

02

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

© А.А. Басалаев, 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 3 августа 2018 г.)

Измерены абсолютные величины полных сечений захвата одного и двух электронов ионами 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 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 ρ 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 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	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^+ + \text{Ar}^{n+} + (n-1)e^- \quad n \geq 3$	одноэлектронный захват с n -кратной ионизацией
5b	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^0 + \text{Ar}^{n+} + (n-2)e^- \quad n \geq 4$	двуэлектронный захват с n -кратной ионизацией
5c	$\text{He}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{Ar}^{n+} + ne^- \quad n \geq 1$	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 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 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 Ar^{n+} и временная корреляция импульсов регистрации частиц с соответствующих детекторов. Максимальная кинетическая энергия ионов отдачи Ar при рассеянии налетающих частиц на угол 3° 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 He^+ или атомов 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 σ^{22-m} — полное сечение захвата одного или двух электронов ($m = 1, 2$), $d\sigma_{0n}^{22-m}/d\Omega$ — относительное дифференциальное сечение образования медленных

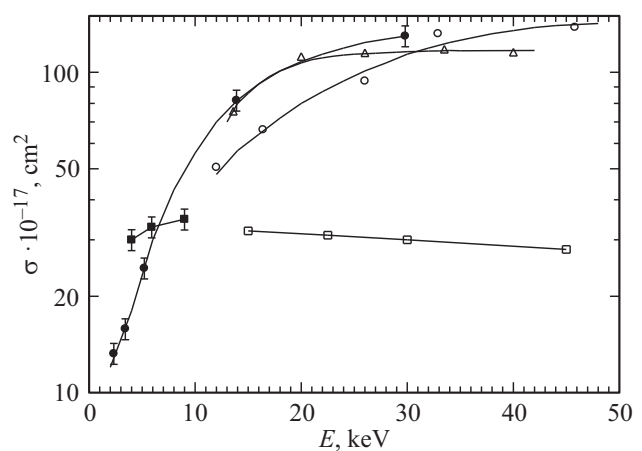


Рис. 1. Полные сечения процессов захвата одного или двух электронов при столкновении ионов He^{2+} с атомами Ar. Сумма сечений процессов № 1 + 2 из таблицы: ● — настоящая работа, △ — [6], ○ — [5]; сумма сечений процессов № 3 + 4: ■ — настоящая работа, □ — [7].

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 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 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 (He^+ и 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

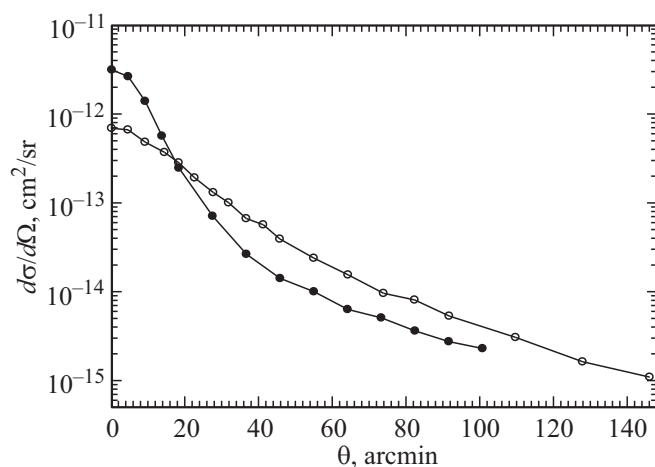


Рис. 2. Дифференциальные сечения рассеяния ионов He^+ , образованных в процессах одноэлектронного захвата ионами He^{2+} с кинетической энергией 6 keV: ● — процесс № 1, ○ — процесс № 2.

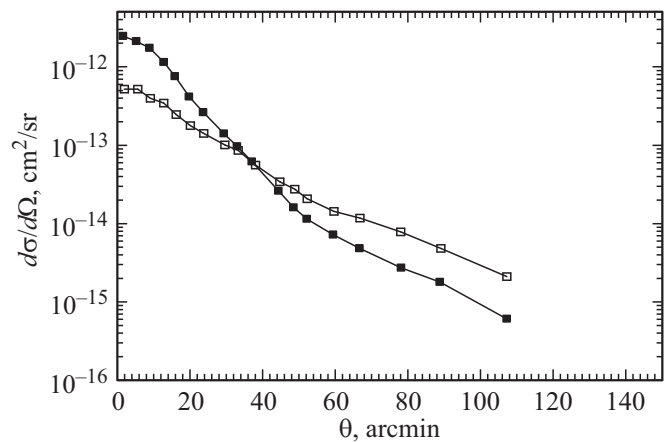


Рис. 3. Дифференциальные сечения рассеяния в процессах захвата двух электронов ионами He^{2+} : ■ — процесс № 3, □ — процесс № 4.

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 He^{2+} с атомом аргона рассеяние возможно рассматривать как результат кулоновского взаимодействия при меняющемся расстоянии сближения 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 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

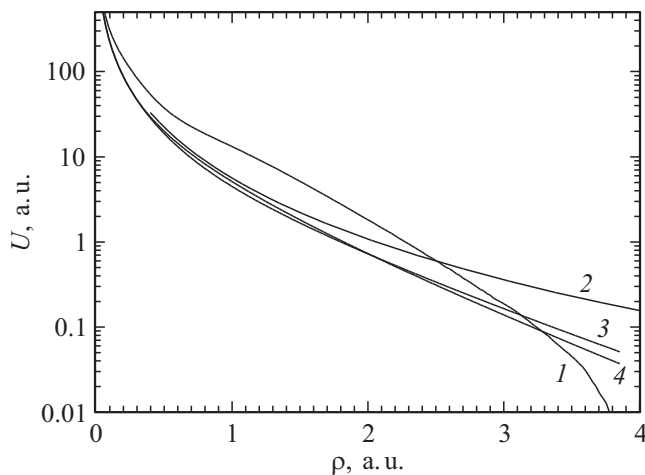


Рис. 4. Зависимость различных модельных потенциалов взаимодействия иона He^{2+} с атомом аргона от расстояния сближения: 1 — потенциал Хартри–Фока [11], 2 — Томаса–Ферми [10], 3 — из работы [1], 4 — из работы [2].

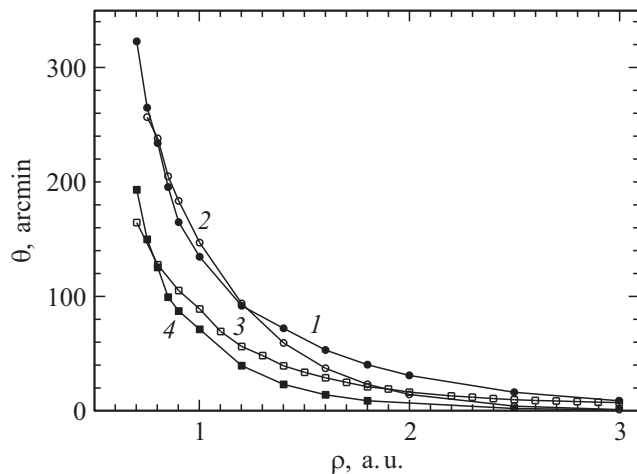


Рис. 5. Функции отклонения ионов ${}^3\text{He}^{2+}$ в зависимости от потенциала взаимодействия: 1 — потенциал Томаса–Ферми [10], 2 — метод Хартри–Фока [11], 3 — потенциал из работы [1], 4 — потенциал из работы [2].

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} см².

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 $\sim 5.21 \cdot 10^{-16}$ см². Подавляющая часть сечений захвата соответствует взаимодействию налетающего иона с электронами внешней оболочки.

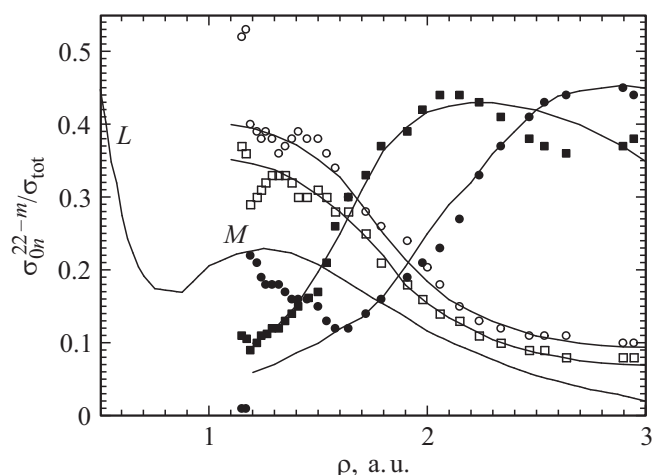


Рис. 6. Относительные вероятности процессов захвата электрона при различных величинах параметра удара: ● — процесс № 1, ○ — процесс № 2, ■ — процесс № 3, □ — процесс № 4.

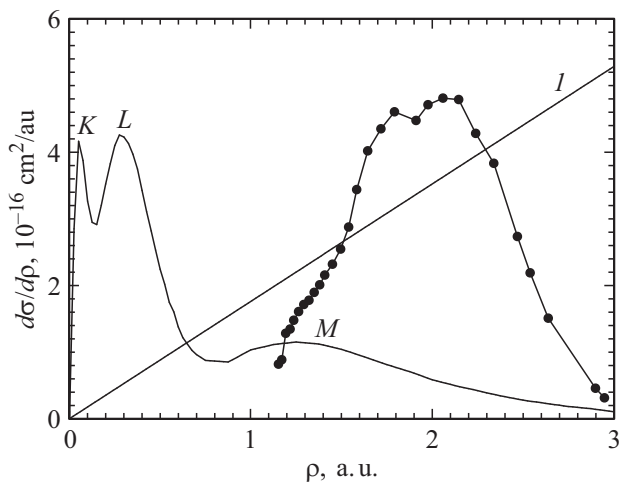


Рис. 7. Сумма вероятностей сечений всех неупругих процессов (процессы № 1–4) при различных параметрах удара. Кривые *KLM* — $dQ/d\rho$ — распределение электронов по радиусу от ядра атома аргона в соответствующих оболочках в относительных единицах. Прямая *1* — $dS/d\rho = 1.76\rho$, где S — площадь круга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

Площадь под прямой $d\sigma/d\Omega = 1.7583\rho$ соответствует геометрической площади мишени радиуса ρ . 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.