

02

Зависимость сечений процессов захвата электрона и захвата с ионизацией от параметра удара при столкновении протонов с многоэлектронными атомами

© В.В. Афросимов, А.А. Басалаев, Г.Н. Огурцов, М.Н. Панов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: m.panov@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 14 августа 2013 г.)

Измерены абсолютные величины дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессах захвата электрона и захвата с ионизацией на примере столкновений протонов с энергией 4.5 и 11 keV с атомами аргона и ксенона. Диапазон исследованных углов рассеяния составлял 0–2°. На основании экспериментальных величин дифференциальных сечений рассеяния рассчитаны вероятности процессов одноэлектронного захвата и захвата электрона с ионизацией как функции параметра удара. Зависимости угла рассеяния налетающих частиц от параметра удара (функции отклонения) при взаимодействии с атомами Ar и Xe были вычислены на основе классической механики с использованием потенциала Мольера–Юкавы для описания взаимодействия между атомными частицами. Проведен анализ зависимости вероятности процессов захвата электрона и захвата с дополнительной ионизацией от параметра удара и распределения электронной плотности различных оболочек в атоме-мишени от расстояния до ядра. Сделан вывод о том, что в процесс захвата с ионизацией вовлечены электроны лишь внешней электронной оболочки атома-мишени. Выполнен расчет сечения процесса захвата с ионизацией в диапазоне энергий протонов 5–20 keV.

Введение

Измерения дифференциальных сечений рассеяния при ионно-атомных и атомно-атомных столкновениях являются экспериментальной основой для получения данных о потенциале взаимодействия атомных частиц как функции расстояния между ними. С другой стороны, знание потенциала взаимодействия позволяет соотнести угол рассеяния частицы с ее параметром удара и расстоянием наибольшего сближения частиц при столкновении.

Обычным источником сведений о потенциале упругого взаимодействия атомных частиц являются измерения их углового рассеяния, когда сохраняются электронные состояния сталкивающихся частиц. Это возможно при рассеянии в области малых углов, соответствующих большим параметрам удара. При рассеянии протонов килоэлектронвольтных энергий такие измерения были выполнены в работах [1–4]. В этих работах были предложены выражения для потенциалов взаимодействия между частицами с использованием экранированного кулоновского потенциала

$$U = \sum_n \frac{Z_n}{r} \exp(-A_n r), \quad (1)$$

где r — межъядерное расстояние, Z_n и A_n — параметры, соответствующие измеренным абсолютным величинам дифференциальных сечений рассеяния. При этом движение протонов рассматривалось как движение тяжелых частиц по классическим траекториям.

Однако, как хорошо известно, при энергиях столкновения частиц в несколько килоэлектронвольт при каждом конкретном параметре удара может осуществляться

ряд неупругих процессов, и, следовательно, в этом случае рассеяние быстрых частиц отражает усредненный потенциал взаимодействия. Наиболее подробно исследованы системы ион–атом инертного газа, из которых наиболее простой является система протон или атом водорода и атом инертного газа [5–11].

При наличии данных об абсолютных величинах дифференциальных сечений рассеяния можно вычислить зависимость вероятности процесса захвата электрона от параметра удара, а также сопоставить ее с распределением электронной плотности различных оболочек многоэлектронного атома. Это может служить более чувствительным тестом теоретических расчетов, чем согласие результатов расчета с экспериментальными данными об абсолютных величинах полных сечений захвата или дифференциальных сечений рассеяния быстрых частиц.

Абсолютные величины дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода, образовавшихся при столкновении протонов с атомами инертных газов, были измерены в целом ряде работ [1–10], но в этих работах не проводился анализ зарядовых состояний образующихся ионов отдачи, т.е. не разделялись процессы захвата и захвата с ионизацией. Строгие квантово-механические расчеты имеются только для процесса одноэлектронного захвата [5,7,12], что затрудняет сравнение с экспериментами, в которых не осуществляется разделение процессов.

Целью настоящей работы является измерение абсолютных величин дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода в процессах захвата и захвата с дополнительной ионизацией образовавшегося иона отдачи, а

также расчет полных сечений процесса захвата с ионизацией. Кроме этого, в задачи работы входят получение на основе потенциалов взаимодействия частиц вероятности $W(b)$ этих процессов как функции параметра удара b и сопоставление вероятности процессов с распределением электронной плотности атома мишени и анализ участия разных электронных оболочек атомов мишени в этих процессах.

1. Экспериментальная установка и методика измерений

В настоящей работе измерялись абсолютные величины дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода, образующихся при осуществлении элементарных процессов захвата электрона $\{1001\}$ и захвата электрона с дополнительной ионизацией $\{100k\}$ ($k = 2, 3$ — заряд иона мишени после столкновения) у атомов Ag и Xe налетающими ионами H^+ . Для разделения элементарных процессов использовался анализ зарядового состояния ионов отдачи по времени пролета.

Измерения проводились на установке, описанной в работе [13], для протонов с кинетическими энергиями 4.5 и 11 keV. Пучок протонов, выделенный магнитным масс-анализатором, коллимировался системой щелей размером 0.5×0.5 mm, расположенных на расстоянии 85 cm друг от друга, что определяло угловую расходимость первичного пучка $\Delta\theta \approx 4'$. Полученный узкий пучок ионов пересекал эффузионную струю газа мишени, поступающую в область взаимодействия из капилляра диаметром $d = 1$ mm. Давление струи газа мишени выбиралось таким образом, чтобы обеспечить, во-первых, условие однократности столкновений и, во-вторых, достаточную плотность мишени для достижения необходимой (порядка 1%) статистической точности за время экспозиции. Малый расход газа через капилляр и большой объем баллона с расходующим газом обеспечивали стабильность плотности струйной мишени. Используемые диффузионные насосы поддерживали фоновое давление вне области взаимодействия на уровне $5 \cdot 10^{-7}$ Torr. Система коллимации позволяла направлять полученный пучок протонов в центр эффузионной струи газа мишени и ограничить его диаметр величиной, не превышающей 1 mm в области взаимодействия. Нейтрализовавшиеся налетающие частицы, рассеявшиеся в результате взаимодействия на определенный угол θ , регистрировались детектором нейтральных частиц с диафрагмой, задающей угловое разрешение $\Delta\theta \approx 1.7'$. При этих условиях угловое разрешение рассеянных быстрых частиц составляло $5'$. Экспериментально эта величина определялась путем измерения расходимости первичного пучка протонов.

Диапазон исследуемых углов рассеяния быстрых частиц составлял $-2^\circ \leq \theta \leq +2^\circ$. При регистрации быстрых частиц в нейтральном зарядовом состоянии все заряженные частицы отклонялись электрическим полем

электростатического анализатора. Сигнал с детектора нейтральных частиц H^0 служил сигналом „старт“ времяпролетного анализатора. Медленные ионы мишени Ag^{k+} и Xe^{k+} , образовавшиеся в области пересечения ионного пучка и газовой струи, вытягивались из области взаимодействия однородным электрическим полем плоского конденсатора, ускорялись и регистрировались детектором ионов мишени. Сигнал с детектора ионов мишени являлся сигналом „стоп“ времяпролетного анализатора. Максимальная кинетическая энергия ионов отдачи в случае упругого рассеяния протона с наибольшей начальной кинетической энергией 11 keV на угол $\theta = 2^\circ$ на атоме Ag составляла 0.3 eV, что позволяло обеспечить их полный сбор на детектор, поскольку используемый масс-спектрометр имел 100%-ную прозрачность для частиц, начальная энергия которых была меньше 3 eV.

Для точного определения нулевого угла рассеяния измерялись масс-спектры образующихся ионов мишени симметрично относительно экспериментально определяемого нулевого угла пучка атомов водорода и строилась зависимость интенсивности пика Ag^+ или Xe^+ от угла, т.е. интенсивности совпадений для пар $H^0 + Ag^+$ или $H^0 + Xe^+$. Полученная кривая аппроксимировалась гауссовой кривой, и ее середина принималась за нулевой угол $\theta = 0$ дифференциального сечения исследуемых процессов.

Интенсивность первичного пучка измерялась системой, состоящей из цилиндра Фарадея и электрометра, работающего в режиме интегрирования тока, и использовалась для нормировки результатов эксперимента.

Для определения абсолютных значений дифференциальных по углу рассеяния налетающей частицы сечений процесса проводилась нормировка измеряемых относительных дифференциальных сечений на абсолютную величину полных сечений [14,15] соответствующих процессов согласно выражению (1)

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) \sin\theta d\theta. \quad (1)$$

Ошибки при измерениях дифференциальных по углу рассеяния налетающей частицы сечений процессов изменения зарядового состояния партнеров столкновения при взаимодействии протонов с атомами благородных газов в основном определялись статистической точностью определения регистрируемых величин ($\pm 3\%$) и точностью измерений абсолютных величин элементарных процессов при данной энергии налетающих протонов $\pm 10\%$ по данным работ [14,15].

При сравнении результатов измерений дифференциальных сечений рассеяния, полученных при различных энергиях налетающих частиц, обычно используются приведенные координаты $E\theta$ [8,16]. В случае сравнения дифференциальных сечений рассеяния в приведенных координатах $E\theta$ какого-то отдельного канала неупругого процесса с суммарными по всем процессам дифференци-

Таблица 1. Дифференциальное сечение рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессах захвата электрона и захвата с ионизацией протонами $\{100k\}$ у атомов Ar $H^+ + Ar \rightarrow H^0 + Ar^{k+} + (k-1)e^-$ $k = 1, 2, 3$ (10^{-16} cm²/ster)

4.5 keV			11 keV			
Θ , min	{1001}	{1002}	Θ , min	{1001}	{1002}	{1003}
2.2	$1.11 \cdot 10^6$	$1.13 \cdot 10^2$	0.9	$1.54 \cdot 10^6$	$3.12 \cdot 10^4$	$1.50 \cdot 10^3$
5.9	$7.18 \cdot 10^5$	$1.71 \cdot 10^2$	1.2	$1.50 \cdot 10^6$	$2.83 \cdot 10^4$	$1.21 \cdot 10^3$
9.5	$3.08 \cdot 10^5$	$2.30 \cdot 10^2$	2.4	$1.27 \cdot 10^6$	$3.12 \cdot 10^4$	$1.91 \cdot 10^3$
12.9	$8.05 \cdot 10^4$	$2.23 \cdot 10^2$	3.0	$1.18 \cdot 10^6$	$2.17 \cdot 10^4$	$1.73 \cdot 10^3$
17.1	$1.48 \cdot 10^4$	$1.63 \cdot 10^2$	4.3	$4.10 \cdot 10^5$	$1.97 \cdot 10^4$	$6.00 \cdot 10^2$
24.1	$5.77 \cdot 10^3$	$2.09 \cdot 10^2$	5.8	$3.73 \cdot 10^5$	$1.83 \cdot 10^4$	$6.93 \cdot 10^2$
37.9	$1.75 \cdot 10^3$	$1.53 \cdot 10^2$	6.7	$1.60 \cdot 10^5$	$1.13 \cdot 10^4$	$3.89 \cdot 10^2$
45.7	$1.28 \cdot 10^3$	$1.48 \cdot 10^2$	8.5	$1.06 \cdot 10^5$	$1.22 \cdot 10^4$	$3.37 \cdot 10^2$
53.0	$8.45 \cdot 10^2$	$1.15 \cdot 10^2$	8.8	$5.17 \cdot 10^4$	$8.09 \cdot 10^3$	$3.13 \cdot 10^2$
60.7	$6.07 \cdot 10^2$	90.1	10.1	$3.87 \cdot 10^4$	$7.35 \cdot 10^3$	$3.53 \cdot 10^2$
67.5	$4.90 \cdot 10^2$	99.6	12.6	$2.39 \cdot 10^4$	$5.24 \cdot 10^3$	$3.21 \cdot 10^2$
75.2	$4.02 \cdot 10^2$	79.1	14.0	$1.25 \cdot 10^4$	$4.12 \cdot 10^3$	$3.13 \cdot 10^2$
89.2	$2.37 \cdot 10^2$	51.5	14.6	$1.08 \cdot 10^4$	$3.16 \cdot 10^3$	$3.13 \cdot 10^2$
95.70	$2.18 \cdot 10^2$	47.4	17.4	$7.17 \cdot 10^3$	$3.01 \cdot 10^3$	$3.71 \cdot 10^2$
110.2	$1.70 \cdot 10^2$	41.6	19.8	$4.76 \cdot 10^3$	$2.00 \cdot 10^3$	$3.21 \cdot 10^2$
124.9	$1.25 \cdot 10^2$	24.9	21.4	$4.02 \cdot 10^3$	$1.86 \cdot 10^3$	$2.71 \cdot 10^2$
			22.7	$2.55 \cdot 10^3$	$1.21 \cdot 10^3$	$2.03 \cdot 10^2$
			40.4	$7.28 \cdot 10^2$	$4.39 \cdot 10^2$	73.8
			55.7	$2.58 \cdot 10^2$	$1.67 \cdot 10^2$	38.5
			77.3	$1.38 \cdot 10^2$	9.4	11.8

альными сечениями необходимо учесть зависимость вероятности осуществления данного процесса от энергии.

2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

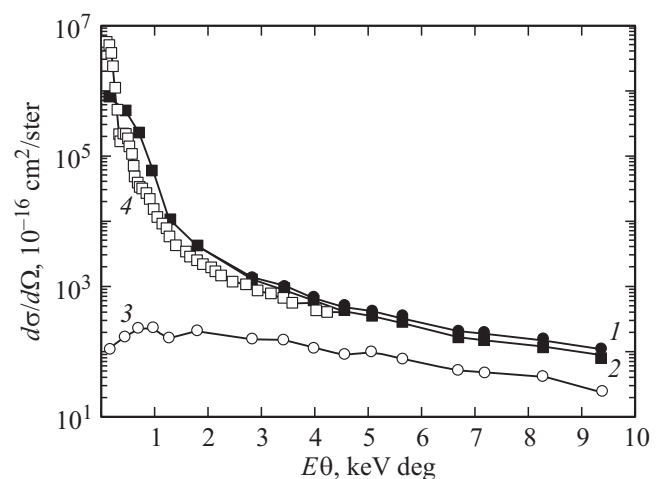
Экспериментальные результаты измерений абсолютных величин дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессах захвата электрона $\{100k\}$ $k = 1-3$ протонами, у атомов Ar и Хе приведены в табл. 1 и 2.

Таблица 2. Дифференциальное сечение рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессах захвата электрона протонами $\{100k\}$ с энергией 4.5 keV у атомов Хе $H^+ + He \rightarrow H^0 + He^{k+} + (k-1)e^-$

Θ , min	{1001}	{1002}
1.0	$7.75 \cdot 10^5$	$1.22 \cdot 10^4$
4.5	$5.35 \cdot 10^5$	$1.04 \cdot 10^4$
8.3	$2.14 \cdot 10^5$	$6.33 \cdot 10^3$
11.7	$6.76 \cdot 10^4$	$3.99 \cdot 10^3$
15.4	$1.66 \cdot 10^5$	$2.63 \cdot 10^3$
22.4	$3.48 \cdot 10^4$	$1.45 \cdot 10^3$
42.3	$9.89 \cdot 10^2$	$7.90 \cdot 10^2$
59.2	$5.14 \cdot 10^2$	$3.20 \cdot 10^2$
74.1	$2.14 \cdot 10^2$	$1.58 \cdot 10^2$
88.8	$1.29 \cdot 10^2$	$1.07 \cdot 10^2$
103.4	97	76.5

2.1. Дифференциальные сечения рассеяния

На рис. 1 приведены дифференциальные сечения процессов захвата электрона (1) и захвата с ионизацией (2) при взаимодействии протонов $E = 4.5$ keV с атомами аргона и дифференциальное сечение рассеяния из работы [5] (3). Методики получения абсолютных величин

**Рис. 1.** Дифференциальное сечение рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессе захвата электрона при взаимодействии $H^+ - Ar$, энергия протонов $E = 4.5$ keV: 1 — суммарное сечение рассеяния процессов одноэлектронного захвата и захвата с ионизацией $\{1001\} + \{1002\}$, 2 — процесса $\{1001\}$, 3 — процесса $\{1002\}$, 4 — полное сечение рассеяния из работы [8].

дифференциальных сечений рассеяния в работе [5] и в настоящей работе также были различны. В настоящей работе они определялись из соотношения (1). В работе [5] для пары $H^+ - Ar$ были измерены суммарные дифференциальные сечения захвата электрона без разделения на сечения процессов, связанных с различными зарядовыми состояниями частиц отдачи, поэтому на рис. 1 приведена также и кривая для суммы измеренных нами величин сечений захвата и захвата с ионизацией. Все дифференциальные сечения на рисунках и в таблицах в настоящей работе нормированы на величины сечений захвата электрона $\{1001\}$ для пары $H^+ - Ar$ $\sigma_{01}^{10} = 15 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ (для энергии 4.5 keV), $\sigma_{01}^{10} = 11.6 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ (для 11 keV) [13] и для пары $H^+ - Xe$ $\sigma_{01}^{10} = 20 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ (для энергии 4.5 keV) [14].

Результаты работы хорошо согласуются с данными [5] по зависимости дифференциальных сечений от угла рассеяния. Некоторое различие в абсолютных величинах сечений в области малых углов вызвано более низким угловым разрешением нашей установки, что привело к сглаживанию острого пика в области углов, близких к нулю. В области приведенных углов $\theta E > 2 \text{ keV} \cdot \text{deg}$ данные, полученные при использовании нашего прибора, угловое разрешение $\Delta\theta = 5'$ и прибора с разрешением $\Delta\theta = 1'$ в работе [5], хорошо согласуются между собой.

Впервые измеренные в настоящей работе дифференциальные по углу рассеяния сечения процессов захвата с ионизацией не имеют резкой угловой зависимости в области малых углов, что позволяет нам с удовлетворительной точностью измерить величины сечений этих процессов во всем диапазоне углов рассеяния быстрой частицы и получить правильную зависимость их сечений от параметра удара во всем исследуемом диапазоне параметров удара.

2.2. Расчет функции отклонения для процессов захвата электрона протонами у атомов Ar и Xe

Для анализа экспериментальных результатов, полученных для процесса захвата электрона протоном у атома Ar, были использованы, во-первых, квантово-механический расчет функции отклонения атомов водорода из работы [2]. В этой работе рассеяние атомов водорода определяется суперпозицией рассеяния на двух потенциалах, соответствующих состояниям квазимолекулярного иона $\{ArH\}^+ \chi^1 \Sigma^+$ и $b^1 \sigma^+$, взаимодействие которых и определяет процесс захвата электрона. На рис. 2 приведена (1) функция отклонения из работы [2], пересчитанная для случая столкновения протонов с энергией 4.5 keV с атомами аргона. Во-вторых, были проведены классические расчеты функции отклонения, с применением трех различных потенциалов. В работе [4] взаимодействие $H^+ - Ar$ описывается модифицирован-

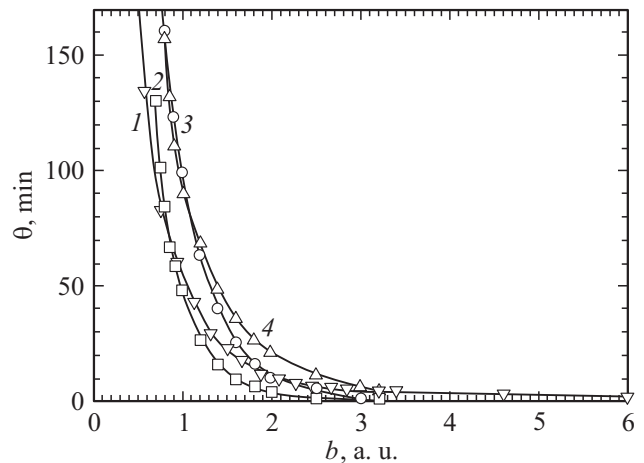


Рис. 2. Зависимость угла рассеяния атомов водорода от параметра удара (функция отклонения) для столкновения $H^+ - Ar$, $E = 4.5 \text{ keV}$: 1 — квантово-механический расчет рассеяния атомов водорода из работы [8], 2 — рассеяние протонов на потенциале Юкавы–Мольера [4], 3 — на экранированном кулоновском потенциале с использованием Хартри-фоковской плотности электронов в атоме Ar [17], 4 — на потенциале Томаса–Ферми [18].

ным потенциалом Мольера–Юкавы

$$V(R) = (18/R)e - R/0.357 + (2/R)e - R/0.063 + (2/R)e - R/0.26 + (8/R)e - R/0.75,$$

где потенциал представляет сумму не трех, как обычно, а четырех экранированных кулоновских потенциалов. Функция отклонения, рассчитанная с использованием этого потенциала, представлена кривой 2 на рис. 2. Кривая 3 представляет результаты расчета функции отклонения при использовании для описания взаимодействия протона с атомом аргона кулоновского потенциала, согласно Хартри–Фоковским расчетам электронной плотности для атома Ar [17], и кривая 4 — потенциала Томаса–Ферми [18].

Видно, что наиболее близки к квантово-механическим расчетам результаты расчета при использовании потенциала Мольера [4], выбранного нами для анализа экспериментальных результатов для пары $H^+ - Xe$, для которой квантово-механические расчеты отсутствуют.

2.3. Анализ роли различных электронных оболочек в процессах захвата электрона

Знание функции отклонения позволяет преобразовать дифференциальные по углу рассеяния сечения процесса в дифференциальные сечения $d\sigma/db$ по параметру удара или, что в некоторых случаях нагляднее, в вероятность процесса $W(b) = 1/2\pi b d\sigma/db$.

На рис. 3 приведены вероятности процессов захвата одного электрона $\{1001\}$ (1) и процесса захвата с ионизацией $\{1002\}$ (2) при столкновении протонов

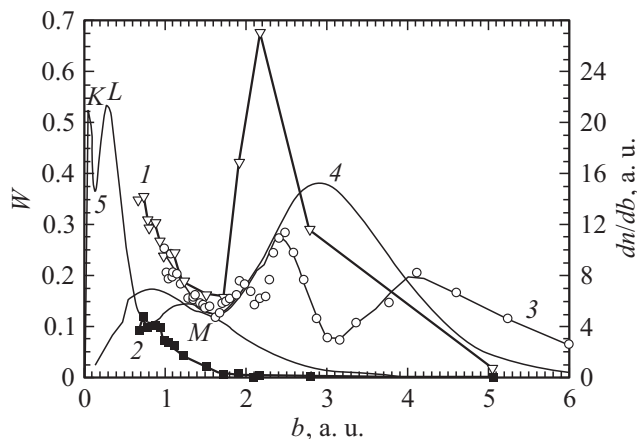


Рис. 3. Вероятность процессов захвата электрона от параметра удара при столкновении $\text{H}^+ - \text{Ar}$, энергия протонов 4.5 keV: 1 — данные настоящей работы для процесса {1001}, 2 — для процесса {1002}, 3 — обработка данных дифференциального сечения рассеяния атомов водорода из работы [5], 4 — расчет вероятности из работы [7], 5 — распределение электронов по радиусу в атоме аргона (шкала с правой стороны рисунка).

с кинетической энергией 4.5 keV с атомами аргона. Расчеты проводились в предположении, что рассеяние быстрой частицы в обоих процессах идет на одном и том же потенциале. Исследованные углы рассеяния при энергии $E = 4.5$ keV соответствуют параметрам удара $b > 0.7$ a.u., а для энергии $E = 11$ keV — $b > 0.4$ a.u.

Полученные нами зависимости вероятности процессов захвата одного электрона {1001} от параметра удара хорошо согласуются с результатами работы [5], обработанными аналогичным образом, в области параметров удара $b < 1.4$ a.u. (3), что обусловлено совпадением дифференциальных сечений рассеяния в области приведенных углов рассеяния 2–10 keV·deg (рис. 1). Осцилляции вероятности захвата электрона W от параметра удара отражают интерференцию процесса между состояниями $x^1\Sigma[\text{H}^+\text{Ar}(3p^6)]$ и $b^1\Sigma[\text{H}(1s)\text{Ar}(3p^5)]$.

Квантово-механический расчет вероятности захвата $W(b)$ для этой пары в диапазоне энергий 3–50 keV выполнен в работах [7,10]. Однако определяемая, исходя из вероятности $W(b)$ по данным работы [10], величина сечения процесса захвата одного электрона при энергии 4.5 keV оказывается в 1.43 раза больше измеренной нами [14]. На рис. 3 кривая 4 соответствует величинам $W(b)$ из [10], деленным на 1.43. Качественно по наличию осцилляций и их периоду результаты этого расчета согласуются с экспериментальными данными.

Экспериментальные данные показывают, что при увеличении кинетической энергии протонов сечения процессов захвата с ионизацией возрастают. Поэтому при энергии 11 keV были измерены дифференциальные сечения рассеяния процессов захвата с образованием одного {1002} и двух свободных электронов {1003}. На рис. 4 приведены дифференциальные по параметру удара сечения этих двух процессов, которые осуществляются

в той же области параметров удара $b < 1.5 \sim 2$ a.u., как и при энергии 4.5 keV.

На рис. 5 представлены дифференциальные по параметру удара сечения процессов захвата (1) и захвата с ионизацией (2) при взаимодействии протонов с энергией $E = 4.5$ keV с атомами ксенона. Как и в случае с парой $\{\text{HAr}\}^+$ максимумы дифференциальных сечений этих процессов соответствуют различным областям параметров удара.

Как видно из полученных результатов, при малых скоростях сближения частиц следует считать, что процесс захвата электрона происходит из внешней электронной оболочки (M для Ar и O для Xe), что, естественно, объясняется значительным дефектом резонанса процесса для более глубоких оболочек. Однако образование свободных электронов происходит при более тесном

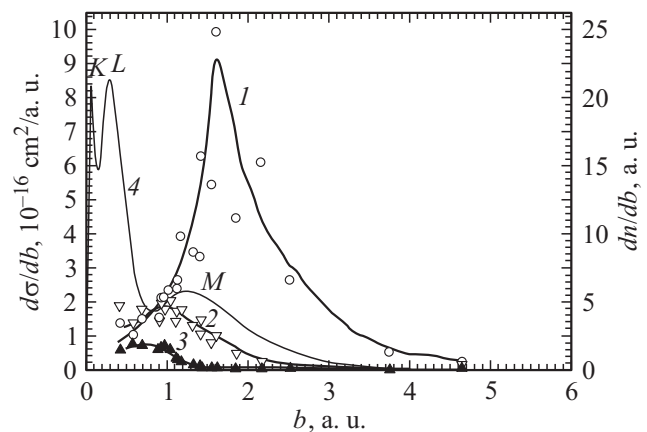


Рис. 4. Дифференциальные по параметру удара сечения процессов захвата электрона при столкновении $\text{H}^+ - \text{Ar}$, энергия протонов 11 keV: 1 — процесс {1001}, 2 — процесс {1002} $2d\sigma/db$, 3 — процесс {1003} $5d\sigma/db$, 4 — распределение электронов по радиусу в атоме аргона (правая ось ординат).

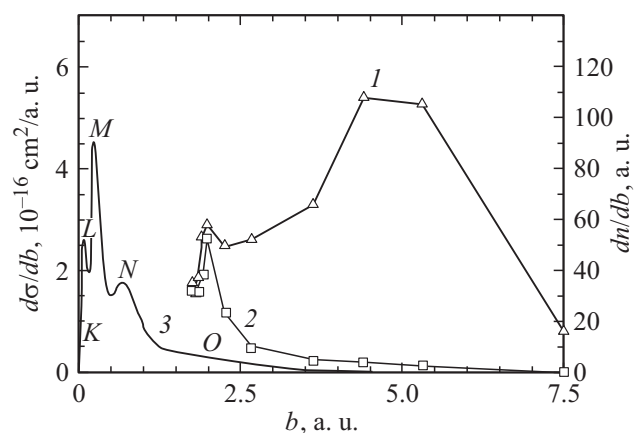


Рис. 5. Дифференциальные по параметру удара сечения процессов захвата электрона и захвата с ионизацией при столкновении $\text{H}^+ - \text{Xe}$, энергия протонов 4.5 keV: 1 — процесс {1001}, 2 — процесс {1002}, 3 — распределение электронов по радиусу в атоме ксенона (правая ось ординат).

сближении частиц. Следует иметь в виду, что захват 3s-электрона у атома Ar и 5s-электрона у атома Xe не ведет к образованию автоионизационных состояний [19] и не сопровождается образованием свободных электронов.

3. Расчет сечения захвата с ионизацией в системе H⁺+Ar

В отличие от захвата одного электрона процесс захвата с ионизацией теоретически не изучался на количественном уровне. В работе Сидиса [2] высказана идея о том, что этот процесс осуществляется последовательно в два этапа: вначале происходит захват одного электрона путем перехода между соответствующими термами квазимолекулы, а затем при дальнейшем сближении частиц второй электрон переходит на возбужденные уровни квазимолекулы. Однако более детального анализа состояний, участвующих в процессе, не было проведено.

Как следует из приведенных экспериментальных данных, захват с ионизацией происходит при межъядерных расстояниях порядка 1 а.е., поэтому целесообразно для расчета использовать молекулярный базис (в отличие от работы Сидиса [2], в которой использован атомный базис). Количественные расчеты орбиталей выполнялись с помощью программы, примененной в предыдущей работе авторов [20] и основанной на решении уравнения Шредингера в вытянутых сфероидальных координатах.

При сближении частиц сначала происходит захват электрона с орбитали 4dσ, коррелирующей с уровнем 3p аргона, на пустую орбиталь 3dσ, коррелирующую с уровнем 1s водорода (электронный переход между квазимолекулярными состояниями x¹Σ и b¹Σ системы (HAr)⁺). Затем при дальнейшем сближении второй электрон, оставшийся на орбитали 4dσ, выдвигается в континуум путем прямой ионизации [21].

В настоящей работе рассматривался механизм захвата на основе связи Демкова (см., например, [22]). Необходимым условием перехода электрона между термами квазимолекулы в этой модели является

$$\frac{|H_{11} - H_{22}|}{2} = H_{12},$$

где H_{ik} — матричные элементы.

В случае H⁺+Ar это условие выполняется при R ≈ 3.5 а.е. (H₁₁ = -0.34, H₂₂ = -0.69, H₁₂ = 0.35 × exp(-0.19R)). Вероятность захвата определяется формулой из работы [22]

$$p = \frac{1}{2} \sec h^2 \left[\frac{\pi |H_{11} - H_{22}|}{2V} \right],$$

где V — радиальная скорость сближения частиц.

Сечение прямой ионизации (S-ионизации) определялось на основе формулы модифицированного адиабатического приближения [21]

$$\sigma = 2\pi |R(0)|^2 \exp \left(-2 \int \text{Im} R \frac{dE}{V} \right).$$

Таблица 3. Сечение процесса захвата с ионизацией {1002}, пара H⁺+Ar

E, keV	σ, 10 ⁻¹⁷ cm ²	
	расчет настоящей работы	эксперимент [13]
5	1.26	1.15
10	3.6	4.57
15	6.1	7.55
20	8.45	9.35

Параметры адиабатического терма, входящие в формулу (R(0) = 2.0 а.е., α(0) = 2 ∫ ImR dE = 0.95), определены из анализа энергетических спектров электронов, измеренных в работе [23]. Методика их определения описана в работе [24].

В табл. 3 приведены результаты расчета сечения захвата с ионизацией, определявшегося как интеграл по параметру удара произведения вероятности прямой ионизации на вероятность захвата одного электрона. Как видно, результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Заключение

Впервые проведены измерения абсолютных величин дифференциальных сечений рассеяния атомов водорода, образовавшихся в процессах захвата с дополнительной ионизацией одного или двух электронов при взаимодействии протонов с атомами аргона и ксенона. На основании экспериментальных данных определены вероятности осуществления этих процессов как функции параметра удара. В этих координатах проявляется интерференция вероятностей двух путей осуществления процесса одноэлектронного захвата. Показано, что процессы захвата с ионизацией осуществляются при значительно меньших параметрах удара, чем одноэлектронный захват. Выполнен расчет сечения захвата с дополнительной ионизацией одного электрона при столкновении H⁺-Ar для энергий протонов 5–20 keV. Процесс рассматривался как суперпозиция захвата одного и прямой ионизации второго 3dσ-электронов внешней оболочки квазимолекулы. Результаты расчета хорошо согласуются с нашими экспериментальными измерениями [14,15]. В исследованной области кинетических энергий протонов процессы захвата с ионизацией осуществляются с участием только электронов внешней оболочки атома инертного газа.

Список литературы

- [1] Abignoli M., Barat M., Baudon J., Fayeton J., Houver J.C. // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1972. Vol. 5. P. 1533–1553.
- [2] Sidis V. // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1972. Vol. 5. P. 1517–1528.

- [3] *Kubachf C., Sidis V.* // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1973. Vol. 6. P. L289–L293.
- [4] *Spranger T., Zapukhlyak M., Kirchner T.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. Vol. 40. P. 1081–1088.
- [5] *Jonson L.K., Gao R.S., Hakes C.L., Smith A., Stebbings R.F.* // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 4920–4925.
- [6] *Schulz M., Blankenship D.M., Bross S.W., Gaus A.D., Gay T.J., Htwe W., Park J.T., Peacher J.L.* // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 46. P. 3870–3876.
- [7] *Amaya-Tapia A., Martinez H., Hernández-Lamonedá R., Lin C.D.* // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 62. P. 052 718.
- [8] *Everhart E.* // Phys. Rev. 1963. Vol. 132. P. 2083–2090.
- [9] *Schulz M., Vajnai T., Brand J.A.* // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75. P. 022 717.
- [10] *Martínez H., Alarcon F.B., Amaya-Tapia A.* // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 78. P. 062 715.
- [11] *Abufager P.N., Fainstein P.D., Martínez A.E., Rivarola R.D.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38. P. 11–22.
- [12] *Nikulín V.K., Guschina N.A.* // Abstracts of papers ICPEAC. Japan, 1999. P. 586.
- [13] *Afrosimov V.V., Basalaev A.A., Belik V.P., Maidl Yu.V., Panov M.N., Smirnov O.V.* // Fulleren. Sci. Techn. 1998. Vol. 6. N 3. P. 393–403.
- [14] *Афросимов В.В., Мамаев Ю.А., Панов М.Н., Урошев-вич В.* // ЖТФ. 1967. Т. 37. С. 717–725.
- [15] *Афросимов В.В., Мамаев Ю.А., Панов М.Н., Федорен-ко Н.В.* // ЖТФ. 1969. Т. 39. С. 159–165.
- [16] *Stedeford J.B.H., Hasted J.B.* // Proc. Roy. Soc. A. 1955. Vol. 227. P. 406–409.
- [17] *Zahlenwerte und Funktion, Atom und Molecular Physik, 1 teil, Herausgegeben Arnold Eucken. Springer-Verlag, 1950.*
- [18] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 3. М.: Наука, 1988. 767 с.
- [19] <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
- [20] *Ogurtsov G.N., Ovchinnikov S.Yu., Macek J.H., Mikoush-kin V.M.* // Phys. Rev. A. 2011. Vol. 84. P. 032 706.
- [21] *Соловьев Е.А.* // УФН. 1989. Т. 157. Вып. 3. С. 437–476.
- [22] *Meyerhof W.E.* // Phys. Rev. Lett. 1973. Vol. 31. P. 1341.
- [23] *Огурцов Г.Н., Микушкин В.М., Флакс И.П., Саргсян М.Г.* // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. С. 652.
- [24] *Ogurtsov G.N., Kroupyshev A.G., Sargsyan M.G., Gor-deev Yu.S.* // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 53. P. 2391–2398.