

Нейтрализация ионов H^- в столкновениях с быстрыми многозарядными ионами

© А.Б. Войткив, В.А. Паздзерский

Институт электроники АН Узбекистана,
700143 Ташкент, Узбекистан

(Поступило в Редакцию 13 октября 1997 г. В окончательной редакции 13 апреля 1998 г.)

Рассматривается нейтрализация ионов H^- в столкновениях с быстрыми многозарядными ионами в области параметров задачи, где неприменимо борновское приближение. Получена аналитическая формула для сечения нейтрализации H^- в таких столкновениях.

Атомные столкновения с участием отрицательных ионов являются предметом довольно интенсивных исследований в течение последних десятилетий (см., например, [1–3] и цитированную там литературу). Исследование таких столкновений может иметь важные практические приложения (например, получение пучков быстрых нейтральных частиц [1]). Для расчета сечения нейтрализации отрицательных ионов при столкновениях с быстрыми заряженными частицами с относительно небольшими значениями заряда ($Z \ll v$, где Z — заряд частицы, v — скорость столкновения; здесь и ниже используется атомная система единиц) может использоваться борновское приближение [4]. В данной работе рассматривается нейтрализация ионов H^- при столкновениях с быстрыми многозарядными ионами (МЗИ) в области параметров задачи $Z \gtrsim v \gg v_0$ (v_0 — характерная орбитальная скорость слабосвязанного электрона в H^-), когда борновское приближение неприменимо. Отметим, что для некоторых значений Z , v из этой области параметров сечения нейтрализации H^- были измерены в [2] для столкновений с ионами Ne ($Z \leq 4$), Ag и Xe ($Z \leq 8$). Теоретическое исследование нейтрализации H^- при столкновениях с МЗИ проводилось в работах [1–3, 5, 6] с использованием метода классических траекторий Монте-Карло [1]; метода, предложенного в [7] как обобщение теории Келдыша [8] для фотоионизации в сильном поле [2, 3]; модели двух состояний [5], метода сильной связи [6]. В данной работе проблема нейтрализации H^- рассматривается на основе подхода, предложенного в [9, 10] для расчета сечений ионизации атомов в столкновениях с быстрыми МЗИ. В отличие от перечисленных выше методов данный подход позволяет получить решение задачи о нахождении сечения в аналитическом виде, причем получаемые результаты пригодны для достаточно широкой области параметров столкновения Z и v , которая будет уточнена ниже.

Перейдем к рассмотрению поставленной задачи. Для расчета сечения нейтрализации необходимо знание электронных волновых функций отрицательного иона. В ионе H^- имеются два электрона, при теоретическом описании которых обычно предполагается, что один из них находится на почти водородовской $1s$ -орбитали, другой же, слабосвязанный, — на диффузной орбитали с ра-

диусом $\sim \kappa^{-1} \sim 4$ ($\kappa^2/2 = 0.0275$ — энергия сродства H^-). В данной работе будем описывать отрицательный ион в одноэлектронном приближении, считая, что слабосвязанный активный электрон движется в поле "замороженного" остова H^- (протон + сильно связанный электрон). Известно (см., например, [11]), что движение отдельной частицы под действием других можно описать как движение этой частицы в эффективном нелокальном потенциале. Подобно работам [5, 12] будем описывать взаимодействие активного электрона с остовом с помощью нелокального сепарабельного потенциала Ямагучи [13]

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\lambda |g(\mathbf{r})\langle g(\mathbf{r}')|, \quad (1)$$

где $g(\mathbf{r})$ выбирается в виде

$$g(\mathbf{r}) = g(r) = (\beta/2\pi)^{1/2} \exp(-\beta r)/r \quad (2)$$

с $\beta = 0.913$ и $\lambda = 0.659$ [12], r — расстояние между активным электроном и ядром H^- .

С таким потенциалом уравнение Шредингера легко решается как для дискретного, так и непрерывного спектров. Так, волновая функция связанного состояния имеет вид

$$\varphi_0(r) = Nr^{-1}(\exp(-\kappa r) - \exp(-\beta r)), \quad (3)$$

где $N = ((2\pi)^{-1} \kappa \beta (\kappa + \beta)(\beta - \kappa)^{-2})^{1/2}$ — нормировочный множитель, а величина $\kappa = 0.235$ задается по известному значению энергии сродства.

Волновая функция (4) имеет правильную асимптотику при $r\kappa \gg 1$

$$\varphi_0(r) = 1.51((2\pi)^{-1} \kappa)^{1/2} \exp(-\kappa r)/r, \quad (4)$$

оставаясь конечной при $r \rightarrow 0$. Ниже волновые функции, полученные с применением потенциала (1), будут использоваться для описания собственных состояний дискретного и непрерывного спектров H^- .

Рассмотрим столкновение быстрого МЗИ с отрицательным ионом водорода. Будем предполагать, что ион водорода покоится в начале координат, а МЗИ движется вдоль классической прямолинейной траектории $\mathbf{R}(t) = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, где b — прицельный параметр. Известно [14], что основной вклад в сечения неупругих процессов при столкновениях с быстрыми МЗИ

дает область прицельных параметров $b > r_0$, где r_0 — характерный размер атомной системы (в нашем случае $r_0 \simeq \varkappa^{-1}$ — характерный размер H^-). При $b > r_0$ поле МЗИ в области нахождения иона водорода можно считать однородным

$$W(\mathbf{r}, t) = Z/|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}| \simeq Z/R(t) - Z\mathbf{R}(t)\mathbf{r}/R^3(t). \quad (5)$$

Первое слагаемое в (5), не зависящее от координат электрона r , приводит к несущественному фазовому множителю, одинаковому для всех состояний, и поскольку он не приводит к электронным переходам, то в дальнейшем учитываться не будет. Электронные переходы обусловлены дипольным взаимодействием $W_1(t) = -Z\mathbf{R}(t)\mathbf{r}/R^3(t)$, которое может рассматриваться как действующее в течение конечного интервала времени. Действительно,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt W_1(t) = W_1(t=0) \cdot T, \quad (6)$$

где $T = T(b) = 2b/v$ имеет смысл эффективного времени действия поля МЗИ.

Следуя подходу, предложенному в [9,10], разделим область прицельных параметров $b > r_0$ на две подобласти: 1) $r_0 < b \ll v\tau$, где $\tau \simeq r_0/v_0$ — характерное орбитальное время для движения слабосвязанного электрона в H^- ; 2) $b \gg Z\varkappa/v$. Используя волновую функцию (3), характерную орбитальную скорость электрона в этом состоянии можно оценить как $v_0 \simeq (\varkappa\beta)^{1/2} \simeq \varkappa^{1/2}$, что дает $\tau \simeq \varkappa^{-3/2}$. Для дальнейшего важно отметить, что подобласть 1 существует при выполнении условия $v \gg v_0 \simeq \varkappa^{1/2}$, а подобласти 1 и 2 частично перекрываются при выполнении условия $v^2 \gg Z\varkappa^{1/2}$, поэтому ниже будем предполагать оба эти условия выполненными.

При столкновениях в первой подобласти эффективное время столкновения $T(b)$ мало ($T \ll \tau$), и для расчета вероятности нейтрализации $w_{-0}(b)$ в этой области будем использовать нулевой порядок приближения внезапных возмущений [15]

$$\begin{aligned} w_{-0}(b) = w_g(b) &= \int d^3\mathbf{k} |\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \exp(-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt W_1(t)) | \varphi_0 \rangle|^2 \\ &= \int d^3\mathbf{k} |\langle \varphi_{\mathbf{k}} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \varphi_0 \rangle|^2, \end{aligned} \quad (7)$$

где φ_0 и $\varphi_{\mathbf{k}}$ — волновые функции соответственно связанного состояния и состояний непрерывного спектра H^- , а величина $\mathbf{q} = 2Z\mathbf{b}/b^2v$ имеет смысл среднего импульса, передаваемого электрону полем быстрого МЗИ.

Вероятность (7) удобно вычислять, используя условие полноты состояний отрицательного иона,

$$|\varphi_0 \rangle \langle \varphi_0| + \int d^3\mathbf{k} |\varphi_{\mathbf{k}} \rangle \langle \varphi_{\mathbf{k}}| = 1,$$

что приводит к следующему выражению:

$$\begin{aligned} w_g(b(q)) &= 1 - \frac{16\pi^2 N^4}{q^2} (\arctg(q/2\varkappa) \\ &+ \arctg(q/2\beta) - 2 \arctg(q/(\varkappa + \beta)))^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Вклад в сечение нейтрализации от столкновений в области прицельных параметров $b_1 \ll b \ll b_2$ (где $b_2 \ll v\tau$, а значение b_1 будет определено ниже) имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{-0}(b_1 \leq b \leq b_2) &= 2\pi \int_{b_1}^{b_2} db b w_g(b) \\ &= 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \int_{q_2}^{q_1} \frac{dq}{q^3} p(q), \end{aligned} \quad (9)$$

где $p(q) = w_g(b(q))$, $q_{1,2} = 2Z/(vb_{1,2})$.

Столкновения в области малых прицельных параметров $b \leq r_0$ при $Z \gtrsim v$ характеризуются большими (в сравнении с энергией связи активного электрона в H^-) передачами энергии электрону. Действительно, при $b > r_0$ среднюю переданную энергию можно оценить как $\varepsilon \simeq 2Z^2/b^2v^2$. Отсюда следует, что эта энергия велика уже при $b \simeq r_0$ (и, естественно, становится еще больше в области $b < r_0$). Большая средняя передача энергии приводит к отрыву слабосвязанного электрона с вероятностью, близкой к единице. Здесь важно отметить следующее. Хотя выражение (7) формально применимо лишь при $b > r_0$, тем не менее расчет по этой формуле дает для вероятности нейтрализации (при $Z \gtrsim v$) разумные (близкие к единице) значения и в области $b \lesssim r_0$. Поэтому при $Z \gtrsim v$ выражение (7) будем использовать для расчета вероятности нейтрализации и в области малых прицельных параметров $b \lesssim \varkappa^{-1}$. Поскольку, как показывает расчет, величина вклада (9) в сечение нейтрализации при $q_1 > 1$ практически не чувствительна к выбору конкретного значения q_1 , то просто положим в (9) $q_1 = \infty$ ($b_1 = 0$).

Интеграл по q в (9) вычислим следующим образом. Так как $p(q) \sim (q/\varkappa)^2$ при $q \ll \varkappa$, то с учетом соотношений $\varkappa \ll v$ и $q_2 \ll \varkappa$ (последнее имеет место при $Z/(\varkappa v) \ll b_2 \ll v/\varkappa^{3/2}$), можно записать

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{-0}(b_1 \leq b \leq b_2) &= 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \int_{q_2}^{\infty} \frac{dq}{q^3} p(q) \\ &= 152.2 \frac{Z^2}{v^2} \left(\int_{q_2}^{\varkappa^{3/2}/v} \frac{dq}{q^3} q^2 + 0.1652 \int_{\varkappa^{3/2}/v}^{\infty} \frac{dq}{q^3} p(q) \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Второе слагаемое в скобках не зависит от заряда МЗИ Z , а от скорости v зависит лишь благодаря нижнему пределу интегрирования. Поскольку $\varkappa^{3/2}/v \ll 1$, то эта

зависимость с хорошей точностью является логарифмической. Действительно, запишем второй интеграл в (10) в виде

$$\int_{\varkappa^{3/2}/v}^{q_1} \frac{dq}{q^3} w(q) = (0.1652)^{-1} \ln(Cv/\varkappa^{3/2}). \quad (11)$$

Численное интегрирование левой части в (11), проведенное для различных значений v из области $v/\varkappa^{3/2} \gg 1$, показывает, что величина $C = 0.46$ практически не зависит от значения v в этой области скоростей. Таким образом, используя (10), (11), для вклада (9) в сечение имеем

$$\Delta\sigma_{-0}(b \leq b_2) = 152.2 \frac{Z^2}{v^2} \ln\left(\frac{0.23v}{Z} b_2\right). \quad (12)$$

В области прицельных параметров $b \gg Z/(v\varkappa)$ вероятность нейтрализации мала. Действительно, при $Z/(v\varkappa) \ll b \ll v\tau$ можно использовать выражения (7), (8), что дает

$$w_{-0}(b) = 1.34 \frac{Z^2}{b^2 v^2 \varkappa^2} \ll 1; \quad Z/(v\varkappa) \ll b \ll v/\varkappa^{3/2}. \quad (13)$$

Поскольку для описания ионизации при $b \gg Z/(v\varkappa)$ будем использовать теорию возмущений по взаимодействию $W_1(t)$. В первом порядке теории возмущения для вероятности ионизации имеем (см., например, [16])

$$w_{-0}(b) = w_p(b) = \frac{4Z^2}{v^4} \int_0^\infty dk k^2 \omega_{k1}^2 y_{k1}^2 \times \left(K_0^2 \left(\frac{\omega_{k1} b}{v} \right) + K_1^2 \left(\frac{\omega_{k1} b}{v} \right) \right), \quad (14)$$

где $\omega_{k1} = (k^2 + \varkappa^2)/2$ — частоты переходов; y_{k1}^2 — усредненный квадрат компоненты дипольного матричного элемента для H^- ($y_{k1}^2 = x_{k1}^2 = z_{k1}^2 = r_{k1}^2/3$); K_0, K_1 — модифицированные функции Бесселя.

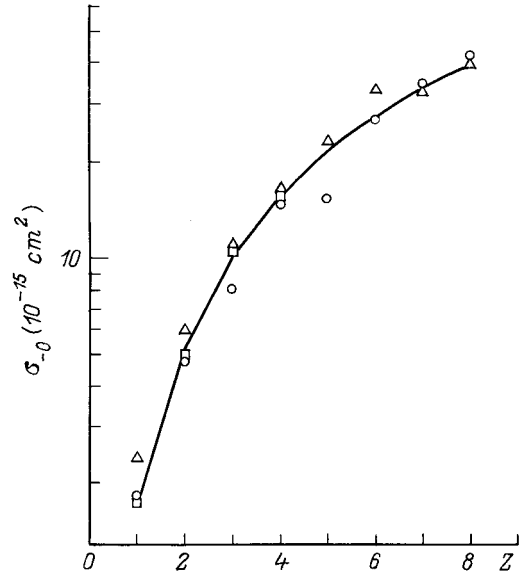
Для вклада в сечение нейтрализации от столкновений с прицельными параметрами $b_3 \leq b < \infty$, где точка b_3 лежит в пределах $Z/(v\varkappa) \ll b_3 \ll v/\varkappa^{3/2}$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_{-0}(b \geq b_3) &= 2\pi \int_{b_3}^\infty db b w_p(b) \\ &= 152.2 \frac{Z^2}{v^2} \ln\left(\frac{1.123v}{\omega_{ef} b_3}\right), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\omega_{ef} = \exp\left(\int_0^\infty dk k^2 y_{k1}^2 \ln \omega_{k1} / \int_0^\infty dk k^2 y_{k1}^2\right) = 0.081.$$

Благодаря тому что при $Z\varkappa^{1/2} \ll v^2$ две рассмотренные выше подобласти прицельных параметров частично



Сечения нейтрализации H^- при энергии столкновения $E = 200$ keV. Значки — экспериментальные данные [2]: \square — Ne^{2+} ($Z \leq 4$), \circ — Ar^{2+} ($Z \leq 8$), \triangle — Xe^{2+} ($Z \leq 8$); сплошная кривая — результаты расчета по (16).

перекрываются, можно положить $b_2 = b_3$ и для сечения ионизации, суммируя вклады (12) и (15), находим

$$\sigma_{-0} = 152.2 \frac{Z^2}{v^2} \ln\left(\frac{3.2v^2}{Z}\right). \quad (16)$$

Уточним область параметров задачи, когда применим использованный выше подход. Во-первых, мы использовали условие "внезапности" столкновения $v \gg v_0 \simeq \varkappa^{1/2}$. Во-вторых, частичное перекрытие двух рассмотренных областей прицельных параметров имеет место при $Z\varkappa^{1/2} \ll v^2$. В-третьих, для минимизации ошибки, вносимой при использованном способе расчета вклада в сечение от столкновений в области малых прицельных параметров ($b \lesssim r_0$), необходимо $Z \gtrsim v$. Следовательно, этот подход применим в области параметров задачи $v \lesssim Z \ll v^2/\varkappa^{1/2}$, $v \gg \varkappa^{1/2}$. Здесь стоит отметить также следующее. Поскольку активный электрон в H^- имеет по атомным масштабам очень малую энергию связи и малую орбитальную скорость, то даже столкновения с частицами с $Z \sim 1$ и $v \sim 1$ могут уже рассматриваться как столкновения с быстрыми "многозарядными" ионами, а сечение нейтрализации, H^- в таких столкновениях оцениваться по формуле (16).

Сравнение значений сечений нейтрализации, рассчитанных по формуле (16) (непрерывная линия), с экспериментальными данными по сечениям из [2] для нейтрализации H^- ионами Ne ($Z \leq 4$), Ar и Xe ($Z \leq 8$) при энергии столкновения в системе центра масс 200 keV приведено на рисунке. Результаты расчета по (16) находятся в хорошем согласии с имеющимися в этой области параметров Z, v численными расчетами других авторов [2,5–6].

В данной работе, как и в [5], для расчета сечений нейтрализации H^- использовалась волновая функция связанного состояния в форме (3). В то же время в [2,3] это сечение рассчитывалось с волновой функцией, взятой в форме (4) (уже для всех r , $0 \leq r < \infty$). Поэтому в заключение нашей работы хотелось бы коснуться вопроса о влиянии не величины рассчитываемых сечений вида волновой функции связанного состояния в области $\kappa r \lesssim 1$. Для этого нами был проведен дополнительный расчет сечения нейтрализации H^- с использованием асимптотической формы волновой функции (5) уже для всех значений r ($0 \leq r < \infty$). Нами найдено, что и в этом случае основной вклад в сечение вносит область прицельных параметров $b > \kappa^{-1}$, значения же сечений превышают рассчитанные по (16) приблизительно на 20%. Неопределенность $\sim 20\%$ в теоретических данных хотя и не превышает ошибку, с которой определяются сечения нейтрализации в эксперименте [2], является уже довольно заметной. Поэтому реалистичный выбор формы волновой функции при $\kappa r \lesssim 1$ является одним из основных источников повышения точности расчета сечений нейтрализации H^- в столкновениях с быстрыми МЗИ. Отметим, что в этом отношении использование $\varphi_0(r)$ в форме (3) является более предпочтительным в сравнении с формой (4), поскольку последняя имеет заведомо неверное поведение при малых r .

Список литературы

- [1] Melchert F., Debus W., Liehr M. et al. // Europhys. Lett. 1989. Vol. 9. P. 433.
- [2] Melchert F., Beuner M., Krudener S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 74. P. 888.
- [3] Uskov D.V. // The Physics of Electronic and Atomic Collisions. XIX Intern. Conf. Whistler (Canada), 1995. P. 687.
- [4] Kim Y.K., Inokuti M. // Phys. Rev. 1971. Vol. A3. P. 665.
- [5] Cherkani M.H., Fussen D., Chibisov M.I., Broillard F. // Phys. Rev. 1996. Vol. A54. P. 1445.
- [6] Lin J.T., Jiang T.F., Kuang J.Y., Lin C.D. // Phys. Rev. 1997. Vol. A56. P. 2020.
- [7] Presnyakov L.P., Uskov D.V. // Sov. Phys. JETP. 1984. Vol. 59. P. 515.
- [8] Keldysh L.V. // Sov. Phys. JETP. 1965. Vol. 20. P. 1307.
- [9] Voitkiv A.B., Padzersky V.A. // J. Phys. 1988. Vol. B21. P. 3369.
- [10] Войткив А.Б. и Коваль А.В. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 3. С. 188.
- [11] Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений М.: Мир, 1967.
- [12] Sidis V., Kubash C., Fussen D. // Phys. Rev. 1983. Vol. A27. P. 2431.
- [13] Tamaguchi Y. // Phys. Rev. 1954. Vol. 95. P. 1628.
- [14] Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986. 200 с.
- [15] Дыхне А.М., Юдин Г.Л. // УФН. 1978. Т. 125. С. 377.
- [16] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 2. М.: Мир, 1974.