

02

Образование свободных электронов при адиабатическом столкновении ионов He^{2+} с атомами ксенона

© М.Н. Панов, А.А. Басалаев, О.В. Смирнов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: m.panov@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 12 января 2024 г.
В окончательной редакции 7 марта 2024 г.
Принято к публикации 13 марта 2024 г.

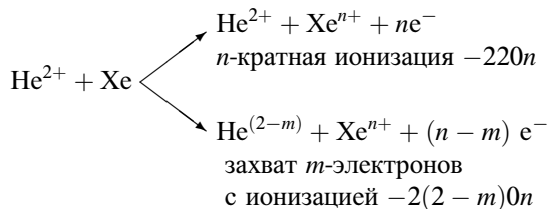
Вычислены сечения различных каналов процесса образования свободных электронов, происходящих при адиабатических столкновениях He^{2+} с атомами ксенона $\text{Xe}(5s^25p^61S)$, т.е. при скоростях существенно ниже скоростей электронов внешней оболочки атома мишени. Определены зависимости сечения прямой ионизации и квазимолекулярной автоионизации или оже-ионизации от кинетической энергии образующихся электронов и расстояния сближения атомных частиц в момент ионизации. Вычисленные величины сечения этих каналов ионизации сопоставлены с экспериментальными данными, полученными на основе измерений сечений элементарных процессов изменения зарядовых состояний при столкновениях He^{2+} и Xe .

Ключевые слова: адиабатические столкновения, прямая ионизация, квазимолекулярная автоионизация, адиабатические термы.

DOI: 10.61011/JTF.2024.05.57809.5-24

Введение

Адиабатические столкновения альфа-частиц с атомами ксенона сопровождаются различными элементарными процессами, ведущими к образованию электронов, и которые могут быть записаны:



В литературе, посвященной ионно-атомным столкновениям, чтобы избежать длинных словесных названий для обозначения процессов изменения зарядовых состояний частиц, принято использовать величины заряда частиц до и после взаимодействия. В нашем случае это $2m0n$. Первые два числа — зарядовые состояния налетающей частицы до и после столкновения, последующие два числа — аналогичные значения зарядовых состояний частицы мишени.

Целью настоящей работы является вычисление сечений образования свободных электронов в процессах прямой ионизации и оже-ионизации и их сравнение с экспериментально измеренными ранее сечениями процессов изменения зарядовых состояний атомных частиц для пары $\text{He}^{2+}-\text{Xe}$, ведущих к образованию свободных электронов. Определить применимость имеющихся теоретических подходов к многоэлектронным системам.

Процессы образования свободных электронов при взаимодействии альфа-частицы с многоэлектронным атомом ксенона исследовались экспериментально с помощью самых различных методов. Большинство из них основано на анализе характеристик состояний тяжелых атомных частиц, связанных с процессом образования свободных электронов. Регистрация конечных зарядовых состояний атомных частиц дает число образующихся свободных электронов. Измерение кинетической энергии тяжелых частиц после взаимодействия дает сведения об энергии, идущей на ионизацию и кинетическую энергию электронов. Эксперименты по измерению дифференциальных по углу рассеяния сечений процессов ионизации позволяют определить расстояния сближения частиц, при которых происходит образование свободных электронов.

В области энергий ($E < 10 \text{ keV}$), соответствующих адиабатическому взаимодействию альфа-частиц с атомами Xe , нами были измерены абсолютные величины сечений элементарных процессов изменения зарядовых состояний взаимодействующих частиц, ведущих к образованию свободных электронов в процессах: ионизации $\{220n\}$ ($n = 1 - 5$), ионизации с захватом одного электрона $\{210n\}$ ($n = 2 - 6$) и ионизации с захватом двух электронов $\{200n\}$ ($n = 3 - 6$) [1]. Показано, что основными механизмами образования свободных электронов являются процессы захвата одного или двух электронов налетающим ионом He^{2+} с образованием Xe^{n+} $n = 2, 3$. Суммарное сечение образования свободных электронов в рассматриваемой области энергий столкновений возрастает при уменьшении скорости сталкивающихся частиц. Анализ измеренных

дифференциальных сечений рассеяния атомов He, образующихся в процессах $\{200n\}$ ($n = 3 - 6$), показывает, что ионизация эффективно осуществляется при расстояниях сближения, соответствующих наибольшей плотности $5p$ - и $5s$ -электронов внешней оболочки атома Xe [2].

Прецизионное измерение спектров кинетических энергий ионов He^+ , образующихся в процессе захвата одного электрона с ионизацией $\{2102\}$, показало, что при энергиях налетающих ионов He^{2+} $E < 10 \text{ keV}$ в этом процессе происходит образование иона в состоянии $\text{He}^+(1s)$ [3]. Экспериментально наблюдаемый непрерывный спектр кинетических энергий ионов He^+ показывает, что образование свободного электрона происходит в квазимолекуле $\{\text{HeXe}\}^{2+}$, причем энергия электрона зависит от межъядерного расстояния в момент его образования.

Альтернативный экспериментальный подход, связанный с непосредственной регистрацией свободных электронов, позволяет провести измерения полного сечения образования свободных электронов и их энергетического спектра. При ионизации фотонами спектр отражает электронные уровни атома [4,5], а при ионизации в процессе столкновения ионов с атомами или молекулами — изменение электронных уровней квазимолекулы в зависимости от межъядерного расстояния, и электронные переходы между ними с последующей ионизацией или взаимодействием термов со сплошным спектром. Были выполнены измерения распределения свободных электронов по их кинетическим энергиям для ионно-атомных пар [6–9] и при взаимодействии ионов с молекулами с малым количеством электронов [10–13].

При скоростях столкновения, соответствующих адиабатическому взаимодействию партнеров, основными каналами образования электронов может быть прямая ионизация (DI), обусловленная распадом квазимолекулярного состояния, вышедшего в сплошной спектр [14–21], и квазимолекулярная автоионизация или оже-ионизация (QA) [22,23]. Квазимолекулярная автоионизация происходит в результате резонансного коррелированного двухэлектронного перехода между термами квазимолекулы.

Процесс ударной ионизации дает вклад в сечение образования свободных электронов лишь при скоростях столкновений, превышающих скорости электронов, принадлежащих внешней оболочке атома. При кинетической энергии ионов He^{2+} менее 10 keV , рассматриваемой в настоящей работе, сечение этого процесса мало.

1. Методика расчета

При столкновении иона He^{2+} с атомом ксенона образуется квазимолекулярная система $\{\text{HeXe}\}^{2+}$ в возбужденном состоянии, потенциальной энергии которой достаточно для ее ионизации. При сближении частиц

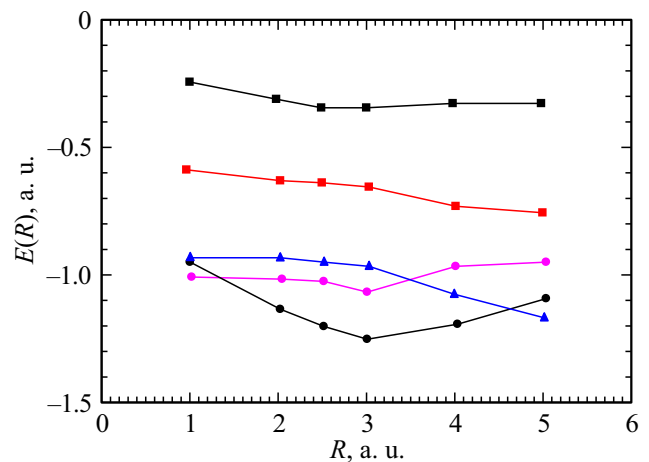


Рис. 1. Двухэлектронные адиабатические термы квазимолекулы $\{\text{HeXe}\}^{2+}$. Член, отвечающий за кулоновское отталкивание частиц, вычтен. ■ — $6d\sigma^2$, □ — $-4f\sigma 6d\sigma$, диабатические термы данных электронных конфигураций выходят в сплошной спектр (см. ссылки ([10,12]) и отвечают за прямую ионизацию системы, △ — $4f\sigma^2$; ○ — $3d\sigma^2$, терм, отвечающий за квазимолекулярную ионизацию QA1; ○ — $3p\sigma 6d\sigma$ — терм, отвечающий за квазимолекулярную ионизацию QA2.

уровень гелия $1s$ коррелирует с уровнем $4f$ объединенного иона Ba^{2+} и при сближении частиц пересекает $5l$ термы квазимолекулы. В области этих пересечений происходят электронные переходы в квазимолекуле. В результате перехода электрона из внешней оболочки атома Xe на $1s$ -уровень иона He^+ выделяется энергия, достаточная для удаления еще одного электрона из атома Xe. В этом случае процесс образования свободных электронов является экзотермическим и происходит без затрат кинетической энергии. Возможность переходов возникает лишь при достижении определенного расстояния сближения ядер частиц. При некотором расстоянии сближения некоторый квазимолекулярный терм может выйти в сплошной спектр. В результате его распада происходит прямая ионизация системы.

Для анализа механизма ионизации при столкновении атомов ксенона с ионом He^{2+} были использованы результаты работ [17,22]. Подобный анализ образования свободных электронов был проведен в нашей работе для столкновения ${}^3\text{He}^{2+} - \text{Ar}$, в интервале энергий ионов $5 - 10 \text{ keV}$ [24] и использован в настоящей работе для анализа механизма процессов ионизации в квазимолекулярной системе $\{\text{HeXe}\}^{2+}$. Следует отметить, что для этой системы наиболее эффективен процесс захвата одного электрона с образованием иона $\text{He}^+(n = 2)$ из-за малого дефекта резонанса [3] и не ведущий к образованию свободных электронов.

Для рассмотрения процессов, ведущих к образованию свободных электронов, первоначально были выполнены расчеты термов квазимолекулы и вероятностей переходов между ними. Расчеты термов были выполнены путем решения уравнения Шредингера в вытянутых

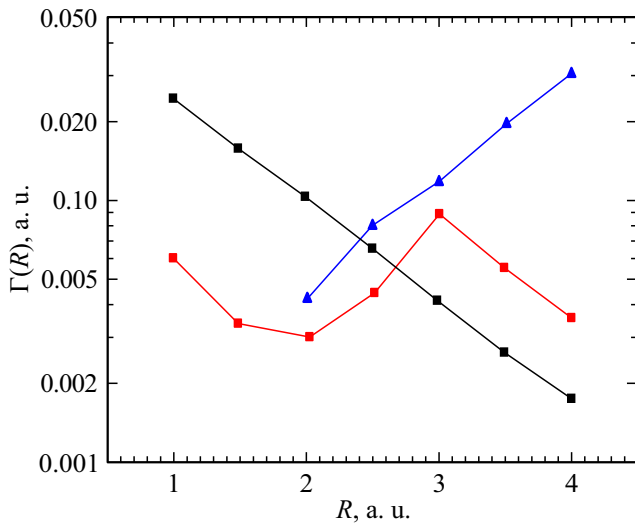


Рис. 2. Ширины автоионизационных состояний: ■ — $6d\sigma^2 - 3d\sigma$, — прямая ионизация DI; □ — $4f\sigma 6d\sigma - 3d\sigma$, квазимолекулярная ионизация Q1; △ — $3p\sigma 6d\sigma - 3d\sigma$ квазимолекулярная ионизация Q2.

сфероидальных координатах, как это было сделано в нашей предыдущей работе [24]. Рассчитанные двухэлектронные адиабатические термы квазимолекулы $\{\text{HeXe}\}^{2+}$ приведены на рис. 1.

Расчет энергетических спектров электронов был произведен с помощью соотношений, полученных в рамках модифицированного адиабатического приближения для прямой ионизации и теории возмущений для квазимолекулярной автоионизации.

Дифференциальные по энергии электронов сечения процесса прямой ионизации [17] описывались соотношениями (1), (2):

$$\frac{d\sigma}{dE} = \frac{4\pi |R(E)|^2 \text{Im}R(E)}{\alpha(E)} \exp\left[-\frac{\alpha(E)}{V_R}\right], \quad (1)$$

$$\alpha(E) = 2 \int_{E_0}^E \text{Im}(R(E')) dE', \quad (2)$$

где $R(E)$ — функция, обратная терму $E(R)$; $\text{Im}R(E)$ — мнимая часть этой функции; E_0 — граничное значение энергии (первое квазипересечение выдвигающегося адиабатического терма); V_R — радиальная скорость сближения атомных частиц.

Дифференциальное сечение процесса квазимолекулярной автоионизации описывалось соотношениями (3), (4) [22]:

$$\frac{d\sigma}{dE} = 2\pi \int_0^\infty N(b, R(E)) W(E, b) b db, \quad (3)$$

$$W(E, b) = \left| \int_{\square}^t \sqrt{\frac{\Gamma(t)}{2\pi}} \exp\left\{iEt - i \int_{\square}^t E_0(t') dt'\right\} dt \right|^2, \quad (4)$$

где $N(b, R)$ — заселенность автоионизационного терма, $W(E, b)$ — вероятность распада, t — время, $\Gamma(t)$ — естественная ширина терма $E(t)$, b — параметр удара. При $\Gamma \ll 1$ вероятность распада может быть представлена в виде уравнения (5):

$$W(E, b) \approx \frac{\Gamma(t_0)}{E'_t(t_0)} = \frac{\Gamma(R_0)}{V_R E'_R(R_0)}, \quad (5)$$

где t_0 и R_0 — время и межъядерное расстояние, соответствующие области автоионизационного перехода, V_R — скорость, апостроф обозначает производную.

Данные о ширинах термов $\Gamma(R_0)$, ведущих к образованию свободных электронов как функции межъядерного расстояния, представлены на рис. 2.

2. Результаты и их обсуждение

Результаты вычисления дважды дифференциальных сечений различных каналов образования свободных электронов при столкновении ионов He^{2+} с атомами Xe представлены на рис. 3.

Одним из источников образования свободных электронов является квазимолекулярная автоионизация [22] (оже-ионизация), которая соответствует экспериментально выделяемому процессу захвата с ионизацией [2012]. Образование автоионизационного молекулярного иона может происходить либо в результате одновременного перехода двух электронов (simultaneous) в точке квазипересечения термов квазимолекулы $\{\text{HeXe}\}^{2+}$ (QA1), либо при последовательном переходе (successive) двух электронов в двух различных по межъядерному расстоянию точках квазипересечения

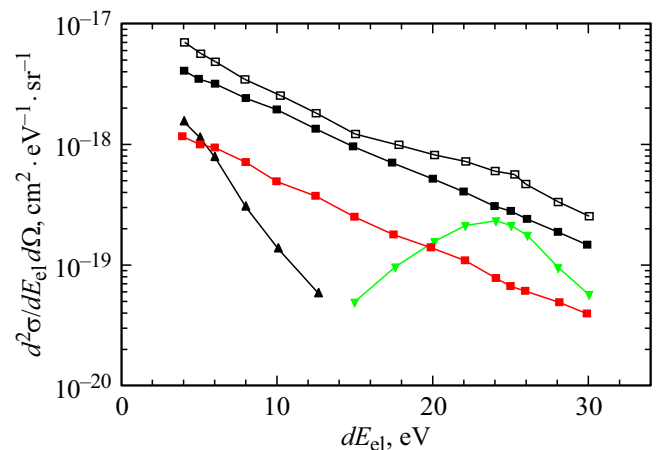


Рис. 3. Дифференциальные сечения различных каналов образования свободных электронов при столкновении ионов He^{2+} с атомами Xe. Энергия ионов 10 keV. □ — Total, ■ — сечение прямой ионизации из начального состояния DI(1); □ — сечение прямой ионизации из состояния с одним захваченным электроном DI(2); ▲ — QA (1) — сечение оже-ионизации в случае одновременного перехода двух электронов на автоионизационный терм; ▽ — QA (2) — сечение оже-ионизации при последовательном переходе электронов.

с последующим оже-распадом этого квазимолекулярного состояния автоионизационных (QA2):

$6d\sigma^2 \rightarrow 3d\sigma + e$, квазимолекулярная автоионизация (QA(1), рис. 3)

$6d^2 \rightarrow 3p\sigma 6d\sigma \rightarrow 3d\sigma + e$, квазимолекулярная автоионизация (QA(2), рис. 3).

Электроны, образующиеся при одновременном переходе двух электронов, дают вклад в низкоэнергетическую часть спектра электронов, а дифференциальное сечение процесса последовательного перехода двух электронов имеет широкий максимум с наиболее вероятной энергией электронов ~ 25 eV.

Третьим источником процесса захвата с ионизацией является распад автоионизационного состояния $\text{He}(2l^2)$ при межъядерных расстояниях, соответствующих пределу разведенных атомов, образованного в процессе захвата двух электронов. Об этом свидетельствуют пики в экспериментально измеренных кривых спектра энергий электронов, соответствующих энергии распада состояний $\text{He}(2s2p^{1,3}P)$ [23].

Вычисленное интегральное значение сечений процесса захвата одного электрона с ионизацией, ведущего к образованию иона He^+ , иона Xe^{2+} и одного свободного электрона, составляет $3.1 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при энергии ионов 10 keV.

В сечение захвата с ионизацией вносят вклад следующие каналы: последовательный переход двух электронов — $2.4 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$, одновременный переход двух электронов в квазимолекуле — $0.15 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ (почти 100% на орбиталь $3d\sigma$) и захват двух электронов в автоионизационное состояние $\text{He}(2l^2)$ — $0.55 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Величина сечения последнего канала процесса определена экспериментально [4], исходя из площади пиков, соответствующих энергии электронов при распаде $2l^2$ состояний атома гелия.

Экспериментальные измерения сечения процесса захвата с ионизацией {2012}, полученное регистрацией методом совпадений образующихся ионов Xe^{2+} и He^+ [1], дают величину $2.7 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Следует отметить, что в эксперименте фиксируются только те случаи взаимодействия, когда образуется только один электрон и отсутствует дополнительная ионизация атома ксенона в результате многоэлектронных переходов. Теоретический расчет так же не рассматривает многократную ионизацию. В результате наблюдается хорошее согласие теории и эксперимента.

Прямая ионизация, осуществляющаяся в результате одноэлектронных переходов с адиабатического терма в состояния континуума, приводит к образованию электронов, энергетическое распределение которых имеет вид убывающей кривой с максимумом при энергии $E_{\text{el}} = 0$ eV. На основании проведенных расчетов можно составить следующую картину эволюции рассматриваемой системы. Состояние $6d\sigma^2$ двухэлектронной системы при сближении сталкивающихся частиц испытывает захват одного электрона $6d\sigma \rightarrow 3p\sigma$ за счет связи Демкова ($R_c \approx 4$ а.у., вероятность перехода $P = 0.25$).

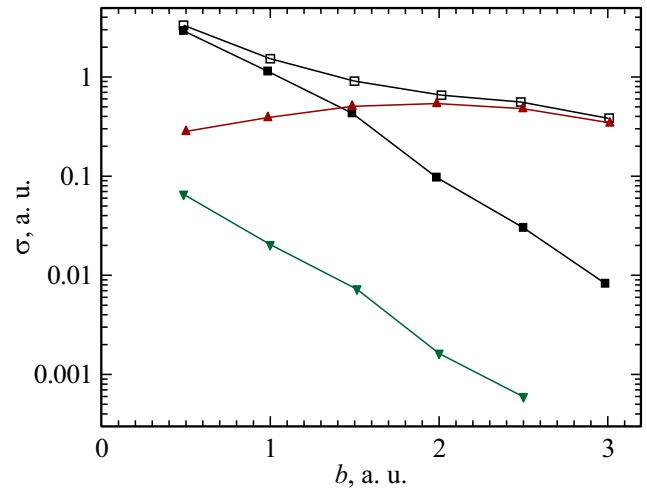


Рис. 4. Дифференциальные сечения различных каналов образования свободных электронов от параметра удара. □ — Total, суммарное сечение прямой ионизации и оже-ионизации; ■ — D1, сечение прямой ионизации — результат взаимодействия квазимолекулярного терма и свободного спектра; ▲ — QA1, сечение оже-ионизации при последовательном переходе электронов на автоионизационный терм; ▼ — QA2, сечение оже-ионизации при одновременном переходе электронов.

При дальнейшем сближении частиц осуществляются следующие процессы, приводящие к ионизации:

$6d\sigma^2 \rightarrow 6d\sigma + e$, прямая ионизация (DI(1), рис. 3)

$3p\sigma 6d\sigma \rightarrow 3p\sigma + e$, прямая ионизация (DI(2), рис. 3)

Расчеты сечения прямой ионизации, согласно решениям уравнений (3) и (4), при энергии ионов He^{2+} 10 keV дают величину $\sigma(202n) = 6.4 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Теория прямой ионизации — распад терма при выходе в сплошной спектр — не включает в себя многоэлектронные процессы.

Теоретический расчет показывает (рис. 3), что больший вклад в сечение образования электронов прямой ионизации вносит процесс распада состояния ($6d\sigma^2$), а меньший — из состояния с одним захваченным электроном ($3p\sigma 6d\sigma$). Вероятности осуществления этих каналов ионизации как функция параметра удара представлены на рис. 4.

Однако такое описание без учета многоэлектронных процессов [17] справедливо для систем лишь с очень ограниченным количеством электронов [7–10]. Эксперимент по измерению сечений элементарных процессов показывает, что образующийся в процессе прямой ионизации многоэлектронный ион $\{\text{HeXe}\}^{2+}$ в последствии распадается с образованием ионов гелия и ксенона различного заряда и некоторого дополнительного числа свободных электронов. Полученная теоретически на основании решений уравнений (1) и (2) величина сечения прямой ионизации превышает сумму всех экспериментальных измеренных величин сечений процессов, ведущих к образованию свободных электронов.

Сумма сечений таких процессов, полученных на основании регистрации зарядовых состояний образующихся ионов, ведущих к образованию свободных электронов, составляет $4.49 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, что составляет лишь 70% от вычисленного сечения прямой ионизации. Существенное расхождение в сечениях может быть вызвано в неточном вычислении ширины адиабатического терма, вышедшего в свободный спектр (рис. 2).

Согласно измерениям сечений элементарных процессов [1], наибольшую часть сечения образования свободных электронов вносит процесс захвата одного электрона, ведущий к образованию иона гелия He^+ и имеющий суммарное сечение $4.77 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$. Следующим по величине сечения является процесс захвата двух электронов, суммарное сечение которых составляет $4.4 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$. Наименьший вклад вносит процесс ионизации {2021} без изменения заряда налетающего иона He^{2+} — $0.315 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$.

Заключение

Теоретический расчет величины сечения захвата с ионизацией в результате заселения автоионизационного двухэлектронного терма и его последующего распада и экспериментальное измерение сечения процесса захвата одного электрона с образованием ионом He^+ , однозарядного иона Xe^+ и одного электрона четко выделяют один определенный элементарный процесс. В этом случае полученные теоретические и экспериментальные величины сечений показывают хорошее согласие. Однако образование свободных электронов в результате прямой ионизации многоэлектронной квази-молекулы — распада терма при выходе в сплошной спектр — является лишь частью сечения образования свободных электронов. Развитый для систем с малым числом электронов метод определения величины сечения ионизации требует для случая квази-молекулы HeXe^{2+} дополнительного учета многоэлектронных процессов. Экспериментальные данные об абсолютных величинах элементарных процессов изменения зарядовых состояний позволяют выделить в чистом виде любой процесс изменения зарядовых состояний частиц, связанный с образованием свободных электронов.

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] А.А. Басалаев, М.Н. Панов, О.В. Смирнов. ЖТФ, **90** (12), 2022 (2020). DOI: 10.61011/JTF.2024.05.57809.5-24 [A.A. Basalaev, M.N. Panov, O.V. Smirnov. Tech. Phys., **65** (12), 1930 (2020). DOI: 10.1134/S106378422012004X]
- [2] А.А. Басалаев, М.Н. Панов, О.В. Смирнов. Письма в ЖТФ, **47** (20), 31 (2021). DOI: 10.61011/JTF.2024.05.57809.5-24
- [3] В.В. Афросимов, А.А. Басалаев, М.Н. Панов. ЖТФ, **64** (10), 22 (1991).
- [4] N.M. Kabachnik, K. Ueda. Phys. Scripta, **T110**, 73 (2004).
- [5] S. Osmekhin, J. Nikkinen, R. Sankari, M. Maatta, E. Kukk, M. Huttula, S. Heinasmaki, H. Aksela, S. Aksela. J. Electr. Spectr. Rel. Phen., **161**, 105 (2007). DOI: 10.1016/j.elspec.2006.10.004
- [6] F. Frémont, A. Hajaji, A. Naja, C. Leclercq, J. Soret, J. A. Tanis, B. Suli, J.-Y. Chesnel. Phys. Rev. A, **72**, 050704(R) (2005). DOI: 10.1103/PhysRevA.72.050704
- [7] G.N. Ogurtsov, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek, V.M. Mikoushkin. Phys. Rev. A, **84**, 032706 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevA.84.032706
- [8] L.Ph.H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz, H. Schmidt-Böcking, R. Dörner, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek, D.R. Schultz. Phys. Rev. Lett., **112**, 083201 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.083201
- [9] G.N. Ogurtsov, S.Yu. Ovchinnikov, V.M. Mikoushkin. Phys. Scripta, **T110**, 370 (2004).
- [10] G.N. Ogurtsov, V.M. Mikoushkin, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **47**, 175201 (2014). DOI: 10.1088/0953-4075/47/17/175201
- [11] G.N. Ogurtsov, V.M. Mikoushkin, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **46**, 175203 (2013). DOI: 10.1088/0953-4075/46/17/175203
- [12] G.N. Ogurtsov, S.Yu. Ovchinnikov, J.H. Macek. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **48**, 055202 (2015). DOI: 10.1088/0953-4075/48/5/055202
- [13] G.N. Ogurtsov, V.M. Mikoushkin, S.K. Semenov, V.V. Kuznetsov, N.A. Cherepkov. J. Electr. Spectr. Rel. Phen., **161**, 63 (2007). DOI: 10.1016/j.elspec.2007.02.020
- [14] Z.Y. Song, X.C. Wang, Z.W. Li, K.L. Han, D. Fischer. Phys. Rev. A, **102**, 042820 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.102.042820
- [15] A.C. Tavares, C.C. Montanari, J.E. Miraglia, G.M. Sigaud. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **47**, 045201 (2014). DOI: 10.1088/0953-4075/47/4/045201
- [16] A. Amaya-Tapia, A. Antillón, C.D. Estrada. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **51**, 115201 (2018). DOI: 10.1088/1361-6455/aabdab
- [17] Е.А. Соловьев. УФН, **157**, 437 (1989).
- [18] С.Ю. Овчинников, Е.А. Соловьев. ЖЭТФ, **91** (2), 477 (1986).
- [19] С.Ю. Овчинников, Е.А. Соловьев. ЖЭТФ, **90** (3), 921 (1986).
- [20] P. Liu, J. Zeng, J. Yuan. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **51**, 075202 (2018). DOI: 10.1088/1361-6455/aab195
- [21] Е.А. Соловьев. ЖЭТФ, **90** (4), 1165 (1986).

- [22] Э.С. Парилис, Л.М. Кишеневский, В.И. Матвеев, Б.Г. Краков. *Оже процессы при атомных столкновениях* (Изд-во ФАН Узбекской ССР, 1989)
- [23] Г.Н. Огурцов. *Автоионизация многоэлектронных атомов при электронных и атомных столкновениях* (Автореф. дисс. д.ф.-м.н., Л., 1986), с. 32.
- [24] В.В. Афросимов, А.А. Басалаев, Г.Н. Огурцов, М.Н. Панов. *ЖТФ*, **84** (5), 14 (2014).