

01;02

©1995 г.

## ПОЛУКЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОДНОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ БЫСТРЫМИ ИОНАМИ

*М.Я.Амусья, Р.Брух, О.В.Константинов, Л.В.Чернышева*

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН,  
194021, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 10 июня 1994 г.)

Предложен простой способ расчета сечения однократной ионизации атомов быстрыми ионами, основанный на использовании эффективного торможения и эмпирической средней энергии потерь на один акт ионизации. Использовано предположение о том, что поле снаряда гораздо больше поля ионного остова. Это приводит к уменьшению эффективного торможения вдвое и улучшению согласия с экспериментом. Однако в диапазоне энергий протонов 1–10 МэВ для дальнейшего улучшения согласия с экспериментом требуется уменьшить эффективное торможение, для чего вводится феноменологический параметр. Его величина для гелия и неона близка к двум.

### Введение

Развитие теории однократной ионизации атомов быстрыми ионами начато в литературе работой Бора [1]. Эта работа основывается на полуклассическом описании движения снаряда и электрона мишени и в ней используются два упрощающих допущения: траектория снаряда предполагается прямолинейной, а движение электрона — свободным, испытывающим ускорение только за счет поля снаряда. Влияние связи электрона в атоме учитывается лишь тем, что минимальная переданная электронная энергия считается равной потенциалу ионизации атома. Дальнейшее развитие теории процесса ионизации продолжено Бете [2] на основе квантово-механической теории возмущений. Этот подход продолжает совершенствоваться и до настоящего времени [3,4]. В работах Бете и последующих показано, что квантово-механическое сечение ионизации как функция переданной электрону энергии и переданного импульса содержит сложную зависимость от этих переменных, которая дается обобщенной силой осциллятора. Для вычисления последней требуется располагать детальной информацией об

энергетическом спектре и волновых функциях электронов в атоме. Такая теория реально может быть осуществлена на основе приближения Хартри-Фока. Однако при этом, как показано, например, в [5], для процессов ионизации требуется учитывать многоэлектронные корреляции в атоме. Таким образом, вычисление сечения однократной ионизации даже в теории возмущений по взаимодействию с полем снаряда является сложной и еще не до конца решенной задачей.

Существует более простая, чем сечение, характеристика процесса ионизации, а именно так называемое эффективное торможение  $k$ , которое представляет собой усредненное произведение сечения  $\sigma(\varepsilon)$  на переданную энергию  $\varepsilon$

$$k = \langle \varepsilon \cdot \sigma(\varepsilon) \rangle. \quad (1)$$

С помощью эффективного торможения обычно вычисляют ионизационные потери снаряда  $dE_p/dx$  на единицу длины пути в газе

$$\frac{dE_p}{dx} = -kn, \quad (2)$$

где  $n$  — концентрация атомов газа.

Для эффективного торможения в литературе существует известное выражение, которое приводится в различных монографиях [2,6,7]. Так, в [6] это будет формула (150.10), а в [7] — формула (2.10)

$$k_B = 4\pi Z \frac{z_p^2 e^4}{m\nu_p^2} \ln \left( \frac{2m\nu_p^2}{\tilde{I}} \right), \quad (3)$$

где  $Z$  — число валентных электронов;  $z_p$ ,  $-\nu_p$  — зарядовое число и скорость снаряда;  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона;  $\tilde{I}$  — характерная энергия, которая превосходит энергию ионизации атома  $I$  на 10–30%.

Все внутренние характеристики атома входят в одну единственную величину  $\tilde{I}$ , причем зависимость от нее оказывается логарифмической, т.е. очень слабой. Следует отметить, что в классической теории Бора входит энергия ионизации атома  $I$ . При этом использование точного потенциала  $I$  вместо эффективного  $\tilde{I}$  изменяет величину торможения на долю процента, поскольку под логарифмом стоит число, много большее единицы для той области энергий, где скорость снаряда много больше атомной скорости.

## 1. Полуэмпирический метод нахождения сечения ионизации

Основная идея настоящей работы состоит в том, чтобы вычислять полное сечение однократной ионизации, используя эффективное торможение и полуэмпирическую среднюю энергию  $E$ , затрачиваемую снарядом на образование электрон-ионной пары. Эта энергия была получена в результате исследований по созданию ионизационных спектрометров. Она приводится, например, в [7] для различных газов. Было установлено, что в широком диапазоне энергий снаряда она практически не зависит от энергии снаряда. Таким образом,

можно рассматривать  $E$  как параметр, свойственный данному атому в той же мере, как и энергия ионизации  $I$ . В табл. 1 мы приводим значения  $E$  для различных инертных газов и их потенциалов ионизации, взятых из таблиц работы [8]. Для атома гелия валентные электроны находятся на  $s$ -оболочке, тогда как для неона, аргона и криптона внешней подоболочкой с наименьшей энергией ионизации  $I_p$  является  $p$ -подоболочка. Для этих атомов потенциалы ионизации  $I_s$   $s$ -подоболочки оказываются существенно больше и превосходят среднюю энергию  $E$ , затрачиваемую на ионизацию. Поэтому вклад процессов ионизации  $s$ -подоболочки в полное сечение ионизации будет весьма невелик. Теоретическое вычисление величины  $E$ , как отмечается в [7], представляет собой весьма сложную задачу. Кроме ионизации  $s$ - и  $p$ -подоболочек, следует учитывать также возбуждение электронов, не сопровождающееся ионизацией, а также тот факт, что выбитые из атома электроны уносят некоторую кинетическую энергию. Как видно из табл. 1, наиболее экономно протекает ионизация гелия, для которого средняя энергия  $E$  всего лишь на 11% превосходит потенциал ионизации гелия. Этот избыток энергии в значительной мере вкладывается в кинетическую энергию выбитых электронов. При вычислении эффективного торможения (3) по теории возмущений Бете все эти процессы учитываются, так что весьма простая формула (3) учитывает большое количество сложных атомных процессов, которые входят всего лишь через два параметра: эффективную энергию ионизации и число валентных электронов  $Z$ . Основная наша идея состоит в том, что с помощью эффективного торможения [3,4] и средней энергии  $E$ , приведенной в табл. 1, можно без труда получить сечение ионизации  $\sigma$ . Эта формула для гелия имеет следующий вид:

$$\sigma = k/E. \quad (4)$$

Для всех других инертных газов сечение ионизации будет

$$\sigma = \frac{k_p}{E} + \frac{k_s}{E_1}. \quad (5)$$

Здесь  $k_p$  и  $k_s$  — эффективные торможения для  $p$ - и  $s$ -электронов

$$k_p = 6k_e(I_p), \quad k_s = 2k_e(I_s). \quad (6)$$

Величина  $k_e(I)$  — эффективное торможение в расчете на один электрон, имеющий энергию ионизации  $I$ , равна

$$k_e(I) = \frac{4\pi z_p^2 e^4}{m\nu_p^2} \ln \left( \frac{2m\nu_p^2}{I} \right). \quad (7)$$

Таблица 1.

Атом	$E$ , эВ	$I_p$ , эВ	$I_s$ , эВ	$E_1$ , эВ
He	27.8	—	24.6	—
Ne	27.4	21.5	48.5	62
Ar	25.4	15.8	29.4	47
Kr	22.8	14	24	39

В формулу (5) для полного сечения ионизации входит величина  $E_1$ , которая по смыслу является средней энергией, затрачиваемой на ионизацию электрона с  $s$ -подоболочки. Такая величина в литературе не приводится, и для ее получения мы используем предположение о том, что она пропорциональна потенциалу ионизации  $s$ -подоболочки в том же отношении, в каком величина  $E$  пропорциональна потенциалу ионизации  $p$ -подоболочки

$$E_1 = I_s \frac{E}{I_p}. \quad (8)$$

С помощью этой формулы мы и рассчитываем числовые значения  $E_1$  для различных инертных газов, приведенные в последнем столбце табл. 1. Следует отметить, что вклад  $s$ -подоболочки в полное сечение ионизации оказывается очень небольшим и соответствующее ему слагаемое в формуле (5) мы учитываем по существу лишь для оценки этого вклада.

## 2. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов для сечения ионизации

На рис. 1–4 построены экспериментальные и теоретические кривые зависимости сечения однократной ионизации от энергии протона для He, Ne, Ar, Kr. Экспериментальные данные, взятые из обзорной работы [9] для энергии протонов, меньшей 8 МэВ, представлены на рисунках сплошными кривыми с индицирующими точками, которые экстраполированы при энергиях больше 8 МэВ путем линейной экстраполяции. Штриховой линией показаны энергетические зависимости сечений, которые получены на основе формул (4)–(7). Потенциалы ионизации и средние энергии, теряемые на один акт ионизации, взяты из табл. 1. Видно, что согласие между теоретической и экспериментальной зависимостью неудовлетворительно, поскольку теоретические значения больше экспериментальных примерно в 4 раза. На тех же рисунках построены тонкими сплошными линиями теоретические кривые 1 и 2. У кривой 2 все ординаты уменьшены по сравнению со штриховой кривой в 2 раза, а у кривой 1 — в 4 раза. Эти кривые мы обсудим ниже. Кривая 2 соответствует модели независимых электронов атома, сильно взаимодействующих с полем налетающего снаряда. На рис. 1, 2 видно, что в случае гелия и неона экспериментальные кривые в интервале энергий 1–10 МэВ достаточно хорошо описываются теоретической кривой 1, уменьшенной по сравнению со штриховой кривой в 4 раза. С ростом энергии это согласие ухудшается и экспериментальная кривая отходит вверх от теоретической кривой 1, приближаясь к теоретической кривой 2, соответствующей двукратному уменьшению эффективного торможения. Эта тенденция гораздо яснее просматривается на примере аргона, для которого экспериментальная кривая при относительно небольшой энергии протонов, равной 10 МэВ, располагается ближе к кривой 2, чем к кривой 1. Когда же энергия протонов приближается к 400 МэВ, то экстраполированная экспериментальная кривая уже фактически совпадает с теоретической кривой 2. Таким образом, можно заключить, что кривая 2, соответствующая двукратному уменьшению эффективного торможения, — это и есть тот теоретический предел, к которому стремится экспериментальная кривая зависимости сечения ионизации от энергии при большой скорости снаряда. Что же касается борновского приближения, которое описывается

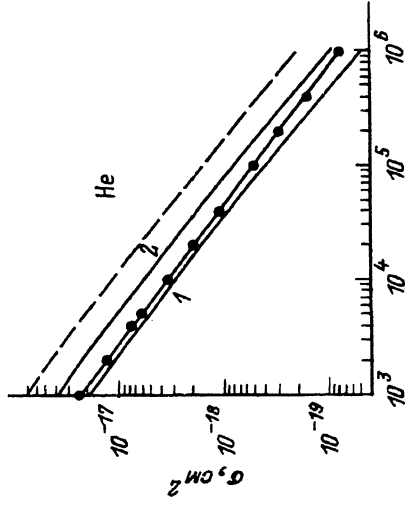


Рис. 1. Зависимость сечения ионизации гелия от энергии протона.  
1 — расчет с помощью формулы (13).

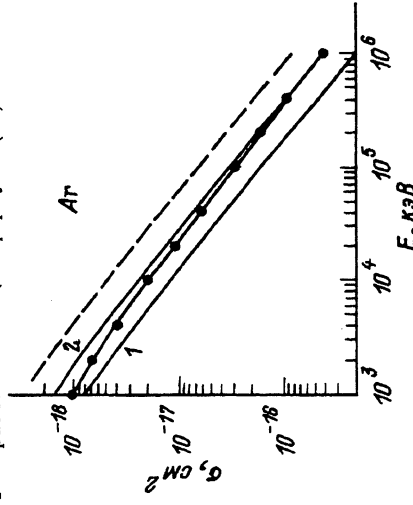


Рис. 3. Зависимость сечения ионизации аргона от энергии протона.  
Параметры те же, что и на рис. 2.

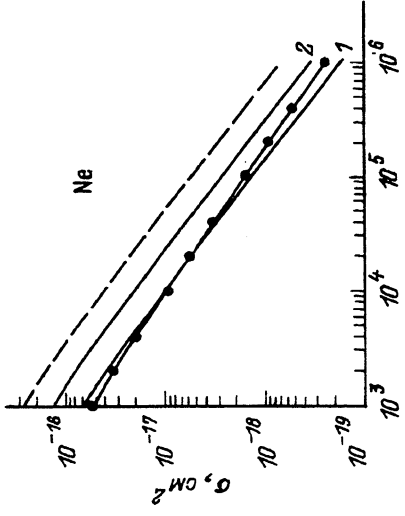


Рис. 2. Зависимость сечения ионизации неона от энергии протона.  
1 — расчет по формуле (13),  $z_p = 1$ .

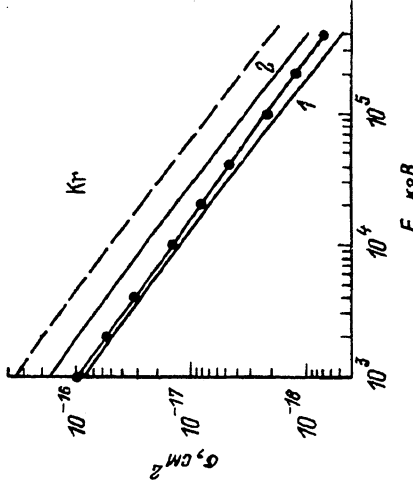


Рис. 4. Зависимость сечения ионизации криптона от энергии протона.  
Параметры те же, что и на рис. 2.

штриховой кривой, то экспериментальные значения сечения остаются как минимум в два раза меньше, чем борновское сечение даже при энергиях протонов порядка 1000 МэВ. Получается так, что борновское значение сечения ионизации оказывается практически недостижимым. Кривые для криптона в качественном отношении носят промежуточный характер между неонем и аргоном.

### 3. Ионизация гелия ионами урана высокой энергии

В работе [10] получены экспериментальные сечения ионизации гелия ионами урана с  $z_p = 90$  при трех значениях энергии на нуклон 60, 120, 420 МэВ. На рис. 5 дано сравнение экспериментального сечения однократной ионизации гелия ионами урана с теоретическим (штриховая кривая), полученным по формуле (5). Теоретические кривые 1, 2 и штриховая линия имеют тот же смысл, что и на рис. 1-4, т.е. штриховая линия соответствует известному эффективному торможению, а кривые 1 и 2 соответствуют уменьшению этого торможения в 4 и в 2 раза. Видно, что штриховая кривая столь же плохо соответствует экспериментальным точкам, как и в случае протонов с энергией до 10 МэВ. Что же касается кривых 1 и 2, то, несмотря на имеющиеся экспериментальные погрешности, следует предпочесть кривую 1, которая соответствует 4-кратному уменьшению борновского эффективного торможения. Таким образом, все те выводы, которые сделаны для протонов с энергией до 10 МэВ, сохраняют свою силу и для ионов урана.

### 4. Полуклассический расчет эффективного торможения в рамках модели независимых электронов

Одна из причин сильного несоответствия экспериментальных результатов с формулой Бете для эффективного торможения заключается, по нашему мнению, в том что теория возмущений, по-видимому, вообще не имеет области применимости в задаче об ионизации атома тяжелой заряженной частицей. Дело в том, что теория возмущений предполагает малость кулоновского поля снаряда по сравнению с полем ионного остова. Между тем, сечение ионизации, например, неона

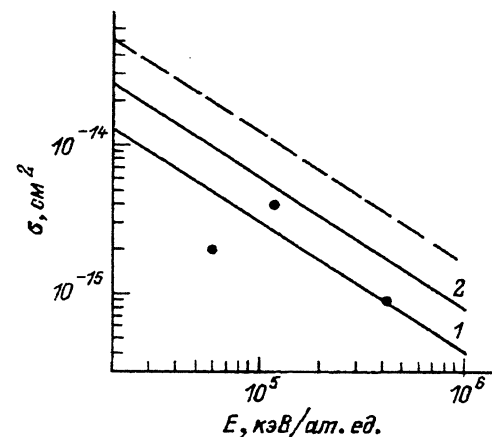


Рис. 5. Зависимость сечения ионизации атома гелия быстрыми ионами урана от их энергии.

Параметры те же, что и на рис. 2,  $z_p = 1$ .

при энергии протона в 10 МэВ будет порядка  $10^{-17}$  см<sup>2</sup>, а для гелия в три раза меньше. Это значит, что расстояние между налетающим протоном и электроном атома гелия в момент его ионизации будет порядка  $10^{-9}$  см и поле снаряда окажется в десятки раз сильнее, чем поле ионного остова. Поэтому электрон можно считать свободным и покоящимся до столкновения со снарядом, а процесс столкновения можно рассматривать как кулоновское рассеяние тяжелого снаряда на свободном электроне. Практически удобнее решать задачу рассеяния путем перехода в систему координат, движущуюся вместе со снарядом. При этом можно использовать как квантовую механику, так и классическую, поскольку в обоих случаях получается одна и та же формула Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния (например, (19.8) в [11])

$$d\sigma = 2\pi \frac{z_p^2 e^4}{mv_p^2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon^2}. \quad (9)$$

Умножая на энергию и интегрируя, мы получаем величину эффективного торможения на одном электроне

$$k_e = \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon l\sigma = \frac{2\pi z_p^2 e^4}{mv_p^2} \ln \left( \frac{\varepsilon_{\max}}{\varepsilon_{\min}} \right). \quad (10)$$

В эту формулу следует поставить пределы интегрирования

$$\varepsilon_{\min} = I, \quad \varepsilon_{\max} = 2m\nu_p^2. \quad (11)$$

В итоге мы приходим к следующему выражению для эффективного торможения на одном электроне:

$$k_e = 2\pi \frac{z_p^2 e^4}{m\nu^2} \ln \left( \frac{2m\nu_p^2}{I} \right). \quad (12)$$

Это выражение в два раза меньше, чем известное в литературе выражение (7). Так получается благодаря предположению, что поле снаряда гораздо больше, чем поле остова, т.е. электрон считается свободным. Тот же результат получится для свободного электрона и при квантовом рассмотрении процесса столкновения.

Таблица 2.

Атом	$A \cdot 10^{15}, \text{см}^2$	$B \cdot 10^{16}, \text{см}^2$	$C \cdot 10^{18}, \text{см}^2$	$W_A, \text{кэВ}$	$W_B, \text{кэВ}$	$W_e, \text{кэВ}$	$n$
He	0.	3.81	0.512	—	11.29	0.	0.83
Ne	1.33	0.87	1.584	9.9	22.3	70	0.80
Ar	2.	1.9	2.88	7.25	13.47	110	0.84
Kr	2.5	2.8	2.16	6.42	11.	0.	0.83

## 5. Расчетные формулы для сечения

Приведем ниже конкретные числовые выражения для сечений ионизации He, Ne, Ar, Kr, которые соответствуют боровскому эффективно-му торможению, уменьшенному в четыре раза, и представлены кривыми 1 на рис. 1-4. Сечение ионизации He, Ne, Ar, Kr

$$\sigma = z_p^2 \left[ A \left( \frac{W_A}{E_p} \right) \ln \left( \frac{E_p}{W_A} \right) + B \left( \frac{W_B}{E_p} \right) \ln \left( \frac{E_p}{W_B} \right) \right], \quad (13)$$

где  $E_p$  — энергия снаряда в кэВ/нуклон, параметры  $A$ ,  $B$ ,  $W_A$ ,  $W_B$  вычисляются с помощью (4)-(7) и табл. 1.

Экспериментальные данные из [9] в интервале энергий  $10^3 \leq E_p \leq \leq 8 \cdot 10^3$  кэВ могут быть интерполированы к следующим выражениям:

$$\sigma = C \left( \frac{10^5}{E_p} \right)^n \cdot 10^{\frac{W_e}{E_p}}. \quad (14)$$

Эта формула используется для экстраполяции энергетической зависимости экспериментальных сечений ионизации на область энергий протонов более  $10^4$  кэВ. Параметры  $C$ ,  $W_e$ ,  $n$ , определенные из экспериментальных данных [9], приведены в табл. 2.

### Список литературы

- [1] Bohr N. // Phil. Mag. 1913. Vol. 26. P. 857.
- [2] Бете Г. Квантовая механика простейших систем. Л.; М., 1935.
- [3] Inokuti M., Kim Y.-K. // Phys. Rev. 1969. Vol. 184. P. 18.
- [4] McGuire J.H. Adv. in Atomic. Mol. and Opt. Phys. 1992. Vol. 29. P. 217.
- [5] Амусья М.Я., Черепков Н.А., Чернышева Л.В., Шефтель С.И. // ЖЭТФ. 1969. Т. 56. С. 1987.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Т. 3. М.: Наука, 1989.
- [7] Ферми Э. Ядерная физика. М.: ИЛ, 1951.
- [8] Moore Ch. Tables of Atomic Level Energies. Vol. 1.
- [9] DuBois R.D., Manson S.T. // Phys. Rev. 1987. Vol. A35. N 5. P. 2007.
- [10] Berg H. et al. // Phys. Rev. 1992. Vol. A46. N 9. P. 5539.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. Т. 1. М.: Наука, 1973.