

01;02

©1994 г.

**НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ
ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТОМА ГЕЛИЯ
С БЫСТРЫМ МНОГОЗАРЯДНЫМ ИОНОМ**

P.A.Алимов, В.И.Матвеев

Ташкентский государственный университет, 700000

(Поступило в Редакцию 2 сентября 1992 г.

В окончательной редакции 4 октября 1993 г.)

На основе простого подхода, согласно которому возбуждение сложного атома при столкновении с быстрым многозарядным ионом происходит в результате внезапной передачи импульса атомным электронам, рассмотрены одноэлектронная ионизация, одноэлектронные возбуждения и двухэлектронные возбуждения в автоионизационные состояния дискретного спектра атома гелия. Также приведены отношения сечений двойной ионизации к однократной. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Обычно многократную ионизацию или возбуждение при столкновении атома с быстрой заряженной частицей рассчитывают по теории возмущений. Причем взаимодействие атомных электронов с налетающей частицей учитываются один раз, а за многоэлектронные возмущения и ионизацию считается ответственным межэлектронное взаимодействие. Поэтому при таком подходе, например, двухэлектронная ионизация атома гелия является эффектом второго порядка теории возмущений по взаимодействию атомных электронов с налетающей частицей и межэлектронному взаимодействию. Теория возмущений применима, если $Z/V \ll 1$, где Z — заряд налетающей частицы, V — относительная скорость столкновения (ат.ед.). При столкновениях же с многозарядными ионами $Z \gg 1$ и даже для $V \gg 1$ часто оказывается, что $Z/V \sim 1$. В таких случаях многоэлектронные возбуждения (в том числе двух- и более кратную ионизацию) сложного атома следует объяснять на основе так называемого прямого механизма возбуждения атома ударом многозарядного иона [1]. Этот механизм основан на том, что во время столкновения взаимодействие атомных электронов между собой существенно меньше их взаимодействия сильным полем иона. В принципе этот механизм можно учесть в рамках применимых при $Z/V \sim 1$ приближений: приближения внезапных возмущений [2] и эйкonalного приближения [3,4]. Однако эти приближения даже в случае ионизации атома водорода приводят к громоздкому численному счету,

который еще более усложняется при рассмотрении столкновений многозарядных ионов со сложными атомами, например с атомом гелия. В работе [5] показано, что результат неупругого столкновения быстрого многозарядного иона с атомом сводится к внезапной передаче импульса атомным электронам, что соответствует прямому механизму возбуждения сложного атома. Сечения ионизации атома водорода и двойной ионизации атома гелия, полученные в [5-7] на основе этого простого подхода, хорошо согласуются с экспериментом. Кроме того, из подхода [5] при соответствующих упрощениях следует так называемая модель независимых электронов, широко используемая в расчетах неупругих процессов, сопровождающих столкновение быстрых многозарядных ионов со сложными атомами [8].

В настоящей работе на основе механизма внезапной передачи импульса рассмотрены следующие неупругие процессы при столкновениях быстрого многозарядного иона с атомами гелия (при $Z/V \sim 1$): а) одноэлектронная ионизация, б) двойная ионизация, в) одноэлектронные возбуждения, г) возбуждения автоионизационных состояний. Приведены сравнения с экспериментом и с результатами расчетов других авторов.

Согласно [5], сечение перехода атома гелия из основного состояния $|0\rangle$ в какое-либо состояние $|n\rangle$ при столкновении с быстрым многозарядным ионом (при $Z/V \sim 1$) имеет вид

$$\sigma_n = 8\pi \frac{Z^2}{V^2} \int_{q_0}^{q_1} \frac{dq}{q^3} W_n(q), \quad (1)$$

где \mathbf{q} — переданный импульс, состояние $|n\rangle$ может соответствовать возбуждению или ионизации одного или двух электронов, а пределы интегрирования q_0 и q_1 определены из границ применимости подхода [5] и соответственно равны $q_0 = 2Z_{ef}^2/V$ и $q_1 = 2ZZ_{ef}^2/V$ [5], здесь Z_{ef} — эффективный заряд ядра атома гелия (значение Z_{ef} см. ниже). В выражении (1)

$$W_n(q) = |\langle n | \exp \{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} | 0 \rangle|^2 \quad (2)$$

имеет смысл вероятности перехода атома из состояния $|0\rangle$ в состояние $|n\rangle$ в результате внезапной передачи импульса \mathbf{q} ; \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 — координаты электронов атома гелия.

Будем описывать состояния атома гелия в виде симметризованных произведений одноэлектронных водородоподобных волновых функций. Соответственно произвольные состояния атома гелия будем обозначать двумя наборами квантовых чисел $|n_1, n_2\rangle$. В этих обозначениях (2) перепишется в виде

$$W_{n_1 n_2}(q) = |\langle n_1, n_2 | \exp \{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} | 0, 0 \rangle|^2. \quad (2')$$

Тогда состоянию однократной ионизации соответствует попадание одного электрона в любое из состояний континуума, а другого электрона в любое из состояний дискретного спектра, т.е. $|n_1, n_2\rangle |k, n\rangle$, где \mathbf{k} — импульс электрона в континууме, n — набор квантовых чисел одноэлектронных состояний дискретного спектра. Поэтому полная вероятность одноэлектронной ионизации получается из (2') после суммирования по всем состояниям континуума для одного электрона и по

всем состояниям дискретного спектра для другого электрона, т.е. полная вероятность однократной ионизации $W^{(1)}(q)$ равна (ср. [8])

$$W^{(1)}(q) = \int d\mathbf{k} \sum_n W_{\mathbf{k},n}(q) = 2W(q)[1 - W(q)]. \quad (3)$$

Здесь

$$W(q) = \int d\mathbf{k} |\langle \mathbf{k} | \exp\{i\mathbf{qr}\} | 0 \rangle|^2 = \int dk k^2 \varphi_k(q), \quad (4)$$

где

$$\varphi_k(q) = \frac{2^8 q^2 [q^2 + (1 + k^2)/3] \exp\left\{-\frac{2}{k} \arctg \frac{2k}{q^2+1-k^2}\right\}}{k [1 - \exp(-\frac{2\pi}{k})] \left[(q^2 + 1 - k^2)^2 + (2k)^2\right]^3}$$

есть квадрат модуля неупругого одноэлектронного форм-фактора водородоподобного атома, соответствующий переходу $|1s\rangle \rightarrow |\mathbf{k}\rangle$, проинтегрированный по импульсам электрона в континууме, имеющий смысл вероятности ионизации одного электрона в модели независимых электронов; здесь $q \equiv q/Z_e$, $k \equiv k/Z_e$.

Вероятность же двойной ионизации получаем непосредственно из (2') (следуя [7])

$$W^{(2)}(q) = \int d^3 k_1 d^3 k_2 W_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(q) = [W(q)]^2, \quad (5)$$

где \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 — импульсы электронов в континууме, при интегрировании по которым необходимо следить за тем, чтобы конечное состояние не учитывалось дважды.

Таким образом, согласно (1), сечение ионизации кратности n выглядит так:

$$\sigma^{n+} = 8\pi \left[\frac{Z}{Z_e V} \right]^2 \int_{q_0}^{q_1} \frac{dq}{q^n} W^n(q), \quad (6)$$

где $W^{(1)}(q)$ определяется из формул (3) и (4), а $W^{(2)}(q)$ из (4) и (5).

Для вычисления одноэлектронного форм-фактора и определения пределов интегрирования в (6) необходимо, согласно [5], определить эффективный заряд ядра атома гелия. Причем в основном состоянии эффективный заряд ядра атома гелия следует считать равным $Z_a = 2 - 5/16$, в одноэлектронном континууме эффективный заряд ядра $Z_{c_1} = 1$, а в случае двойной ионизации $Z_{c_2} = 2$. При этом начальные и конечные состояния оказываются неортогональными. С тем чтобы избежать процедуры ортогонализации, мы описывали начальные и конечные состояния как водородоподобные с одним и тем же эффективным зарядом Z_{ef} . Причем для одноэлектронной ионизации $Z_{ef} = (Z_a + Z_{c_1})/2$, а для двойной $Z_{ef} = (Z_a + Z_{c_2})/2$ (ср. [7]).

Обсудим вопрос о чувствительности неупругих сечений к специальному выбору эффективного заряда $Z_{ef} = (Z_a + Z_c)/2$ на примере двойной ионизации атома гелия $\sigma^{2+} = \sigma^{2+}(Z_{ef})$. Для $V \sim Z \gg 1$, а $Z_{ef} \ll Z$

мы имеем $q_0 = 2Z_{ef}/V \ll 1$, а в (6) $W^{(2)}(q)$, согласно (5) и (4), мало для малых q . Следовательно, для $\Delta Z \ll Z_{ef}$ мы имеем из (6)

$$\Delta\sigma^{2+} = \sigma^{2+}(Z_{ef} + \Delta Z) - \sigma^{2+}(Z_{ef}) \cong \mp \frac{2}{Z_{ef}} \sigma^{2+}(Z_{ef}) \Delta Z.$$

В нашем случае (двойной ионизации) $\Delta Z < (Z_c - Z_a)/2 \sim 0.15 \ll Z_{ef} \sim 2$. Следовательно, $|\Delta\sigma^{2+}/\sigma^{2+}| \sim 2|\Delta Z|/Z_{ef} \ll 1$. Подобная слабая чувствительность сохраняется и в случаях двойных возбуждений атома гелия, когда эффективный заряд ядра для начального и конечного состояний принимает близкие значения. Однако при рассмотрении однократных возбуждений либо однократной ионизации значения эффективного заряда в начальном и конечном состояниях отличаются более значительно, и поэтому сечения оказываются более чувствительными к выбору эффективного заряда ядра. Тем не менее мы для единообразия сохраняем и в этих случаях тот же выбор эффективного заряда.

Сечение возбуждения состояний дискретного спектра атома гелия имеет аналогичный с (6) вид

$$\sigma^{ex} = 8\pi \left[\frac{Z}{Z_{ef}V} \right]^2 \int_{q_0}^{q_1} \frac{dq}{q^3} W^{ex}(q), \quad (7)$$

где $W^{ex}(q)$ — вероятность возбуждения состояний дискретного спектра атома гелия, пределы интегрирования q_0 и q_1 те же, что и в (6).

В формуле (7)

$$W^{ex}(q) = 2W_1(q)W_2(q), \quad (8)$$

где для одноэлектронных возбужденных состояний типа $|n, 0\rangle$

$$W_1(q) = |\langle n | \exp\{i\mathbf{qr}\} | 0 \rangle|^2 \quad (9)$$

и

$$W_2(q) = |\langle 0 | \exp\{i\mathbf{qr}\} | 0 \rangle|^2. \quad (9')$$

Здесь $W_1(q)$ — вероятность перехода одного электрона из основного состояния $|0\rangle$ в возбужденное состояние $|n\rangle$, $W_2(q)$ — вероятность остаться другому электрону в основном состоянии $|0\rangle$. Для возбуждения же в автоионизационные двухэлектронные состояния типа $|n, n_1\rangle$ вероятность будет иметь аналогичный с (8) вид с той лишь разницей, что вероятность $W_2(q)$ заменяется вероятностью

$$W_3(q) = |\langle n_1 | \exp\{i\mathbf{qr}\} | 0 \rangle|^2, \quad (10)$$

где $W_3(q)$ — имеет смысл перехода другого электрона в какое-либо отличное от $|n\rangle$ состояние $|n_1\rangle$ дискретного спектра атома гелия (в случае полного совпадения наборов n и n_1 двойку в правой части (8) следует опустить).

Эффективный заряд в этом случае равен $Z_{ef} = 2 - 5/16$.

Таблица 1.

Энергия, МэВ/нуклон	Заряд иона	Эксперимент [1], 10^{-16} см^2	Теория, 10^{-16} см^2
1.4	6	4.96	2.91
1.4	15	17.9	13.2
1.4	18	22.4	19.0
1.4	20	26.0	23.4
1.4	36	57.2	76.0
1.4	37	59.5	80.3
1.4	44	72.1	114.3

Необходимо подчеркнуть, что используемый нами подход справедлив только при $Z \gg Z_{ef}$. Поэтому формулы (6) и (7) нельзя использовать при $Z \leq Z_{ef}$, что выражается, в частности, в том, что при $Z = Z_{ef}$ имеем $q_0 = q_1$ и из этого следует, что сечение равняется нулю [7].

В табл. 1 приведены экспериментальные данные [1] для сечения однократной ионизации атома гелия ударом быстрого многозарядного иона, а также теоретические результаты, полученные по формулам (3), (4) и (6): столб. 1 — энергия налетающего иона, отнесенная к единице атомной массы; столб. 2 — заряд иона; столб. 3 — эксперимент [1]; столб. 4 — наши результаты. В табл. 2 приведено аналогичное сравнение сечения одноэлектронной ионизации атома гелия и экспериментальных данных [9] с результатами, полученными из (3), (4) и (6), с той разницей, что для экспериментальных сечений иногда приводятся два значения, первое из которых соответствует сечению столкновения атома гелия ударом иона углерода, а второе — ударом иона кислорода.

В табл. 3 приведено сравнение экспериментальных данных [10] с нашими данными, рассчитанными по формулам (7), (8) и (10), а также с

Таблица 2.

Энергия, МэВ/нуклон	Заряд иона	Эксперимент [9], 10^{-16} см^2	Теория, 10^{-16} см^2
0.64	5	4.9, 4.9	2.51
0.64	6	6.0, 6.1	3.22
0.64	8	7.9	5.58
1.44	5	3.3, 3.5	1.67
1.44	6	4.5, 4.2	2.12
1.44	7	5.5	2.78
1.44	8	6.7	3.66
2.26	5	2.8	1.29
2.26	6	3.2	1.64
2.26	7	4.6	2.31
2.26	8	5.4	2.71
2.31	5	2.43	1.15
2.31	6	3.3	1.42

Таблица 3.

Энергия, МэВ/нуклон	Заряд иона	Эксперимент [10], 10^{-19} см^2	Теория, 10^{-19} см^2	Расчет [10], 10^{-19} см^2
1.84	6	8.305 ± 1.744	21.43	25.6
1.5	6	20.1 ± 7.20	22.80	31.8
1.5	9	48.99 ± 17.66	51.38	111.6

расчетами других [10] авторов для суммарных сечений возбуждения в автоионизационные состояния ($2s2p+2p^2$) атома гелия: столб. 1 — энергия налетающего иона, отнесенная к единице атомной массы; столб. 2 — заряд иона; столб. 3 — эксперимент [10]; столб. 4 — наши результаты; столб. 5 — расчет, приведенный в работе [10].

На рис. 1 сравниваются теоретические значения для отношения сечений двойной ионизации к однократной ($R = \sigma^{2+}/\sigma^+$), вычисленные

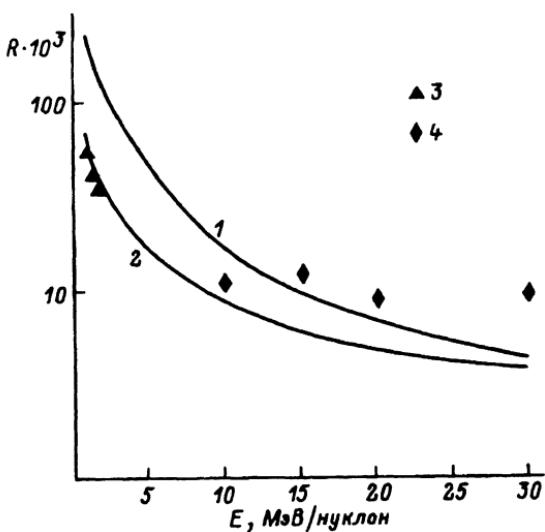
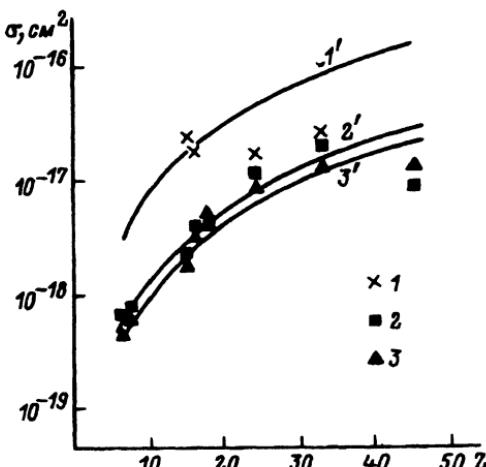


Рис. 1. Отношение сечения двойной ионизации к сечению однократной ионизации R атома гелия при столкновении с ионом N^{7+} от относительной энергии столкновения E (МэВ/нуклон).
 1 — наши результаты; 2 — расчет [9]; 3, 4 — эксперимент [9] и [11] соответственно.

Рис. 2. Сечения одноэлектронного возбуждения в дискретный спектр атома гелия (при относительной энергии столкновения $E = 1.4$ МэВ/нуклон) в зависимости от заряда налетающего иона Z .

Точки — эксперимент [12],
 где 1 — переход $1s \rightarrow 4p$, 2 — переход $1s \rightarrow 4s$, 3 — переход $1s \rightarrow 4d$;
 1-3 — наши расчеты, где 1' — переход $1s \rightarrow 4p$, 2' — переход $1s \rightarrow 4s$, 3' — переход $1s \rightarrow 4d$.



из формул (3)–(6) для атома гелия при столкновении с быстрыми зарядами иона азота N^{7+} с экспериментальными данными [9,11], а также с расчетом, приведенным в [9].

На рис. 2 сравниваются теоретические значения для сечения однозарядового возбуждения, вычисленные по формулам (7)–(9'), с экспериментальными данными [12]. Как видно из рис. 2, экспериментальные сечения возбуждения $4p$ -состояний ведут себя аномальным образом, хотя ясно, что в рассматриваемой области параметров столкновения сечение должно расти с ростом Z , что подтверждается нашими расчетами.

Таким образом, наши результаты систематически находятся в не плохом согласии с экспериментами и подтверждают а) вывод работы [1] о преимущественном (при $Z \geq 5$) прямом механизме возбуждения сложного атома полем многозарядного иона, б) возможности использования модели независимых электронов.

Список литературы

- [1] McGuier J.H., Muller A., Schuch B. et. al. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. N 1. P. 2479–2483.
 - [2] Юдин Г.Л. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. Вып. 3. С. 1026–1037.
 - [3] McGuier J.H. // Phys. Rev. A. 1982. Vol. 26. N 1. P. 143–147.
 - [4] Crothers D.S.F., McCann S.H. // J. Phys. B. 1983. Vol. 16. N 17. P. 3229–3242.
 - [5] Матвеев В.И. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. Вып. 6. С. 2021–2025.
 - [6] Матвеев В.И. // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 6. С. 1176–1177.
 - [7] Алимов Р.А., Матвеев В.И. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 9. С. 158–161.
 - [8] Матвеев В.И. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. № 1. С. 36–41.
 - [9] Knudsen H., Andersen L.H., Hvelplund P. et. al. // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. N 1. P. 3545–3564.
 - [10] Fritsch W., Lin C.D. // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 41. N 9. P. 4776–4782.
 - [11] Muller A., Schuch B., Groh W. et. al. // Z. Phys. D. 1987. Vol. 7. N 3. P. 251–256.
 - [12] Reymann K., Schortner K.-H., Sommer B. et. al. // Nucl. Ins. & Meth. in Phys. Res. B. 1987. Vol. 23. P. 157–159.
-