

УДК

ПРИБЛИЖЕНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ СЕЧЕНИЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ В ИОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

А. Д. Уланцев¹

Исследована применимость геометрической модели (ГМ), предложенной в работах [14, 15] для расчетов вероятностей и сечений ионизации атомов и ионов, при столкновениях с ионами, включая структурные ионы, при больших скоростях партнеров. ГМ представляет собой вариант классического импульсного приближения. Показано, что ГМ во всех рассмотренных случаях позволяет получить оценку вероятности и полного сечения ионизации атома или иона при соударениях с ионами с отклонением не более 50% от результатов классического метода Монте-Карло. Расчеты по ГМ являются достаточно простыми в вычислительном отношении и обеспечивают ограниченность вероятности ионизации единицей при любых параметрах столкновения.

Сечения однократной и многократной ионизации атомов и ионов в ион-атомных столкновениях представляют интерес для целого ряда приложений, в том числе для проблем управляемого термоядерного синтеза. Теоретическое рассмотрение соответствующих задач достаточно сложно даже в случае однократной ионизации из-за наличия сплошного спектра конечных состояний, особенно если необходимо определение зависимости вероятности ионизации $p(b)$ от прицельного параметра b . Последнее может быть необходимо, в частности, при расчетах многоэлектронных переходов в рамках модели независимых частиц (МНЧ) [1] или модели независимых событий (МНС) [2].

¹РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина 117296, Москва, Ленинский пр., 65, каф. физики; e-адрес: art.ulantsev@mtu-net.ru.

Рассмотрим задачу об ионизации при достаточно больших скоростях столкновения, причем под большими скоростями будем понимать скорости, удовлетворяющие условию

$$v \geq 2\bar{v}_e, \quad (1)$$

где $v = v_{PT}$ – относительная скорость сталкивающихся частиц, $\bar{v}_e \equiv \bar{v}_{eP} = \bar{p}_e/m$ – средняя скорость связанного электрона в начальном состоянии относительно своего ядра (для определенности далее предполагается, что происходит ионизация иона-снаряда). Напомним, что в используемой далее (если не оговорено обратное) атомной системе единиц $m = e = \hbar = 1$.

Во многих случаях при расчетах можно ограничиться одноэлектронным приближением. Кроме того, при столкновениях атомов или ионов со структурными ионами-партнерами можно при достаточно больших скоростях учитывать только экранирование ядра электронами, т.е. использовать статический потенциал невозмущенного иона, пренебрегая эффектами антиэкранирования и обмена. Под структурными ионами будем понимать ионы, обладающие остатками электронной оболочки. Отметим, что такие известные подходы, как первое приближение теории возмущений (Борновское приближение) в представлении параметра столкновения (БППС) [3], различные варианты приближения искаженных волн (ПИВ) [4, 5], приближение внезапных возмущений (ПВВ) [6–8], а также классический метод Монте-Карло (КММК) [9, 10] требуют достаточно сложных расчетов. При этом БППС и ПИВ в общем случае не обеспечивают ограниченность вероятности перехода в представлении прицельного параметра, что делает ненадежными результаты расчетов этими методами в области $q/v \geq 1$, где q – заряд иона-партнера, v – в атомных единицах. Оценки полного сечения однократной ионизации для ряда случаев были получены с разумной точностью в приближении бинарных соударений (ПБС) [11, 12], и в классическом импульсном приближении (КИП) [13], но эти приближения не позволяют вычислять $p(b)$.

В связи с этим представляется целесообразным для оценочных расчетов вероятности ионизации использовать существующие приближенные полуаналитические модели. Геометрическая модель (ГМ), предложенная в работах [14, 15], позволяет оценить вероятность ионизации как функцию прицельного параметра путем вычисления двукратных (в случае использования аналитической волновой функции начального состояния) или трехкратных (в случае использования волновой функции, заданной численно) интегралов от плотности вероятности начального состояния связанного электрона. При этом автоматически обеспечивается условие ограниченности вероятности перехода $p(b) \leq 1$.

ГМ может рассматриваться как упрощенный вариант КИП в представлении параметра столкновения, использующий для описания исходного состояния одноэлектронное квантовое распределение по координатам, но в пренебрежении распределением по импульсам (скоростям).

Повторим вкратце вывод основных результатов модели, следуя работам [14, 15] и имея в виду возможность обобщения на случай поля, отличного от чисто кулоновского. Рассмотрим ионизацию снаряда (иона или атома) в приближении одного “активного” электрона при столкновении с тяжелым партнером-мишенью (голым ядром или структурным ионом). В случае столкновения со структурным ионом будем использовать статический потенциал взаимодействия электрона с мишенью $V_{T\mathbf{r}} - \mathbf{R}_T$, где \mathbf{r} и \mathbf{R}_T – радиус-векторы электрона и ядра мишени соответственно, т.е. будем пренебрегать возбуждением и ионизацией иона-мишени.

Классическое условие ионизации иона или атома-снаряда имеет вид

$$\frac{(p')^2}{2} = \frac{(v'_e)^2}{2} \geq I, \quad (2)$$

где v'_e – классическая скорость электрона относительно ядра своего иона или атома после столкновения, I – потенциал ионизации иона-снаряда. Используя элементарные геометрические соотношения и предполагая начальную скорость электрона относительно своего ядра пренебрежимо малой, условие (2) можно переписать в виде

$$2v^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \geq I, \quad (3)$$

где θ – угол рассеяния электрона, движущегося относительно иона-мишени со скоростью $v_e = v$, v – относительная скорость сталкивающихся тяжелых частиц.

Отсюда следует условие для критического угла отклонения при рассеянии электрона на тяжелой частице-мишени

$$|\theta_{\text{cr}}(v)| = 2 \arcsin \left(\frac{1}{v} \sqrt{\frac{I}{2}} \right). \quad (4)$$

Критическое прицельное расстояние $b_{0,e}$ для электрона относительно мишени, соответствующее пороговому изменению скорости электрона и, соответственно, удовлетворяющее условию $\theta(b_{0,e}, v) = \theta_{\text{cr}}(v)$, может быть определено с помощью точного классического решения для угла отклонения $\theta(b_e, v)$ при любом центральном потенциале

(включая как кулоновский, так и короткодействующий или сумму кулоновского и короткодействующего потенциалов) [16, 17]

$$\theta(b_e, v) = \pi - 2b_e \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{b_e^2}{r^2} - \frac{2V(r)}{v^2}}}, \quad (5)$$

где r_{\min} определяется условием

$$1 - \frac{b_e^2}{r^2} - \frac{2V(r)}{v^2} = 0. \quad (6)$$

В случае кулоновского поля, как известно, интеграл вычисляется точно, и зависимость угла рассеяния от прицельного расстояния электрона выражается через элементарные функции [16, 17], что позволяет получить явное выражение для критического прицельного расстояния $b_0 = b_{0,e}$ также через элементарные функции

$$b_0 = \frac{|q|}{v^2} \left| \operatorname{ctg} \left(\frac{\theta_{cr}(v)}{2} \right) \right| = \frac{|q|}{v} \sqrt{\frac{2}{I} \left(1 - \frac{I}{2v^2} \right)}. \quad (7)$$

Именно этот случай рассматривался в [14, 15]. При использовании потенциалов, учитывающих частичное экранирование ядра, т.е. содержащих сумму кулоновского и короткодействующего потенциала, интеграл для угла отклонения электрона приходится вычислять численно. Соответственно, критическое прицельное расстояние электрона b_0 приходится определять интерполяцией по рассчитанной заранее таблице $\theta(b_e, v)$. Аналогично обстоит дело для случая короткодействующих потенциалов, который предполагается рассмотреть в следующей работе, посвященной ионизации атомов и ионов при столкновениях с нейтральными атомами.

Учитывая условие применимости ГМ (1), можем для большинства случаев упростить выражение (7) для b_0 в кулоновском поле

$$b_0 \approx \frac{|q|}{v} \sqrt{\frac{2}{I}}. \quad (8)$$

Вероятность ионизации одноэлектронного иона-снаряда $p(b)$ при произвольном параметре столкновения $b = b_{\text{PT}}$ определяется как интеграл от плотности вероятности распределения электрона в исходном состоянии по цилиндрической области пространства, удовлетворяющей условию $b_{e\text{P}} \leq b_0$. Результат в цилиндрических координатах имеет вид

$$p(b) = \int_0^{b_0} \int_0^{2\pi} w(b_{e\text{P}}) b_{e\text{T}} db_{e\text{T}} d\varphi, \quad (9)$$

где $b_{eP} = \sqrt{b^2 + b_{eT}^2 - 2bb_{eT} \cos(\varphi)}$.

Геометрический фактор $w(b_{eP})$, описывающий распределение электрона по прицельным расстояниям относительно ядра своего иона, выражается в виде одномерного интеграла по цилиндрической координате z (здесь выбрано направление оси z вдоль скорости $z \parallel \mathbf{v}$) от плотности вероятности начального состояния электрона $|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2$, где $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ – одноэлектронная волновая функция начального состояния электрона

$$w(b_{eP}) = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{nlm}(r(b_{eP}, z), \theta(b_{eP}, z), \phi)|^2 dz, \quad (10)$$

где $r(b_{eP}, z) = \sqrt{b_{eP}^2 + z^2}$, $\cos(\theta(b_{eP}, z)) = z/r(b_{eP}, z)$.

Если $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ задается в достаточно простой аналитической форме (например, водородоподобная функция или слетеровская функция с целым показателем степени), геометрический фактор $w(b_{eP})$ может быть вычислен в явном виде. Так, для ионизации атома H(1s) имеем

$$w(b_{eP}) = \frac{2}{\pi} b_{eP} K_1(2b_{eP}). \quad (11)$$

Аналогичные выражения могут быть получены для произвольных возбужденных состояний атома водорода, а также для основных или возбужденных состояний водородоподобных ионов и для состояний, описываемых Слетеровскими функциями с целыми показателями. При усреднении по m -компонентам интеграл по z в (11) берется от квадрата модуля радиальной функции $|R_{nl}(r(b_{eT}, z))|^2$.

Для сложных ионов или атомов, рассматриваемых в МНЧ или МНС, геометрический фактор для отдельного электрона $w(b_{eP})$ может быть получен однократным численным интегрированием соответствующей одноэлектронной плотности вероятности, рассчитанной с использованием какой-то приближенной волновой функции, в том числе заданной численно, например хартри-фоковской (ХФ) или полуэмпирической волновой функции [19].

Представляется существенным тот факт, что при использовании приближенного выражения (8) для критического прицельного расстояния электрона результат ГМ для кулоновского поля точно совпадает с результатом классического приближения внезапных возмущений (КПВВ) в пренебрежении начальным распределением по скоростям и при использовании квантовомеханического начального распределения по координатам.

В последовательно классическом подходе, изложенном выше, области с прицельными параметрами электрона с $b_{eT} = b_e > b_0$, соответствующие малой передаче импульса,

не вносят никакого вклада в ионизацию, т.е. эффективность ионизации меняется скачком от 1 до 0 при $b_e = b_0$. Чтобы приближенно учесть вклад больших прицельных параметров электрона, в работе [15] авторы модели ввели приближенный непрерывно меняющийся фактор эффективности ионизации $\eta(b_e; b_0)$

$$\eta(b_e; b_0) = \begin{cases} 1, & b_e < b_0(\sqrt{2} - 1) \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{b_e}{b_0} - \frac{b_0}{b_e} \right) \right], & b_0(\sqrt{2} - 1) < b_e < b_0(\sqrt{2} + 1) \\ 0, & b_e > b_0(\sqrt{2} + 1). \end{cases} \quad (11a)$$

При этом выражение для вероятности ионизации приобретает вид

$$p(b) = \int_0^{b_0(\sqrt{2}+1)} \int_0^{2\pi} w(b_{eP}) b_e \eta(b_e; b_0) db_e d\varphi. \quad (12)$$

Здесь параметры фактора эффективности ионизации $\eta(b_e; b_0)$ выбраны так, чтобы обеспечить совпадение результатов ГМ для полного сечения ионизации с результатами ПБС для ионизации ударом голого ядра [18] при больших энергиях. Таким образом, при выборе корректирующей функции рассматривался только случай ионизации кулоновским полем. Далее мы будем обозначать модель, характеризуемую уравнениями (11a, 12), сокращением ГМк ("ГМ с коррекцией"). Исходный вариант модели, характеризуемый уравнением (9), будем обозначать ГМи.

Полное сечение ионизации водородоподобного иона, или сечение ионизации определенного состояния многоэлектронного иона в МНЧ, определяется обычным образом

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^{\infty} p(b) b db. \quad (13)$$

Как видно из уравнений (9), (12), при заданном выборе волновой функции начального состояния электрона остальные характеристики системы (потенциал ионизации снаряда I , заряд мишени q и относительная скорость сталкивающихся тяжелых частиц v) входят в выражения для вероятности и сечения ионизации только через параметр b_0 . При использовании водородоподобных волновых функций начального состояния можно также выделить в явном виде зависимость сечения ионизации от заряда ядра иона снаряда Z .

Зависимость $p(b)$ вероятности ионизации атома $H(1s)$ ударами ядер He^{2+} от параметра столкновения, рассчитанная по моделям ГМк и ГМи для $v = 2$ а.е., приводится на рис. 1 в сопоставлении с результатами расчетов по КММК [20]. Поскольку ГМ не различает возможность захвата электрона ядром He^{2+} от вероятности ионизации, на рис. 1

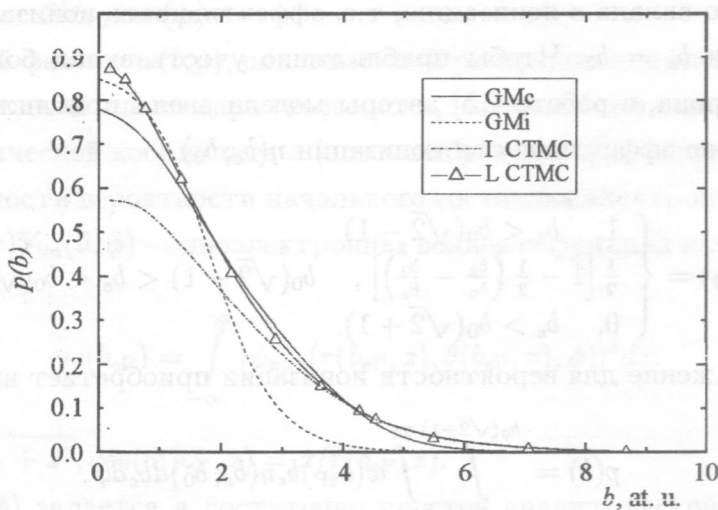


Рис. 1. Вероятности ионизации атомов водорода и потери электрона при столкновениях с ионами He^{2+} . Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КММК: ионизация (I CTMC), потеря электрона (L CTMC) – [20].

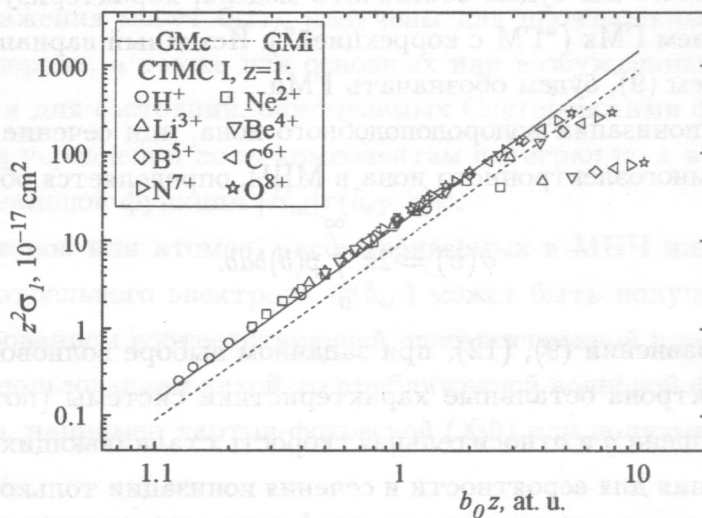


Рис. 2. Сечения ионизации атомов водорода при столкновениях с ядрами X^{z+} в функции критического прицельного расстояния b_0 . Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КММК (CTMC) – [20].

представлены КММК вероятности как для ионизации атома $H(1s)$, так и для вероятности потери электрона, т.е. суммы вероятностей ионизации и перезарядки. Вероятности,

рассчитанные по ГМк, согласуются с КММК вероятностью потери электрона с точностью выше 15%, и с КММК вероятностью ионизации с точностью порядка 25% вплоть до $b = 5$ а.е. Согласие ГМк и КММК результатов, вообще говоря, оказывается хуже при большем значении отношения q/v , но даже при $q/v = 5$ ($v = 2, q = 10$) вероятности по ГМк согласуются с КММК вероятностями потери электрона с точностью порядка 30% вплоть до $b = 7$ а.е., хотя отличие вероятностей ионизации может достигать фактора 4.

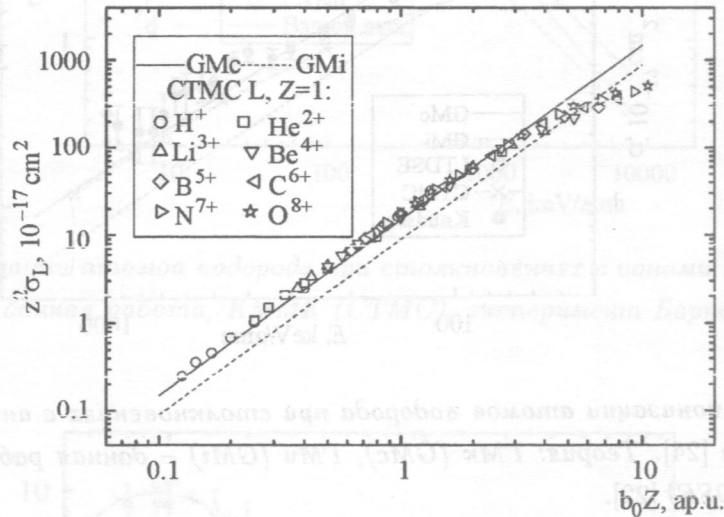


Рис. 3. Сечения потери электрона атомами водорода при столкновениях с ионами X^{q+} в функции критического прицельного расстояния b_0 . Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КММК (CTMC) [20].

Результаты расчетов по ГМ полных приведенных сечений $\sigma_r = Z^2 \sigma$ ионизации атома $H(1s)$ и водородоподобных ионов с зарядами ядра Z ударами голых ядер X^{q+} как функции от $b_0 Z$ приведены на рис. 2, где они сопоставляются с результатами расчетов по КММК для ионизации атомов $H(1s)$ ядрами с зарядами $q = 1 - 8$ [38]. Видно, что согласие результатов ГМк и КММК весьма удовлетворительно во всех случаях, когда выполняется основное условие (1) применимости ГМ, и не зависит от заряда q иона-мишени. Заметим, что достаточно высокая точность самого КММК подтверждена в упомянутой работе [38], а также в целом ряде работ, сравнением с большим количеством экспериментальных данных и детальными расчетами. Приведенные результаты также подтверждают преимущество ГМк перед ГМи.

На рис. 3 результаты расчетов по ГМк и ГМи сопоставляются с сечениями потери электрона, рассчитанными по КММК [20]. Как и в случае вероятностей перехода, со-

согласие между результатами ГМк и результатами КММК для сечений потери электрона оказывается весьма удовлетворительным даже там, где расхождение результатов для сечений ионизации достаточно велико.

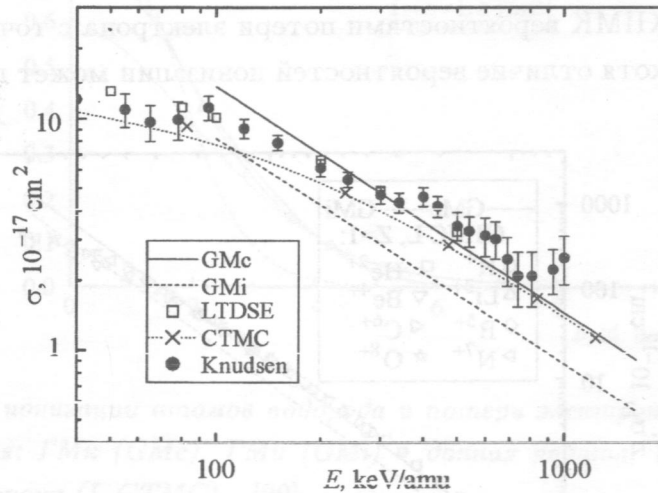


Рис. 4. Сечения ионизации атомов водорода при столкновениях с антипротонами. Эксперимент: Кнудсен [24]. Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КММК (CTMC) [21], ВУШС (LTDSE) [22].

В качестве примера расчета сечения ионизации в ситуации отсутствия канала перезарядки на рис. 4 представлены сечения ионизации атомов $H(1s)$ ударами антипротонов. В этом случае отличие результатов ГМк и КММК [21] не превышает 50% во всей рассмотренной области энергий. Согласие с результатами квантовых расчетов (численное решение временного уравнения Шредингера на пространственной сетке [22]) оказывается даже лучше (30%), хотя это скорее всего связано со случайной компенсацией ошибок в ГМ.

Как пример расчета по ГМ сечений при столкновениях атомов со структурными ионами на рис. 5 приведены результаты для сечений ионизации атомов H ударами ионов He^+ в сопоставлении с усредненными результатами различных теоретических расчетов [23]. При расчетах по ГМ использовалось статическое поле иона He^+ , т. е. учитывался эффект экранирования ядра гелия $1s$ электроном, но не учитывалось антиэкранирование. Проведенные оценки эффекта антиэкранирования в рамках ГМ показывают, что в данном случае учет антиэкранирования может увеличить результат не более чем на 20%.

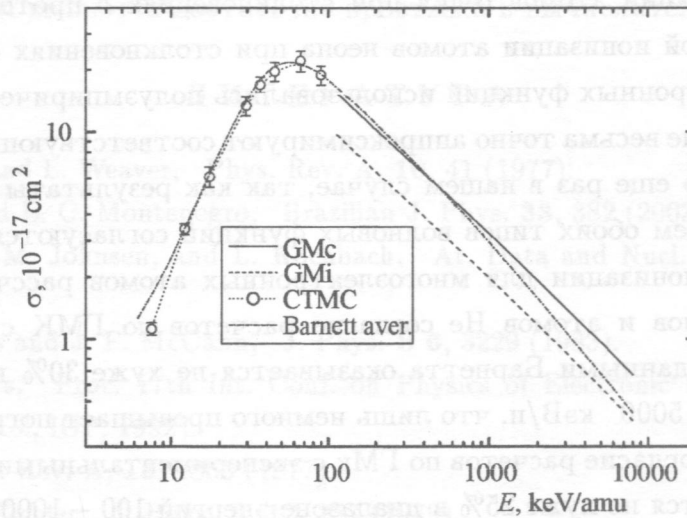


Рис. 5. Сечения ионизации атомов водорода при столкновениях с ионами He^+ . Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КМКК ($CTMC$), эксперимент Барнетт (усредненные результаты) [23].

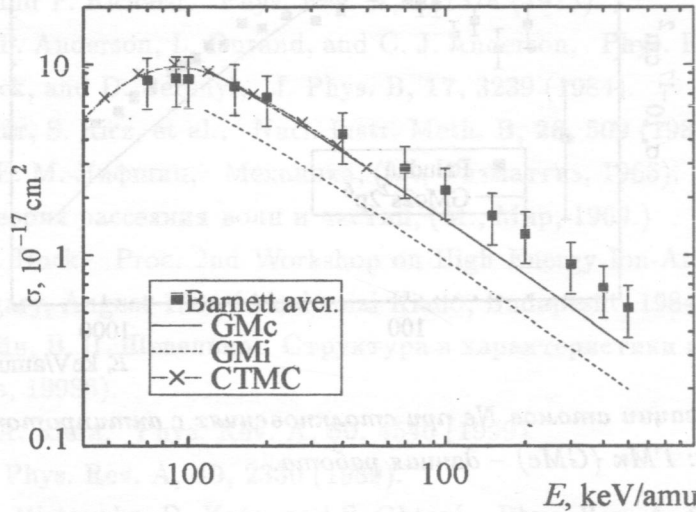


Рис. 6. Сечения ионизации атомов He при столкновениях с протонами. Эксперименты: Барнетт (усредненные данные) [23]. Теория: ГМк (GMc), ГМи (GMi) – данная работа, КМКК ($CTMC$) [21].

Для учета вклада нескольких электронов снаряда (атома или иона) в вероятность однократной ионизации, а также для расчета вероятности многократной ионизации можно применить МНЧ или близкую к ней МНС. Для примера на рис. 6 приведены сечения

однократной ионизации атомов гелия при столкновениях с протонами, а на рис. 7 – сечения однократной ионизации атомов неона при столкновениях с антипротонами. В качестве одноэлектронных функций использовались полуэмпирические функции Вайнштейна [19], которые весьма точно аппроксимируют соответствующие функции ХФ, что было подтверждено еще раз в нашем случае, так как результаты расчетов для Ne по ГМ с использованием обоих типов волновых функций согласуются с точностью выше 5%. Вероятности ионизации для многоэлектронных атомов рассчитывались в МНЧ. Для случая протонов и атомов Ne согласие расчетов по ГМК с усредненными экспериментальными данными Барнетта оказывается не хуже 30% в диапазоне энергий столкновения 100 – 5000 кэВ/н, что лишь немного превышает погрешность данных. В случае атомов Ne согласие расчетов по ГМК с экспериментальными данными Палудана и др. [25] оказывается не хуже 25% в диапазоне энергий 100 – 1000 кэВ/н.

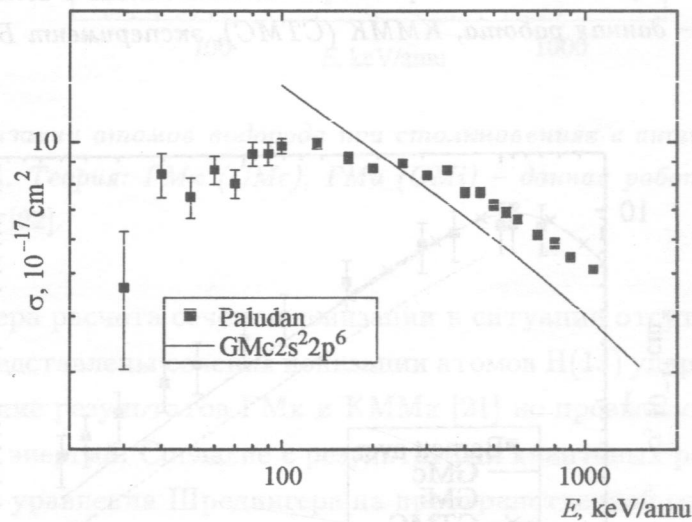


Рис. 7. Сечения ионизации атомов Ne при столкновениях с антипротонами. Эксперимент: Палудан, [25]. Теория: ГМК (GMc) – данная работа.

Подводя итог, можно заключить, что вариант ГМК (геометрической модели с коррекцией), предложенный в работе [15], позволяет получить оценку полного сечения ионизации атома или иона (говоря более строго, потери электрона) при соударениях с ионами, включая структурные ионы, с отклонением не более 50% от результатов КММК (классического приближения Монте-Карло) по крайней мере при $2\bar{v}_e < v < 6\bar{v}_e$ и зарядах иона-партнера вплоть до $q \sim 8$. Оценки вероятности ионизации (потери электрона) как функции прицельного параметра $p(b)$ по ГМК имеют тот же порядок точности. При

этом расчеты по ГМ являются достаточно простыми в вычислительном отношении.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] J. H. Mc Guire and L. Weaver, *Phys. Rev. A*, **16**, 41 (1977).
- [2] G. M. Sigaud and E. C. Montenegro, *Brazilian J. Phys.* **33**, 382 (2003).
- [3] J. M. Hansteen, M. Johnsen, and L. Kochbach, *At. Data and Nucl. Data Tables*, **15**, 305 (1975).
- [4] D. S. F. Crothers and J. F. McCann, *J. Phys. B* **6**, 3229 (1983).
- [5] D. S. P. Crothers, *Proc. 17th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions (Brisbane)*, (Bristol, IOP, 1992).
- [6] J. Eichler, *Phys. Rev. A*, **15**, 1856 (1977).
- [7] A. Salop and J. Eichler, *J. Phys. B*, **12**, 257 (1979).
- [8] A. B. Voitkiv, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Phys. Rev. A*, **59**, 2794 (1999).
- [9] R. Abrines and I. C. Percival, *Proc. Phys. Soc.* **88**, 861; *ibid*, **88**, 873 (1966).
- [10] R. E. Olson and A. Salop, *Phys. Rev. A*, **16**, 531 (1977).
- [11] J. D. Garcia, *Phys. Rev. A*, **4**, 955 (1971).
- [12] J. H. McGuire and P. Richard, *Phys. Rev. A*, **8**, 1374 (1973).
- [13] K. Riesselman, L. Anderson, L. Durand, and C. J. Anderson, *Phys. Rev. A*, **43**, 5934 (1991).
- [14] B. Sulik, G. Hock, and D. Berényi, *J. Phys. B*, **17**, 3239 (1984).
- [15] B. Sulik, I. Kádár, S. Ricz, et al., *Nucl. Instr. Meth. B*, **28**, 509 (1987).
- [16] Л. В. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, (М., Физматгиз, 1965).
- [17] Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, (М., Мир, 1969.)
- [18] B. Sulik and G. Hock, *Proc. 2nd Workshop on High Energy Ion-Atom Collision Processes, Debrecen, Hungary, August 1984 (Akadémiai Kiadó, Budapest, 1984) p. 183.*
- [19] Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько, *Структура и характеристики ионов в горячей плазме* (М., Физматгиз, 19986).
- [20] C. Plescas and A. Riera, *Phys. Rev. A*, **60**, 4546 (1999).
- [21] D. R. Schultz, *Phys. Rev. A*, **40**, 2330 (1989).
- [22] X. -M. Tong, T. Watanabe, D. Kato, and S. Ohtani, *Phys. Rev. A*, **63**, 022711 (2001).
- [23] C. F. Barnett et al., *Atomic Data for Fusion*. **1**, Report ORNL-6086, unpublished, 1980.
- [24] H. Knudsen, U. Mikkelsen, K. Paludan et al. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4627 (1995).
- [25] K. Paludan, H. Bluhme, H. Knudsen, et al., *J. Phys. B*, **30**, 3951 (1997).

Поступила в редакцию 2007 г.