

02

Возбуждение электронных оболочек быстрых структурных ионов и их вклад в потери энергии ионов

© Е.С. Гусаревич

Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова,
163002 Архангельск, Россия
e-mail: gusarevich@gmail.com

(Поступило в Редакцию 28 сентября 2016 г.)

На основе приближения эйконала рассмотрены потери энергии быстрых структурных ионов при столкновениях с атомами. Под структурными ионами понимаются ионы, состоящие из ядра и некоторого количества связанных с ним электронов. Показано, что учет взаимодействия ядра иона с атомом мишени в рамках приближения эйконала может заметно влиять на величину эффективного торможения иона, обусловленного возбуждением его собственных электронных оболочек.

DOI: 10.21883/JTF.2017.06.44523.2048

Исследованиям потерь энергии ионов в веществе с давних пор уделяется много внимания (см., например, [1–4] и приведенные в них ссылки) ввиду практической важности этого вопроса. Обычно в таких процессах в роли снарядов выступают [4–7] структурные ионы, состоящие из ядра и некоторого количества электронов, образующих „шубу“ иона. При нахождении потерь энергии таких ионов, помимо возбуждения частиц среды (мишени), необходимо учитывать также возбуждение электронных оболочек самого иона [5,8–14]. Другими словами, согласно [9–14], эффективное торможение структурных ионов в этом случае можно представить в виде

$$\kappa = \kappa^{(t)} + \kappa^{(p)}, \quad (1)$$

где $\kappa^{(t)}$ — эффективное торможение иона за счет возбуждения частиц среды, а $\kappa^{(p)}$ — торможение иона за счет возбуждения своих собственных электронных оболочек. Учет вклада электронной структуры ионов в эффективное торможение (слагаемое $\kappa^{(p)}$ в (1)) рассматривался ранее в рамках первого борновского приближения для случая столкновения ионов с атомарными [9,11] и молекулярными [12] мишенями. В частности, в работе [9] было показано, что учет электронной структуры снаряда может давать заметный вклад (до 10–20%) в общие потери энергии таких ионов. Непертурбативное рассмотрение потерь энергии быстрых структурных ионов при столкновениях с атомами с учетом одновременных переходов в оболочках снаряда и мишени было проведено в работе [10] в рамках метода сшивки и приближения внезапных возмущений. Обобщение развитой в [10] теории на случай столкновения структурных ионов с молекулами и наночастицами проведено в работах [13,14]. Отметим одну общую особенность борновского приближения и приближения внезапных возмущений. В рамках этих двух приближений величина $\kappa^{(p)}$ выражается, хотя и поразному, через энергию взаимодействия структурного

иона с мишенью

$$U = U_{t,n} + U_{t,e}, \quad (2)$$

где $U_{t,n}$ и $U_{t,e}$ — энергии взаимодействия мишени с ядром и электронами иона соответственно. Причем в обоих вышеуказанных приближениях слагаемое $U_{t,n}$ входит в $\kappa^{(p)}$ таким образом [9–14], что оно не влияет на переходы в электронных оболочках иона и может быть опущено при расчете эффективного торможения $\kappa^{(p)}$.

В настоящей работе на основе приближения эйконала, развит непертурбативный метод расчета эффективного торможения $\kappa^{(p)}$ быстрых нерелятивистских структурных ионов при столкновениях с атомами, в рамках которого произведен учет слагаемого $U_{t,n}$ и показано, что в определенных случаях оно может вносить заметный вклад в величину $\kappa^{(p)}$. Особой целью работы является исследование зависимости $\kappa^{(p)}$ от заряда ядра иона. Далее в статье используется атомная система единиц $\hbar = e = m_e = 1$.

Рассмотрим столкновение быстрого нерелятивистского иона с нейтральным атомом. Пусть Z и Z_a — заряды ядер иона и атома соответственно, N — число электронов на оболочках иона ($N < Z$), v — скорость столкновения, причем $v \gg v_0$, где v_0 — характерная скорость электронов на оболочках иона. Дальнейшее рассмотрение будет проведено в рамках непертурбативного подхода, поэтому никаких ограничений сверху на величину Z_a налагаться не будет. Эффективное торможение $\kappa^{(p)}$, определяющее вклад электронной структуры иона в общие потери энергии, может быть рассчитано по формуле [10]

$$\kappa^{(p)} = \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \sigma_n, \quad (3)$$

где ε_0 и ε_n — энергии начального $|0\rangle$ и конечного $|n\rangle$ состояний иона, σ_n — сечение неупругого перехода $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$. При этом конечное состояние атома мишени не отслеживается и может оказаться произвольным.

В случае многоэлектронных мишеней ($Z_a \gg 1$), как отмечено в [10], при расчете эффективного торможения $\kappa^{(p)}$ ион-атомное столкновение можно рассматривать как взаимодействие иона с распределенной в пространстве с некоторой плотностью системой зарядов (ядра атома и его электронов). Для описания распределения электронов в атоме воспользуемся моделью Дирака–Хартри–Фока–Слейтера (ДХФС) [15], согласно которой энергия взаимодействия иона с атомом имеет вид:

$$U(R, r) = \frac{Z_a Z}{R} \phi(R) - \sum_{p=1}^N \frac{Z_a}{|R + r_p|} \phi(|R + r_p|), \quad (4)$$

где $R \equiv \{X, b\}$ — координаты ядра иона относительно атома, $r_p \equiv \{r_1, r_2, \dots, r_N\}$ — набор координат электронов иона относительно его ядра, ϕ — экранирующая функция:

$$\phi(\rho) = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i \rho), \quad (5)$$

где A_i и α_i — постоянные, определенные в [15] для всех атомов с $Z_a = 1, \dots, 92$.

Для расчета сечения σ_n в (3) воспользуемся приближением эйконала и приближением Глаубера [16–18], в результате с учетом (4) получим

$$\kappa^{(p)} = N\pi \int_{q_{\text{eff}}}^{q_{\text{max}}} \langle 0 | \nabla \Phi \nabla \Phi^+ | 0 \rangle q dq, \quad (6)$$

где дифференцирование посредством ∇ производится по координатам любого из N электронов иона,

$$\nabla \Phi = \frac{1}{2\pi} \int \exp(-iqb) \exp(i\chi) \nabla \chi d^2b, \quad (7)$$

$$\chi = \sum_{p=1}^N \varphi(|b + s_p|) - Z\varphi(b), \quad \varphi(b) = \frac{2Z_a}{v} \sum_{i=1}^3 A_i K_0(\alpha_i b).$$

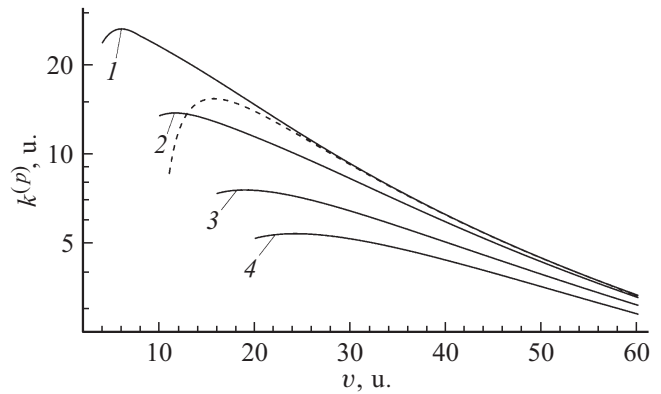
Здесь $s_p \equiv \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ — проекции координат электронов иона на плоскость параметра удара b , K_0 — функция Макдональда нулевого порядка, $q_{\text{max}} = 2v$, $q_{\text{eff}} = I_{\text{eff}}/v$, а I_{eff} — эффективная энергия ионизации снаряда, вводимая по аналогии со „средней“ энергией ионизации атомов в теории торможения Бёте [17], с той лишь разницей, что в нашем случае источником возмущения является не заряженная, а нейтральная частица — атом:

$$\frac{I_{\text{eff}}}{v} = G^{-1} \left(\frac{1}{N} \sum_n N_n G \left(\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v} \right) \right), \quad (8)$$

где N_n — силы осцилляторов [17], G^{-1} — функция, обратная к функции

$$G(q) = \int_0^q \left| \int_0^\infty J_0(pb) \exp\{-iQ\varphi(b)\} \varphi(b) b db \right|^2 p^3 dp, \quad (9)$$

где $Q = Z - N$ — заряд иона, J_0 — функция Бесселя первого рода нулевого порядка.



Зависимость эффективного торможения $\kappa^{(p)}$ водородоподобных ионов He⁺, B⁴⁺, O⁷⁺ и Ne⁹⁺ от скорости столкновения v с атомом Ag (а. е. — атомные единицы). Сплошная линия — расчет по формуле (6), штриховая линия — расчет по аналитической формуле (10). Кривая 1 — ион He⁺, 2 — B⁴⁺, 3 — O⁷⁺, 4 — Ne⁹⁺.

В качестве примера расчета эффективного торможения $\kappa^{(p)}$, мы рассмотрели столкновение с атомом водородоподобного иона. В этом случае в общей формуле (6) $N = 1$, а состояния $|n\rangle$ единственного электрона иона описываются водородоподобными волновыми функциями с эффективным зарядом Z . При этом $v_0 \sim Z$, поэтому условие применимости нашего подхода сведется к выполнению неравенства $Z/v \ll 1$. Используя формулу (6) в качестве примера, мы исследовали зависимость эффективного торможения $\kappa^{(p)}$ водородоподобных ионов He⁺, B⁴⁺, O⁷⁺ и Ne⁹⁺ на атоме Ag ($Z_a = 18$) от скорости столкновения. Результаты расчетов представлены на рисунке в виде сплошных линий. Также для сравнения мы привели расчеты $\kappa^{(p)}$ по аналитической формуле (штриховая линия), полученной в работе [10]:

$$\kappa^{(p)} = \frac{4\pi Z_a^2}{v^2} N \left[\ln 2v - \sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln(\alpha_i \sqrt{e}) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} + \Delta L_B \right], \quad (10)$$

где ΔL_B — поправка Блоха, зависящая лишь от Z_a/v . Как видно из (10), эта формула не зависит от заряда Z ядра иона, поскольку при ее выводе в [10] использовалось приближение внезапных возмущений, которое, как отмечалось ранее, не чувствительно к взаимодействию ядра иона с мишенью.

Из рисунка видно, что при малых скоростях эффективное торможение $\kappa^{(p)}$, рассчитываемое по формуле (6), оказывается зависящим от заряда ядра иона и существенно отличается от значения, получаемого по формуле (10). Это означает, что при малых v учет взаимодействия ядра иона с мишенью оказывает заметное влияние на значение $\kappa^{(p)}$, рассчитываемое

в приближении эйконала. Однако с ростом скорости различие в $\kappa^{(p)}$ для разных ионов уменьшается, что свидетельствует об уменьшении влияния вышеуказанного взаимодействия на значение $\kappa^{(p)}$. Анализируя формулу (6), мы установили, что в роли приближенного критерия необходимости учета такого взаимодействия выступает величина $\eta = Z_a Z / v$. Если $\eta \gg 1$, то учет взаимодействия ядра иона с мишенью может давать заметный вклад в эффективное торможение $\kappa^{(p)}$. Если же $\eta \leq 1$, то таким взаимодействием можно пренебрегать.

Как видно из рисунка, именно такое поведение наблюдается для ионов He^+ и B^{4+} . При малых скоростях для таких ионов $\eta \gg 1$, поэтому результаты расчетов по формулам (6) и (10) не совпадают друг с другом. Однако при больших v параметр η становится меньше или порядка единицы, поэтому наши расчетные кривые 1 и 2 (см. рисунок) асимптотически переходят в аналитическое решение (10). В случае же столкновения с атомом ионов O^{7+} и Ne^{9+} $\eta \gg 1$ при всех v (так, даже при $v = 60$: $\eta = 2, 4$ и $\eta = 3$ соответственно для O^{7+} и Ne^{9+}). Поэтому расчеты в рамках приближений внезапных возмущений и эйконала дают заметно отличающиеся друг от друга результаты во всем рассматриваемом диапазоне скоростей.

Представленные в настоящей работе расчеты проводились с использованием библиотек GSL и Cuba на вычислительном кластере САФУ.

Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ (№ 3.1726.2014/К).

Автор благодарит профессора В.И. Матвеева за обсуждение результатов работы и сделанные полезные замечания.

Список литературы

- [1] Ziegler J.F. // J. Appl. Phys / Rev. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. P. 1249.
- [2] Weaver B.A., Westphal A.J. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2002. Vol. 187. P. 285.
- [3] Sigmund P. Particle Penetration and Radiation Effects. General Aspects and Stopping of Swift Point Particles. Springer Series in Solid State Sciences. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
- [4] Sigmund P. Particle Penetration and Radiation Effects. Vol. 2: Penetration of Atomic and Molecular Ions. Switzerland: Springer, 2014.
- [5] Sigmund P.K. // Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 2006. Vol. 52. P. 557. Special issue on Ion Beam Science: Solved and Unsolved Problems / Ed. by P. Sigmund.
- [6] Geissel H., Weick H., Scheidenberger C., Bimbot R., Gardes D. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2002. Vol. 195. P. 3.
- [7] Schiwietz G., Grande P.L. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2001. Vol. 175–177. P. 125.
- [8] Montanari C.C., Miraglia J.E. // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. P. 024901.
- [9] Cabrera-Trujillo R., Cruz S.A., Oddershede J., Sabin J.R. // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 55. P. 2864.
- [10] Матвеев В.И., Сидоров Д.Б. // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. С. 569.
- [11] Tufan M.Ç., Köroğlu A., Gümüş H. // Acta Phys. Pol. A. 2005. Vol. 107. P. 459.
- [12] Tufan M.Ç., Kabadayı Ö., Gümüş H. // Radiat. Phys. Chem. 2007. Vol. 76. P. 631.
- [13] Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Рябченко С.В., Макаров Д.Н. // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88. С. 268.
- [14] Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Макаров Д.Н. // ЖЭТФ. 2009. Т. 136. С. 843.
- [15] Salvat F., Martinez J.D., Mayol R., Parellada J. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 36. P. 467.
- [16] Glauber R.J. In Lectures in Theoretical Physics. Vol. I. Ed. by W.E. Brittin. N.Y.: Interscience, 1959. 315 p.
- [17] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 768 с.
- [18] Joachain C.J., Quigg C. // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. P. 279.