

УДК

## РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ ОДНОВРЕМЕННОЙ ИОНИЗАЦИИ В ИОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ МЕТОДОМ ОБОБЩЕННОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

А. Д. Уланцев<sup>1</sup>

Геометрическая модель (ГМ) ионизации при ион-атомных столкновениях (Sulik et al., *J. Phys. B* **17**, 3239 (1984); *Nucl. Instr. Meth. B* **28**, 509 (1987)) обобщена для описания ионизации обеих сталкивающихся частиц (одновременной ионизации) за счет электрон-электронного взаимодействия. Обобщенная ГМ (ОГМ) позволяет вычислять сечения потери электрона налетающей частицей с одновременной ионизацией мишени при скоростях столкновения больших, чем характеристические скорости электронов, с точностью до множителя два относительно результатов Борновского или импульсного приближения. Преимуществом ОГМ, кроме простоты, можно признать также легкость вычисления  $p(b)$  ( $p$  – вероятность ионизации,  $b$  – параметр столкновения), что позволяет включить вклад одновременной ионизации в более общие приближенные схемы расчета сечений многоэлектронной ионизации атомов или ионов.

При столкновениях двух тяжелых структурных атомных частиц существенную роль, нередко соизмеримую с ролью одноэлектронной ионизации, играет одновременная ионизация обоих партнеров, частицы-мишени и налетающей частицы (снаряда) [1].

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

Одновременную ионизацию называют также ионизацией мишени с потерей электрона снарядом. Основной вклад в одновременную ионизацию во многих случаях дает взаимодействие электрона, принадлежащего снаряду, с электроном мишени, приводящее к коррелированному переходу обоих электронов в сплошной спектр [2]. В первом порядке теории возмущений этот вклад является единственным. Двухэлектронные переходы за счет электрон-электронного взаимодействия называют также двухцентральной корреляцией, а в случае применения теории возмущений первого порядка – эффектом антиэкранирования. Заметим, что в эффект антиэкранирования включают также ионизацию одной из частиц с возбуждением другой, однако вклад таких переходов в полную ионизацию соответствующей частицы обычно намного меньше, чем вклад одновременной ионизации.

Вычисление сечений двухэлектронных переходов в сплошной спектр достаточно сложно даже в первом Борновском приближении [3–5] и импульсном приближении [6, 7]. Поэтому могут быть полезны более упрощенные приближенные методы, дающие результаты с разумной точностью, скажем, до фактора порядка двух относительно Борновского приближения. Заметим, кстати, что для одновременной ионизации первое Борновское приближение во многих случаях дает разумные результаты даже в области максимума сечения [1], что, вообще говоря, несправедливо для ионизации одной частицы.

В наших работах [18, 19] было рассмотрено применение геометрической модели (ГМ) [8, 9] к вычислению вероятности и сечения ионизации одного из партнеров при высокоэнергетических ион-атомных и атом-атомных столкновениях, в том числе для столкновений со структурными партнерами с учетом эффекта экранирования. ГМ можно рассматривать как упрощенный высокоэнергетический предел классического приближения Монте-Карло [10, 11] или классического импульсного приближения [12] в приближении прицельного параметра (параметра столкновения). Достоинством ГМ можно считать возможность вычисления вероятности ионизации как функции прицельного параметра и автоматическую нормировку этой вероятности на единицу.

Поэтому представляется интересным обобщить ГМ на случай вычисления вероятностей одновременной ионизации с учетом электрон-электронного взаимодействия. Для этого используем те же предположения, что и в стандартной ГМ, для описания столк-

новения двух структурных частиц. Вначале для простоты будем считать обе частицы водородоподобными.

Пренебрегаем распределением электронов по скоростям, что, очевидно, возможно при

$$v \gg v_1 = v_{eP}; \quad v \gg v_2 = v_{eT}, \quad (1)$$

где  $v$  – относительная скорость сталкивающихся тяжелых частиц (строго говоря, их ядер),  $v_{eT}$ ,  $v_{eP}$  – средние скорости рассматриваемых электронов частицы-мишени и налетающей частицы в начальных состояниях. Далее, рассматривая столкновение двух свободных электронов, один из которых движется со скоростью снаряда  $v$ , а другой покоится, выражаем изменение энергии каждого электрона через межэлектронное прицельное расстояние  $b_{ee}$  [13]. При этом, очевидно, энергия каждого электрона должна вычисляться в системе своего центра. Предполагаем, как и в любой классической теории, что ионизация обоих партнеров происходит, когда полученная каждым электроном энергия превышает его энергию связи. Отсюда получаем выражение для минимального межэлектронного прицельного расстояния, при котором возможна одновременная ионизация обоих партнеров

$$b_{0,ee} = \frac{1}{v} \sqrt{\frac{2}{I_m} \left(1 - \frac{2I_m}{v^2}\right)}, \quad (2)$$

где  $I_m = \max(I_P, I_T)$  – наибольший из потенциалов ионизации сталкивающихся частиц. Вероятность одновременной ионизации  $p(b)$  как функция прицельного параметра  $b$  определяется интегралом от произведения плотностей вероятностей  $\rho_i(\mathbf{r}_i) = |\psi_i(\mathbf{r}_i)|^2$  взаимодействующих электронов по области конфигурационного пространства двух электронов, удовлетворяющей условию

$$b_{12} = b_{e1,e2} = |\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2| \leq b_{0,ee}, \quad (3)$$

то есть

$$p(b) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \rho_1(\mathbf{r}_1) \rho_2(\mathbf{r}_2) \theta(b_{0,ee} - b_{12}), \quad (4)$$

где  $\theta(x)$  – ступенчатая функция.

Модель, определяемую уравнениями (2, 4), назовем обобщенной геометрической моделью (ОГМ), generalized geometrical model (GGM). Как и в случае стандартной ГМ для одноэлектронной ионизации, чтобы приближенно учесть вклад столкновений с малой передачей импульса, можно ввести вместо ступенчатой функции  $\theta(b_{0,ee} - b_{12})$  сглаженную

корректирующую функцию  $\eta(b_{12}; b_{0,ee})$  [9, 18]. Тогда

$$p(b) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \rho_1(\mathbf{r}_1) \rho_2(\mathbf{r}_2) \eta(b_{12}; b_{0,ee}). \quad (5)$$

Корректирующая функция  $\eta(b_{12}; b_{0,ee})$  может быть выбрана в форме, аналогичной функции  $\eta(b_e; b_0)$  [9, 18]. Модель, определяемую уравнениями (2, 5), назовем обобщенной геометрической моделью с коррекцией (ОГМк), *generalized geometrical model with correction* (GGMc). Далее будет рассматриваться именно эта модель, поскольку для случая кулоновского взаимодействия введение коррекции весьма существенно [18].

Вводя вспомогательные интегралы  $u_i(b_i)$  от плотностей вероятностей по осям  $z_1$  и  $z_2$ , параллельным относительной скорости столкновения  $\mathbf{v}$

$$u_i(b_i) = 2 \int_0^\infty \rho_i(\sqrt{b_i^2 + z_i^2}) dz_i, \quad (6)$$

и заменяя некоторые из переменных интегрирования, получаем окончательное выражение для вероятности одновременной ионизации в ОГМк (которая и используется далее)

$$p(b) = \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^\infty db_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_{12} \int_0^{b_{0,ee}\sqrt{2}} db_{12} b_1 b_{12} u_1(b_1) u_2(b_2) \eta(b_{12}; b_{0,ee}), \quad (7)$$

где

$$b_2 = \sqrt{b_1^2 + b_{12}^2 - 2b_1 b_{12} \cos(\varphi_{12})}.$$

Если используемые волновые функции являются водородоподобными или Слетеровскими с целыми показателями, вспомогательные функции  $u_i(b_i)$  могут быть выражены в аналитической форме [19]. Четырехкратное численное интегрирование в (7) не представляет серьезных вычислительных трудностей даже на ПК со средним быстродействием, т.к. функции  $u_i(b_i)$  неотрицательны и монотонны или имеют небольшое число максимумов.

В случае столкновений двух- или многоэлектронных частиц вероятность одновременной ионизации для пары электронов из заданных оболочек выражается в модели независимых частиц через одноэлектронные плотности вероятности аналогично (5, 7), и затем полная вероятность ионизации может быть приближенно выражена через вероятности ионизации пар. Сечение взаимной ионизации выражается через  $p(b)$  обычным для метода прицельного параметра образом.

Результаты расчетов по ОГМк (2, 5) для одновременной ионизации при столкновениях водородоподобных ионов с зарядами  $1 \leq Z \leq 10$  с атомами водорода и гелия

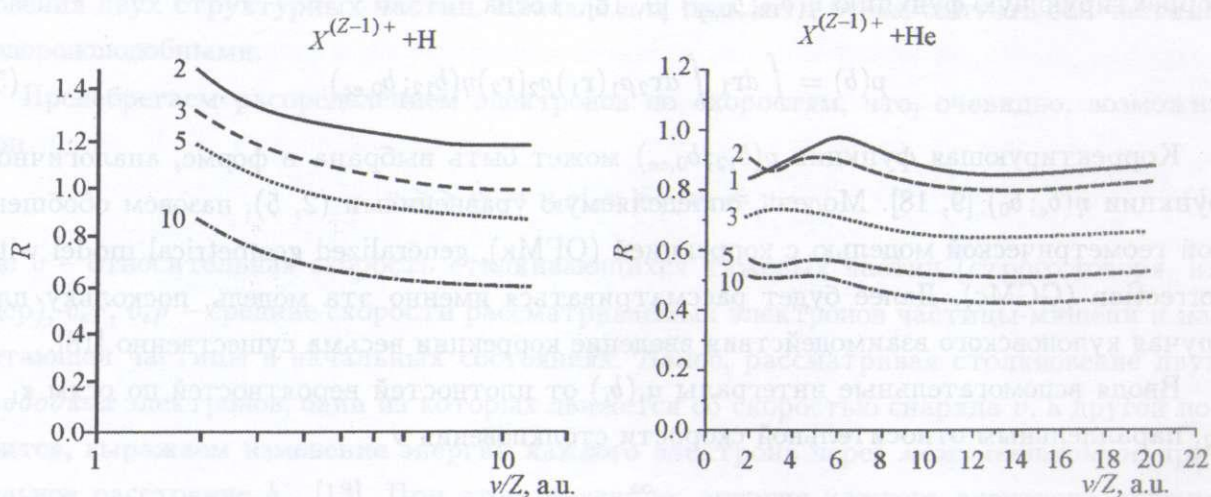


Рис. 1. Отношение сечений одновременной ионизации водородоподобных ионов  $X^{(Z-1)+}$  и атомов  $H$ , рассчитанных по ОГМК и в Борновском приближении [4]. Заряды  $Z$  указаны около графиков.

Рис. 2. Отношение сечений одновременной ионизации водородоподобных ионов  $X^{(Z-1)+}$  и атомов  $He$ , рассчитанных по ОГМК и в Борновском приближении [4]. Заряды  $Z$  указаны около графиков.

сравниваются с Борновскими результатами [4] на рис. 1, 2, где даны отношения сечений

$$R = \frac{\sigma_{GMc}(v/Z)}{\sigma_B(v/Z)}.$$

Видно, что в достаточно широких пределах  $2 \leq v/Z \leq 20$  отличие не превышает фактора два. При этом отношение  $R$  слабо зависит от аргумента  $v/Z$ , что позволяет при необходимости ввести корректирующий (подгоночный) множитель для вероятности и сечения взаимной ионизации, являющийся функцией только от заряда  $Z$  налетающей частицы. Так, для столкновений водородоподобных ионов с атомами водорода введение в выражение для вероятности и сечения взаимной ионизации корректирующего множителя

$$k(Z) = \frac{1}{0.40464 + 1.10887 \exp(-Z/6.21663)}$$

позволяет заметно улучшить совпадение результатов ОГМК и Борновских, уменьшив расхождение в рассматриваемой области параметров до 20%. Отметим, что в области

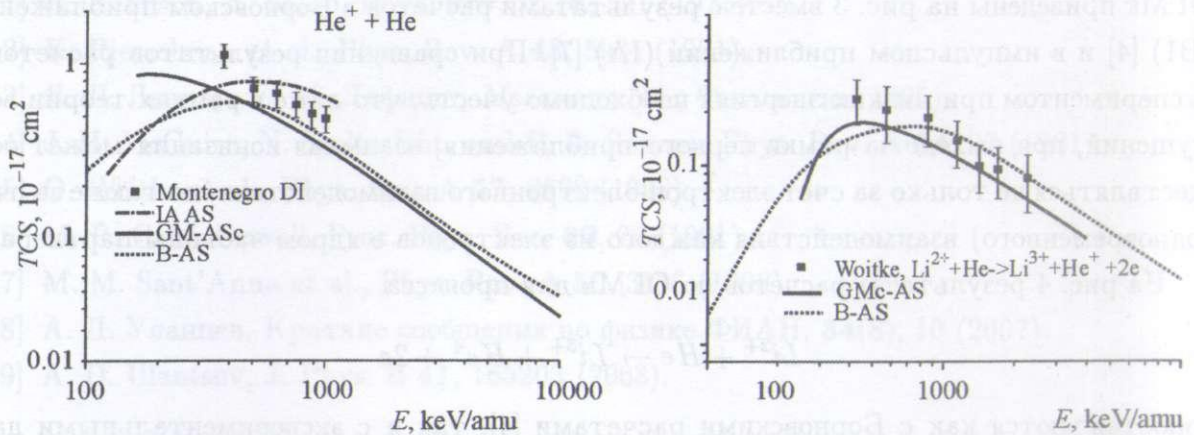


Рис. 3. Сечения одновременной ионизации ионов He<sup>+</sup> и атомов He. Теория: сплошная кривая – ОГМк (GGMc) – данная работа; пунктир – Борновское приближение (B1-AЭ, B1-AS) [4]; штрих-пунктир – импульсное приближение (ИП, IA) [7]. Квадраты – эксперимент [7].

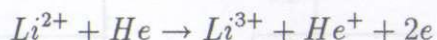
Рис. 4. Сечения одновременной ионизации ионов Li<sup>2+</sup> и атомов He. Теория: сплошная кривая – ОГМк (GGMc) – данная работа; пунктир – Борновское приближение (B1-AЭ, B1-AS) [4]. Квадраты – эксперимент [15].

$1.4 \leq v/Z \leq 2$ , не приведенной на рисунках, отличие результатов также не превышает фактор два. Однако продолжение расчетов по ОГМ для данной области, строго говоря, незаконно, т.к. для электрона в ионе  $X^{(Z-1)+}$  при этих энергиях нарушается основное условие применимости модели. Соответственно результаты для этой области надо считать разумной экстраполяцией за пределы области применимости с использованием аналитической зависимости от параметров, полученной в высокоэнергетической области.

Для столкновений водородоподобных ионов с атомами водорода и гелия опубликованные приближенные аналитические выражения для Борновского сечения взаимной ионизации [4] обеспечивают примерно такое же согласие с численными Борновскими расчетами при энергиях выше максимума, как и ОГМк. Однако ОГМк позволяет вычислить также  $p(b)$  – вероятность перехода как функцию прицельного параметра, а также позволяет достаточно легко перейти к рассмотрению пар более сложных партнеров. Знание  $p(b)$  и выполнение условия нормировки по крайней мере в канале ионизации  $p(b) \leq 1$  позволяет в дальнейшем учесть, хотя бы приближенно, влияние различных каналов реакции и получить нормировку на все основные каналы.

Расчеты сечений взаимной ионизации обоих сталкивающихся партнеров  $\text{He}^+$  и  $\text{He}$  по ОГМк приведены на рис. 3 вместе с результатами расчетов в Борновском приближении (B1) [4] и в импульсном приближении (IA) [7]. При сравнении результатов расчетов с экспериментом при низких энергиях необходимо учесть, что даже в рамках теории возмущений, при выходе за рамки первого приближения, взаимная ионизация может осуществляться не только за счет электрон-электронного взаимодействия, но также за счет (одновременного) взаимодействия каждого из электронов с ядром частицы-партнера.

На рис. 4 результаты расчетов по ОГМк для процесса



сопоставляются как с Борновскими расчетами [4], так и с экспериментальными данными для сечений одновременной ионизации мишени и потери электрона снарядом [15]. Как видно из рисунка, расхождение ОГМ и Борновских результатов в области  $E > 300$  кэВ/аеи не превышает 20%, и примерно с такой же точностью результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными.

Подводя итоги, можно утверждать, что предложенное обобщение геометрической модели позволяет достаточно просто оценить сечения взаимной ионизации с разумной точностью, в пределах фактора два. В ходе расчетов определяются нормированные вероятности ионизации  $p(b) \leq 1$ , которые могут быть использованы в более сложных моделях совокупности процессов изменения зарядовых состояний партнеров.

В заключение хочу поблагодарить В.П. Шевелько за плодотворное обсуждение работы. Работа выполнена при поддержке гранта INTAS N 06-1000012-8530.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] H.-P. Hülskötter et al., Phys. Rev. A **44**, 1712 (1991).
- [2] W. Wu et al., Phys. Rev. A **55**, 2771 (1998).
- [3] D. R. Bates, A. Williams, Proc. Phys. Soc. A **70**, 306 (1957).
- [4] И. С. Дмитриев, Я. М. Жилейкин, В. С. Николаев, ЖЭТФ **49**, 500 (1965).
- [5] R. Anholt, Phys. Lett. **114A**, 126 (1986).
- [6] T. J. M. Zouros et al., Nucl. Instr. Meth. B **79**, 166 (1993).
- [7] Montenegro, Phys. Rev. A **50**, 3186 (1994).
- [8] B. Sulik, G. Hock, and D. Berényi, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **17**, 3239 (1984).
- [9] B. Sulik et al., Nucl. Instr. Meth. B **28**, 509 (1987).

- [10] R. Abrines, I. C. Percival, Proc. Phys. Soc. **88**, 861 (1966); *ibid*, **88**, 873 (1966).  
[11] R. E. Olson, A. Salop, Phys. Rev. A **16**, 531 (1977).  
[12] K. Riesselman et al., Phys. Rev. A **43**, 5934 (1991).  
[13] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика* (М., Физматгиз, 1965).  
[14] J. H. McGuire, N. Stolterfoht, and P. R. Simony, Phys. Rev. A **24**, 97 (1981).  
[15] O. Voitke et al., Phys. Rev. A **57**, 2692 (1998).  
[16] M. R. C. McDowell, Proc. Phys. Soc. **89**, 23 (1991).  
[17] M. M. Sant'Anna et al., Phys. Rev. A **50**, 3186 (1998).  
[18] А. Д. Уланцев, Краткие сообщения по физике ФИАН, **34**(8), 10 (2007).  
[19] A. D. Ulantsev, J. Phys. B **41**, 165203 (2008).

Поступила в редакцию 5 мая 2009 г.