

УДК 539.186.3

СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНОВ

И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько

Методом многоканальной нормировки в представлении параметра удара впервые вычислены полные сечения одноэлектронной перезарядки, возникающей при столкновении между тяжелыми малозарядными ионами атомов Xe, Cs, Ba, Pb, Bi и U в области относительных энергий $E > 0.1$ кэВ/н. Вычисленные сечения перезарядки достаточно велики и достигают максимума $\sigma_m \approx 10^{-15}$ см² при относительных энергиях столкновения $E_m \approx 10 - 30$ кэВ/н, т.е. при относительных скоростях $v \approx 1$ а.е. = 2.2×10^8 см/с. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Перезарядка и ионизация, возникающие при столкновениях тяжелых многоэлектронных атомов и ионов, являются основными реакциями с изменением зарядового состояния, представляющими интерес для проблем физики ионного термоядерного синтеза, образования ионных пучков с большим временем жизни в ускорительных машинах и для других задач. Имеющиеся экспериментальные и теоретические данные по эффективным сечениям таких процессов весьма ограничены [1, 2], поэтому систематические расчеты столкновительных характеристик указанных ионов приобретают самостоятельный интерес.

В настоящей работе представлены первые предварительные результаты расчетов сечений одноэлектронной перезарядки в области относительных энергий $E > 0.1$ кэВ/н при столкновении одно- и четырехзарядных ионов





где $X = Xe, Cs, Ba, Pb, Bi$ и U , т.е. атомные системы с числом электронов более 50 и зарядами +1 и +4. В настоящее время, указанные ионы представляют интерес для решения ряда задач ионного УТС.

Расчеты сечений перезарядки проводились по программе CAPTURE, созданной в Отделе спектроскопии ФИАН, в представлении параметра удара на основе соотношения между квазиклассической $a(\vec{\rho}, v)$ и квантово-механической $f(\vec{k}, v)$ амплитудами перезарядки. Согласно [3], искомое соотношение, полученное в приближении Бринкмана-Крамерса (модификация первого приближения теории возмущений), имеет вид¹

$$a(\vec{\rho}, v) = \frac{1}{v(2\pi)^2} \int_P f(\vec{k}, v) e^{i\vec{k}\vec{\rho}} d^2\vec{k}, \quad (3)$$

где v – относительная скорость сталкивающихся частиц, ρ – прицельный параметр, k – импульс системы с учетом перестройки сталкивающихся частиц. Интегрирование в (3) проводится по плоскости P , описываемой уравнением

$$\vec{k} \cdot \vec{v} - \Delta E - \frac{v^2}{2} = 0,$$

где ΔE – дефект резонанса, т.е. разность между энергиями связи оптического (захватываемого) электрона в начальном (0) и конечном (1) состояниях:

$$\Delta E = I_0 - I_1. \quad (4)$$

Вектор \vec{k} связан с обычным вектором передачи импульса \vec{q} соотношением

$$\vec{k} = \vec{q} + \frac{\vec{v}}{v} \left(\frac{\Delta E}{v} + \frac{v}{2} \right). \quad (5)$$

Соотношение (3) получено в предположении прямолинейной траектории налетающего иона и с учетом фактора трансляции захватываемого электрона $\exp(i\vec{v}\vec{r})$. Согласно (3), радиальная часть амплитуды перезарядки имеет вид

$$a(\rho, v) = \frac{4}{v} \int_0^\infty k dk \cdot C_{l_0 m_0} \cdot C_{l_1 m_1} \cdot P_{l_0}^{m_0}(\cos \theta_0) \cdot P_{l_1}^{m_1}(\cos \theta_1) \cdot J_{\Delta m}(k\rho) \times$$

¹В работе используется система атомных единиц $e = m = \hbar = 1$ до тех пор, пока единицы не оговорены особо.

$$\times F_{n_0 l_0}(\sqrt{k^2 + (\Delta E/v - v/2)^2}) \cdot F_{n_1 l_1}(\sqrt{k^2 + (\Delta E/v + v/2)^2}), \quad (6)$$

$$C_{lm} = \left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2}; \quad \Delta m = |m_0 - m_1|, \quad (7)$$

$$\cos \theta_1 = \frac{\frac{v}{2} + \frac{\Delta E}{v}}{\sqrt{k^2 + \left(\frac{\Delta E}{v} + \frac{v}{2}\right)^2}}, \quad \cos \theta_0 = \frac{\frac{v}{2} - \frac{\Delta E}{v}}{\sqrt{k^2 + \left(\frac{\Delta E}{v} - \frac{v}{2}\right)^2}}. \quad (8)$$

Здесь lm – орбитальные и магнитные квантовые числа оптического электрона до и после столкновения, P_l^m – полином Лежандра, $J(x)$ – функция Бесселя. Функции F начального и конечного состояний определяются интегралами

$$F_{n_0 l_0}(y) = \int_0^\infty P_{n_0 l_0}(r) j_{l_0}(ry) r dr, \quad (9)$$

$$F_{n_1 l_1}(x) = \int_0^\infty P_{n_1 l_1}(r) j_{l_1}(rx) V(r) r dr, \quad x^2 - y^2 = 2\Delta E, \quad (10)$$

где $j_l(x)$ – сферическая функция Бесселя, $V(r)$ – эффективный потенциал взаимодействия иона X^{0+} или X^{3+} с оптическим электроном. Радиальные волновые функции $P(r)$ электрона удовлетворяют условию нормировки

$$\int_0^\infty P_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (11)$$

Сечение перезарядки в представлении параметра удара имеет вид

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^\infty W(\rho, v) \rho d\rho, \quad W(\rho, v) = |a(\rho, v)|^2, \quad (12)$$

где $W(\rho, v)$ – вероятность перезарядки.

Свойства квантовой амплитуды $f(k, v)$ перезарядки хорошо изучены теоретически [1, 4 – 6], что позволяет выполнить нормировку вероятностей (и сечений) с помощью общего соотношения (3). В программе CAPTURE процедура нормировки вероятностей осуществляется с учетом перезарядки на другие возможные каналы реакции в виде

$$W_{01}^N(\rho, v) = \frac{W_{01}(\rho, v)}{1 + \sum_j W_{0j}(\rho, v)}, \quad W_{01}(\rho, v) = |a_{01}(\rho, v)|^2, \quad (13)$$

где ненормированные амплитуды перезарядки a_{01} определены в (6).

В качестве радиальных волновых функций $P(r)$ оптического электрона в программе CAPTURE используются водородоподобные функции

$$P_{nl}^Z(r) = Z^{1/2} P_{nl}^H(Zr), \quad (14)$$

где $P_{nl}^H(r)$ – радиальная волновая функция атома водорода, Z – эффективный заряд. Использование H -подобных функций связано с двумя главными обстоятельствами. Во-первых, известно [1], что в полное сечение перезарядки большой вклад вносит захват в высоковозбужденные (водородоподобные) состояния образующегося иона, а при больших энергиях столкновения сечения перезарядки определяются главным образом захватом внутренних электронов мишени, которые находятся вблизи незранированного ядра и поэтому также носят водородоподобный характер. Во-вторых, с водородоподобными функциями численные расчеты полных сечений перезарядки, т.е. усредненных по квантовым числам m и l , существенно упрощаются, что связано со спецификой матричных элементов перезарядки, являющихся Фурье-компонентами волновых функций оптического электрона (см. [4]).

В настоящей работе эффективный заряд Z^* водородоподобных функций выбирался из условия

$$Z^* = n\sqrt{2I_{nl}}, \quad (15)$$

где I_{nl} – энергия связи электрона в начальном или конечном состояниях, n – главное квантовое число. Другой альтернативой является использование H -подобных волновых функций с постоянным зарядом Z (как правило, это спектроскопический символ атома или иона) и эффективным квантовым числом n^* , где

$$n^* = (2I_{nl}/Z^2)^{-1/2}. \quad (16)$$

Функции с эффективными (нецелочисленными) квантовыми числами использовались, например, для расчетов дипольных и квадрупольных матричных элементов в известных таблицах Бейтса–Дамгаард (см. [7]). В случае задачи о перезарядке использование приближения (15) с целочисленными значениями главного квантового числа n является более предпочтительным, т.к. позволяет выполнить аналитически усреднение по орбитальным и магнитным квантовым числам lm , которые также должны принимать целочисленные значения.

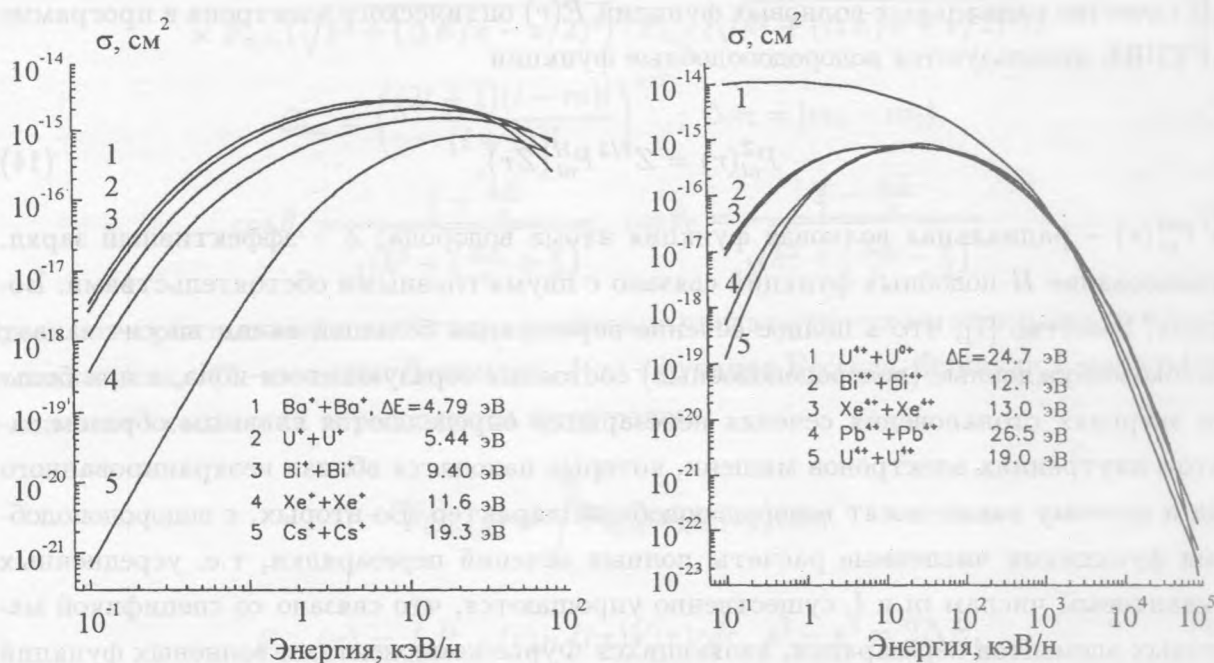


Рис. 1. Сечения перезарядки (1) однозарядных ионов, уравнения (12 - 14, б), как функции относительной энергии E , кэВ/н. ΔE - дефекты резонанса реакций в эВ. 1 - $Va^{1+} + Va^{1+}$; 2 - $U^{1+} + U^{1+}$; 3 - $Bi^{1+} + Bi^{1+}$; 4 - $Xe^{1+} + Xe^{1+}$; 5 - $Cs^{1+} + Cs^{1+}$.

Рис. 2. Вычисленные сечения перезарядки (2) четырехзарядных ионов, уравнения (12 - 14, б), как функции относительной энергии E , кэВ/н. ΔE - дефекты резонанса реакций в эВ. 1 - $U^{4+} + U^{0+}$; 2 - $Bi^{4+} + Bi^{4+}$; 3 - $Xe^{4+} + Xe^{4+}$; 4 - $Pb^{4+} + Pb^{4+}$; 5 - $U^{4+} + U^{4+}$.

В программе CAPTURE в качестве потенциала взаимодействия $V(r)$ в (10) используется кулоновский потенциал $V(r) = -Z^*/r$, где Z^* - эффективный потенциал образующегося иона. Программа позволяет выполнить нормировку на произвольное число каналов, однако для практических расчетов, как правило, достаточно учета $j < 50$ конечных состояний с главными квантовыми числами n . Возможен расчет как полных, так и парциальных (по главному квантовому числу n) вероятностей и сечений, т.е. величин, усредненных по орбитальным l и магнитным m квантовым числам начального и конечного состояний.

Результаты расчетов полных сечений перезарядки для реакций (1) и (2) представлены на рис. 1 - 5 как функции относительной энергии $E[\text{кэВ/н}] \simeq 25v^2[\text{a.e.}]$, где v - относительная скорость в атомных единицах, $1\text{a.e.} \simeq 2.2 \times 10^8 \text{ см/с}$. На рис. 1 и

2 приведены также значения дефектов резонанса ΔE (в эВ) для основных состояний мишени и образующегося иона.

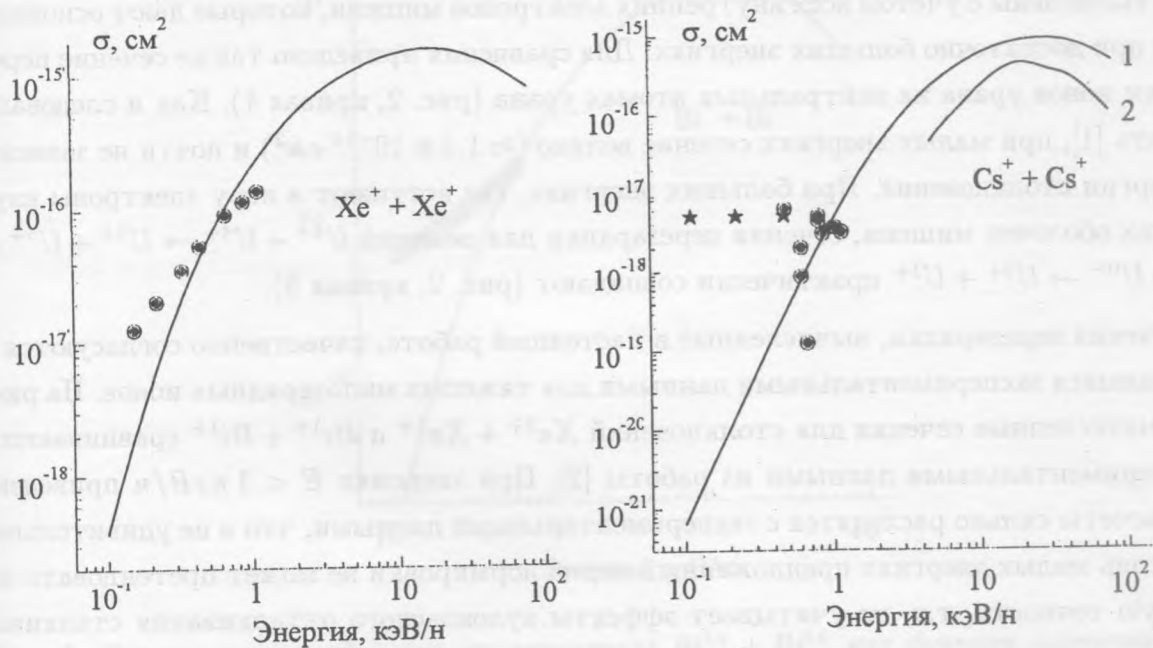


Рис. 3. Сечения перезарядки при столкновениях $\text{Xe}^{1+} + \text{Xe}^{1+}$ как функции относительной энергии сталкивающихся ионов E , кэВ/н. Кружки – эксперимент из работы [2], сплошная кривая – настоящая работа, формулы (12 – 14, 6).

Рис. 4. Сечения перезарядки при столкновениях $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$ как функции относительной энергии сталкивающихся ионов E , кэВ/н. Кружки – эксперимент [8], звезды – эксперимент из работы [2]. Кривая 1 – настоящая работа, формулы (12 – 14, 6); кривая 2 – расчет методом атомных орбиталей [9].

Из рисунков видно, что, несмотря на кулоновский характер взаимодействия сталкивающихся ионов, сечения перезарядки довольно велики и достигают максимума при энергиях $E \approx 10 - 30 \text{ кэВ/н}$, т.е. при относительной скорости $v \approx 1 \text{ а.е.}$; при этом для столкновений $X^{1+} + X^{1+} \rightarrow X^{0+} + X^{2+}$ максимальные сечения $\sigma_m \approx (0.5 - 3.0) \times 10^{-15} \text{ см}^2$, а для столкновений $X^{4+} + X^{4+} \rightarrow X^{3+} + X^{5+}$ сечения $\sigma_m \approx (5 - 8) \times 10^{-16} \text{ см}^2$ соответственно. При энергиях $E < 10 \text{ кэВ/н}$ сечения перезарядки сильно убывают с ростом дефекта резонанса и существенно зависят от атомной структуры сталкивающихся ионов.

Сечения перезарядки $X^{4+} + X^{4+} \rightarrow X^{3+} + X^{5+}$, представленные на рис. 2, вычислены для более широкого диапазона энергий. В отличие от рис. 1, где при расчете сечений учитывался в основном захват только внешнего электрона мишени, сечения на рис. 2 вычислены с учетом всех внутренних электронов мишени, которые дают основной вклад при достаточно больших энергиях. Для сравнения приведено также сечение перезарядки ионов урана на нейтральных атомах урана (рис. 2, кривая 1). Как и следовало ожидать [1], при малых энергиях сечение велико ($\approx 1.1 \times 10^{-14} \text{ см}^2$) и почти не зависит от энергии столкновения. При больших энергиях, где вступают в игру электроны внутренних оболочек мишени, сечения перезарядки для реакций $U^{4+} + U^{4+} \rightarrow U^{3+} + U^{5+}$ и $U^{4+} + U^{0+} \rightarrow U^{3+} + U^{1+}$ практически совпадают (рис. 2, кривая 5).

Сечения перезарядки, вычисленные в настоящей работе, качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными для тяжелых малозарядных ионов. На рис. 3–4 вычисленные сечения для столкновений $Xe^{1+} + Xe^{1+}$ и $Bi^{1+} + Bi^{1+}$ сравниваются с экспериментальными данными из работы [2]. При энергиях $E < 1 \text{ кэВ/н}$ приведенные расчеты сильно расходятся с экспериментальными данными, что и не удивительно: при столь малых энергиях предложенный метод нормировки не может претендовать на высокую точность, т.к. не учитывает эффекты кулоновского отталкивания сталкивающихся ионов, зависимость дефекта резонанса от межъядерного расстояния и другие эффекты.

Сечения перезарядки в столкновениях $Cs^{1+} + Cs^{1+}$ приведены на рис. 5: при энергиях $E > 1 \text{ кэВ/н}$ результаты настоящих расчетов качественно согласуются с экспериментом и расчетами, выполненными методом атомных орбиталей. Что касается экспериментальных данных, то для этой реакции имеется значительное расхождение между измерениями, выполненными различными экспериментальными группами.

Таким образом, в настоящей работе методом многоканальной нормировки в представлении параметра удара выполнены первые предварительные расчеты полных сечений перезарядки, возникающей при столкновении тяжелых малозарядных ионов. Результаты расчетов сечений качественно согласуются с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов в области относительных энергий столкновения $E > 1-10 \text{ кэВ/н}$. Важным преимуществом предложенного метода расчета является возможность вычислять полные сечения с учетом перезарядки в возбужденные состояния и захвата всех внутренних электронов мишени. Для того, чтобы сделать более определенные выводы о применимости предложенного метода, необходимо провести дальнейшие детальные расчеты и сравнение их с экспериментальными данными и расчетами, вы-

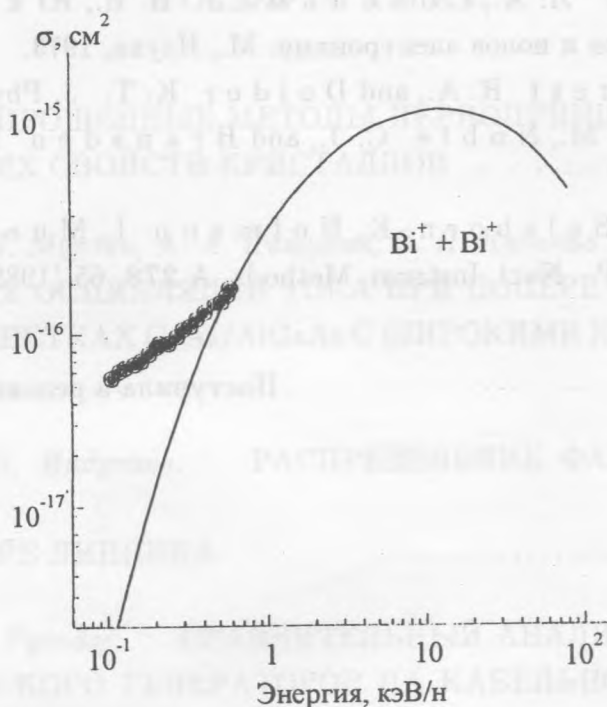


Рис. 5. Сечения перезарядки при столкновениях $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}$ как функции относительной энергии сталкивающихся ионов E , кэВ/н. Кружки – эксперимент [10], сплошная кривая – настоящая работа, формулы (12 – 14, 6).

полненными другими методами.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ N 99-02-16602 и N 00-02-17825.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Пресняков Л. П., Шевелько В. П., Янев Р. К. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М., Атомиздат, 1986.
- [2] Melcher F. in Atomic Physics with Heavy Ions, ed. by H. F. Beyer and V. P. Shevelko (Springer, Berlin 1999), p. 323.
- [3] Shevelko V. P. J. Phys. B **13**, L319 (1980).
- [4] May R. Phys. Rev., A **136**, 669 (1964).
- [5] Виноградов А. В., Шевелько В. П. ЖЭТФ, **59**, 593 (1970).
- [6] Shevelko V. P. Z. Phys., A **287**, 19 (1978).

- [7] В а й н ш т е й н Л. А., С о б е л ь м а н И. И., Ю к о в Е. А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М., Наука, 1973.
- [8] P e a r t B., F o r g e s t R. A., and D o l d e r K. T. J. Phys., B **14**, L383 (1981).
- [9] E r m o l a e v A. M., N o b l e C. J., and B r a n s d e n B. H. J. Phys., B **15**, 457 (1982).
- [10] M e l c h e r t F., S a l z b o r n E., H o f m a n n I., M u e l l e r R. W., and S h e v e l k o V. P. Nucl. Instrum. Methods, A **278**, 65 (1989).

Поступила в редакцию 31 марта 2000 г.