02.2

Вероятность процесса захвата двух электронов быстрым ионом He²⁺ у атома Хе при различных параметрах удара

© А.А. Басалаев, М.Н. Панов[¶], О.В. Смирнов

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

Поступило в Редакцию 16 июня 2021 г. В окончательной редакции 6 июля 2021 г. Принято к публикации 6 июля 2021 г.

Измерены дифференциальные сечения рассеяния атомов гелия, образующихся при столкновении ионов He^{2+} с кинетическими энергиями 1.97, 3.00 и 7.17 keV/a.m.u. с атомами Хе в процессах с образованием медленных ионов ксенона с зарядами 2–4. Вычислена функция отклонения налетающих ионов. Определена вероятность осуществления всех этих процессов при различных величинах параметра удара сталкивающихся частиц. Определена роль электронных оболочек атома Xe 5(s, p) и 4(s, p, d) для процесса захвата двух электронов в зависимости от скорости сближения сталкивающихся частиц, параметра удара и зарядности образующихся ионов ксенона.

Ключевые слова: захват двух электронов, захват с ионизацией, дифференциальное сечение рассеяния, параметр удара.

DOI: 10.21883/PJTF.2021.20.51611.18921

Исследования нейтрализации ионов He²⁺ при взаимодействии с многоэлектронными атомами важны для создания моделей их взаимодействия с атомами конструкционных материалов (например, вольфрама), содержащихся в установках с высокотемпературной плазмой, но сложных для получения мишеней в лабораторных условиях. Особенностью электронных оболочек таких атомов является близость по энергии связи электронов внешней и нижележащей оболочек. Подобной структурой электронных оболочек обладает атом ксенона.

В момент образования альфа-частицы в установках управляемого термоядерного синтеза обладают высокими кинетическими энергиями и, следовательно, высокими скоростями столкновения с компонентами плазмы. Однако после термализации их скорости соответствуют адиабатическому взаимодействию между частицами, при котором столкновение может рассматриваться как перестройка электронных уровней двухатомного квазимолекулярного иона. В результате этой перестройки при разлете частиц происходит изменение их зарядовых состояний. Таким образом, в этой области скоростей для понимания взаимодействия частиц важна их электронная структура. В рамках такого подхода можно исходя из величин углов рассеяния образующихся атомов Не вычислить вероятности процессов при различных минимальных расстояниях сближения частиц (параметрах удара) и сопоставить расстояния с размерами электронных оболочек.

Для относительно легких мишеней, например для атома Ar, энергия связи внутренних электронов $2s^22p^6$ составляет порядка 240 eV [1]. В результате процесс перехода электрона из оболочки атома Ar с n = 2 к иону гелия практически невозможен в рассматриваемом

диапазоне скоростей столкновений. Процессы изменения зарядовых состояний в этом случае затрагивают лишь электроны внешней оболочки. В то же время 4d-электроны в оболочке Хе находятся на глубине порядка 70 eV [1]. Таким образом, для альфа-частицы высокую вероятность может иметь процесс захвата двух электронов, один из которых принадлежит 4d-оболочке, а именно процесс

$$\operatorname{He}^{2+} + \operatorname{Xe}(4d^{10}5s^25p^6) \to \operatorname{He}(1s^2) + \operatorname{Xe}^{2+}(4d^95s^25p^5),$$

имеющий дефект резонанса $\sim 3 \, \mathrm{eV}$ [2].

Целью настоящей работы является изучение механизма процессов изменения зарядового состояния партнеров столкновений, сопровождающих захват двух электронов, а также выявление роли электронов внутренних оболочек тяжелых атомов в таких процессах. Для этого измерялись дифференциальные сечения рассеяния образующихся атомов гелия. Были выбраны три энергии налетающих альфа-частиц: 1.97, 3.00 и 7.17 keV/a.m.u. Для каждой энергии измерялись сечения рассеяния атомов гелия, образующихся в трех следующих элементарных процессах:

$$\text{He}^{2+} + \text{Xe}^{0} \rightarrow \text{He}^{0} + \text{Xe}^{(2+n)+} + ne^{-}, \ n = 0-2.$$

Для обозначения элементарного процесса используются заряды партнеров столкновения до и после взаимодействия $\{200(2+n)\}$.

Измерения были проведены на установке, подробно описанной в [3]. Здесь укажем лишь характеристики установки, важные при измерении дифференциальных сечений. В эксперименте использовался коллимированный пучок быстрых ионов He^{2+} с сечением 1×1 mm и угловой расходимостью 4', которая непосредственно



Рис. 1. Дифференциальные по углу рассеяния налетающего иона сечения процессов, осуществляющихся при захвате двух электронов ионами He^{2+} у атомов Xe: $I = \{2002\}, 2 = \{2003\}, 3 = \{2004\}$. Энергия столкновения, keV/a.m.u.: a = 1.97, b = 3.00, c = 7.17.

определялась в начале измерений при отсутствии рассеяния на газовой мишени. Мишень атомов Хе создавалась струей газа из капилляра с диаметром 1 mm. Это обеспечивало в области пересечения с ионным пучком мишень нейтральных атомов длиной ~ 1 mm. Входная щель детектора нейтральных атомов имела диаметр также 1 mm и находилась на расстоянии 60 cm от области взаимодействия. Все эти размеры определяли суммарное угловое разрешение прибора в 7'. Образующиеся медленные ионы ксенона извлекались из области взаимодействия электрическим полем напряженностью 50 V/cm и разделялись по заряду по времени их пролета до детектора ионов отдачи. Отклонение первичного пучка ионов He²⁺ на пути в 1 mm было пренебрежимо мало и не искажало измеряемые дифференциальные сечения рассеяния.

Дифференциальные сечения рассеяния измерялись в относительных величинах, приведенных для каждой энергии He²⁺ к одинаковой плотности газовой мишени и интенсивности пучка ионов He²⁺. Абсолютные величины находились из отношения абсолютных величин полных сечений образования медленных ионов определенного заряда в процессе захвата двух электронов из нашей работы [4] и дифференциального сечения согласно соотношению

$$\sigma = 2\pi \int_{0}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) \sin(\theta) d\theta.$$
(1)

Результаты этих измерений приведены на рис. 1.

Величины дифференциальных сечений процессов захвата двух электронов {2002} и захвата двух электронов с ионизацией {2003} имеют максимум при минимальном угле рассеяния, т.е. при больших параметрах удара. Оба эти процесса экзотермические и могут осуществляться за счет потенциальной энергии иона ${
m He}^{2+}$. При увеличении угла рассеяния до $\sim 1^\circ$ сечения этих процессов уменьшаются более чем на два порядка. Такая зависимость величин сечений от угла рассеяния сохраняется с ростом кинетической энергии налетающих ионов. При всех исследованных энергиях и углах рассеяния сечение процесса {2003} превосходит по величине сечение {2002}. В процессе {2002} уменьшение потенциальной энергии в квазимолекулярной системе (XeHe)²⁺ преобразуется в энергию возбуждения иона ксенона и в увеличение кинетической энергии партнеров столкновения. В случае процесса захвата с ионизацией (процесс {2003}) появляются каналы реакции, связанные с образованием свободного электрона.

Иная завиасимость наблюдается для {2004} — эндотермического процесса нейтрализации налетающего иона гелия, сопровождающегося образованием двух свободных электронов. При низкой скорости сближения частиц, соответствующей кинетической энергии иона He^{2+} 1.97 keV/a.m.u., дифференциальное сечение рассеяния даже растет при увеличении угла рассеяния от 0 до 40 arcmin, достигая максимума $4.4 \cdot 10^{-14}$ cm²/sr. При энергии 3.0 keV/a.m.u. в том же диапазоне углов рассеяния наблюдаются слабый рост дифференциального сечения с увеличением θ и существенно более медленное по сравнению с сечениями других процессов уменьше-



Рис. 2. Зависимости вероятности элементарных процессов от межъядерного расстояния $(1 - P_{2002}, 2 - P_{2003}, 3 - P_{2004})$ и распределение плотности электронов внешней оболочки в атоме Хе в зависимости от расстояния до ядра атома $(4 - n = 4\Sigma s, p, d; 5 - n = 5\Sigma s, p)$. Энергия столкновения, keV/a.m.u.: a - 1.97, b - 3.00, c - 7.17.

ние этого сечения в диапазоне θ от 40 до 70 агстіп всего лишь в 1.7 раза. При энергии столкновения 7.17 keV/a.m.u. при углах рассеяния больше 30 агстіп сечение процесса {2004} становится больше не только сечения процесса {2002}, но и сечения процесса {2003} (рис. 1, *c*).

На основании измеренных величин дифференциальных сечений рассеяния можно определить вероятности осуществления процесса в зависимости от расстояния наибольшего сближения сталкивающихся частиц, преобразуя зависимость процесса от угла θ в зависимость от параметра удара R

$$P(R) = \frac{\pi}{2(180\cdot 60)^2 R} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)\theta(R)\frac{d\theta}{dR}$$
(2)

(при углах рассеяния менее 1° параметр удара и расстояние наибольшего сближения практически совпадают [5]). Первый множитель в выражении (2) возникает в результате перевода величин сечений, выраженных в единицах cm²/sr, в сечения в cm²/sq.arcmin. Остальные множители отражают пересчет сечения как функции θ в сечение как функцию *R*. Как видно из выражения (2), для проведения расчетов необходимо найти функцию отклонения $\theta(R)$ и ее производную $d\theta/dR$. При вычислении функции отклонения использовалась модель кулоновского взаимодействия налетающего иона гелия с зарядом 2e и заряда ядра атома ксенона, экранированного электронами, находящимися на расстояниях, меньших, чем расстояние между сталкивающимися частицами. При реализации модели было использовано распределение электронов по радиусу в атоме ксенона, вычисленное методом Хартри-Фока. Функция отклонения для ионов гелия с кинетической энергией 1.97 keV/a.m.u. вычислена в диапазоне параметров удара 1.3-3.5 а.u. с шагом 0.1 а.u. Она хорошо описывается выражением

$$\theta = 1763.44 \frac{1.97}{E} \exp(-1.87095R), \tag{3}$$

где E — энергия иона He²⁺ (в keV/a.m.u.).

Вероятности осуществления элементарных процессов захвата двух электронов с образованием ионов Xe^{2+} , Xe^{3+} и Xe^{4+} в зависимости от величины параметра удара

. . .

представлены на рис. 2. Там же штриховыми линиями показана плотность распределения электронов в зависимости от расстояния до ядра атома Хе в оболочках $5s^25p^6$ и $4s^24p^64d^{10}$.

При всех исследованных энергиях столкновений с наибольшей вероятностью осуществляется процесс захвата двух электронов с ионизацией {2003}. Вероятности процессов {2002} и {2003} имеют максимумы при параметрах удара, соответствующих максимуму электронной плотности оболочки 5s²5p⁶. При энергии столкновений 1.97 keV/a.m.u. максимум вероятности процесса {2004} также соответствует максимуму плотности электронов внешней оболочки. Однако с ростом энергии столкновений для этого процесса положение максимума вероятности сдвигается в область меньших параметров удара, при этом происходит значительный рост вероятности процесса {2004}. Как следует из рис. 2, с, при параметрах удара ~ 1.5 а.u. ион He^{2+} достигает электронов 4*d*-оболочки. Очевидно, что вовлечение в процесс электронов внутренней оболочки и приводит к росту вероятности образования многозарядных ионов Xe⁴⁺.

Полученные результаты указывают на то, что при анализе взаимодействия ионов He²⁺ с распыленным материалом первой стенки установки управляемого термоядерного синтеза нужно учитывать, что во взаимодействие будут вовлечены электроны не только внешней оболочки атомов, что приведет к эффективному образованию многозарядных ионов примесей.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания (тема № 0040-2019-0023).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M. Barat, W. Lichten, Phys. Rev. A, 6 (1), 211 (1972).
- [2] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.8)* (National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2020). DOI: 10.18434/T4W30F
- [3] А.А. Басалаев, М.Н. Панов, ЖТФ, 89 (3), 346 (2019).
 DOI: 10.21883/JTF.2019.03.47166.299-18
- [4] M.N. Panov, in Proc. XI ICPEAC. Invited Papers and Progress Report, ed. by. N. Oda, K. Takayanagi (North-Holland, Amsterdam, 1980), p. 437.
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика (Наука, М., 1988), т. 1, с. 75–77.