

01;02

Физика атомных столкновений в ретроспективе

© Дж. Мэйсек

Университет Теннесси, TN 379960-1501 Ноксвилл
Ок-Риджская национальная лаборатория, TN 37831 Ок-Ридж

(Поступило в Редакцию 14 января 1999 г.)

Около 65 лет назад была опубликована классическая работа Мотта и Месси, в которой был определен предмет физики атомных столкновений. С тех пор эта область получила значительное развитие. Фактически все теоретические методы, обозначенные в работе Мотта и Месси, были реализованы в большей или меньшей степени. Что касается эксперимента, то выполненные измерения, дифференциальные по нескольким параметрам, обеспечили надежную проверку предложенных механизмов. В настоящее время физика атомных столкновений — это достаточно зрелая область физики, так что можно уже оглянуться на пройденный путь и выявить много достижений, способствующих ее развитию. Прогресс в науке обычно связан с интенсивной концентрацией усилий критического числа исследователей на решении конкретной задачи, которая, по общему мнению, имеет важное значение. За таким "прорывом" обычно следует интенсивное развитие области. Физика атомных столкновений в этом плане не является исключением. Она знала периоды интенсивной концентрации усилий на решении конкретных задач, "прорывы" с последующим быстрым развитием, за которыми следовали периоды затишья. Циклы повторялись: обнаруживалась новая область концентрации усилий, происходил "прорыв" и устанавливалось новое представление. Некоторые из таких циклов будут проанализированы далее с точки зрения их значения для атомной физики в целом.

Положение физики атомных столкновений как самостоятельного раздела атомной физики установилось в конце 50-х—начале 60-х годов, когда начали проводиться международные конференции по данной тематике. В этот период времени были сделаны два открытия, оказавшие решающее влияние на развитие области, что сегодня очевидно. Одно из них — это предсказание и обнаружение резонансов в сечениях возбуждения атомов и молекул электронным ударом [1]. Одновременно было обнаружено, что такие резонансы, или автоионизационные состояния, возбуждаются не только при электронном ударе, но и при фотопоглощении и ударе заряженных атомных частиц. Исследование этих состояний стало широко известным достижением, в которое ученые ФТИ внесли значительный вклад [2]. Некоторые из обнаруженных эффектов будут рассмотрены более подробно. Второе открытие, сделанное в ФТИ в 1964 году, на первый взгляд не связанное с резонансами, было еще более удивительным. Чтобы это уяснить, следует напомнить, что мы понимаем под "адиабатическим" состоянием двухатомной молекулы. В таком состоянии электроны находятся на связанных уровнях в поле фиксированных кулоновских центров. Ожидалось, что переходы между "адиабатическими" состояниями при "медленных" столкновениях (когда скорость ударяющей частицы много меньше средней орбитальной скорости связанного электрона) маловероятны. При этом столкновения в данной области энергий должны быть в основном упругими. В серии замечательных работ, выполненных в ФТИ [3], было показано, что в действительности имеет место противоположная ситуация: были обнаружены интенсивные линии в спектре потерь энергии порядка сотен eV. Это открытие стало возможным благодаря использованию техники совпадений [4]. Анализ спектров совпадений показал, что характеристические линии

возбуждаются при достижении определенных расстояний наибольшего сближения сталкивающихся частиц. По сути дела, когда перекрываются электронные оболочки атомов, электроны селективно "выдвигаются" с внутренних на валентные оболочки. При этом вакансии, образовавшиеся во внутренних оболочках, обычно заполняются путем оже-переходов, сопровождающихся вылетом быстрых электронов с фиксированной энергией. Для понимания данного процесса потребовалось отказаться от существующих представлений об адиабатических состояниях и ввести в рассмотрение "диабатические" одноэлектронные орбитали, такие как в системе H_2^+ [5]. Это открыло возможность проведения неэмпирических расчетов неупругих процессов. Наличие количественной теоретической базы и непрерывно совершенствующейся экспериментальной техники позволило следующие два десятилетия посвятить проверке модели молекулярных орбиталей при ионно-атомных и атомно-атомных столкновениях.

Обнаружение оже-электронов, испускаемых при заполнении вакансий во внутренних оболочках атомов [6], было убедительным доказательством справедливости этой модели. В дальнейшем с достаточно высоким разрешением были измерены характеристические спектры электронов, испускаемых из ударяющей частицы и частицы мишени. В течение нескольких лет были изучены многие характеристики неупругих процессов, были надежно рассчитаны величины сечений для целого ряда переходов, оказалось возможным связать энергии оже-переходов с состоянием ионизации и даже идентифицировать очень слабые процессы. Возможно, окончательным триумфом молекулярной модели явилось обнаружение рентгеновского излучения и оже-электронов, испускаемых в момент столкновения, в результате переходов между короткоживущими квазимолекулярными

состояниями [7]. Благодаря этому наблюдению исчезли все сомнения в том, что молекулярные орбитали H_2^+ являются ключом к пониманию механизма медленных ионно-атомных столкновений. Удивительно, но ранние открытия Афросимова и сотрудников, которые, как казалось, не имели отношения к резонансам, наблюдаемым при фотопоглощении и электронном ударе, в конце концов оказались однозначно связанными с оже-процессами, поэтому значение исследований ионно-атомных и атомно-атомных столкновений возрастает. При медленных столкновениях многоэлектронных атомов образуются необычные состояния, которые могут быть исследованы путем анализа продуктов их распада. Надежность стандартных методов расчета, таких как методы Хартри–Фока [8] и R -матрицы [9], повышается по мере роста мощности компьютеров. Предложены новые методы учета электронных корреляций в многократно возбужденных состояниях [10]. За недостатком времени я не имею возможности перечислить все достижения, последовавшие в результате интенсивной работы по исследованию этих состояний, выполненной сообществом ученых — специалистов в области физики атомных столкновений. Упомяну только одно открытие, свидетельствующее о разнообразии новых явлений, связанных с необычными, многократно возбужденными резонансными состояниями, образующимися при ионно-атомных столкновениях.

Состояния атомов с двумя вакансиями во внутренних оболочках могут образовываться с высокой вероятностью при ионно-атомных столкновениях. При этом даже в данном случае атом обычно релаксирует посредством оже-переходов, существенно идентичных оже-переходам в атомах с одной внутренней вакансией. Для таких переходов характерно коррелированное движение двух электронов: один из них теряет энергию и заполняет вакансию во внутренней оболочке, а второй удаляется, унося фиксированную энергию. В случае, когда образуются две вакансии во внутренней оболочке, они обычно заполняются путем двух независимых двухэлектронных переходов. В принципе имеется вероятность того, что два электрона, заполняющие вакансии, передадут свою энергию одному электрону в результате трехэлектронного перехода, обусловленного вкладом корреляций в начальном или конечном состояниях. Такие переходы были обнаружены сотрудниками ФТИ [11]. Их удалось обнаружить благодаря разработке приборов с высокой чувствительностью, а также тому, что атомы с двумя вакансиями во внутренней оболочке образуются при атомных столкновениях с сечениями, близкими к геометрическим.

Наряду с процессами во внутренних оболочках исследовались и переходы с участием электронов валентных оболочек. Осцилляции сечений возбуждения [12] выявили эффекты, связанные с интерференцией между различными "траекториями", ведущими к одному и тому же конечному состоянию. Строя зависимость сечения возбуждения от обратной скорости $1/v$ — величины,

пропорциональной времени столкновения, можно определить фазу и разность энергий $E_1(t) - E_2(t)$ квази-молекулярных состояний, участвовавших в переходе. Возможность связать осцилляции сечений с уровнями квази-молекулы дает нам в руки ценный инструмент для анализа процессов атомных столкновений в рамках принятой модели молекулярных орбиталей.

Дальнейшее развитие концепции "адиабатического" состояния было связано с обнаружением того факта, что медленные электроны, не участвующие в оже-процессах (испускаемые в результате прямой ионизации), имеют следующее энергетическое распределение [13]:

$$\sigma(E_e) \approx C \exp[-(E_e - \delta)/\alpha v].$$

Это соотношение выполняется в широком интервале энергий, соответствующем изменению сечения $\sigma(E_e)$ на 5 порядков величины. Обоснование приведенной формулы дано в работе [14]. Следуя замечанию [15] о том, что адиабатические уровни энергии $E_n(R)$ необходимо рассматривать как отдельные ветви единой функции $E(R)$ комплексного переменного R , авторы [14] выполнили расчет этой функции для системы H_2^+ . Различные ветви функции $E(R)$ соединяются в точках ветвления. Вероятности неадиабатических переходов между состояниями, уровни которых соединяются в точках ветвления, вычисляются путем оценки фазовых интегралов вдоль контуров, которые начинаются и оканчиваются на вещественной оси R и совершают обход вокруг точек ветвления. Соловьев [16] обнаружил серии точек ветвления, получившие название "супервыдвижения" или S -серий, двигаясь вдоль которых, электрон $2p\sigma$ объединенного атома может выдвигаться в состояние непрерывного спектра с энергией E_e . Одна из замечательных особенностей этой теории состоит в том, что экспериментальные данные о сечениях могут быть описаны свойствами функции адиабатической энергии $E(R)$ при комплексных значениях R .

Использование адиабатических состояний в рамках приближенной теории скрытых пересечений привело к определенному успеху, однако оно столкнулось с рядом других трудностей. Точное численное решение нестационарного уравнения Шредингера — это цель, которая практически достигнута благодаря непрерывному усовершенствованию вычислительной техники. Непосредственное применение стандартного метода связанных молекулярных собственных значений, известного также как метод возмущенных стационарных состояний, оказывается невозможным, несмотря на то, что, как следует из экспериментальных данных, электроны в первом приближении движутся по молекулярным орбитам. Можно предположить, что требование галилеевой инвариантности исключает возможность использования таких состояний в качестве базиса для неэмпирических расчетов. Оказалось, что эту трудность можно преодолеть многими способами, лучшим из которых, по моему мнению, является использование масштабного преобразования, предложенного в работе [17]. Я не буду обсуждать детали этого преобразования, ограничусь лишь

утверждением, что оно приводит к удовлетворительной теории.

Действительно, удовлетворительная формулировка задачи в терминах адиабатических состояний обнаруживает основную причину того, что они оказываются неудобными для выполнения полных неэмпирических расчетов ионизации, — необходимость использования бесконечного количества состояний. Это иллюстрируется моделью Демкова-Ошерова [18]. Чтобы перейти из связанного состояния в континуум, необходимо пересечь бесконечное число промежуточных состояний. Если какое-либо из них опущено, то результат становится в принципе ошибочным. По этой причине использование адиабатических состояний оказывается менее пригодным для решения уравнения Шредингера по сравнению с другими приближениями, например с прямым интегрированием дифференциального уравнения в частных производных или применением многоцентровых атомных состояний. Наличие мощных современных компьютеров обуславливает очень высокую эффективность последних методов, однако при их использовании теряется общая физическая картина, в которой поведение орбиталей системы H_2^+ является источником информации об ионно-атомных столкновениях.

Решение указанной дилеммы предполагает перестройку диаграмм адиабатических уровней энергии. В данном случае вместо переменной энергии вводится величина $E(R)R^2$. Рис. 1, *a* представляет собой график функции $\omega = E(R)R^2$ для модельной системы электрона в поле двух потенциалов нулевого радиуса (ПНР) [19,20]. Повернем эту диаграмму на 90° и рассмотрим функцию $R(\omega)$ (рис. 1, *b*). Этой функции отвечает лишь одна собственная функция $\varphi(R(\omega), q)$ — модифицированная собственная функция $S(\omega, q)$. Точное решение модельной задачи выражается через приведенную выше однозначную функцию. Оказалось, что благодаря масштабным свойствам кулоновского потенциала такая конструкция может быть применима и для двухатомных систем. В этом случае имеется бесконечное число функций $S_n(\omega, q)$, где теперь $q = r/R$ — приведенная координата электрона, а приведенная энергия определена выше. В противоположность адиабатическому базису в нашем случае амплитуда перехода между любым начальным и любым конечным состояниями, включая континуум, определяется только одной функцией. Развитие данной теории явилось результатом сотрудничества между учеными ФТИ и Ок-Риджской Национальной Лаборатории.

Традиционное направление исследований, ведущихся нами в сотрудничестве с учеными ФТИ, — это конструктивное взаимодействие теории и эксперимента. Эта традиция продолжается и в настоящее время, несмотря на то, что финансирование экспериментальных работ в области физики атомных столкновений становится все более проблематичным. В заключение я приведу пример того, как развитая нами теория предсказала ряд новых свойств, обнаруженных затем в эксперименте.

Новые состояния $S_n(\omega, q)$ суть собственные функции, отвечающие собственным значениям $R_n(\omega)$. Теперь

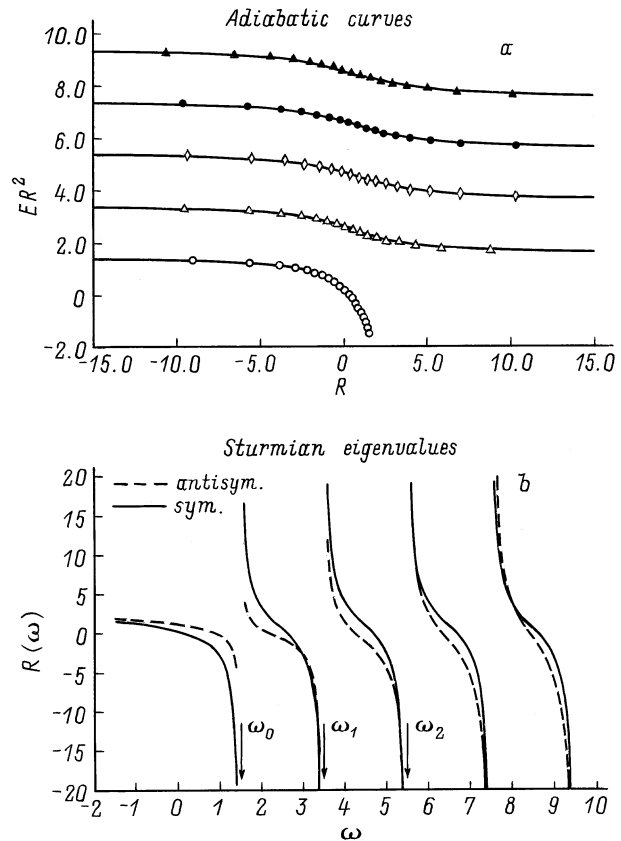


Рис. 1. Зависимости параметра $\omega = E(R)R^2$ от R для частицы в поле двух ПНР (*a*) и обратной функции $R(\omega)$ от ω (*b*). Все величины в атомных единицах.

эти собственные значения являются коэффициентами при потенциале $V(q)$ в масштабированном уравнении Шредингера; при положительных ω они приобретают комплексные или даже отрицательные значения. В последнем случае потенциал эффективно обращается и волновая функция концентрируется в области посередине между двумя протонами, в которой локальный потенциал хорошо описывается гармоническим осциллятором. Электроны имеют вероятность выдвинуться в область гармонического осциллятора посредством механизма перемещения на вершине потенциального барьера, что приводит к появлению так называемой T -серии точек ветвления. Существуют две возможности для электронов достичь континуума. Одна из них приводит к распределению типа σ , а вторая — к распределению типа π . Поскольку вклад соответствующих траекторий когерентен, следует, как и в случае осцилляций [12] для процессов возбуждения и захвата электрона, ожидать появления подобных осцилляций плотности распределения электронов. Плотности распределения осциллируют с частотой, зависящей от разности вещественных частей комплексных собственных энергий гармонического осциллятора, как это показано на рис. 2. Действительно, частота осцилляций является мерой разности энергий, взятой при комплексных значениях межъядерного рас-

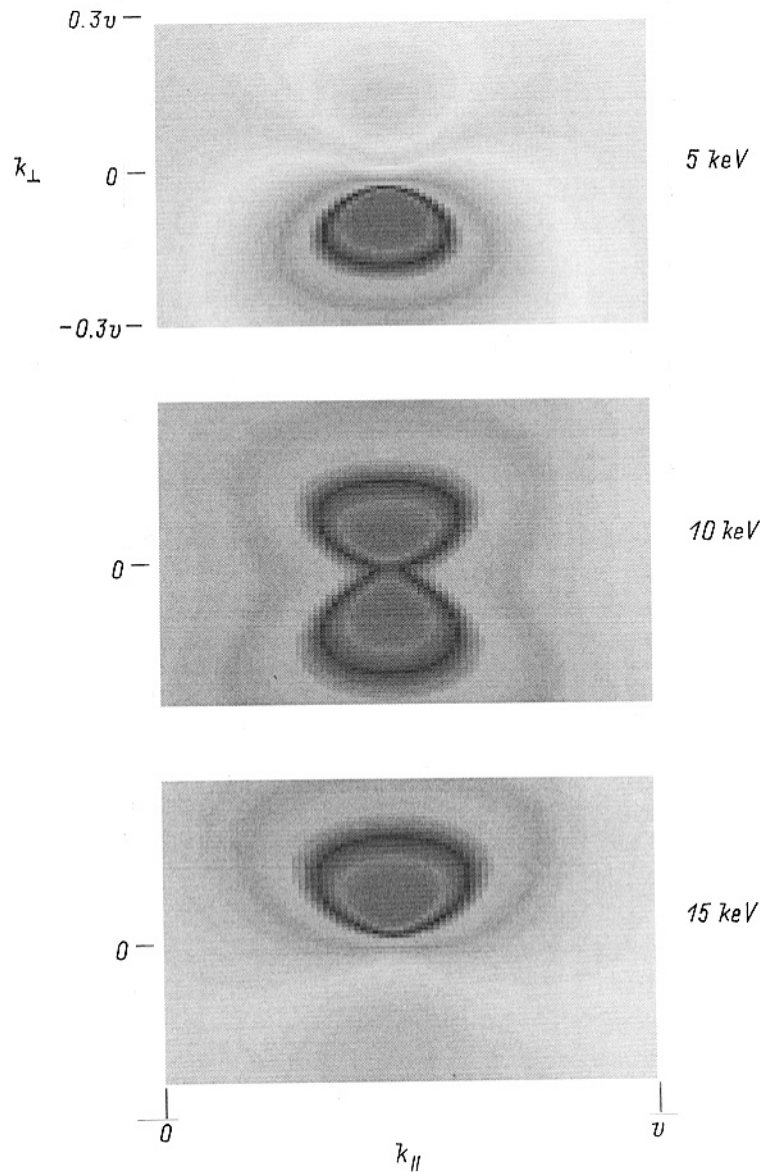


Рис. 2. Плотности распределения электронов, испускаемых при столкновениях протонов с энергиями 5, 10 и 15 keV с атомами водорода, при фиксированном прицельном параметре $b = 1.2$ а.е. (из [21]); k_{\parallel} и k_{\perp} — компоненты волнового вектора электрона: параллельная и перпендикулярная оси первичного пучка.

стояния R . Эта разность энергий достаточно медленно, как $R^{-3/2}$, уменьшается с межъядерным расстоянием, поэтому соответствующий фазовый интеграл достаточно велик

$$\phi = v^{-1} \int_{R_0}^{\infty} \Delta E(R) dR \approx 2C_1 / (vR_0^{1/2}),$$

где R_0 оказывается порядка единицы, а вещественная часть C_1 равна 4 в атомных единицах [21].

Такие осцилляции в распределении очень медленных электронов, образующихся при столкновениях протонов с атомами гелия, были обнаружены в работе [22].

Мнимая часть фазового интеграла также имеет физический смысл, который лучше всего прослеживается в контексте ионизации электронным ударом. В этом случае необходимо использовать другую модификацию адиабатических состояний, в которой гипер-радиус R играет роль адиабатической переменной. Оказывается, что функция $R(\omega)$ пригодна для описания ионизации электронным ударом и можно развить теорию, аналогичную теории ионно-атомных столкновений. В ней также появляются состояния на вершине барьера, которые можно описать, используя "обратные адиабатические состояния", $S(\omega, \hat{R})$, где \hat{R} обозначает все координаты частиц, кроме гипер-радиуса R . Один из этапов сотрудничества между ФТИ и нашей группой был посвящен применению

развитой нами теории к электронно-атомным столкновениям [23]. В данном случае мнимая часть C_1 имеет отношение к знаменитому пороговому закону Ванье. Наши расчеты показали очень хорошее согласие с данными измерений сечений ионизации в пороговой области. Можно прийти к заключению, что адиабатические состояния в принципе применимы практически ко всем низкоэнергетическим процессам, в которых атомы или молекулы распадаются на три заряженных фрагмента.

Подводя итоги, можно констатировать, что идея адиабатических состояний получила в последние годы значительное развитие, в которое ФТИ внес важный вклад. Краткий ретроспективный анализ позволил возобновить в памяти прошлые достижения и прогнозировать в будущем создание полной теории атомных систем, состоящих из небольшого числа частиц, на основе одного из вариантов теории адиабатических состояний. Ионно-атомные столкновения, однако, уже не являются передовым фронтом атомной физики. В настоящее время более перспективными и интригующими областями представляются бозе-конденсация и холодные столкновения. Но и в этих случаях для проверки пределов применимости обычной теории были использованы гиперсферические адиабатические состояния [24]. Я не могу предвидеть будущее, но могу высказать предположение о том, что и в дальнейшем адиабатические состояния будут удивлять нас возможностью применения для расчета самых различных динамических процессов.

Список литературы

- [1] *Burke P.G., Shey H.M.* // Phys. Rev. 1962. Vol. 126. P. 147.
- [2] *Ogurtsov G.N.* // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. P. 1.
- [3] *Afrosimov V.V., Gordeev Yu.S., Panov M.N., Fedorenko N.V.* // Zh. Techn. Fiz. 1964. Vol. 34. P. 1613, 1624, 1637. Soviet Tech. Phys. 1965. Vol. 9. P. 1248, 1256, 1265.
- [4] *Fedorenko N.V.* // Zh. Techn. Fiz. 1954. Vol. 24. P. 784. *Afrosimov V.V., Fedorenko N.V.* // Zh. Techn. Fiz. 1957. Vol. 27. P. 2557. Soviet Tech. Phys. 1957. Vol. 2. P. 2391.
- [5] *Lichten W.* // Phys. Rev. 1963. Vol. 131. P. 229. Ibid, 1967. Vol. 164. P. 131. *Fano U., Lichten W.* // Phys. Rev. Lett. 1965. Vol. 14. P. 627.
- [6] *Rudd M.E., Jorgensen T., Jr., Volz D.J.* // Phys. Rev. 1966. Vol. 151. P. 28.
- [7] *Saris F.W., van der Weg W.F., Tawara H., Laubert R.* // Phys. Rev. Lett. 1972. Vol. 28. P. 717.
- [8] *Fischer C.F., Braga T., Jönsson P.* // Computational Atomic Structure: An MCHF Approach. Bristol: Institute of Physics Publ., 1997.
- [9] *Atomic Molecular & Optical Sciences Handbook* / Ed. G.W.F. Drake. Woodbury; New York: American Institute of Physics. P. 536.
- [10] *Macek J.H.* // J. Phys. B. 1968. Vol. 1. P. 831. *Lin C.D.* // Rept. Prog. Phys. 1995. Vol. 257. P. 1.
- [11] *Afrosimov V.V., Gordeev Yu.S., Zinoviev A.N.* et al. // Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1975. Vol. 21. P. 535.
- [12] *Rosenthal H., Foley H.M.* // Phys. Rev. Letters. 1969. Vol. 23. P. 480. *Bobashev S.V.* // ZhETF Pis. Red. 1970. Vol. 11. P. 389. JETP Lett. 1970. Vol. 11. P. 260.

- [13] *Woerlee P.H., Gordeev Yu.S., Waard H.De., Saris F.W.* // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. P. 5527.
- [14] *Ovchinnikov S.Yu., Solov'ev E.A.* // Comments on Atomic and Molecular Physics XXII. 1988. P. 69.
- [15] *Demkov Yu.M.* // Proc. 5th Intern. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic Collisions / Ed. by I.P. Flaks, E.S. Solov'yev. Leningrad, 1967. P. 186.
- [16] *Solov'ev E.A.* // Teor. i Mat. Fiz. 1976. Vol. 28. P. 240. Sov. Phys. Theor. and Math. Phys. 1976. Vol. 28. P. 757.
- [17] *Solov'ev E.A., Vinit'skiy S.I.* // J. Phys. B. 1985. Vol. 18. P. L557.
- [18] *Demkov Y.N., Osherov V.I.* // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1967. Vol. 53. P. 1589. Sov. Phys. JETP. 1968. Vol. 26. P. 916.
- [19] *Khrebtukov D.B., Macek J.H.* // J. Phys. A. 1997. Vol. 31. P. 2853.
- [20] *Ovchinnikov S.Yu., Macek J.H., Khrebtukov D.B.* // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 56. P. 2872.
- [21] *Ovchinnikov S.Yu., Macek J.* // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 80. P. 2298.
- [22] *Dörner R., Khemliche H., Prior M.H.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 4520.
- [23] *Macek J.H., Ovchinnikov S.Yu., Pasovets S.V.* // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 4631.
- [24] *Esry B.D., Greene C.H.* // Abstracts of 16th Intern. Conf. on Atomic Physics / Ed. by W.E. Baylis, G.W.F. Drake. University of Windsor (Canada), 1998. P. 101.