

## ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

И. Л. Бейгман, В. П. Шевелько

*Приведены параметры аппроксимации для расчета сечений и скоростей ионизации многозарядных ионов электронным ударом в области энергий и температур, представляющих интерес для приложений. Получено асимптотическое выражение для сечений ионизации атомов и ионов при больших энергиях налетающего электрона.*

Процессы ионизации атомов и ионов электронным ударом  $X^{m+} + e \rightarrow X^{(m+1)+} + 2e$  представляют интерес для многих физических приложений [1], где необходимо знание эффективных сечений  $\sigma$  и максвелловских скоростей  $\langle v\sigma \rangle$  ионизации. В работе [2] на основе численных расчетов сечений в приближении Кулон-Борна с обменом получены параметры аппроксимации для  $\sigma$  и  $\langle v\sigma \rangle$  ионов в виде:

$$\sigma = q(Ry/I)^2 \frac{Cu}{(u+1)(u+\varphi)} [\pi a_0^2], \quad u = E/I - 1, \quad (1)$$

$$\langle v\sigma \rangle = 10^{-8} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1} q(Ry/I)^{3/2} e^{-\beta} \frac{AV\bar{\beta}}{\beta + \chi}, \quad \beta = I/T, \quad (2)$$

$$u \leq 14, \quad 1/8 \leq \beta \leq 8, \quad (3)$$

которые описывают численные значения  $\sigma$  и  $\langle v\sigma \rangle$  с точностью до 15% в области приведенных энергий  $E$  и температур  $T$ , указанных в (3). Здесь  $C$ ,  $\varphi$ ,  $A$ ,  $\chi$  – параметры аппроксимаций,  $q$  – число эквивалентных электронов в  $nl^q$ -оболочке мишени,  $n$ ,  $l$  – главное и орбитальное квантовые числа,  $I$  – энергия связи оболочки. Параметры аппроксимации для ионизации многозарядных ионов из внешних и внутренних оболочек с квантовыми числами  $1s \leq nl \leq 6h$  приведены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

Параметры аппроксимации для сечений и скоростей ионизации  
многозарядных ионов из  $nl$ -состояний (формулы (1 - 3))

$nl$	$C$	$\varphi$	$A$	$\chi$
1s	7,96	2,70	5,65	0,40
2s	6,69	2,03	6,23	0,52
2p	6,93	1,47	9,05	0,73
3s	6,00	1,59	7,37	0,70
3p	6,24	1,31	9,11	0,82
3d	6,57	1,08	11,7	1,00
4s	5,77	1,43	7,76	0,76
4p	6,00	1,26	9,11	0,86
4d	6,23	1,11	10,8	0,97
4f	7,06	1,00	13,5	1,07
5s	5,66	1,36	7,96	0,79
5p	5,88	1,23	9,13	0,87
5d	6,08	1,12	10,4	0,96
5f	6,26	1,08	11,1	1,00
5g	6,47	1,04	11,9	1,03
6s	5,60	1,32	8,07	0,80
6p	5,82	1,22	9,13	0,88
6d	6,00	1,13	10,2	0,95
6f	6,24	1,07	11,2	1,00
6g	6,33	1,04	11,7	1,03
6h	6,44	1,01	12,2	1,06

Для приложений часто необходимо знание величин  $\sigma$  и  $\langle v\sigma \rangle$ , усредненных по орбитальному квантовому числу  $l$ :

$$\sigma_n = n^{-2} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \sigma_{nl}. \quad (4)$$

Соответствующие параметры аппроксимации, полученные из табл. 1 методом наименьших квадратов, приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2

Параметры аппроксимации для сечений и скоростей ионизации многозарядных ионов из  $n$ -состояний (формулы (1 - 4));  $u \leq 14$ ,  $1/8 \leq \beta \leq 8.0$

$n$	$C$	$\varphi$	$A$	$\chi$
1	7,96	2,70	5,65	0,40
2	6,82	1,55	8,33	0,68
3	6,44	1,23	10,2	0,90
4	6,30	1,11	10,9	0,97
5	6,24	1,06	11,2	1,01
6	6,21	1,03	11,4	1,03

С помощью данных таблиц 1 и 2 можно получить параметры аппроксимации для состояний с  $n \geq 7$ , представляя каждый из параметров  $C$ ,  $\varphi$ ,  $A$ ,  $\chi$  в виде разложения по степеням  $n^{-2}$ :

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1(1/n^2) + \dots + \alpha_k(1/n^{2k}), \quad n \geq 7, \quad \alpha = C, \varphi, A, \chi. \quad (5)$$

Первые два коэффициента разложения  $\alpha_0$  и  $\alpha_1$  приведены в табл. 3. Определение параметров аппроксимации для состояний  $nl$  с  $n \geq 7$ ,  $l \geq 3$  не представляется возможным, т.к. аккуратные расчеты сечений для этих состояний в литературе отсутствуют.

Т а б л и ц а 3

Коэффициенты разложения  $\alpha_0$  и  $\alpha_1$  (5) для ионизации из состояний с  $n \geq 7$

Коэфф.	Состояние			
	$ns$	$np$	$nd$	усредненное по $l$
$C_0$	5,46	5,68	5,81	6,13
$C_1$	4,92	5,02	6,85	2,75
$\varphi_0$	1,23	1,19	1,14	0,97
$\varphi_1$	3,23	1,11	-0,59	2,33
$A_0$	8,28	9,13	9,70	11,8
$A_1$	-8,15	-0,37	17,8	-13,6
$\chi_0$	0,84	0,90	0,94	1,07
$\chi_1$	-1,28	-0,66	0,52	-1,54

Таким образом, с помощью формул (1 - 5) и таблиц 1 - 3 можно оценить сечения ионизации при энергиях налетающего электрона  $E \leq 15 \cdot I$ , где  $I$  - энергия связи оболочки

мишени. Представляет также интерес асимптотическое поведение сечений при  $E \gg I$ . Известно, что сечение ионизации при больших энергиях можно представить в виде суммы двух слагаемых: классического и квантового дипольного сечений (логарифма Бете):

$$\sigma = \sigma^{cl} + \sigma^{dip} \propto (Ry/I)^2 \left( \frac{a}{u} + \frac{b \ln u}{u} \right), \quad u \gg 1, \quad u = E/I - 1, \quad (6)$$

где константы  $a$  и  $b$  определяются из численных расчетов. Для некоторых случаев эти константы можно получить аналитически. В работе [2] классическое сечение ионизации получено в виде

$$\sigma^{cl} = q \left( \frac{Ry}{I} \right)^2 \Phi(u) [\pi a_0^2], \quad \Phi(u) = \frac{4}{3} (u+1)^{-3} \begin{cases} u(5u+3), & u \leq 1 \\ 4u^2 + 5u - 1, & u > 1 \end{cases} \quad (7)$$

откуда определяется константа  $a$ . Константа перед логарифмом находится из асимптотического выражения для борновского матричного элемента ионизации или из выражения для дипольного сечения возбуждения ионов в приближении Бете, приведенного в [3], путем перехода в непрерывный спектр. Окончательный результат имеет вид:

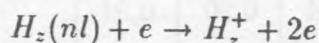
$$\sigma^{dip} = 8\pi a_0^2 \frac{\ln(2\sqrt{E}/\sqrt{I})}{EI} \frac{137}{4\pi} \int_I^\infty \sigma_{nl}^{ph}(\omega) (I/\omega) d\omega, \quad (8)$$

$$\sigma = (Ry/I)^2 \frac{\pi a_0^2}{u} \left( \frac{16}{3} + \frac{B}{n} \ln(4u) \right), \quad u \gg 1, \quad (9)$$

$$B = n \frac{137}{\pi} \int_I^\infty \sigma_{nl}^{ph}(\omega) (I/\omega) d\omega, \quad (10)$$

где  $\sigma_{nl}^{ph}(\omega)$  – сечение фотоионизации из оболочки  $nl$  в единицах  $\pi a_0^2$ , все энергии в единицах  $Ry$ . Заметим, что в соответствии с (8) асимптотическое поведение сечения ионизации электронным ударом определяется пороговым поведением сечения фотоионизации из той же оболочки.

В случае ионизации H-подобных ионов из состояний  $1s \leq nl \leq 4f$



константу  $B$  можно найти, используя значения сумм квадратов дипольных радиальных интегралов дискретного и непрерывного спектров, приведенных в [4] (табл. 4).

Т а б л и ц а 4

Константы  $B(nl)$  (10) для  $H$ -подобных систем; константы  $B(n)$  для состояний  $n = 2, 3$  и  $4$  соответствуют усредненным по  $l$  значениям  $B(nl)$

Состояние $nl$	$B(nl)$	Состояние $nl$	$B(nl)$
1s	1,12	4s	1,77
2s	1,80	4p - $\epsilon s$	0,14
2p - $\epsilon s$	0,04	4p - $\epsilon p$	1,84
2p - $\epsilon d$	1,06	4p	1,98
2p	1,10	4d - $\epsilon p$	0,067
$n = 2$	1,28	4d - $\epsilon f$	1,60
3s	1,97	4d	1,67
3p - $\epsilon s$	0,12	4f - $\epsilon d$	0,0071
3p - $\epsilon d$	1,62	4f - $\epsilon g$	0,69
3p	1,74	4f	0,70
3d - $\epsilon p$	0,02	$n = 4$	1,31
3d - $\epsilon f$	0,84		
3d	0,86		
$n = 3$	1,28		

Использование крамеровских (усредненных по  $l$ ) сечений фотоионизации  $\sigma_n^{Kr}(\omega)$  в (8) дает для всех  $n$  одинаковое значение  $B(n)$

$$B(n) = \frac{64}{9\sqrt{3}\pi} \simeq 1,31, \quad (11)$$

которое близко к константам  $B(n)$ , приведенным в табл. 4.

При  $u > 50$  сечения (9), (11) для атома водорода согласуются в пределах 10 - 20% с рекомендуемыми данными [5] и с расчетами в борновском приближении, выполненными по программе "АТОМ" [6].

Используя (11), легко оценить относительный вклад классического и дипольного слагаемых в усредненное по  $l$  сечение ионизации: логарифмическая часть становится доминирующей при условии

$$u > e^{4n}/4. \quad (12)$$

Например, при  $n = 1$  вклад дипольного сечения превалирует для энергий  $u > 10$ ; при  $u < 10^3$  логарифм Бете существенен для ионизации из состояний с главными квантовыми числами  $n = 1, 2$  и  $3$  (рис. 1).

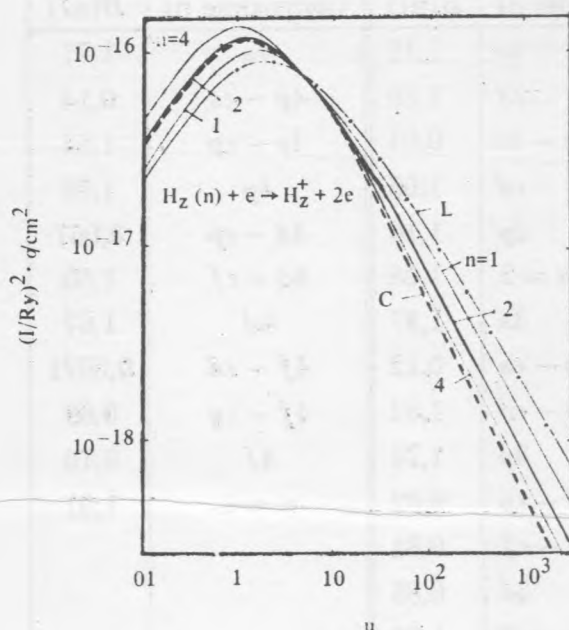


Рис. 1. Приведенные сечения ионизации водородоподобных ионов ( $z = 10, n = 1, 2, 4$ ) как функции приведенной энергии налетающего электрона  $u = E/I - 1$ : сплошные кривые – приближение Кулона-Борна с обменом (программа "АТОМ" [6]), пунктирная кривая – классическое приближение (8), штрих-пунктирная кривая – формула Лотца [7].

Таким образом, асимптотика (9) позволяет получить абсолютные сечения ионизации при больших энергиях налетающего электрона и оценить вклад классического и квантового сечений ионизации из основного и возбужденного состояний.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (заявка N 94-02-05371-а) и Международного научного фонда Сороса (гранты МК-1000 и MQ-7000 от ISF).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions (ed. C. D. Lin), World Scientific: Singapore, 1993.

- [2] Beigman I. L., Shevel'ko V. P., Nurhussen F., and Barany A., Direct Electron-impact Ionization of high-z Ions from the Ground and Excited States, *Physica Scripta*, 1994 (to be submitted).
- [3] Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М., Наука, 1979.
- [4] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., Физмат. лит., 1960.
- [5] Janev R. K. and Smith J. J., Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion, *Suppl. Journ. Nucl. Fusion*, vol. 4, p. 27 (IAEA, Vienna, 1993).
- [6] Shevel'ko V. P. and Vainshtein L. A., *Atomic Physics for Hot Plasmas* (IOP Publ., Bristol, 1993).
- [7] Lotz W., *Z. Phys.* **220**, 466 (1969).

Поступила в редакцию 24 мая 1994 г.