

УДК 537.56, 539.18, 621.384

РАСЧЕТ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ЭФФЕКТИВНЫХ СЕЧЕНИЙ ИОНИЗАЦИИ В БЫСТРЫХ ИОННО-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

*А. К. Каминский*¹

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва

Изложен метод расчета эффективных сечений $d\sigma/d\Omega$ ионизации, дифференциальных по углу рассеяния налетающего иона, в быстрых столкновениях легких ионов и атомов. Приведены результаты численного расчета угловых распределений ионов Al, Mg (различных зарядов и энергии) после столкновений с атомами Ne, Mg с ионизацией последних. Обсуждена зависимость эффективных сечений ионизации от начальных состояний выбиваемых электронов, заряда и энергии налетающего иона.

The method of the calculations of the ionization effective cross sections $d\sigma/d\Omega$ differential in the incident ion scattering angle is described in fast collisions of light ions and atoms. The calculated values of angular distributions of the ions Al, Mg (for the different values of charge and energy of ions) after their collisions with the Ne, Mg atoms being ionized are reported. The dependence of such angular distributions on the incident ion charge and energy and the initial state of ejected electron is investigated.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования зарядовых, энергетических и угловых распределений всех частиц после ионно-атомных столкновений являются основным направлением физики ионно-атомных столкновений. Величины указанных выше распределений необходимы также для большого класса научно-технических проблем [1–3].

В [3] изложен метод расчета угловых и энергетических распределений $d\sigma/d\Omega$ ионов после ионизации в быстрых ионно-атомных столкновениях, когда оба сталкивающиеся партнеры A и B имеют $N_A \leq 10$ и $N_B \leq 10$ собственных электронов соответственно. Ниже приведены расчеты угловых распределений ионов после ионизации в быстрых ионно-атомных столкновениях, когда налетающий ион (или атом) A имеет число электронов $N_A \leq 12$, а ионизуемый атом (или ион) мишени B имеет число электронов $N_B \leq 18$. Получены необходимые формфакторы, отмечена специфика метода расчета, требующая удвоенной точности счета на компьютерах.

¹kamin@anna19.npi.msu.su, kamin@he.jinr.ru

1. РАСЧЕТ

Дифференциальное по углу рассеяния θ налетающего иона (или атома) A эффективное сечение $d\sigma/d\Omega$ вырывания электрона из состояния $|nlm\rangle$ в атоме (или ионе) мишени B в плосковолновом борновском приближении (PWBA) выражается в виде

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \frac{d\sigma_B^{\text{el}}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_B^{\text{in}}}{d\Omega}, \quad (1)$$

$$\frac{d\sigma_B^{\text{el}}}{d\Omega} = \frac{4a_0^2 z_A^2 M^2}{z_B^{*4} m^2} \int \left[1 - \frac{N_A}{z_A} F_A(q) \right]^2 \frac{v' \eta_{nlm}(q, k) dk}{v q^4}, \quad (2)$$

$$\frac{d\sigma_B^{\text{in}}}{d\Omega} = \frac{4a_0^2 N_A M^2}{z_B^{*4} m^2} \int S_A(q) \frac{v' \eta_{nlm}(q, k) dk}{v q^4}. \quad (3)$$

Здесь и далее использованы обозначения: $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$; M — приведенная масса сталкивающегося иона A и атома B ; v и v' — их относительные скорости до и после столкновения; q — изменение импульса p налетающего иона; k — импульс электрона в системе координат, связанной с ионом B ; $\eta_{nlm}(q, k)$ — проинтегрированный по углу χ вылета выбитого электрона квадрат модуля матричного элемента $\epsilon_{nlm}(q, \mathbf{k})$ перехода электрона из состояния $|nlm\rangle$ в непрерывный спектр; m — масса электрона; $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9}$ см — боровский радиус; z_B^* — эффективный заряд ионизуемой оболочки иона B ; величины q и k даны в единицах $z_B^* \hbar a_0^{-1}$.

Выражения для $\eta_{nlm}(q, k)$ для $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -, $3s$ -, $3p$ - и $3d$ -состояний электронов приведены в [4–6]. Они связаны выражением

$$\frac{dF(q, \Delta E)}{d(\Delta E)} = \frac{\Delta E}{I_0} (q a_0)^{-2} \eta_{nlm}(q, k) \quad (4)$$

с так называемой плотностью обобщенных сил осциллятора $\frac{dF(q, \Delta E)}{d(\Delta E)}$ (здесь ΔE — передача энергии иона при столкновении).

Формулы (1)–(3) приведены в [1–3] для эффективного сечения $d\sigma/d\Omega$ ионизации иона A при столкновении с атомом B , там же отмечена их симметрия относительно перестановки индексов A и B (реальным «нарушением симметрии» является тот факт, что величины $\eta_{nlm}(q, k)$ имеются в литературе до $3d$ -оболочки, а величины формфакторов приведены ниже только до $3s$ -оболочки включительно).

Связь угла рассеяния θ с величинами q и k определяется законами сохранения. Ионизационные потенциалы I_0 атомов и ряда ионов приведены в [7–9].

В формулах (1)–(3) по всем начальным состояниям электронов из иона N_A проведено суммирование по правилу сумм. Формфакторы $F_A(q)$ и $S_A(q)$ определяются только электронной структурой атома (или иона) A , описываемой его начальной функцией $\Psi_A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$:

$$F_A(q) = N_A^{-1} \sum_{j=1}^{N_A} \int |\Psi_A|^2 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j/\hbar) d\mathbf{r}, \quad (5)$$

$$S_A(q) = N_A^{-1} \left[\sum_{j \neq s}^{N_A} \int |\Psi_A|^2 \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_s)/\hbar) d\mathbf{r} - |N_A F_A(q)|^2 \right]. \quad (6)$$

Интегрирование в (5) и (6) ведется по всем радиусам-векторам электронов \mathbf{r}_j всех электронов иона N_A . Для расчета формфакторов $F_A(q)$ и $S_A(q)$ были использованы волновые функции свободных ионов и атомов в виде линейных комбинаций [1–3, 10]:

$$\Psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_A}) = \sum_t \alpha_t \prod_{j=1}^{N_A} \psi_j(z_j, \mathbf{r}_j) \chi_j(m_{sj}) \quad (7)$$

одноэлектронных кулоновских волновых функций

$$\psi_j(z_j^*, \mathbf{r}_j) = R_{nl}(z_j^*, r_j) Y_{lm}(\vartheta_j, \varphi_j) \quad (8)$$

и спиновых функций $\chi_j(m_{sj})$.

Вычисленные с использованием волновых функций (7)–(8) выражения для $F_A(q)$ и $S_A(q)$ для атомов с $z_A \leq 12$ и ионов с $N_A \leq 12$ имеют простой алгебраический вид:

$$F(q) = N^{-1} [N_{1S}L(1s, 1s) + N_{2S}L(2s, 2s) + N_{2P0}L(2p_0, 2p_0) + N_{2P1}L(2p_1, 2p_1) + N_{3S}L(3s, 3s)], \quad (9)$$

$$S(q) = N^{-1} [N - a_1L^2(1s, 1s) - a_2L^2(2s, 2s) - a_3L^2(1s, 2s) - a_4L^2(2p_0, 2p_0) - a_5L^2(2p_1, 2p_1) - a_6L^2(1s, 2p_0) - a_7L^2(2s, 2p_0) - a_8L(2p_0, 2p_0)L(2p_1, 2p_1) - a_9L^2(3s, 3s) - a_{10}L^2(1s, 3s) - a_{11}L^2(2s, 3s) - a_{12}L^2(3s, 2p_0)]. \quad (10)$$

Коэффициенты N_{nlm} в (9) равны числам электронов в соответствующих состояниях $|nlm\rangle$. Коэффициенты α_i , в (10) приведены в таблице (пустые клетки соответствуют нулевым значениям), величины одночастичных матричных элементов

$$L(nlm, n'l'm') = \int \Psi_{nlm}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \Psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (11)$$

для $N_B \leq 12$ даны в приложении (соответствующие величины для $N_B \leq 10$ приведены в [1]).

При анализе влияния упругого формфактора $F(q)$ на сечения удобно вместо $F(q)$ рассматривать входящую в (2) величину

$$U_i(q) = \left[1 - \left(\frac{N_i}{z_i} \right) F_i(q) \right]^2. \quad (12)$$

Свойства формфакторов (8)–(11) проиллюстрированы на рис. 1, 2 формфакторами ионов Mg с зарядом от 0 до +11 (графики формфакторов для ионов Ne и Al приведены в [3, 11]). Общим свойством неупругих формфакторов $S(q)$ является их монотонный рост с увеличением q и числа электронов в ионизирующем ионе. Упругие формфакторы $U(q)$ подавляют подынтегральное выражение в (2) тем сильнее, чем меньше величина q

Величины коэффициентов a_i в формуле (10) для неупругого формфактора $S(q)$ для иона или атома с $N \leq 12$

N	Терм	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9	a_{10}	a_{11}	a_{12}
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					
11	${}^1S_{1/2}$	2	2	4	2	4	4	4		1	2	2	2
12	1S_0	2	2	4	2	4	4	4		2	4	4	4

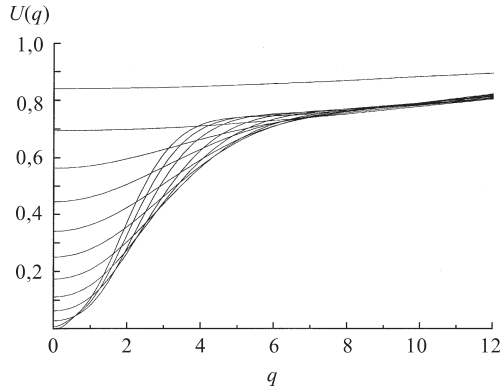


Рис. 1. Величины $U(q)$ для атома Mg и его ионов Mg^{+i} с зарядом i от 0 до +11. Заряд иона тем выше, чем выше кривая $U(q)$

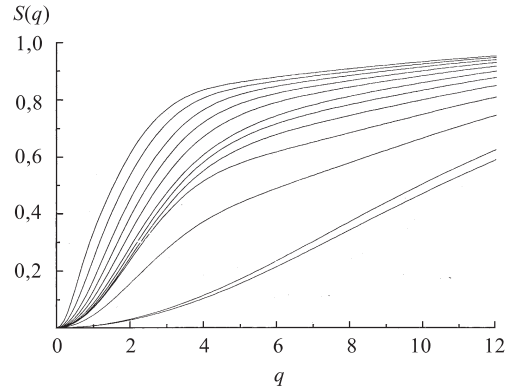


Рис. 2. Неупругий формфактор $S(q)$ для атома Mg и его ионов Mg^{+i} с зарядом i от 0 до +12. Заряд иона тем выше, чем ниже кривая $S(q)$

и чем меньше степень ионизации иона (подробнее свойства формфакторов и величин $\eta_{mlm}(q, k)$ обсуждены в [3, 4]).

Формулы (1)–(3) приведены в нерелятивистском приближении, релятивистские поправки обсуждаются в [6, 12–14], в [14] приведены формулы для дифференциальных сечений ионизации в умеренно-релятивистской области энергии сталкивающихся ионов при $E/A \leq 1$ ГэВ/нуклон.

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТА

Существенной особенностью дифференциальных эффективных сечений $d\sigma/d\Omega$ в ионно-атомных столкновениях является малая передача энергии и импульса иона ($\Delta p \ll p$ и $\Delta E \ll E$). Это неоднократно отмечалось ранее и лежит в основе используемого метода расчета. В то же время современные стандартные программы для персональных компьютеров могут быть использованы для подобных расчетов только с двойной точностью, это учтено при счете приведенных здесь величин $d\sigma/d\Omega$ (недостаточный учет этого свойства программ привел к занижению величин $d\sigma/d\Omega$ для ионизации атомов Ne ионами Al при $\vartheta \rightarrow 0$ в [3]).

Характерные особенности угловых распределений $d\sigma/d\Omega$ налетающих ионов после столкновений с атомами (или ионами) мишеней с ионизацией последних проиллюстрированы ниже как для ионизации атома Ne ионами Al, когда внешними являются 2s- и 2p-оболочки (рис. 3, а-в), так и для ионизации атома Mg ионами Mg с внешней

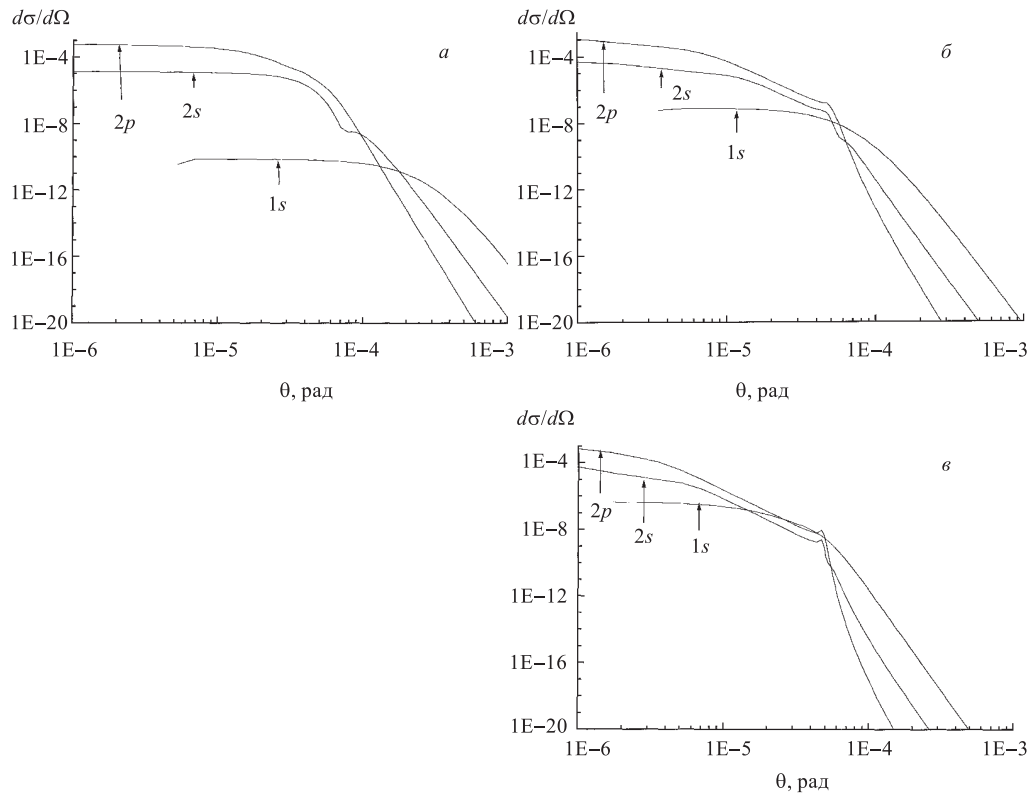


Рис. 3. Дифференциальные эффективные сечения ионизации атома Ne при столкновении с ионами: а) Al^{+9} с энергией 300 кэВ/нуклон (в единицах $см^2/ср$ в системе центра масс); б) Al^{+6} с энергией, равной 2 МэВ/нуклон; в) Al^{+3} с энергией, равной 10 МэВ/нуклон. Начальные состояния вырываемых электронов указаны под кривыми

3s-оболочкой (рис. 4, 5) при различных энергиях налетающих ионов (для наглядной иллюстрации точности метода кривые проведены по расчетным точкам без сглаживания).

Общим свойством всех приведенных расчетов величин $d\sigma/d\Omega$ является наличие области углов 0 с линейной (в логарифмическом масштабе) зависимостью $d\sigma/d\Omega$ от θ при $\theta > mv_0 z^* (Mv)^{-1}$, что эквивалентно резерфордскому рассеянию соответствующих зарядов. Такие большие углы θ соответствуют близким столкновениям ионов с малыми прицельными параметрами, в этой области углов θ результаты слабо зависят от детального описания волновых функций выбиваемых электронов.

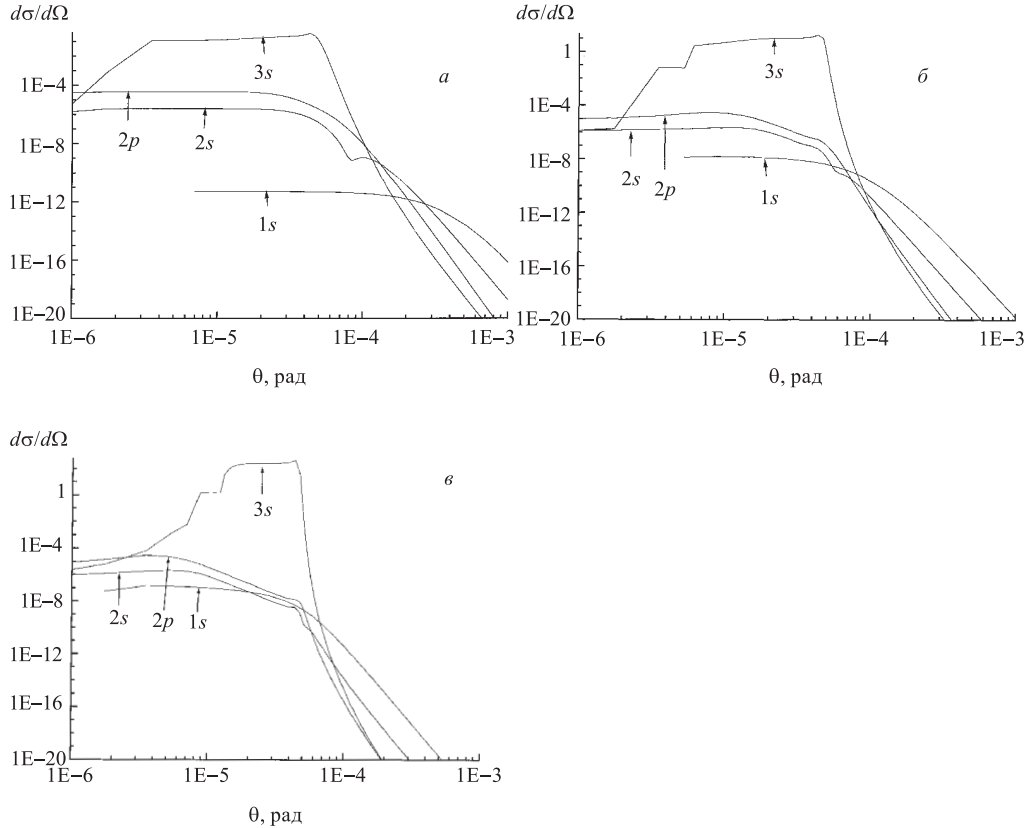


Рис. 4. Дифференциальные эффективные сечения ионизации атома Mg при столкновении с атомом Mg: а) с энергией 300 кэВ/нуклон; б) с энергией, равной 2 МэВ/нуклон; в) с энергией, равной 10 МэВ/нуклон

При ионизации с рассеянием ионов на малые углы $\theta < mv_0 z^* (Mv)^{-1}$ сечения $d\sigma/d\Omega$ сильно зависят от начального состояния $|nlm\rangle$ удаляемого электрона и сравнительно слабо зависят от угла θ . При малых углах θ величины $d\sigma/d\Omega$ для ионизации внутренней 1s-оболочки всегда меньше всех других сечений, но это различие уменьшается с ростом энергии E ионизирующего иона. Это видно на всех рис. 3–5. В то же время при слабой

зависимости величин ионизации $d\sigma/d\Omega$ $1s$ -оболочки от угла θ эти величины становятся преобладающими на больших углах θ . Это следует из того, что для рассеяния на большие углы требуется сравнительно большая передача импульса q , разрешенная законами сохранения только для сильно связанного $1s$ -электрона.

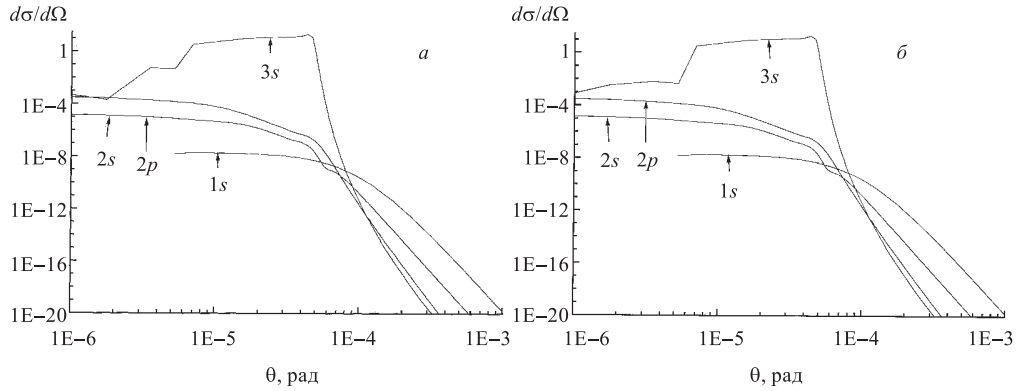


Рис. 5. Величины $d\sigma/d\Omega$ для ионизации атома Mg ионом Mg^{+2} (а) и ионом Mg^{+6} (б) с энергией, равной 2 МэВ/нуклон

На рис. 4, 5 видно, что при малых углах θ величины $d\sigma/d\Omega$ для вырывания $3s$ -электрона значительно превышают все другие величины $d\sigma/d\Omega$, различие между величинами $d\sigma/d\Omega$ для $2s$ – $2p$ -электрона существенно меньше. В то же время величины $d\sigma/d\Omega$ для $3s$ -электрона убывают при самых малых углах $\theta \rightarrow 0$. Это объясняется тем, что вероятность вырывания слабо связанного $3s$ -электрона экранированным ядром иона (описываемая формулой (2)) без заметной передачи поперечного импульса (при «лобовом столкновении») мала.

При далеких столкновениях ионов с атомами с малой передачей q импульса величина $U(q)$ растет с увеличением заряда иона (см. рис. 1). Это приводит к заметному увеличению $d\sigma/d\Omega$ при малых углах $\theta \leq 10^{-5}$ с ростом заряда иона, что отчетливо видно при сравнении $d\sigma/d\Omega$ для ионов Mg^{+i} и атомов Mg (рис. 4, 5).

Заметим, что вследствие законов сохранения в такие величины $d\sigma/d\Omega$ ионизации при столкновениях двух атомов Mg (см. рис. 4, а–б) при всех приведенных энергиях при малых углах $\theta < 10^{-6}$ основной вклад дают электрон-электронные столкновения, описываемые формулой (3). Относительный вклад электрон-электронных столкновений в $d\sigma/d\Omega$ в других областях углов θ при всех энергиях сравнительно мал даже для столкновения нейтральных атомов (для ионно-атомных столкновений он всегда мал из-за пропорциональности числу N_A электронов в (3) вместо Z_A^2 в (2)). При электрон-электронных столкновениях налетающий ион теряет энергию и импульс на возбуждение обоих сталкивающихся электронов. Уравнение (3), описывающее вклад в сечение ионизации столкновений электронов налетающего иона (или атома) A с электронами мишени B , содержит функцию $\eta_{lm}(q, k)$, входящую в (2). Но отличие в кинематике электрон-электронных столкновений от столкновений электронов с ядром приводит к сдвигу максимумов в энергетических распределениях выбитых электронов в сторону меньших (примерно в 2 раза)

значений импульсов k по сравнению с (2). Вклад этих областей q и k в сечение $d\sigma/d\Omega$ зависит от числа электронов в сталкивающихся частицах A и B и от энергии налетающего иона A . Особенности величин $\eta_{mlm}(q, k)$ и формфакторов необходимо учитывать при выборе процедуры интегрирования в (7), (8) и анализе результатов.

Приведенные на рисунках данные показывают возможности использованного метода расчета сечений ионизации при быстрых столкновениях многоэлектронных ионов и атомов, пределы применимости метода обсуждены ранее в [1, 2, 10].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Величины матричных элементов $L(nlm, n'l'm)$ в формуле (10) для $3s$ -оболочки. Величины матричных элементов $L(nlm, n'l'm)$ для первых 8 членов в (10) совпадают с опубликованными в [1] для $N \leq 10$.

$$L(3s, 3s) = 1/b^2 - 2(3 - a_7^2)/b^3 + 16(1 - a_7^2)/b^4 - \\ - 4(5 - 10a_7^2 + a_7^4)/b^5 + 10(3 - 10a_7^2 + 3a_7^4)/(3b^6), \quad (\text{П1})$$

$$a_7 = 2qz^*/(3z_{3s}), b = 1 + a_7^2. \quad (\text{П1а})$$

$$L(3s, 2p_0) = aa \{ 1/b_1^2 d^4 + (-3d + 9da_8^2 - 6z_{3s} + 2z_{3s}a_8^2)/(3b_1^3 d^5) + \\ + 2z_{3s}(d - 6da_8^2 + da_8^4 + 4z_{3s}/9 - 4z_{3s}a_8^2)/(b_1^4 d^6) - \\ - 8z_{3s}^2(1 - 10a_8^2 + 5a_8^4)/(9b_1^5 d^6) \}, \quad (\text{П2})$$

$$a_8 = qz^*/(z_{2p}/2 + z_{3s}/3), b_1 = 1 + a_8^2, aa = (2z_{2p}^5 z_{3s}^3 / 27)^{1/2} / a_8. \quad (\text{П2а})$$

$$L(1s, 3s) = c_{13}E(1s, 3s), \quad (\text{П3})$$

$$a_9 = qz^*/(z_{1s} + z_{3s}/3), b_2 = 1 + a_9^2, \quad (\text{П3а})$$

$$d_1 = z_{1s} + z_{3s}/3, aa_1 = \text{sqrt}(z_{1s}z_{3s}/3)^3, \quad (\text{П3б})$$

$$E(1s, 3s) = aa_1 [8/(b_2^2 d_1^3) - 16z_{3s}(3 - a_9^2)/(3b_2^3 d_1^4) + \\ + 32z_{3s}^2(1 - a_9^2)/(9b_2^4 d_1^5)], \quad (\text{П3в})$$

$$c(1s, 3s) = 8aa_1(z_{1s} - z_{3s}/3)(z_{1s} - z_{3s})/(z_{1s} + z_{3s})^5, \quad (\text{П3г})$$

$$c_{13} = c(1s, 3s)/[1 - c(1s, 3s)^2]^{1/2}. \quad (\text{П3д})$$

$$L(2s, 3s) = c_{23}E(2s, 3s), \quad (\text{П4})$$

$$a_{10} = qz^*/(z_{2s}/2 + z_{3s}/3), b_3 = 1 + a_{10}^2, d_2 = z_{2s}/2 + z_{3s}/3, \quad (\text{П4а})$$

$$aa_2 = \text{sqrt}(2z_{2s}z_{3s}/3)^3, \quad (\text{П4б})$$

$$E(2s, 3s) = aa_2 [1/(b_3^2 d_2^3) - (3z_{2s} + 4z_{3s})(3 - a_{10}^2)/(6b_3^3 d_2^4) + \\ + 4z_{3s}(1 - a_{10}^2)(z_{2s} + 2z_{3s}/9)/(d_2^5 b_3^4) - \\ - 4z_{2s}z_{3s}^2(5 - 10a_{10}^2 + a_{10}^4)/(9d_2^6 b_3^5)], \quad (\text{П4в})$$

$$c(2s, 3s) = aa_2 [2 - (3z_{2s} + 4z_{3s})/d_2 + 8z_{3s}(z_{2s} + 2z_{3s}/9)/d_2^2 - \\ - 40z_{2s}z_{3s}^2/(3d_2)^3] / 2/d_2^3, \quad (\text{П4г})$$

$$c_{23} = c(2s, 3s)/[1 - c(2s, 3s)^2]^{1/2}. \quad (\text{П4д})$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каминский А. К., Попова М. И. // ЖТФ. 1986. Т. 56, вып. 7. С. 1287.
2. Каминский А. К., Васильев А. А. // ЭЧАЯ. 1998. Т. 29, вып. 2. С. 489.
3. Каминский А. К. // Письма в ЭЧАЯ. 2000. № 5[102]. С. 96.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1963. С. 666.
5. Choi B. H., Merzbacher E., Khandelwal G. S. // Atom. Data. 1973. V. 5. P. 291.
6. Choi B. H. // Phys. Rev. A. 1973. V. 7. P. 2056.
7. Физические величины: Справ. / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М., 1991. С. 411.
8. NIST database at http://aeldata.nist.gov/nist_atomic_spectra.html.
9. Viemont E., Fremat Y., Quinet P. // Atom. Data and Nucl. Data Tables. 1999. V. 71, No. 1. P. 117.
10. Каминский А. К. // Крат. сообщ. ОИЯИ. 1997. № 1[81]. С. 65.
11. Каминский А. К. // Там же. № 4[84]. С. 21.
12. Inokuti M. // Rev. Mod. Phys. 1971. V. 43. P. 297.
13. Inokuti M., Itikawa Y., Turner J. E. // Rev. Mod. Phys. 1978. V. 50. P. 23.
14. Kaminsky A. K. et al. // Nucl. Instr. Meth. 1981. V. 180. P. 231.

Получено 14 февраля 2002 г.