эффектом и встрялочными процессами [7,8].

Ввиду важности распределения ионов по зарядам для GMD, желательно иметь простую и надежную технику для теоретического описания указанных явлений. Одной

из трудностей здесь является сравнительно небольшой объем экспериментальных данных по зарядовым распределениям.

В недавней работе [6] приводятся такие данные для фотоионизации ксенона и криптона фотонами с энергией около 1 keV. Целью настоящей работы является демонстрация относительно простой вычислительной техники, позволяющей с хорошей точностью воспроизводить эти экспериментальные результаты на примере атома Кг.

При расчете вероятности фотоионизации криптона в настоящей работе для электронов внутренних оболочек используется эффективный одночастичный потенциал Кратцера [9,10], что ранее было предложено с этой целью в работе [11]:

$$V(r) = -\frac{Z^*}{r} + \frac{l^*(l^* + 1)}{r^2}. \quad (1)$$

Здесь параметры  $Z^*$  и  $l^*$  не обязательно целочисленные, варьируются отдельно для каждой  $nl$ -подоболочки.

Отметим, что потенциал (1) используется и для внешних электронных оболочек. В этом случае он в литературе известен как потенциал Саймонса [12]. Несмотря на неверное асимптотическое поведение при  $r \rightarrow \infty$ , потенциал Саймонса в ряде случаев дает разумные радиационные характеристики атомов, близкие к тем, что получаются при использовании известного метода квантового дефекта [13].

В потенциале Кратцера радиальные функции  $R_{n^*l^*}$  для электрона  $nl$ -подоболочки, где  $n^* = n + l^* - l$ , имеют кулоноподобную форму и могут быть записаны через вырожденную гипергеометрическую функцию  $F$ :

$$R_{n^*l^*}(r) = \frac{\sqrt{Z^*}(2Z^*r)^{l^*+1}}{(2n^*)^{l^*+1}\Gamma(2l^*+2)} \sqrt{\frac{\Gamma(n^*+l^*+1)}{\Gamma(n^*-l^*)}} \times e^{-\frac{Z^*r}{n^*}} F\left(-n^*+l^*+1, 2l^*+2, \frac{2Z^*r}{n^*}\right). \quad (2)$$

Здесь и везде далее используются атомные единицы  $\hbar = m = e = 1$ . Для волновой функции электрона в непрерывном спектре воспользуемся кулоновским приближением [14]:

$$R_{Tl'}(r) = 2r\sqrt{Z} \left(1 - \exp\left(-\frac{2\pi Z}{\sqrt{2T}}\right)\right)^{-1/2} \times \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 + \frac{Z^2}{2T}} \frac{(2\sqrt{2Tr})^{l'}}{\Gamma(2l'+2)} \exp(-i\sqrt{2Tr}) \times F\left(i\frac{Z}{\sqrt{2T}} + l' + 1, 2l' + 2, 2i\sqrt{2Tr}\right). \quad (3)$$

Здесь  $Z = 1$  — заряд остаточного иона,  $\varepsilon = \hbar\omega - I_{nl}$  — энергия фотоэлектрона,  $I_{nl}$  — ионизационный порог для  $nl$ -подоболочки. Дифференциальное сечение фотоионизации для отдельных  $nl$ -подоболочек в общем случае можно записать в виде [15]

$$\frac{d\sigma_{\text{ph}}^{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{\text{ph}}^{nl}(\omega)}{4\pi} (1 + (-2)^{-|\mu|} \beta_{nl}(\omega) P_2(\cos\theta)). \quad (4)$$

Здесь величины полного сечения  $\sigma_{\text{ph}}^{nl}(\omega)$  и параметра угловой анизотропии  $\beta_{nl}(\omega)$  для  $nl$ -подоболочки определяются матричными элементами с волновыми функциями (2) и (3). Значение  $\mu$  зависит от поляризации кванта; для неполяризованного света  $\mu$  следует положить равным нулю. Следует отметить, что угловая зависимость дифференциального сечения может играть роль в схемах детекторов XFEL-излучения, основанных на регистрации электронов, а не только ионов [16]. Полное сечение фотоионизации атома дается суммой по всем подоболочкам, для которых открыты каналы ионизации  $\omega > I_{nl}$ :

$$\sigma_{\text{ph}}^{\text{total}}(\omega) = \sum_{nl} \sigma_{\text{ph}}^{nl}(\omega). \quad (5)$$

В каждом акте фотоионизации атома вероятность  $P_{nl}$  образования вакансии в  $nl$ -подоболочке пропорциональна сечению фотоионизации соответствующего канала:

$$P_{nl} = \sigma_{\text{ph}}^{nl}(\omega) / \sigma_{\text{ph}}^{\text{total}}(\omega).$$

Начальная однократная фотоионизация  $nl$ -подоболочки инициирует Оже-каскады и встрясочные (shake-off) процессы, которые приводят к появлению положительных ионов с различными зарядами  $q = 1, 2, 3, \dots$ , относительную долю которых обозначим через  $p_{nl}(q)$ . Тогда конечное (с учетом всех задействованных подоболочек) распределение по зарядам  $p_{nl}(q)$  для образующихся ионов имеет вид

$$p(q) = \sum_{nl} P_{nl} p_{nl}(q). \quad (6)$$

Для расчетов  $p_{nl}(q)$  использовалась техника Монте-Карло [7,8,17]. Учитывались следующие  $nl$ -подоболочки:

Процентное соотношение зарядов  $K\alpha$ , вызванное рентгеновским излучением с энергией кванта 1300 eV

| Заряд $q$ | Эксперимент [4] | Теория, данная работа |
|-----------|-----------------|-----------------------|
| 1         | 3.5             | 3.9                   |
| 2         | 24              | 21                    |
| 3         | 39              | 42                    |
| 4         | 24              | 26                    |
| 5         | 7.8             | 5.4                   |
| 6         | 1.6             | 1.1                   |
| $\bar{q}$ | 3.1             | 3.1                   |

$3s, 3p, 3d, 4s, 4p$ . На каждом запуске схемы Монте-Карло предполагалось, что начальная вакансия возникает в некоторой оболочке в соответствии с относительной вероятностью фотоионизации этой оболочки, рассчитанной с помощью (6). Затем схема продолжалась с учетом того, что каждая вакансия может распасться по одному из следующих сценариев: (1) радиационный переход, (2) Оже-распад, (3) процесс встряски. На каждом шаге выбор сценария осуществлялся в соответствии с его относительной вероятностью; вероятности всех процессов брались из работы [8]. Схема обрывалась, когда вероятности любого сценария распада всех накопленных вакансий с выходом электрона становились пренебрежимо малыми по сравнению с радиационным распадом вакансии. Для получения окончательного распределения было проведено  $N = 10000$  запусков вышеупомянутой схемы.

Результаты расчетов и их сравнение с экспериментом [6] приведены в таблице. Как видно, теоретический расчет согласуется с экспериментом в пределах 10%-ной относительной погрешности для  $q < 5$ . Несколько большее отличие в случаях больших кратностей ионов может объясняться тем, что мы не учитывали изменение потенциалов ионизации  $I_{nl}$  подоболочек с ростом заряда. Такой учет становится особенно актуальным при расчетах процессов в сильных полях XFEL с энергией кванта в десятки keV [18]. Таким образом, предложенный относительно простой метод расчета зарядового распределения ионов, образуемых под действием рентгеновского излучения с энергией кванта в диапазоне 1 keV, позволяет получить достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными.

Авторы благодарны М.Я. Амусье (Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе), Г.Е. Гаврилову и Ю.Г. Нарышкину (Петербургский Институт ядерной физики им. Б.П. Константинова) за полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Госзаданий 1306 (моделирование атомных процессов) и 1122 (моделирование Монте-Карло).

## Список литературы

- [1] *Pellegrini C., Marinelli A., Reiche S.* // Rev. Mod. Phys. 2016. Vol. 88, N 1. P. 015006 (55 p). 10.1103/RevModPhys.88.015006
- [2] *Tono K., Togashi T., Inubushi Y., Sato T.* et al. // New J. Phys. 2013. Vol. 15. N 8. P. 083035 (21 p). 10.1088/1367-2630/15/8/083035
- [3] *Kato M., Saito N., Tiedtke K., Jurani P.N.* et al. // Metrologia. 2010. Vol. 47. N 5. P. 518–521. 10.1088/0026-1394/47/5/002
- [4] *Leitner T., Sorokin A.A., Gaudin J., Kaser H.* et al. // New J. Phys. 2011. Vol. 13. N 9. P. 093003. 10.1088/1367-2630/13/9/093003
- [5] *Kato M., Tanaka T., Kurosawa T., Saito N.* et al. // Appl. Phys. Lett. 2012. Vol. 101. N 2. P. 023503. 10.1063/1.4733354
- [6] *Moeller S., Brown G., Dakovski G., Hill B.* et al. // J. Synchrotron Rad. 2015. Vol. 22. N 3. P. 606–611. 10.1107/S1600577515006098
- [7] *Carlson T.A., Krause M.O.* // Phys. Rev. 1965. Vol. 137. P. A1655–A1662. 10.1103/PhysRev.137.A1655
- [8] *Krause M.O., Carlson T.A.* // Phys. Rev. 1967. Vol. 158. P. 18–24. 10.1103/PhysRev.158.18
- [9] *Kratzer A.* // Z. Phys. 1920. Bd. 3. H. 5. S. 289–307. 10.1007/BF01327754
- [10] *Flugge S.* Practical Quantum Mechanics. Springer, 1991.
- [11] *Chernov V.E., Dorofeev D.L., Elfimov S.V., Zon B.A.* et al. // Laser Phys. Lett. 2015. Vol. 12. N 3. P. 036002. 10.1088/1612-2011/12/3/036002
- [12] *Simons G.* // J. Chem. Phys. 1971. Vol. 55. N 2. P. 756–761. 10.1063/1.1676142
- [13] *Fainshtein A.G., Manakov N.L., Ovsianikov V.D., Rapoport L.P.* // Phys. Rep. 1992. Vol. 210. N 3. P. 111–221. 10.1016/0370-1573(92)90020-Z
- [14] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2002. 808 с.
- [15] *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 273 с.
- [16] *Гаврилов Г.Е., Нарышкин Ю.Г.* Детектор-монитор для контроля интенсивности и положения пучка рентгеновских фотонов лазеров на свободных электронах. Патент РФ на полезную модель RU 160376 U1, 18.02.2016.
- [17] *Abdullah A.H., El-Shemi A.M., Ghoneim A.A.* // Rad. Phys. Chem. 2003. Vol. 68. N 5. P. 697–705. 10.1016/S0969-806X(03)00433-X
- [18] *Rudek B., Son S.-K., Foucar L., Epp S.W.* et al. // Nat. Photon. 2012. Vol. 6. P. 858–865. 10.1038/nphoton.2012.261