

РАСЧЕТ ДВАЖДЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ ИОНИЗАЦИИ В ИОННО-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

*А.К.Каминский**

Изложен метод расчета дважды дифференциальных эффективных сечений ионизации при быстрых столкновениях ионов с числом электронов $N \leq 10$ и атомов с $z \leq 10$. Исследована зависимость дважды дифференциальных сечений ионизации при таких столкновениях от начального состояния удаляемого электрона, от скорости v налетающей частицы и от степени ионизации сталкивающихся частиц. Обсуждена природа особенностей электронных спектров в различных областях энергии ϵ_L и углов χ_L вылета электронов.

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Double-Differential Ionization Cross Section Calculations for Fast Collisions of Ions and Atoms

A.K.Kaminsky

The method of the calculations of the double-differential ionization cross sections in fast collisions of ions having the electron numbers $N \leq 10$ and atoms with nuclear charge $z \leq 10$ is reported. The dependence of such double-differential cross sections on the ejected electron initial state, the projectile velocity v , and the ionization rates of colliding partners has been investigated. The nature of the electron spectra features in various ranges of the electron energy ϵ_L and the ejection angle χ_L has been discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of High Energies, JINR.

1. Метод расчета

В работах [1—5] развит метод расчета дважды дифференциальных эффективных сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ ионизации в быстрых ионно-атомных столкновениях, основанный на первом борновском приближении (PWBA) и правиле сумм. Здесь и далее через ϵ_L и χ_L обозначены энергия и угол вылета выбитого электрона в лабораторной системе координат, $d\omega_L = 2\pi \sin \chi_L d\chi_L$.

*НИИ ядерной физики им. Д.В.Скобельцына МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва 119899

Аналитические выражения для матричных элементов ионизации [6] и упругих, и неупругих формфакторов [5,7] атомов и ионов (с числом электронов $N \leq 10$) замкнули систему формул в [1—5] и свели задачу расчета величин $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ для ионно-атомных столкновений к вычислению двукратных интегралов от известных функций.

Создание точной теории ионно-атомных столкновений наталкивается на непреодолимые трудности. Это требует решения квантовой проблемы многих тел, связанных кулоновским взаимодействием и обладающих спином.

Отметим характерные свойства быстрых ионно-атомных столкновений при высоких и средних энергиях, существенные для выбора теоретических приближений в расчетах дифференциальных сечений ионизации при таких столкновениях.

Как правило, в процессах, связанных с перестройкой электронных оболочек, потерей или захватом электронов, быстрый налетающий ион теряет лишь незначительную часть своей энергии E и импульса p ($\Delta E \ll E$ и $\Delta p \ll p$). Передаваемая энергия ΔE обычно сравнима по порядку величины с потенциалом ионизации соответствующей оболочки атома или иона. Это составляет величины порядка десятков или сотен электронвольт для внешних оболочек, большие потери ΔE маловероятны, так же маловероятны большие величины Δp . Следовательно, при таких столкновениях ионы рассеиваются на малые углы $\theta \approx \Delta p/p$. Большие углы θ рассеяния соответствуют процессам, связанным с перестройкой внутренних оболочек тяжелых атомов. Отклонение ионов на значительные углы происходит лишь при рассеянии на ядрах мишени при столкновениях с малыми прицельными параметрами.

Даже при далеких столкновениях, когда изменяется состояние только одного слабо связанного электрона, этот переход осуществляется в результате взаимодействия всех кулоновских центров, обоих ядер и всех электронов. В настоящее время создание приближенных методов решения таких задач возможно лишь с использованием специальных моделей и приближений, пригодных лишь для ограниченной области параметров (энергии, заряда, степени ионизации и т. д.), при этом весьма сложно дать оценки точности расчетов. Имеющиеся приближенные методы, развитые для потенциалов, быстро убывающих с расстоянием, и позволившие решить ряд задач ядерной физики, здесь не применимы из-за медленного убывания потенциала.

Спиновые функции и тождественность электронов учитываются при корректном учете свойств симметрии функций начального и конечного состояний ионов и атомов, поляризационные эффекты не существенны в рамках рассматриваемой здесь задачи, а ядерные силы не участвуют во взаимодействии на расстояниях порядка $10^{-8} + 10^{-7}$ см, дающих основной вклад в сечения.

С учетом указанных выше особенностей быстрых ионно-атомных столкновений физически корректные методы расчетов эффективных сечений ионизации основаны на использовании различных вариантов теории возмущений. Для решения рассматриваемой здесь конкретной задачи проблемы многих частиц, обладающих спином и связанных медленно убывающим взаимодействием, необходимо ввести ряд приближений, основанных на физическом понимании задачи.

Система ион плюс атом описывается волновой функцией Ψ , являющейся решением уравнения Шредингера

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (1)$$

В теории возмущений гамильтониан H разделяется на две части

$$H = H_0 + U, \quad (2)$$

при этом H_0 описывает свободные ион и атом (их движение и структуру), а оператор взаимодействия

$$U = \frac{z_A z_B e^2}{|\mathbf{R}|} - \sum_{j=1}^{z_B} \frac{N_A e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^{N_A} \frac{z_B e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i|} + \sum_{j=1}^{z_B} \sum_{i=1}^{N_A} \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (3)$$

описывает взаимодействие двух ядер и всех электронов с «чужим» ядром. Здесь и далее \mathbf{r}_j и \mathbf{r}_i — радиусы-векторы электронов атома мишени и иона (относительно своих ядер) соответственно, $N_A = z_A - i_A$ — число электронов иона.

Главная сложность задачи состоит в отсутствии точного решения уравнения

$$H_0 \Psi = E \Psi \quad (4)$$

и в принципиальных трудностях получения его приближенных решений. Точное решение уравнения Шредингера (4) для волновых функций Ψ_A и Ψ_B свободных ионов и атомов существует лишь для атома водорода и водородоподобных ионов. Для атомов и ионов с числом электронов $N > 1$ существуют лишь приближенные волновые функции Ψ_A и Ψ_B , построенные на различных базисах, в том числе с десятками и сотнями базисных функций. Необходимость в столь сложных функциях возникает при детальном учете электронных корреляций, смешивании конфигураций для расчетов тонких эффектов при электронных переходах (ширин тонких оптических линий, структуры мезоатомов и т.д.). Естественно, что такие расчеты весьма трудоемки.

Основным рабочим приближением в расчетах сечений ионизации при быстрых ионно-атомных столкновениях является плосковолновое борновское приближение (PWBA), в котором волновые функции Ψ_i и Ψ_f начального и конечного состояний системы имеют вид:

$$\Psi_i = \Psi_{Ai} \Psi_{Bi} \exp(i\mathbf{p}_i \mathbf{R} / \hbar), \quad \Psi_f = \Psi_{Af} \Psi_{Bf} \exp(i\mathbf{p}_f \mathbf{R} / \hbar), \quad (5)$$

где Ψ_A и Ψ_B — волновые функции свободных состояний иона и атома соответственно, \mathbf{R} — радиус-вектор расстояния между ядрами иона и атома, \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_f — импульсы налетающего иона до и после столкновения.

Использование плоских волн в PWBA для описания относительного движения сталкивающихся ионов или атомов не вносит заметных неточностей в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при энергии налетающего иона $E/A \geq 1$ МэВ/нуклон, так как при этом $\Delta p \ll p$, как отмечено выше.

Для практических расчетов эффективных сечений ионизации в быстрых ионно-атомных столкновениях желательно построить такие функции Ψ_A и Ψ_B , которые позволят получить приближенные величины сечений ионизации при сравнительно небольшой трудоемкости расчетов и с достаточной для практических применений точностью (естественно, что такие функции неприменимы для расчетов тонких эффектов, упомянутых выше). Для этого являются оптимальными функции Ψ_A и Ψ_B в виде линейных комбинаций [5,7]:

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_A}) = \sum_i a_i \prod_{j=1}^{N_A} \psi_j(z_j, \mathbf{r}_j) \chi_j(m_{sj}) \quad (6)$$

одноэлектронных кулоновских волновых функций

$$\psi_j(z_j^*, \mathbf{r}_j) = R_{nl}(z_j^*, r_j) Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j) \quad (7)$$

и спиновых функций $\chi_j(m_{sj})$. Здесь $Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j)$ — сферические функции, $R_{nl}(z_{nl}^*, r)$ — кулоновские радиальные волновые функции в поле с зарядом z_{nl}^* .

Коэффициенты α_i выбираются такими, чтобы Ψ_A и Ψ_B соответствовали квантовым числам основного состояния иона и атома: полному моменту J , орбитальному моменту L и спину S , при этом обеспечиваются необходимые свойства симметрии и соблюдение принципа Паули [9]. Величины коэффициентов α_i состоят из комбинаций соответствующих коэффициентов векторного сложения моментов. Мы не приводим их здесь для краткости.

Функции (7) взаимно ортогональны за счет ортогональности сферических функций $Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j)$. Исключение составляют ns -состояния, для которых необходима дополнительная ортогонализация. В то же время радиальные функции $R_{nl}(z_{nl}^*, r)$ для различных оболочек не являются ортогональными, так как они отличаются значениями эффективных зарядов z_{nl}^* .

Отметим, что в этом приближении оператор (3) является одночастичным по отношению к электронам ионизируемого иона A , поэтому в первом порядке приближения возможно изменение состояния (в том числе и вырывания в непрерывный спектр) только одного электрона. Эффективное сечение многократной ионизации в этом приближении равно нулю, оно в этом приближении может быть описано лишь более громоздкими формулами более высоких порядков.

Проведенное в [2] и [4] сравнение с экспериментальными данными из [10] и [11] показало применимость основных приближений метода для количественного описания энергетических и угловых распределений выбитых электронов в широком диапазоне ϵ_L и χ .

Начальное состояние выбиваемого при ионизации электрона определяется заданием главного квантового числа n , орбитального момента количества движения l и его проекции m на выбранную ось. В той области ϵ_L и χ_L , где основной вклад в электронный спектр $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ дают электроны, выбитые из атома мишени, величина $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ определяется дифференциальным сечением $d^2\sigma_B/d\epsilon_L d\omega_L$ ионизации атома мишени B . При этом по конечным состояниям налетающего иона A может быть проведено суммирование по правилу сумм. Такая процедура приводит к выражениям [1–5]:

$$\frac{d^2\sigma_B}{d\epsilon d\omega} = \frac{d^2\sigma_B^{el}}{d\epsilon d\omega} + \frac{d^2\sigma_B^{in}}{d\epsilon d\omega}, \quad (8)$$

$$\frac{d^2\sigma_B^{el}}{d\epsilon d\omega} = \frac{2a_{0^+}^2 v_0^2}{I_{0^+B} v^2} \int_{q \min}^{q \max} [1 - N_A z_A^{-1} F_A(q)]^2 k q^{-3} dq \int_0^{2\pi} |\mathcal{E}_{nlm}(q, \mathbf{k})|^2 d\varphi, \quad (9)$$

$$\frac{d^2\sigma_B^{in}}{d\varepsilon d\omega} = \frac{2a_0^2 N_A v_0^2}{I_0 z_B^* v^2} \int_{q' \min}^{q' \max} S_A(q) k q^{-3} dq \int_0^{2\pi} |\mathcal{E}_{nlm}(q, \mathbf{k})|^2 d\varphi. \quad (10)$$

Здесь через q обозначена передача импульса при столкновении, \mathbf{k} — импульс выбитого электрона, z_B^* — эффективный заряд ионизируемой оболочки, $\mathcal{E}_{nlm}(q, \mathbf{k})$ — матричный элемент выбивания электрона из состояния $|nlm\rangle$ в непрерывный спектр, $F_A(q)$ и $S_A(q)$ — упругий и неупругий формфакторы налетающего иона, z_A и N_A — его заряд ядра и число электронов, $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-8}$ см, $v_0 = 2,19 \cdot 10^8$ см/с, $I_0 = 13,6$ эВ. Связи величин q и \mathbf{k} , углов вылета налетающего иона θ и электрона χ_L определяются законами сохранения [1—5]. Атом мишени в лабораторной системе предполагается покоящимся, поэтому индекс L в (8)—(10) опущен.

При исследовании деталей зависимости величин $d^2\sigma/d\varepsilon_L d\omega_L$ от начального состояния $|nlm\rangle$ удаляемого электрона для случаев $l \neq 0$ оказывается существенным выбор системы координат.

В [6] приведены выражения для матричных элементов $\mathcal{E}_{nlm}(q, \mathbf{k})$ ионизации из состояний $2s$, $2p_0$, $2p_1$, при этом ось квантования начального состояния выбрана по вектору \mathbf{k} вылета удаляемого электрона. В литературе по физике атомных столкновений чаще используются обозначения $2p_0$ вместо $|210\rangle$ и т. д., поэтому при дальнейшем анализе результатов расчета мы будем использовать эти обозначения подоболочек p -оболочки. Для анализа дифференциальных сечений $d^2\sigma/d\varepsilon_L d\omega_L$ выбивания электронов из $2p_0$ - и $2p_1$ -подоболочек атомов мишени удобнее выбрать ось квантования по вектору \mathbf{p} импульса налетающего иона A , во всех остальных случаях выбор оси квантования несуществен.

Матричные элементы $\mathcal{E}_{nlm}^{(p)}(q, \mathbf{k})$ ионизации при выборе оси квантования вдоль оси \mathbf{p} связаны с $\mathcal{E}_{nlm}(q, \mathbf{k})$ из [6] соотношением

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}_{211}^{(p)}(q, \mathbf{k}) \\ \mathcal{E}_{210}^{(p)}(q, \mathbf{k}) \\ \mathcal{E}_{21-1}^{(p)}(q, \mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\chi}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \chi & \sin^2 \frac{\chi}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \chi & \cos \chi & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \chi \\ \sin^2 \frac{\chi}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \chi & \cos^2 \frac{\chi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{211}(q, \mathbf{k}) \\ \mathcal{E}_{210}(q, \mathbf{k}) \\ \mathcal{E}_{21-1}(q, \mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Соотношение (11) следует из преобразования сферических функций $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ при повороте системы координат [8,11] на угол χ_L относительно оси, перпендикулярной векторам \mathbf{k} и \mathbf{p} .

Аналитические выражения для формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ для атомов и ионов с числом электронов $N \leq 10$ приведены и обсуждены в [7], они могут быть представлены в виде

$$F(q) = N^{-1} [N_{1S} L(1s, 1s) + N_{2S} L(2s, 2s) + N_{2p_0} L(2p_0, 2p_0) + N_{2p_1} L(2p_1, 2p_1)], \quad (12)$$

$$S(q) = N^{-1} [N - a_1 L^2(1s, 1s) - a_2 L^2(2s, 2s) - a_3 L^2(1s, 2s) - a_4 L^2(2p_0, 2p_0) - a_5 L^2(2p_1, 2p_1) - a_6 L^2(1s, 2p_0) - a_7 L^2(2s, 2p_0) - a_8 L^2(2p_0, 2p_0) L(2p_1, 2p_1)]. \quad (13)$$

Величины одночастичных матричных элементов

$$L(nlm, n'l'm') = \int \Psi_{nlm}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar} \Psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (14)$$

приведены в [7]. Коэффициенты N_{1S} и N_{2S} являются числами электронов в $1s$ - и $2s$ -оболочках рассматриваемых ионов или атомов соответственно. Коэффициенты N_{2P_0} и N_{2P_1} равны соответственно:

$$N_{2P_0} = (N-4)/3, \quad N_{2P_1} = 2(N-4)/3. \quad (15)$$

При получении величин (15) учтено, что матричные элементы (14) с $m = +1$ $m = -1$ равны, запрещены лишь переходы с различными значениями m . Величины коэффициентов a_i для различных ионов приведены здесь в таблице из [7], при этом пустые клетки приведенной таблицы соответствуют нулевым значениям соответствующих коэффициентов.

Таблица. Величины коэффициентов a_i в формуле (13) для неупругого формфактора $S(q)$ для иона или атома с $N \leq 10$

N	Конфигурация	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
1	$2S_{1/2}$	1							
2	$1S_0$	2							
3	$2S_{1/2}$	2	1	2					
4	$1S_0$	2	2	4	.				
5	$2P_{1/2}$	2	2	4	1/9	4/9	2/3	2/3	4/9
6	$3P_0$	2	2	4	4/9	10/9	4/3	4/3	4/9
7	$4S_{3/2}$	2	2	4	1	2	2	2	
8	$3P_2$	2	2	4	10/9	22/9	8/3	8/3	4/9
9	$3P_{3/2}$	2	2	4	13/9	28/9	10/3	10/3	4/9
10	$1S_0$	2	2	4	2	4	4	4	

В [7] проведено сравнение наших расчетов формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ для атомов и ионов кислорода с вариационными зарядами z_{nl}^* из [12] и с z_{nl}^* из энергии связи [13—14], а также с табличными величинами из [15]. Вычисленные по формулам (12)—(15) величины формфакторов для атома Ne и его ионов с зарядами от 1 до 9 иллюстрируют рис. 1 и 2. При этом вместо $F(q)$ на рис. 1 приведена величина

$$U = [1 - NZ^{-1}F(q)]^2, \quad (16)$$

входящая в формулу (9).

Отметим, что приведенные выше выражения (12)—(13) для формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ требуются не только для расчетов сечений (8)—(10), но и для расчетов сечений рассеяния γ -квантов и заряженных частиц на атомах или ионах [7].

Во всех областях переменных ε_L и χ_L , где вклад в спектр $d^2\sigma/d\varepsilon_L d\omega_L$ электронов либо из налетающего иона A , либо из атома (или иона) мишени B является преобладающим, суммарный спектр электронов может быть представлен суммой [1]

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_L d\omega_L} = \frac{d^2\sigma_A}{d\varepsilon_L d\omega_L} + \frac{d^2\sigma_B}{d\varepsilon_L d\omega_L}. \quad (17)$$

Формула (17) неприменима лишь в тех областях ε_L и χ_L , где оба слагаемых сравнимы по величине.

Вклад в сечение электронов из атома B мишени вычисляется непосредственно по формулам (8)—(10). Первый член в (17) вычисляется аналогично в движущейся с ионом системе координат и затем преобразуется в лабораторную систему общепринятым методом [16]:

$$\frac{d^2\sigma_A}{d\varepsilon_L d\omega_L} = \frac{v_L}{v_A} \frac{d^2\sigma_A}{d\varepsilon_A d\omega_A}. \quad (18)$$

Расчеты [3,4,17] величин $d^2\sigma/d\varepsilon_L d\omega_L$ указанным выше методом, а также приближенные расчеты [18,19] выявили характерные особенности электронных спектров, позволили понять природу этих особенностей, их зависимость от структуры сталкивающихся ионов или атомов и их относительной скорости v . Актуальность таких исследований подчеркивается тем, что современные экспериментальные методики с

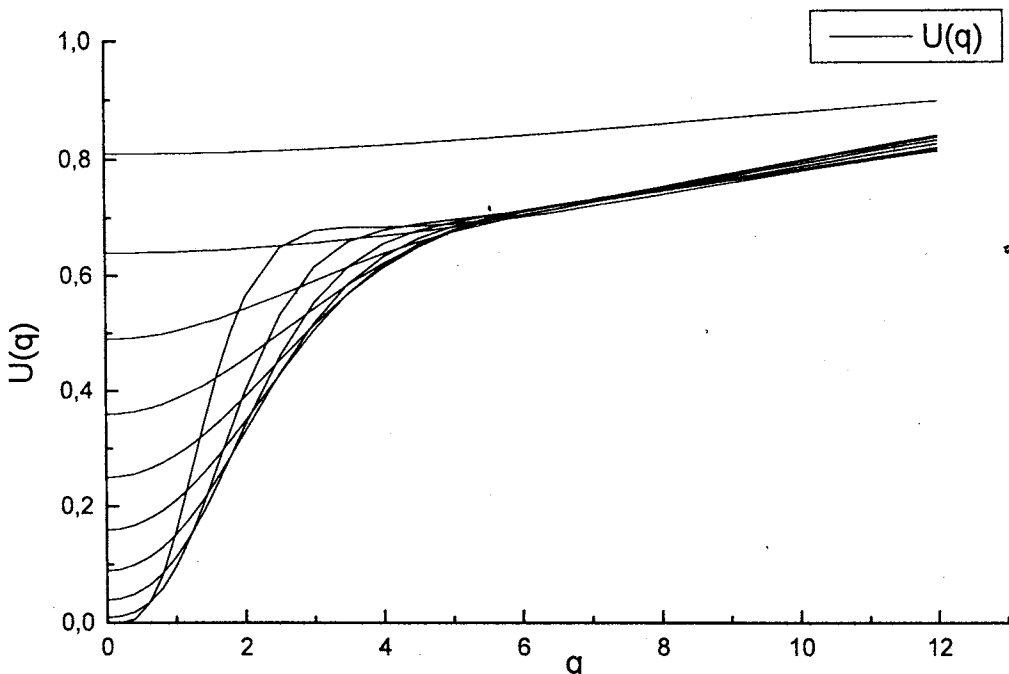


Рис. 1. Величины $U(q)$ для атома неона и его ионов с числом электронов от 1 до 9. Заряды ионов возрастают с ростом величины $U(q)$ при $q \rightarrow 0$. Эффективные заряды оболочек вычислены по энергиям связи [13,14]

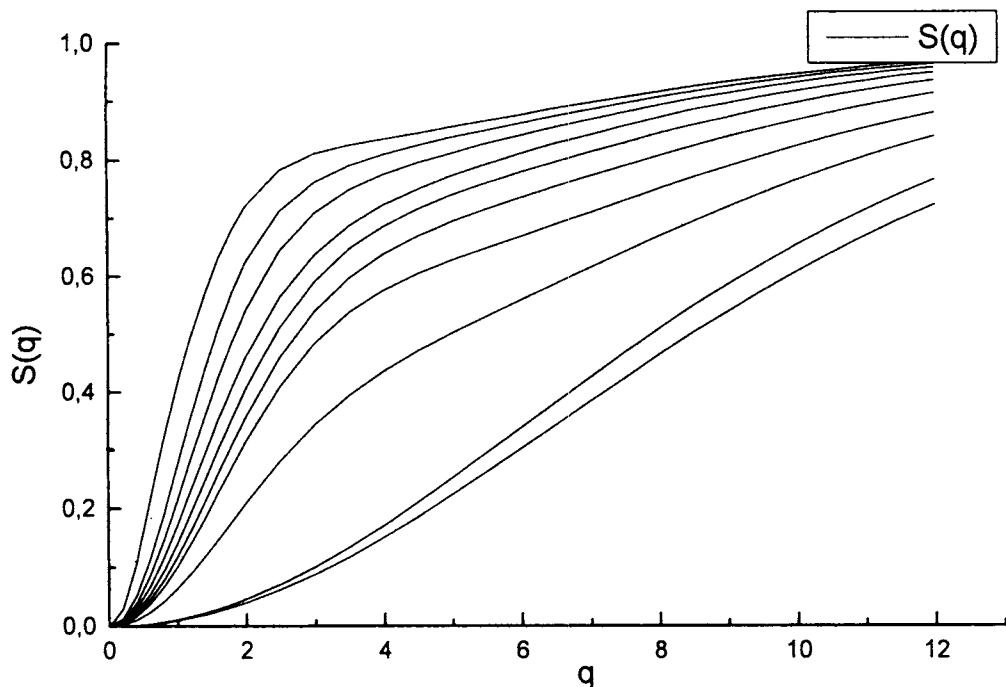


Рис.2. Величины $S(q)$ для атома неона и его ионов с числом электронов от 1 до 9. Заряды ионов возрастают с ростом величины $S(q)$ при фиксированном значении q . Эффективные заряды вычислены по энергиям связи [13,14]

использованием схем совпадений позволяют выделить вклад отдельных оболочек сталкивающихся ионов или атомов в суммарный спектр, такие эксперименты уже начаты [20]. В ряде экспериментальных работ [21] исследуются особенности электронных спектров (наличие пиков, их структура и т. д.). Начато исследование [22–24] трижды дифференциальных сечений ионизации $d^3\sigma/d\Omega d\epsilon_L d\omega_L$, здесь $\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, где θ — угол рассеяния ионизирующей частицы ω_L электронами.

Ниже дан анализ характерных особенностей угловых и энергетических спектров электронов, выбитых при быстрых ионно-атомных столкновениях, когда обе сталкивающиеся частицы имеют собственные электроны. Обсуждена зависимость этих особенностей от электронной структуры сталкивающихся частиц и их относительной скорости v .

2. Обсуждение результатов расчетов

Теоретические расчеты [1–5,17–19] дважды дифференциальных сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ показали, что в сложной структуре $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ выделяются четыре характерные области ϵ_L и χ_L , в которых $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ принимают максимальное значение. В значительной области ϵ_L и χ_L эти максимумы четко разделены и имеют различную

природу. Но особенно важно то, что в ряде случаев в различные максимумы попадают электроны из различных сталкивающихся частиц.

Рассмотрим характерные особенности дифференциальных сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ для быстрых ионно-атомных столкновений и проиллюстрируем их величинами $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$, вычисленными изложенным выше методом для столкновений ионов кислорода различного заряда ($z_A - N_A$) с энергией $E/M = 10$ МэВ/нуклон с атомами мишени C (рис.3—6).

При малых энергиях выбитых электронов $\epsilon_L \rightarrow 0$ в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ имеется максимум, который образуют электроны, выбитые из атомов мишени B при далеких столкновениях налетающего иона A с этими электронами. Этот максимум дает главный вклад в полное сечение σ_B ионизации атомов мишени при быстрых ионно-атомных столкновениях. Величина этого максимума сильно зависит как от начального состояния $|nlm\rangle$ удаляемого электрона, так и от степени ионизации ($z_A - N_A$) ионизирующего иона.

Величины $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $\epsilon_L \rightarrow 0$ являются самыми большими при $N_A = 0$, когда ионизирующей частицей является полностью ободранное ядро, при этом $d^2\sigma_B/d\epsilon_L d\omega_L = d^2\sigma_B^{el}/d\epsilon_L d\omega_L$ и $d^2\sigma_B^{in}/d\epsilon_L d\omega_L = 0$. С ростом N_A при заданном z_A первое слагаемое в (8) убывает из-за увеличения экранировки заряда z_A электронами, второе слагаемое растет с ростом N_A .

Экранирование является наиболее существенным при $q < 1$, но именно при малых $q < 1$ и при малых ϵ_L квадраты матричных элементов максимальны.

При ионизации атома C атомом O с энергией $E/M = 10$ МэВ/нуклон в области $\epsilon_L \rightarrow 0$ величина $d^2\sigma_B^{in}/d\epsilon_L d\omega_L$ сравнима с первым слагаемым в (8) для ионизации $2p$ -оболочки и лишь в 3 и 4 раза меньше $d^2\sigma_B^{in}/d\epsilon_L d\omega_L$ для $2s$ - и $1s$ -состояний соответственно. В то же время при ионизации атома C ионом O^{+4} с той же скоростью вклад $d^2\sigma_B^{in}/d\epsilon_L d\omega_L$ в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ составляет величину порядка 1%.

Из результатов на рис. 2—5 видно, что при $\epsilon_L \rightarrow 0$ наибольшим является вклад $2p_0$ -состояния выбиваемого электрона, несколько меньше вклад $2p_1$ - и $2s$ -состояний, а вклад сильно связанного $1s$ -электрона значительно меньше, хотя с ростом ϵ_L величина $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ для $1s$ -оболочки убывает существенно медленнее.

Общим свойством электронных спектров при малых ϵ_L является их практически изотропный характер.

В работе [18] выполнен приближенный расчет дважды дифференциальных сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ вырывания электрона из возбужденного состояния $2p_0$ налетающего иона He^+ при столкновении с атомом Ag мишени в пределе малых скоростей $v_A \rightarrow 0$ выбитых электронов в системе координат, связанной с налетающим ионом He^+ . Использовано борновское приближение с разложением в ряд матричного элемента перехода при $v_A \rightarrow 0$ и суммированием лишь по двум состояниям атома мишени Ag . Уста-

новлено наличие узкого провала (inverted peak) в максимуме $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ и $d\sigma/dv_L$ для ионизации $2p_0$ -подоболочки. По мнению автора [18], этот провал является следствием отрицательной четности $2p_0$ -состояния и должен наблюдаться для всех состояний с отрицательной четностью. Глубина этого провала должна расти с ростом скорости v налетающего иона.

При вырывании электрона из $2p_0$ -состояния налетающего иона такой провал должен проявиться в максимуме сечения при $v_L = v$ в лабораторной системе.

В работе [19] проведено дальнейшее исследование «обращенного пика» в сечении вырывания электронов с $\epsilon_L \rightarrow 0$ из $2p_0$ -состояния и отмечен провал в сечении $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ в бинарном максимуме при $v_L = 2v \cos \chi_L$ для ионизации атома Ne протонами, продемонстрированный в опубликованной ранее нашей работе [17] на расчетах

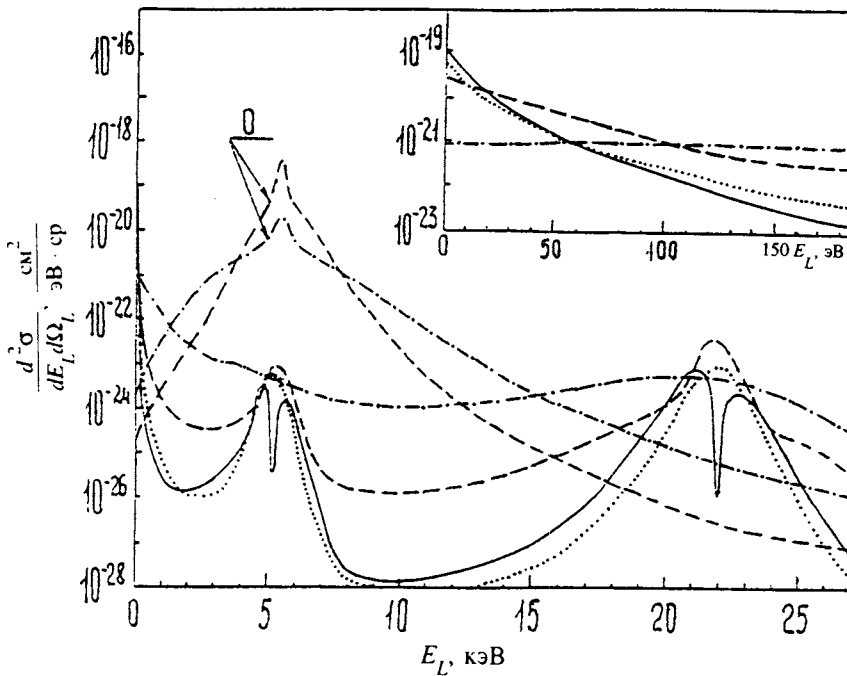


Рис.3. Величины сечений $\frac{d^2\sigma_A}{d\epsilon_L d\omega_L}$ и $\frac{d^2\sigma_B}{d\epsilon_L d\omega_L}$ при столкновении иона O^{+4} с энергией $E/M = 10$ МэВ/нуклон с атомом С мишени. Угол вылета электрона равен 1° . Сплошные кривые соответствуют сечению $\frac{d^2\sigma_B}{d\epsilon_L d\omega_L}$ вырывания электрона из начального состояния $2p_0$ атома С, точечная — из состояния $2p_1$, пунктирная — из $2s$, штрихпунктирная — из $1s$ соответственно. Буквой О обозначены соответствующие кривые для сечений $\frac{d^2\sigma_A}{d\epsilon_L d\omega_L}$ для выбивания электрона из иона O^{+4} . Ось квантования направлена по начальному импульсу иона p_i

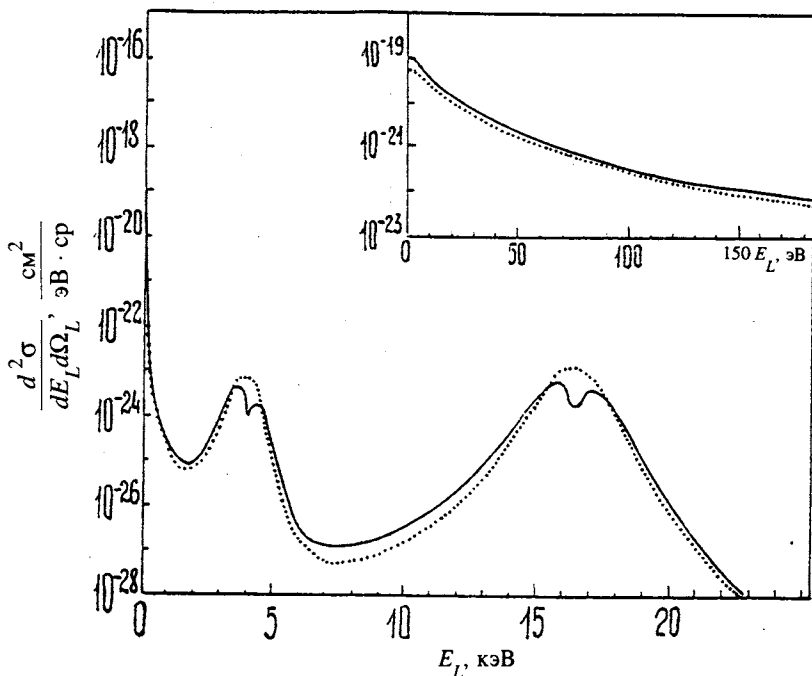


Рис.4. То же, что и на рис.3, но при угле вылета электрона $\chi_L = 30^\circ$

величин $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ для ионизации в столкновениях атомов водорода с атомами углерода. При этом наши расчеты выполнены без дополнительных приближений, использованных в [18] и справедливых лишь в пределе очень малых скоростей $v_L \rightarrow 0$.

Исследование структуры квадрата матричного элемента $\epsilon_{210}(q, \mathbf{k})$ выбивания электрона из $2p_0$ -состояния показало, что минимум в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $v_L \rightarrow 0$ возможен лишь при специальных ограничениях на величины передачи импульса q . Но $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ является интегралом по q , а при ионно-атомных столкновениях с $N_A \neq 0$ подынтегральное выражение включает и формфакторы ионизирующей частицы. При этом существенно, что при малых величинах $q < 1$ сечение сильно подавляется формфакторами, если ионизирующей частицей является атом с $N_A = z_A$.

С ростом скорости v столкновения максимум в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $\epsilon_L \rightarrow 0$ становится все более выраженным, углубляется и «провал» между ним и следующим максимумом.

Одним из важных критериев при исследовании механизма столкновения является соотношение между двумя слагаемыми в (8). Это соотношение зависит от z_A и N_A , от состояния удаляемого электрона, оно является существенно разным в различных областях энергий ϵ_L и углов χ_L .

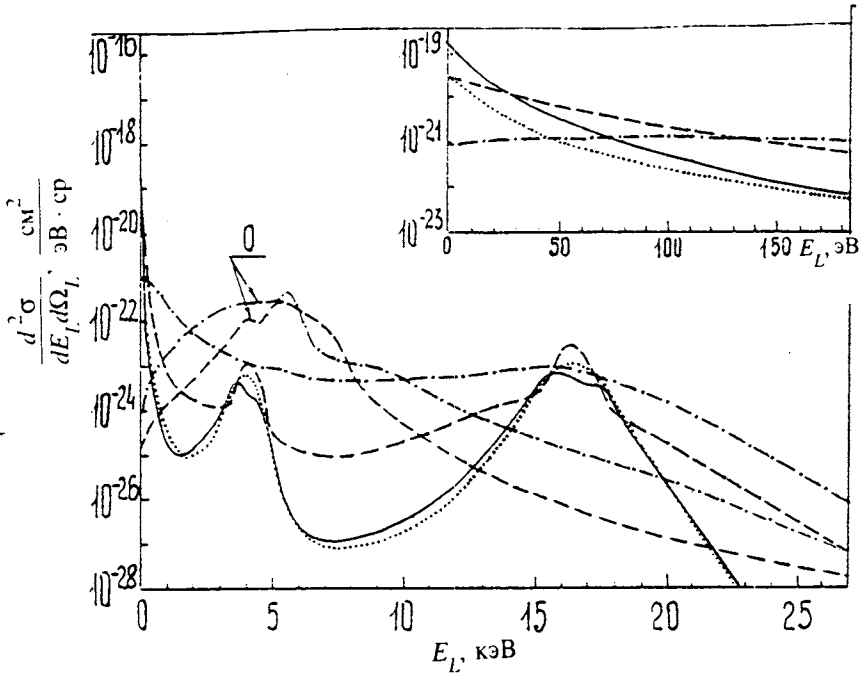


Рис.5. То же, что и на рис.4, но при направлении оси квантования по импульсу \mathbf{k} выбитого электрона

Зависимость сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $\epsilon_L \rightarrow 0$ от степени экранирования налетающего иона проиллюстрирована врезками на рис.2—4 и рис.5, где представлены расчеты величин $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $\epsilon_L \leq 200$ эВ для ионизации атома C ионами H^+ , O^{+2} , O^{+4} и атомом O .

При $v_L = 2v \cos \chi_L$ имеется ярко выраженный хребет в электронных спектрах, обусловленный близкими столкновениями ядра налетающего иона A с электронами атома (или иона) B с большой передачей импульса q . При малых углах вылета χ_L столь большие скорости v_L имеют только электроны из мишени B , выбитые в таких столкновениях. Это определяет следующие характерные особенности сечений $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $v_L = 2v \cos \chi_L$. Высота этого хребта пропорциональна квадрату заряда z_A ядра налетающего иона A и не зависит от степени ионизации ($z_A - N_A$) иона A . Вклад второго члена в (8) в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при таких ϵ_L пренебрежимо мал. Хребет несколько сдвинут в сторону меньших скоростей, чем $v_L = 2v \cos \chi_L$, для результатов на рис.2—4 этот сдвиг составляет величину порядка 1 кэВ.

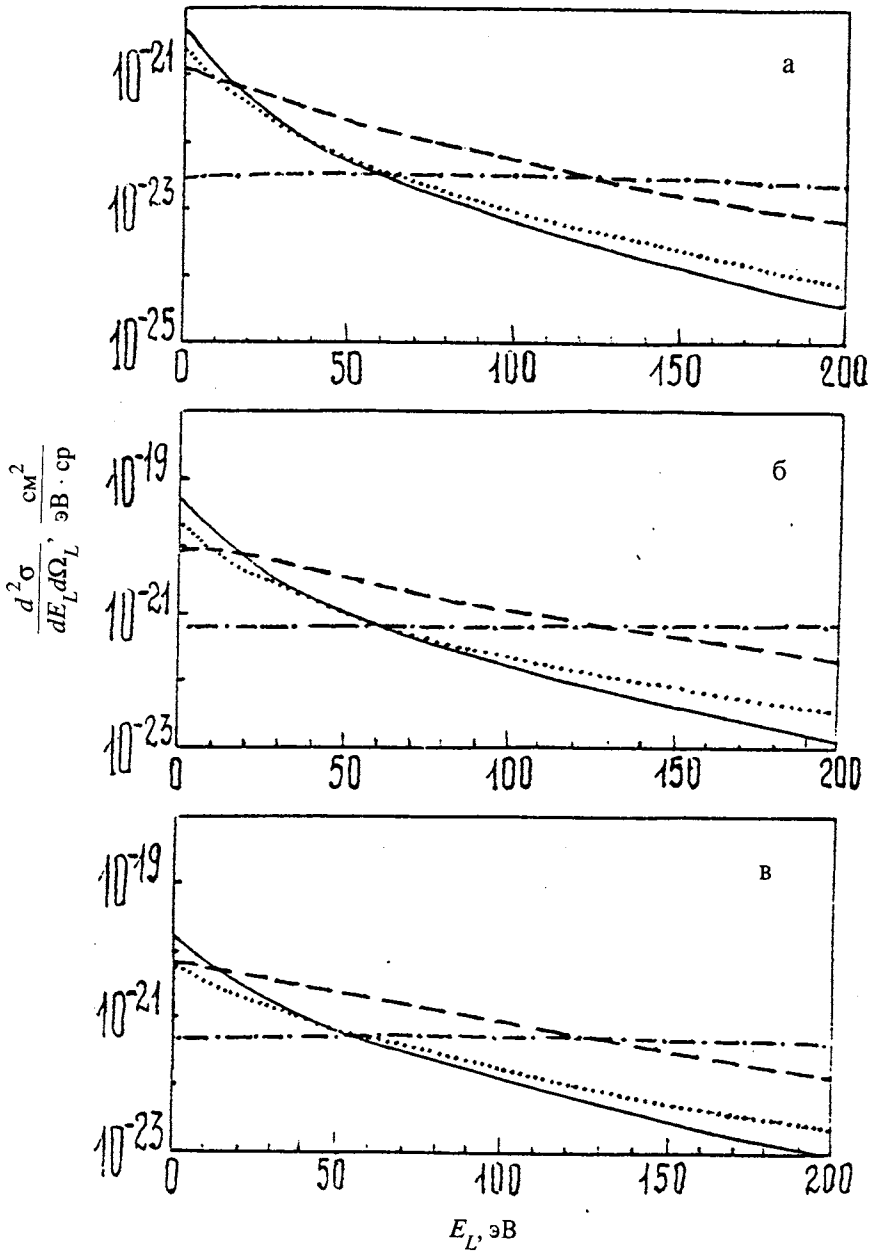


Рис.6. Величины сечений $d^2\sigma/dE_L d\omega_L$ для столкновений протона (а), иона O^{+2} (б) и атома кислорода (в) с атомом углерода при $\chi_L = 1^\circ$ и малых энергиях ϵ_L . Энергия налетающей частицы равна $E/M = 10$ МэВ/нуклон, ось квантования — по p_i

Для сильно связанных электронов из внутренних оболочек хребет при $v_L = 2v \cos \chi_L$ является слабо выраженным, широким и существенно ниже по высоте, чем для внешних оболочек. Это иллюстрируют результаты для $1s$ -оболочки на рис.2–4.

Особенностью бинарного хребта для $2p_0$ -состояния является наличие глубокого оврага в центре хребта. Такой овраг был получен при точном расчете [17], но его природа может быть просто объяснена на основе качественного анализа близких столкновений налетающего ядра с электронами атома мишени. При таких столкновениях можно пренебречь связью выбиваемых электронов с ядром атома мишени и рассматривать ионизацию как столкновение ядра налетающего иона со свободными электронами, обладающими заданным распределением по скоростям v_c , определяемым начальной волновой функцией $|nlm\rangle$, как это делается в приближении бинарных столкновений. При вырывании электрона из $2p_0$ -состояния вектор импульса налетающего иона лежит в плоскости начальной орбиты выбиваемого электрона. Скорость v_L выбитого электрона при этом может быть приближенно определена по законам упругого рассеяния ядра налетающего иона на электроне [25]. Это дает $v_L = 2v \cos \chi_L \pm v_c$, где v_c — проекция орбитальной скорости электрона в начальном состоянии $|nlm\rangle$ на направление импульса \mathbf{k}_L выбитого электрона. При этом для энергии $\epsilon_L = mv_L^2/2$ вылетевшего из $2p_0$ -состояния электрона получаем величину расщепления $\Delta\epsilon_L \cong 8(v_L/v_0)(v_c/v_0) \cos \chi_L$, что соответствует величине $\Delta\epsilon_L \cong 1,5$ кэВ для ионизации атома углерода ионами кислорода с энергией $E/M = 10$ МэВ/нуклон (см. рис.3). Отметим, что величина расщепления $\Delta\epsilon_L$ пропорциональна скорости v налетающей частицы и эффективному заряду z_B^* ионизируемой $2p_0$ -подоболочки.

Расщепление бинарного максимума для $2p_0$ -подоболочки можно объяснить и более формально [12], заметив, что сечение $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ в бинарном максимуме пропорционально проекции плотности распределения импульсов \mathbf{k} в начальном состоянии на направление \mathbf{p} .

С увеличением угла χ_L глубина провала в хребте в $d^2\sigma/d\epsilon_L d\omega_L$ при $v_L = 2v \cos \chi_L$ для вырывания электрона из $2p_0$ -состояния быстро уменьшается. При $\chi_L = 30^\circ$ и при выборе оси квантования по импульсу \mathbf{p} налетающего иона A от глубокого провала при $v_L = 2v \cos \chi_L$ остается лишь перегиб на кривой (см. рис.4). При выборе оси квантования по импульсу \mathbf{p} выбитого электрона расщепление бинарных максимумов для ионизации $2p_0$ -подоболочки при $\chi_L = 30^\circ$ еще достаточно ярко выражено (см. рис.5). Более быстрое уменьшение глубины провала для ориентации по \mathbf{p} с ростом χ_L объясняется примесью $2p_1$ -состояния, определенного в ориентации по направлению \mathbf{k} в соответствии с (11).

В структуре $d^2\sigma_B/d\epsilon_L d\omega_L$ имеется еще один хребет при $v_L = v \cos \chi_L$, обусловленный близкими столкновениями электронов налетающего иона A с электронами атома мишени B . Его величина примерно пропорциональна N_A , он исчезает при ионизации мишени ядром. Основной вклад в $d^2\sigma_B/d\epsilon_L d\omega_L$ при $v_L = v \cos \chi_L$ дает второе слагаемое

в (8). При этом величина переданной энергии ΔE в формулах для связи q , импульса \mathbf{k} и угла θ должна выбираться в виде [3]:

$$\Delta E = \bar{I}_A + I_B + k_L^2/2m + k_A^2/2m, \quad (19)$$

где k_A — импульс электрона, выбитого из налетающего иона при электрон-электронном столкновении; \bar{I}_A — средняя энергия возбуждения налетающего иона; I_B — ионизационный потенциал для состояния $|nlm\rangle$ атома B . Если учитывать в ΔE только первые два слагаемых в (19), как это обычно делалось при расчетах полных сечений σ_B в ионизации, расчет с использованием правила сумм не дает максимума при $v_L = v \cos \chi_L$. Для упрощения расчета мы приняли $k_A = k_L$, что может приводить к несколько заниженным величинам $d^2\sigma_B/d\varepsilon_L\omega_L$ при $v_L = v \cos \chi_L$ и $v_L = 2v \cos \chi_L$.

Зависимость бинарного хребта при $v_L = v \cos \chi_L$ от начального состояния $|nlm\rangle$ вырываемого электрона качественно такая же, как и в бинарном хребте при $v_L = 2v \cos \chi_L$. Из-за кинематических особенностей рассеяния частиц равной массы [25] на этом бинарном хребте расщепление максимума в сечении для $2p_0$ -состояния меньше, чем при $v_L = 2v \cos \chi_L$. Сдвиг этого хребта в сторону меньших ε_L также меньше, он составляет примерно 200 эВ на рис.3.

Спектры электронов в $d^2\sigma_A/d\varepsilon_L\omega_L$, выбитых из налетающего иона A , могут быть вычислены по формулам, аналогичным (1)—(3) в системе координат, связанной с ионом A , и затем пересчитаны в лабораторную систему [2,10]. При этом электроны из максимума при $\varepsilon_L \rightarrow 0$ в движущейся системе образуют в лабораторной системе максимум при $v_L = v$ и при малых углах χ_L . Электроны из бинарного максимума при $v_A = 2v \cos \chi_L$ в движущейся системе получают в лабораторной системе скорость $v_L = v$ и угол вылета $\chi_L = \pi - 2\chi_A$. Электроны из бинарного максимума при $v_A = 2v \cos \chi_L$ будут иметь в лабораторной системе скорость $v_L = v \cos \chi_L$, где $\chi_L = \pi/2 - \chi$.

Следовательно, электроны из первых двух максимумов из налетающего иона обладают скоростью $v_L = v$ и при $\chi_L \neq 0$ образуют в лабораторной системе отдельный максимум. Лишь при $\chi_L \rightarrow 0$ эти электроны попадают в ту же область v_L и χ_L , что и электроны из атома мишени с $v_L = v \cos \chi_L$. Но в этой области скоростей $v_L \equiv v$ и углов $\chi_L \rightarrow 0$ электронов из налетающего иона значительно больше, и вкладом электронов из атома мишени можно пренебречь. Таким образом, и в области скоростей электронов $v_L \leq v$ наблюдается частичное разделение электронов, обеспечивающее применимость используемых приближений.

С ростом скорости v столкновения все указанные максимумы становятся все более выраженными, провалы между ними — шире и глубже. При четком разделении максимумов предложенный в [1—5] метод расчета должен давать количественное описание электронных спектров различных партнеров в ионно-атомных столкновениях.

Из приведенных выше результатов расчета видно, что в электронных спектрах имеются значительные области энергии ε_L , в которых вклад внутренних оболочек не является малым по сравнению со вкладом внешних оболочек. В области энергий ε_L и углов

χ_L между максимумами сечений $d^2\sigma_B/d\varepsilon_L d\omega_L$ вклад на рис.3—5 внутренней оболочки $1s$ превышает вклад $2p$ -оболочки. Поэтому при расчетах электронных спектров необходимо учитывать вклад всех оболочек. При этом полное сечение σ вырывания электронов из $1s$ -оболочки много меньше соответствующих сечений для $2s$ - и $2p$ -оболочек, так как главный вклад в полные сечения дают электроны с малой энергией ε_L , где величина $d^2\sigma_B/d\varepsilon_L d\omega_L$ для $1s$ -состояния мала, это видно из врезок на рис.3—5 и рис.6.

Современные экспериментальные методики позволяют проверить точность таких расчетов и уточнить их область применимости, поэтому экспериментальное исследование особенностей электронных спектров, их зависимость от состояния $|nlm\rangle$ вырываемого электрона и степени ионизации $(z_A - N_A)$ ионизирующего иона является особенно актуальным.

Литература

1. Kaminsky A.K., Myakishev N.G., Popova M.I. — J. Phys. B, 1980, v.16, p.1161.
2. Kaminsky A.K. et al. — Nucl. Instrum. Meth., 1981, v.180, p.231.
3. Day M.H.J. — J. Phys. B., 1981, v.14, p.231.
4. Kaminsky A.K., Popova M.I. — J. Phys. B, 1982, v.15, p.403.
5. Каминский А.К., Попова М.И. — ЖТФ, 1986, т.56, вып.7, с.1287.
6. Каминский А.К., Lovtsov S.V., Popova M.I. — Phys. Lett. A, 1977, v.61A, p.308.
7. Каминский А.К. — Краткие сообщения ОИЯИ, №1[81]-97, Дубна, 1997, с.65.
8. Давыдов А.С. — Квантовая механика, 1963, М.: ГИФМЛ, с.478.
9. Edmonds A.R. — Angular momentum in quantum mechanics. Princeton University Press, Princeton, 1957, p.57.
10. Wilson W.E., Toburen L.H. — Phys. Rev. A, 1973, v.7, p.1535.
11. Toburen L.H. — Phys. Rev. A, 1971, p.5, p.216.
12. Omidvar K., Kyle H.L., Sullivan E.C. — Phys. Rev. A, 1972, v.5, p.1174.
13. Sevier K.D. — Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1979, v.24, p.323.
14. Carlson T.A. et al. — Atomic Data, 1970, v.2, №2, p.63.
15. International tables for X-ray crystallography. Kynoch Press, Birmingham, England, v.3, 1968.
16. Drepper F., Briggs J.S. — J. Phys. B, 1976, v.9, p.2063.
17. Kaminsky A.K., Popova M.I. — XIII ICPEAC, Abstracts of contributed papers, Berlin, 1983, p.368.
18. Bürgdorfer. — Phys. Lett., 1983, v.51, p.374.
19. Böckl H., Spies R., Bell F., Jakubassa-Amundsen D.H. — Phys. Rev. A, 1984, v.29, p.983.
20. Sakardi L., Bossler J., Hipper R., Lutz H.O. — J. Phys. B, 1983, vol.16, p.71.
21. Dunkan M.M., Menendez M.G., Hopkins J.H. — Phys. Rev. A, 1984, v.300, p.655.
22. Bransden B.H., Smith J.J., Winters K.H. — J. Phys. B, 1978, v.11, №17, p.3095.
23. Biswas R., Sinha C. — J. Phys. B, 1995, v.28, p.1311.
24. Biswas R., Sinha C. — Phys. Rev. A, 1995, v.51, p.3766.
25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Механика. М.: ГИФМЛ, 1958, с.60.