

## Вероятность процессов захвата электронов у атомов аргона ионами ${}^3\text{He}^{2+}$ при различных параметрах удара

© А.А. Басалаев, М.Н. Панов<sup>¶</sup>

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

<sup>¶</sup> e-mail: m.panov@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 3 августа 2018 г.)

Измерены абсолютные величины полных сечений захвата одного и двух электронов ионами  $\text{He}^{2+}$  у атомов аргона. Определены дифференциальные сечения рассеяния быстрых атомов и однозарядных ионов гелия, образовавшихся в каждом из этих процессов: как без, так и с дополнительной ионизацией образовавшегося медленного иона аргона. Измерения проведены для ионов  $\text{He}^{2+}$  с кинетической энергией 6 keV в диапазоне углов рассеяния  $0-2.5^\circ$ . На основе измеренных дифференциальных сечений с использованием различных модельных потенциалов взаимодействия атомных частиц, вычислены сечения этих процессов как функции параметра удара. Проведено сопоставление вероятности осуществления исследуемых процессов с распределением электронной плотности различных оболочек в атоме-мишени. Показана применимость формул для экранированных кулоновских потенциалов взаимодействия для описания рассеяния частиц, захвативших электроны.

DOI: 10.21883/JTF.2019.03.47166.299-18

### Введение

Измерения абсолютных дифференциальных сечений рассеяния быстрых налетающих ионов  ${}^3\text{He}^{2+}$  на многоэлектронном атоме при осуществлении различных элементарных процессах изменения зарядовых и электронных состояний позволяет проверить правильность используемых при расчетах потенциалов взаимодействия альфа-частиц с многоэлектронными атомами, сопоставить угол рассеяния налетающих частиц с параметром удара и сравнить сечения, соответствующие этому параметру, с полученными экспериментально сечениями процессов изменения зарядовых состояний. Последнее важно для подтверждения правильности расчетов сечений при использовании метода параметра удара, когда движение тяжелых ядер можно рассматривать классически, а электронные переходы — квантово-механически.

В случаях малых углов рассеяния ( $\theta < 3^\circ$ ) потенциальная энергия взаимодействия частиц значительно меньше кинетической энергии иона-снаряда и, как следствие, параметр удара  $\rho$  и расстояние наибольшего сближения частиц практически близки друг к другу по величине. При этом расстояния сближения частиц соответствуют  $1-2a_0$  [1,2].

При столкновениях ионов  ${}^3\text{He}^{2+}$  с атомами аргона возможно осуществление целого ряда неупругих процессов изменения зарядовых состояний тяжелых частиц. В keV-диапазоне энергий столкновений наибольшими по величине сечения являются процессы захвата одного или двух электронов налетающим ионом, которые могут сопровождаться дополнительной ионизацией образовавшегося медленного иона аргона (см. таблицу).

Процессы № 1–3 являются экзотермическими, имеют большие сечения и идут с преобразованием потенциальной энергии электронов, участвующих в процессе, в кинетическую энергию тяжелых частиц. Процесс № 4 захвата двух электронов с ионизацией хотя является эндотермическим (дефект реакции  $\Delta Q = -5.3$  eV), но имеет заметное сечение. Процессы № 5, требующие значительно больших затрат кинетической энергии налетающего иона (свыше 30 eV), имеют по сравнению с процессами № 1–4 малые величины сечений. Таким образом, при сравнении суммарного сечения всех неупругих процессов с геометрическими размерами мишени, определяемыми параметра удара, вкладом процессов № 5 в полное сечение можно пренебречь, как величинами меньшими погрешности эксперимента.

Измерения дифференциальных сечений рассеяния продуктов реакции проводились при столкновении ионов  $\text{He}^{2+}$  с кинетической энергии 6 keV в диапазоне углов рассеяния в лабораторной системе  $\theta \leq 2.5^\circ$ , что позволяет детально исследовать угловые зависимости при разрешении детектора в несколько arcmin.

Целью настоящей работы является, во-первых, измерение абсолютных величин дифференциальных сечений рассеяния налетающих частиц, образующихся в процессах захвата и захвата с ионизацией. Во-вторых, сопоставление вероятности исследуемых процессов с распределением электронной плотности атома мишени, что позволяет провести анализ роли различных электронных оболочек атома мишени при осуществлении этих процессов. И наконец, оценка применимости различных потенциалов взаимодействия частиц для вычисления вероятности  $W(\rho)$  этих процессов как функции параметра удара.

## Процессы изменения зарядового состояния сталкивающихся частиц

№	Процесс	Название процесса
1	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^+ + \text{Ar}^+$	одноэлектронный захват
2	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^+ + \text{Ar}^{2+} + e^-$	одноэлектронный захват с ионизацией
3	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^0 + \text{Ar}^{2+}$	двуэлектронный захват
4	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^0 + \text{Ar}^{3+} + e^-$	двуэлектронный захват с ионизацией
5a	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^+ + \text{Ar}^{n+} + (n-1)e^-$ $n \geq 3$	одноэлектронный захват с $n$ -кратной ионизацией
5b	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^0 + \text{Ar}^{n+} + (n-2)e^-$ $n \geq 4$	двуэлектронный захват с $n$ -кратной ионизацией
5c	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{Ar}^{n+} + ne^-$ $n \geq 1$	$n$ -кратная ионизация

## 1. Экспериментальная установка и методика измерений

Измерения сечений рассеяния при столкновении  ${}^3\text{He}^{2+}$  с атомами Ar проводились на установке, подробно описанной в предыдущих работах [3,4]. Здесь приведены лишь ее характеристики, определяющие качество получаемых результатов измерений.

Для получения пучка двухзарядных ионов гелия использовался изотоп  ${}^3\text{He}$ , что позволяло исключить примесь молекулярных ионов водорода  $\text{H}^{2+}$  в первичном пучке  ${}^4\text{He}^{2+}$ . Угловая расходимость первичного ионного пучка составляла  $\Delta\theta \approx 4'$ . Экспериментально эта величина определялась при измерении профиля первичного пучка ионов  $\text{He}^{2+}$ . В качестве мишени использовалась эффузионная струя газа, поступающая в область взаимодействия из капилляра длиной 20 мм и диаметром 1 мм. При измерении дифференциальных сечений процессов суммарное угловое разрешение прибора составляло  $\Delta\theta \approx 8'$ . Оно обуславливалось расходимостью первичного пучка, конечным разрешением коллиматора детектора рассеянных частиц и геометрическими размерами мишени. Диапазон исследуемых углов рассеяния быстрых частиц составлял  $-1^\circ \leq \theta \leq 2.5^\circ$ .

Для регистрации элементарного процесса использовался электростатический анализатор зарядового состояния налетающих частиц после их взаимодействия, времяпролетный анализатор для разделения по заряду ионов отдачи  $\text{Ar}^{n+}$  и временная корреляция импульсов регистрации частиц с соответствующих детекторов. Максимальная кинетическая энергия ионов отдачи Ar при рассеянии налетающих частиц на угол  $3^\circ$  составляла  $\approx 1\text{eV}$ , что позволяло обеспечить их полный сбор в детектор. Используемый масс-спектрометр имел 100% прозрачность для частиц с начальной кинетической энергией до 3 eV.

Для точного определения нулевого угла рассеяния измерялась интенсивность счета совпадений относительно экспериментально определяемого нулевого угла для каждого элементарного процесса. Полученная кривая аппроксимировалась кривой нормального распределения, и положение ее максимума принималась за нулевой угол  $\theta = 0^\circ$  дифференциального сечения исследуемых процессов.

Экспериментальные ошибки определялись статистической точностью определения регистрируемых вели-

чин (от 0.1 до 5% в зависимости от угла рассеяния) и точностью измерений абсолютных величин сечений элементарных процессов  $\pm 10\%$ .

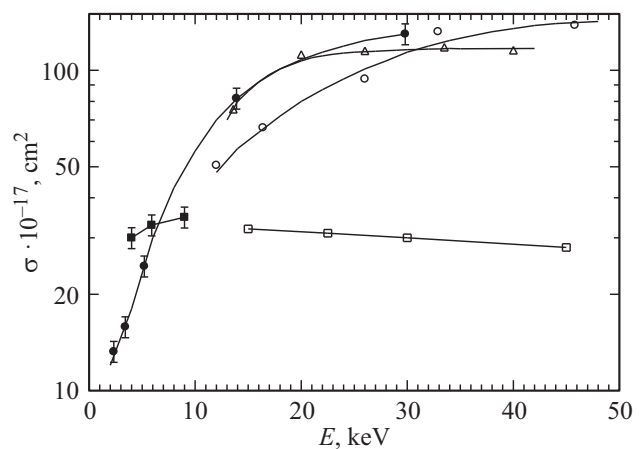
## 2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

### 2.1. Полные сечения элементарных процессов

Непосредственно в эксперименте измерялись относительные величины дифференциальных сечений рассеяния  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)$  образующихся ионов  $\text{He}^+$  или атомов  $\text{He}^0$ . Для получения абсолютных величин сечений процессов проводилась нормировка измеряемых относительных дифференциальных сечений на абсолютные величины полных сечений соответствующих процессов согласно выражению (1):

$$\sigma^{22-m} = 2\pi \int_0^\pi \sum_{n=1}^3 \frac{d\sigma_{0n}^{22-m}}{d\Omega}(\theta) \sin(\theta) d\theta, \quad (1)$$

где  $\sigma^{22-m}$  — полное сечение захвата одного или двух электронов ( $m = 1, 2$ ),  $d\sigma_{0n}^{22-m}/d\Omega$  — относительное дифференциальное сечение образования медленных



**Рис. 1.** Полные сечения процессов захвата одного или двух электронов при столкновении ионов  $\text{He}^{2+}$  с атомами Ar. Сумма сечений процессов № 1 + 2 из таблицы: ● — настоящая работа,  $\triangle$  — [6],  $\circ$  — [5]; сумма сечений процессов № 3 + 4: ■ — настоящая работа,  $\square$  — [7].

ионов аргона зарядности  $n$  при фиксированной зарядности  $(2 - m)$  быстрой частицы.

Большинство работ по измерениям полных сечений одноэлектронного и двуэлектронного захвата выполнено для области высоких энергий ионов  $\text{He}^{2+}$  (десятки и более keV) и лишь несколько в диапазоне keV-энергий. Измеренные нами потенциальным методом абсолютные величины полных сечений захвата одного и двух электронов (рис. 1) удовлетворительно согласуются с имеющимся в литературе данными [5–7]. Для абсолютной калибровки измеренных дифференциальных сечений при энергии 6 keV налетающих ионов  $\text{He}^{2+}$  было принято, что полное сечение одноэлектронного захвата равно  $2.93 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ , а сечение двуэлектронного захвата —  $3.29 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  (рис. 1).

## 2.2. Дифференциальные сечения рассеяния

На основании данных измерений относительных дифференциальных сечений и абсолютных величин полных сечений захвата одного и двух электронов получены абсолютные величины дифференциальных сечений рассеяния налетающих частиц ( $\text{He}^+$  и  $\text{He}^0$ ), приведенные на рис. 2 (процессы № 1 и 2) и рис. 3 (процессы № 3 и 4). При малых углах рассеяния основными по величине являются процессы № 1 и 3, не сопровождающиеся дополнительной ионизацией атомов мишени. Однако сечения этих процессов с ростом угла рассеяния налетающего иона убывают быстрее сечений процессов № 2 и 4. В результате при угле рассеяния в  $20'$  для одноэлектронного захвата и  $40'$  для процесса двуэлектронного захвата процессы с дополнительной ионизацией становятся более вероятными.

Для установления соответствия между углом рассеяния и параметром удара необходимо знать значения потенциала взаимодействия, вызывающего рассеяние налетающей частицы. В работах [1,8,9] был предложен ряд

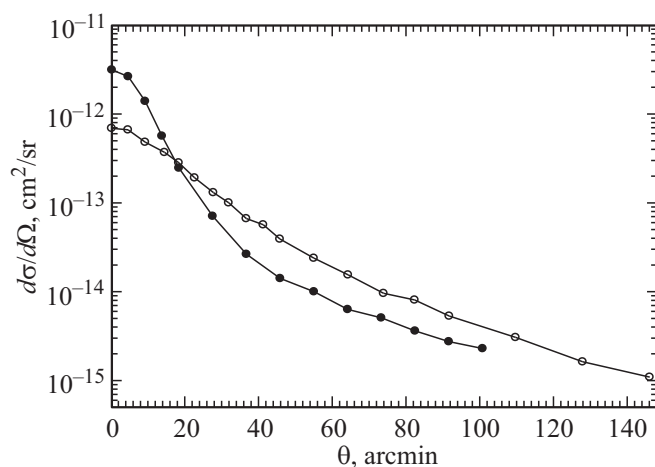


Рис. 2. Дифференциальные сечения рассеяния ионов  $\text{He}^+$ , образованных в процессах одноэлектронного захвата ионами  $\text{He}^{2+}$  с кинетической энергией 6 keV: ● — процесс № 1, ○ — процесс № 2.

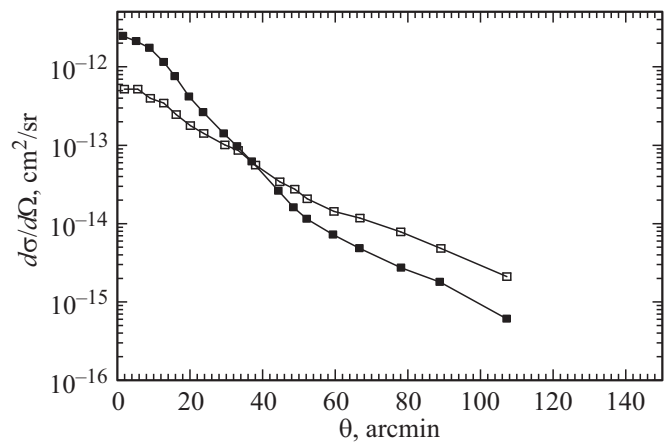


Рис. 3. Дифференциальные сечения рассеяния в процессах захвата двух электронов ионами  $\text{He}^{2+}$ : ■ — процесс № 3, □ — процесс № 4.

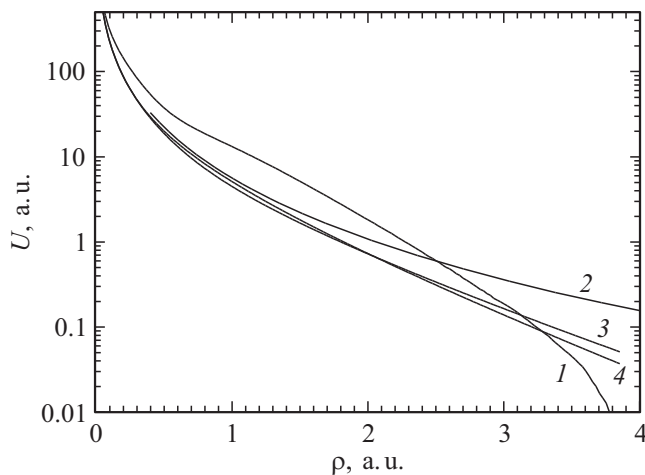
модельных выражений для потенциалов взаимодействия частиц, полученных на основе анализа целого набора экспериментальных зависимостей дифференциальных сечений рассеяния при столкновении большого количества пар атомных частиц. В работах [1,8] для расчетов использовалось выражение в виде экранированных кулоновских потенциалов:

$$U = \sum_k \frac{Z_k}{r} \exp(-A_k r/a), \quad (2)$$

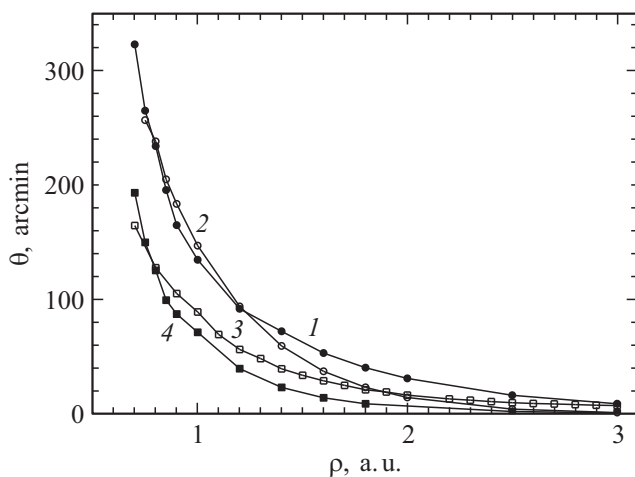
где  $r$  — межъядерное расстояние,  $a$  — длина экранирования, подобная длине экранирования в выражении потенциала Томаса–Ферми,  $Z_k$  и  $A_k$  — подгоночные параметры. Члены выражения (2) для различных  $k$  можно рассматривать как отражение вклада в экранирование различных электронных оболочек взаимодействующих атомных частиц.

При столкновении иона  $\text{He}^{2+}$  с атомом аргона рассеяние возможно рассматривать как результат кулоновского взаимодействия при меняющемся расстоянии сближения  $\text{He}^{2+}$  с ядром атома Ar, экранированного электронами, находящимися при меньших расстояниях от аргона, чем расстояние сближения частиц и в пренебрежении поляризацией атома мишени. Для распределения электронов по радиусу можно использовать формулу Томаса–Ферми [10], либо результаты вычислений на основе самосогласованного поля Хартри–Фока [11]. Результаты расчета с использованием этих потенциалов взаимодействия приведены на рис. 4.

На рис. 5 представлены результаты расчета функции отклонения (зависимости угла рассеяния ионов от параметра удара) для ионов  $\text{He}^{2+}$  с кинетической энергией 6 keV при использовании различных модельных потенциалов. Использование универсальных потенциалов взаимодействия [1,2] для больших параметров удара приводит к меньшим значениям углов рассеяния по сравнению с потенциалом взаимодействия ядра атома гелия и ядра атома аргона, экранированного электронами согласно



**Рис. 4.** Зависимость различных модельных потенциалов взаимодействия иона  $\text{He}^{2+}$  с атомом аргона от расстояния сближения: 1 — потенциал Хартри–Фока [11], 2 — Томаса–Ферми [10], 3 — из работы [1], 4 — из работы [2].



**Рис. 5.** Функции отклонения ионов  ${}^3\text{He}^{2+}$  в зависимости от потенциала взаимодействия: 1 — потенциал Томаса–Ферми [10], 2 — метод Хартри–Фока [11], 3 — потенциал из работы [1], 4 — потенциал из работы [2].

распределению Томаса–Ферми или Хартри–Фока. Последние дают близкие значения функции отклонения, так как для вычисления распределения электронов по радиусу используют условие минимума потенциальной энергии электронов.

### 3. Анализ роли различных электронных оболочек в процессах захвата электрона

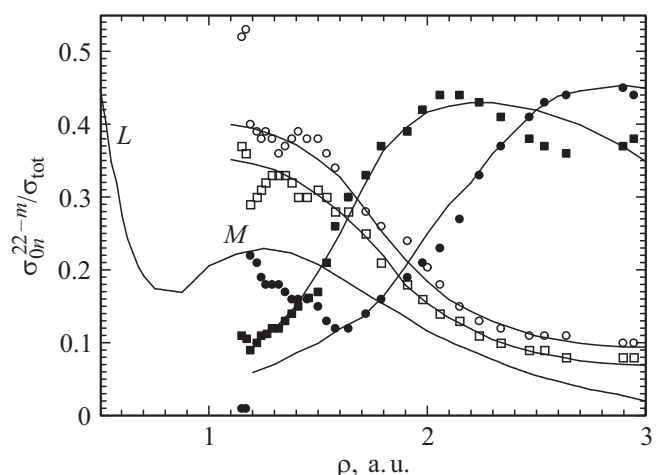
Для сопоставления вероятностей различных процессов при данном параметре удара и электронной плотности отдельных оболочек атома аргона использовались

данные, полученные для потенциала Хартри–Фока, показывающие деление электронов по оболочкам.

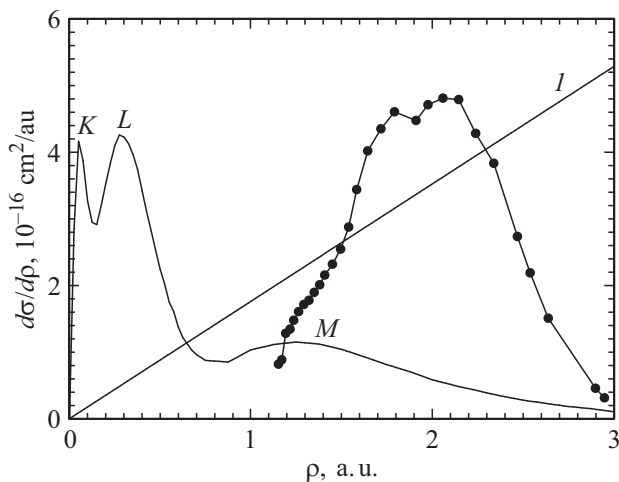
На рис. 6 представлены отношения величин сечений процессов № 1–4 к величине суммы полных сечений процессов захвата одного и двух электронов. Кривая, обозначенная  $LM$ , представляет распределение электронов по радиусу в самосогласованном поле [11]. Из рис. 6 видно, что исследованный диапазон углов рассеяния соответствует сближению частиц на расстояния в пределах внешней  $M$ -оболочки аргона. Процесс одноэлектронного захвата (1) преобладает при  $\rho \geq 2.5$  а.у. Это соответствует областям атома Ar с малой электронной плотностью. В области параметров удара  $\rho \approx 1.7$ – $2.3$  а.у. основным по величине сечения становится процесс двойного захвата (2). Сечения процессов захвата с образованием свободных электронов (2) и (4) имеют сходную зависимость от величины параметра удара. Это может свидетельствовать об одинаковом механизме осуществления этих двух процессов.

Рассеяние налетающих ионов на углы  $\theta \approx 120'$ – $150'$  соответствует параметру удара  $\rho \approx 1.15$  а.у. Это означает, что в эксперименте не фиксировались частицы, рассеянные при еще меньших параметрах удара, где их интенсивность была ниже чувствительности прибора. Геометрическое сечение этой ненаблюдаемой зоны  $\theta \geq 150'$  составляет примерно  $10^{-16}$  см<sup>2</sup>.

Для оценки применимости выбранного потенциала взаимодействия для вычисления углов рассеяния мы сравнили дифференциальные по параметру удара сечения рассеяния с геометрическими размерами атома-мишени. На рис. 7 кривая 1 представляет дифференциальное по параметру удара суммарное сечение всех четырех процессов захвата. Площадь под ней соответствует абсолютной величине сечения процессов захвата  $\sim 5.21 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup>. Подавляющая часть сечений захвата соответствует взаимодействию налетающего иона с электронами внешней оболочки.



**Рис. 6.** Относительные вероятности процессов захвата электрона при различных величинах параметра удара: ● — процесс № 1, ○ — процесс № 2, ■ — процесс № 3, □ — процесс № 4.



**Рис. 7.** Сумма вероятностей сечений всех неупругих процессов (процессы № 1–4) при различных параметрах удара. Кривые *KLM* —  $dQ/d\rho$  — распределение электронов по радиусу от ядра атома аргона в соответствующих оболочках в относительных единицах. Прямая *1* —  $dS/d\rho = 1.76\rho$ , где  $S$  — площадь круга радиуса  $\rho$ .

Площадь под прямой  $d\sigma/d\Omega = 1.7583\rho$  соответствует геометрической площади мишени радиуса  $\rho$ . Наблюдающееся в области  $\rho \sim 2$  а.у. превышение кривой сечения над прямой  $d\sigma/d\Omega$  может являться следствием погрешности измерений полных сечений захвата и дифференциальных сечений в области малых углов рассеяния, обусловленных конечным угловым разрешением. К такому же эффекту может привести занижение величины угла рассеяния в области параметров удара более 2 а.у. при использовании в расчете выбранного потенциала взаимодействия. Использование для обработки экспериментальных данных универсальных потенциалов [1,8–10], дающих при заданном параметре удара меньшие величины углов рассеяния по сравнению с потенциалом Хартри–Фока, сдвигает экспериментальную кривую в область малых параметров удара, что приводит к еще большему несовпадению сечения с геометрическими размерами.

## Заключение

На основании экспериментальных данных определены сечения процессов № 1–4 как функции параметра удара. Показано, что захват одного и двух электронов происходит при сближении частиц на расстояние внешней *M*-оболочки атома аргона. Процессы захвата с ионизацией начинают преобладать при приближении частиц к *L*-оболочке. При нормировке дифференциальных сечений на абсолютную величину полных сечений следует принимать во внимание размер ненаблюдаемой части атома-мишени. Для описания рассеяния кулоновского заряда более адекватным является взаимодействие с кулоновским ядром атома мишени, экранированным

электронами согласно, плотность которых определяется физическими расчетами [11].

## Список литературы

- [1] Sidis V. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. 1972. Vol. 5. P. 1517–1528.
- [2] Jonson L.K., Gao R.S., Hakes C.L., Smith A., Stebbings R.F. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 4920–4925.
- [3] Афросимов В.В., Басалаев А.А., Огурцов Г.Н., Панов М.Н. // ЖТФ. 2014. Т. 84. Вып. 5. С. 14–20.
- [4] 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.
- [5] Bayfield J.E., Khayrallah G.A. // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 11. P. 920–929.
- [6] Shah M.B., Gilbody H.B. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. 1974. Vol. 7. N 2. P. 256–268.
- [7] Rudd M.E., Goffe T.V., Itoh A. // Phys. Rev. A. 1985. Vol. 32. P. 2128–2133.
- [8] Spranger T., Zapukhlyak M., Kirchner T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. 2007. Vol. 40. P. 1081–1088.
- [9] Martinez H., Abarcon E.B., Amaya-Tara A. // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 78. P. 062715.
- [10] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. М.: Наука, 1988. Т. 3. 767 с.
- [11] Zahlenwerte und Funktion, Atom- und Molekularphysik / Herausgegeben Arnold Eucken. Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1950. Band 1. Teil 1. S. 296.