01;02

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ДЛЯ СЕЧЕНИЙ МНОГОЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА УДАРОМ БЫСТРОГО ТЯЖЕЛОГО ИОНА

А.Б.Войткив, А.В.Коваль

Институт прикладной лазерной физики, Ташкент, Узбекистан
(Поступило в Редакцию 24 августа 1994 г.
В окончательной редакции 22 февраля 1995 г.)

Рассматривается многоэлектронная ионизация атома ударом быстрого многозарядного иона (МЗИ) в области параметров задачи $v^2 \gg Z \gtrsim v \gg v_0$, $n \gg 1$ (Z, v — соответственно заряд и скорость МЗИ, v_0 — характерные скорости рассматриваемых электронов в атоме, n — число вылетающих электронов; атомные единицы). Получены простые асимптотические формулы для сечений ионизации.

Процесс столкновения быстрого многозарядного иона (МЗИ) с многоэлектронным атомом представляет собой весьма интересный как в фундаментальном, так и в прикладном отношении вид задачи многих тел [1,2]. В теоретическом исследовании различных аспектов этой сложной задачи (ионизация и перезарядка, энергии и импульсы ионов отдачи и т. д.) вне рамок теории возмущений по полю МЗИ наибольший прогресс достигнут, по-видимому, при использовании метода классических траекторий Монте–Карло (МКТМК), который представляет собой весьма мощный численный метод решения. МКТМК дает достаточно хорошее согласие с экспериментом как для полных сечений ионизации (перезарядки), так и при нахождении различных дифференциальных сечений, энергий ионов отдачи и т. д. [1].

В то же время, на наш взгляд, представляет достаточный интерес (особенно для экспериментаторов) нахождение аналитических оценок физических величин, которые бы объединяли простоту и наглядность подхода к проблеме и разумное согласие с экспериментальными данными. В настоящей работе мы предлагаем простые асимптотические оценки для сечений многоэлектронной ионизации атомов при столкновениях с быстрыми МЗИ. Рассматривается следующая область параметров задачи $v^2 \gg Z \gtrsim v \gg v_0$, $n \gg 1$ (Z, v — соответственно заряд и скорость МЗИ; v_0 — характерные скорости рассматриваемых электронов в атоме; n — число электронов, покидающих атом; здесь и ниже, если специально не оговорено иное, используются ат. ед.). При этом мы используем для описания процесса столкновения "модифицированную" модель независимых электронов и приближение внезапных возмущений [3,4].

В модели независимых электронов вероятность W_n одновременного отрыва n электронов из атомной оболочки, содержащей N электронов, определяется следующим выражением [2]

$$W_n(b) = \binom{N}{n} w^n (1-w)^{N-n}, \tag{1}$$

где $w(b)$ — вероятность одноэлектронного (ионизационного) перехода [2], b — прицельный параметр, $\binom{N}{n}$ — биноминальные коэффициенты.

В выражении (1) вероятность $w(b)$ не зависит от числа вылетающих электронов. Однако очевидно, что физические условия, которые сильно влияют на величину $w(b)$, меняются при изменении n. Например, дальнодействующее поле иона отдачи, в котором движется удаляющийся электрон, существенно зависит от степени ионизации n; средняя энергия связи (на один электрон) также зависит от n (см. по этому поводу [2 с. 272] и цитируемую там литературу). Поэтому, хотя ниже мы и будем использовать выражение (1), при этом входящая туда вероятность $w(b)$ будет рассматриваться как зависящая от зарядового состояния иона отдачи $w = w_n(b)$. Отметим, что введение зависимости вероятности одноэлектронного перехода от числа покидающих атом электронов уже использовалось в литературе (например, в [5,6] при описании ионизации гелия). Сечение ионизации определяется интегрированием "модифицированной" вероятности $w_n(b)$ по всем прицельным параметрам

$$\sigma_n = 2\pi \binom{N}{n} \int_0^\infty dbb(w_n)^n (1-w_n)^{N-n}. \tag{2}$$

Мы будем предполагать, что вероятности $w_n(b)$ могут быть приближенно описаны как вероятности ионизации водородоподобных ионов с соответствующим эффективным зарядом ядра (остова) z_n (см. также [5,6]), т. е. $w_n(b) = w(Z, v; z_n; b)$. Функция $w(Z, v; z_n; b)$ удовлетворяет простому соотношению подобия, которое следует из уравнения Шредингера без дополнительных упрощений (см., например, [7,8]) и поэтому может рассматриваться как точное

$$w(Z, v; z_n; b) = w(Z/z_n, v/z_n; 1; bz_n). \tag{3}$$

Для описания столкновений быстрых частиц с атомами ($v \gg v_0$) в области прицельных параметров $b \ll v/z_n^2$ применимо приближение внезапных возмущений [3,4]. В нулевом порядке этого приближения, которое применимо при $Z \ll v^2$ (см., например, [9,10]), амплитуда атомного перехода зависит только от отношения Z/v и мы имеем более простое соотношение:

$$w(Z, v; z_n; b) = w(Z, v; 1; bz_n). \tag{4}$$

Используя (2) и (4), получаем

$$\sigma_n = 2\pi \binom{N}{n} \int\limits_0^\infty dbb \left(w(Z,v;z_n;b)\right)^n \left(1 - w(Z,v;z_n;b)\right)^{N-n} =$$

$$= 2\pi \binom{N}{n} \frac{1}{z_n^2} \int\limits_0^\infty dbbw_a^n(1-w_a)^{N-n}, \qquad (5)$$

где $w_a = w(Z,v;1;b)$ — вероятность ионизации атома водорода.

Основной вклад в сечения многоэлектронной ионизации атома вносят столкновения в области прицельных параметров, где приближение внезапных возмущений применимо [11]. Поэтому использование в выражении (5) для всех прицельных параметров скейлинга (4) к заметной ошибке не приводит (об оценке этой ошибки см. [11]).

Численные расчеты МКТМК (см., например, [12,13]) показывают, что при $Z \gtrsim v \gg v_0$ вероятность $w_a(b)$ достигает в области малых прицельных параметров насыщения, очень мало отличаясь при этом от единицы. Эти расчеты, а также проведенный при выполнении настоящей работы квантово-механический расчет в нулевом приближении теории внезапных возмущений [10] показывают (рис. 1), что при $v^2 \gg Z \gtrsim v \gg v_0$ можно разделить всю область прицельных параметров на три подобласти: область малых прицельных параметров $b < b_s$, где вероятность $w(b)$ насыщается и очень близка к единице; область промежуточных прицельных параметров $b > b_s$, где эта вероятность убывает с ростом b, оставаясь все еще довольно значительной по величине; область больших прицельных параметров $b \gg b_s$ ($b \gg Z/v$), где вероятность $w_a(b)$ мала и может быть рассчитана в первом порядке теории возмущений по полю МЗИ, что дает при $Z/v \ll b \ll v$ $w_a(b) = \beta Z^2/b^2v^2$ (коэффициент β зависит от того, в каком дискретном состоянии находился исходно атом водорода, например $\beta = 4 \cdot 0.283$, $4 \cdot 0.82$, $4 \cdot 0.53$ соответственно для $1S$, $2S$, $2P$ исходных состояний [14] (для $2P$ проводится усреднение по проекции углового момента); отметим также что при $Z/v \ll b \ll v$ применимо и приближение внезапных возмущений [10]). Анализ численных расчетов и аналитические оценки [9,15] приводят к $b_s \sim Z/v$.

Нетрудно убедиться непосредственным дифференцированием, что максимум вероятности $W_n(b)$ при $n < N$ находится в точке $b_n > b_s$, такой что $w_a(b_n) = n/N$. Можно ожидать, что при $n \gg 1$ этот максимум является узким. Действительно, при $b > b_n$ функция $W_n(b)$ должна быстро уменьшаться из-за сомножителя w_a^n, при $b < b_n$ эта функция убывает из-за $(1-w_a)^{N-n}$. Если расстояние между точками b_s и b_n мало́, то функция $W_n(b)$ должна быстро убывать и при $b < b_n$. Покажем непосредственным расчетом, что функция $W_n(b)$ имеет узкий максимум, если точка b_n лежит в области промежуточных прицельных параметров. Представим $W_n(b)$ в виде

$$bw_a^n(1-w_a)^{N-n} = b_n \exp(F(b)), \qquad (6)$$

где
$$F(b) = \ln\left(w_a^n(1-w_a)^{N-n}\right) \tag{7}$$
и ограничимся разложением функции $F(b)$ в ряд Тейлора в окрестности точки b_n с точностью до квадратичных членов включительно. Для первой и второй производных функции $F(b)$ в точке b_n имеем
$$F'(b_n) = 0,$$
$$F''(b_n) = -N^3(w_a'(b_n))^2/(n(N-n)). \tag{8}$$
Для эффективной ширины максимума γ_n можно тогда записать
$$\gamma_n = \left(\frac{n(N-n)}{N^3(w_a'(b_n))^2}\right)^{1/2}$$
и, оценивая производную функции $w_a(b)$ в промежуточной области прицельных параметров как $w_a'(b) \simeq w_a(b_s)/\Delta b$, где $\Delta b \sim 1$ — размер этой области, находим, что эффективная ширина меняется от $\gamma_{\max} \sim N^{-1/2}$ (при $n = N/2$) до $\gamma_{\min} \sim N^{-1}$ (при $N-n \sim 1$), т.е. эти максимумы действительно являются узкими, если точка b_n находится в области промежуточных прицельных параметров. В этом случае величина интеграла (5) определяется малой окрестностью точки b_n и мы можем вычислить его, ограничиваясь в разложении для функции $F(b)$ членами до квадратичных включительно.

Отметим сразу, что вышесказанное не имеет места при $1 \ll n \ll N$, когда $w_a(b_n) \ll 1$ и соответственно $w_a(b) = \beta Z^2/b^2v^2$ при $b \simeq b_n$. В этом случае для ширины максимума имеем $\gamma_n \sim (N/n)^{1/2}$, т.е. при $N \gg n$ он является широким. Однако в последнем случае для описания ионизации можно попытаться воспользоваться теорией возмущений по полю МЗИ [16], и здесь мы рассматривать его не будем. С учетом выражений (5)–(8) для сечений находим
$$\sigma_n = \frac{2\pi b_n}{z_n^2}\binom{N}{n}\frac{n^n(N-n)^{N-n}}{N^N|w_a'(b_n)|}\left(\frac{2\pi n(N-n)}{N^3}\right)^{1/2} \tag{9}$$
Если не только $N \gg 1$, $n \gg 1$, но и $N-n \gg 1$, то, используя для представления факториалов, входящих в (9), формулу Стирлинга $m! = (2\pi)^{1/2}m^{m+1/2}\exp(-m)$ (см., например, [17]), выражение для сечений можно существенно упростить
$$\sigma_n = \frac{2\pi b_n}{z_n^2|w_a'(b_n)|N}. \tag{10}$$
Поскольку формула Стирлинга дает хорошее представление и для факториалов малых чисел, то выражение (10) можно использовать также для оценки сечений и при $N-n \sim 1$. С учетом приближенных соотношений
$$w_a'(b_n) \simeq \frac{w_a(b_{n+1}) - w_a(b_n)}{b_{n+1}-b_n} = 1/(N(b_{n+1}-b_n))$$
и
$$b_{n+1} \simeq b_n + \frac{db_n}{dn}$$

выражение (10) может быть переписано также в виде:

$$\sigma_n \simeq z_n^{-2} \left| \frac{d(\pi b_n^2)}{dn} \right|, \tag{11}$$

т. е. сечение ионизации пропорционально скорости, с которой уменьшается с ростом n площадь круга радиуса b_n.

Дальнейшее упрощение (10) вряд ли возможно без привлечения более конкретных представлений о виде зависимости $w_a(b)$ в области промежуточных прицельных параметров. Однако если для $w_a(b)$ имеются результаты численных расчетов или $w_a(b)$ исходно задана в виде простой модельной функции [18], то формула (10) может быть весьма полезна. Ниже, основываясь на выражениях (10), (11) и результатах наших численных расчетов для $w_a(b)$, мы получаем простое рекуррентное соотношение для сечений многоэлектронной ионизации, а также оценки для абсолютных значений этих сечений.

Анализ показывает, что зависимость $w_a(b)$ для ионизации из $1S$-состояния, приведенная на рис. 1, в области прицельных параметров, где $w_a(b)$ уже заметно меньше единицы, но все еще не очень мала, с погрешностью, не превосходящей нескольких процентов, аппроксимируется функцией $w_a(b) = \exp(-A_1 b^2 - A_2 b - A_3)$, где $A_1 = 0.0256$, $A_2 = 0.7578$, $A_3 = -0.8122$ $(1.5 < b < 2.7)$. Подставляя эту функцию в (10), получаем, что $\sigma_n \sim z_n^{-2} n^{-1}$ с точностью до малосущественного логарифмического члена. Для вероятностей ионизации из исходных $2S$- и $2P$-состояний (в последнем случае проводилось усреднение по проекциям углового момента исходного состояния), которые также представлены на рис. 1, подобный же анализ показывает, что $w_a(b) = \exp(-A_1 b^2 - A_2 b - A_s)$, где $A_1 = 0.092$, $A_2 = -0.1014$, $A_3 = -0.2437$ для $2S$ и $A_1 = 0.0624$, $A_2 = -0.049$, $A_3 = -0.088$ для $2P$; $2.5 < b < 4.8$, и мы вновь приходим к зависимости $\sigma_n \sim z_n^{-2} n^{-1}$. В общем случае очевидно, что если вероятность $w(b)$ может быть аппроксимирована в промежуточной области b как $\exp(-f(b))$, где $b/f'(b)$ — медленно меняющаяся в сравнении с $\exp(f(b))$ функция b, то для сечений (10) будет иметь место асимптотическая зависимость $\sigma_n \sim z_n^{-2} n^{-1}$. Отметим также, что простейшая экспоненциальная аппроксимация $w(b) = A \exp(-ab)$ использовалась для расчета многоэлектронной ионизации в [18].

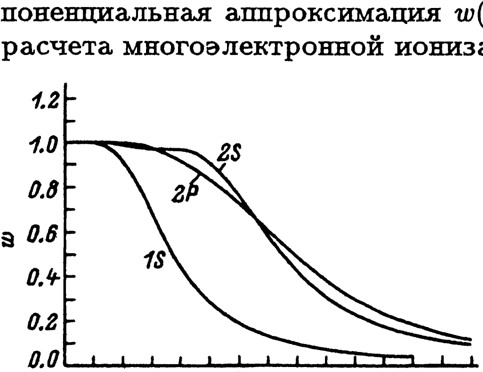

Рис. 1. Вероятность ионизации атома водорода из $1S$-, $2S$- и $2P$-исходных состояний как функции прицельного параметра ($Z = 25$, $v = 25$).

Из зависимости $\sigma_n \sim z_n^{-2} n^{-1}$ следует простое рекуррентное соотношение для сечений ионизации различной (большой) кратности

$$n z_n^2 \sigma_n \simeq n' z_{n'}^2 \sigma_{n'}; \qquad 1 \ll n, \quad n' < N. \tag{12}$$

Оценим величины эффективных зарядов. Для этого удобно использовать формулу (11). Анализ численных расчетов (рис. 1) показывает, что $b_n \sim b_s \sim k$, где k — главное квантовое число исходного связанного состояния. Простые полуклассические оценки на основе сравнения между средней энергией, передаваемой электрону при столкновении, которую можно оценить как $2Z^2/b^2v^2$ (см., например, [15]), и энергией связи, которая пропорциональна k^{-2}, приводят к той же зависимости $b_n \sim b_s \sim k$. Поэтому мы будем считать, что $z_n^2/b_n^2 \sim \bar{\varepsilon}_n$, где $\bar{\varepsilon}_n$ — средняя (на один электрон из рассматриваемой оболочки) энергия связи. Далее естественно положить $n\bar{\varepsilon}_n \simeq I_n$, где I_n — минимальная энергия, необходимая для отрыва n электронов. С учетом (11) и (12) имеем

$$\sigma_n I_n \simeq \sigma_{n'} I_{n'}; \qquad 1 \ll n, \quad n' < N. \tag{13}$$

Это выражение получено для ионизации из внешней оболочки, за исключением случая $n = N$, когда важен учет ионизации из следующей оболочки, приводящей к эффективному "обрезанию" вероятности $W_n(b)$ при $n = N$ в области малых прицельных параметров. Однако, если различия между атомными оболочками невелики (возмущение является внезапным, а вероятности $w_n(b)$ насыщаются при малых b для всех рассматриваемых электронов), то формула (13) может быть применена для описания ионизации в рамках этих оболочек как "целого".

На рис. 2,3 представлено сравнение между результатами, получаемыми с использованием формулы (13), и экспериментальными данными [19] по ионизации атомов иода (ионами U^{+91}, 420 МэВ/а.е.м., $v \simeq 100$ а.е.) и ксенона (U^{+75}, 15.5 МэВ/а.е.м., $v \simeq 25$ а.е.). Здесь же представлены результаты теоретических расчетов, приведенных в [19]. В формуле (13) мы использовали для величин I_n данные из [20] (иод и ксенон, $n \leqslant 10$). Оценивая сечения с помощью (13), мы выбрали следующую "привязку" к эксперименту: $\sigma_7 = \sigma_{7\text{экс}}$. Отметим, что другой ее выбор существенно не меняет согласия с экспериментальными данными (так, если взять для иода $\sigma_6 = \sigma_{6\text{экс}}$, то имеем $\sigma_{27} \simeq \sigma_{27\text{экс}}$). Из

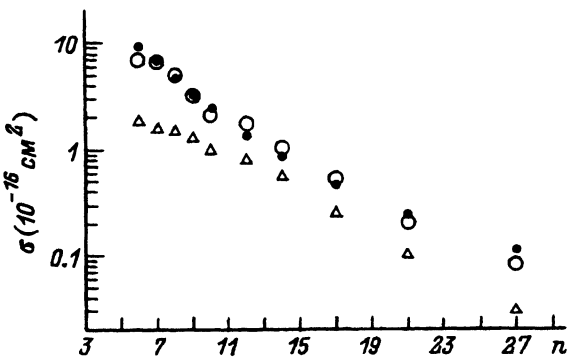

Рис. 2. Сечения ионизации атомов иода ионами U^{+91} (420 МэВ/а.е.м.).
Кружки и треугольники — соответственно экспериментальные и теоретические данные, приведенные в [19]; точки — результаты, полученные по формулам (13), (14).

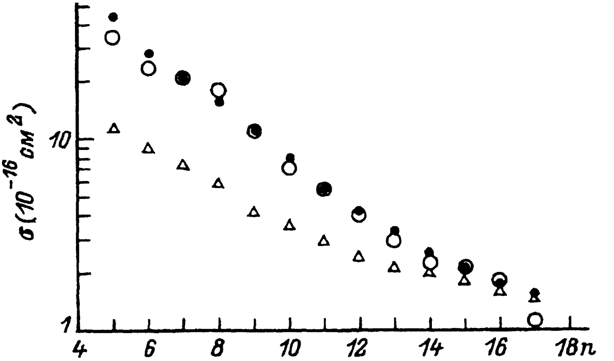

Рис. 3. Сечения ионизации атомов ксенонов ионами U^{+75} (15.5 МэВ/а.е.м.).
Остальные параметры те же, что и на рис. 2.

имеющихся в [20,21] данных следует простое приближенное соотношение $I_n \sim n^3$, и мы имеем

$$n^3 \sigma_n \simeq n^3 \sigma_n; \qquad 1 \ll n, \quad n' < N. \tag{14}$$

Это выражение мы использовали для оценок сечений ионизации иода и ксенона при $n > 10$.

Выделим теперь приближенно зависимость сечений от параметров МЗИ Z, v в явном виде. Поскольку $b_n \sim b_s \sim Z/v$, то из (11) следует $\sigma_n \sim Z^2/v^2$, т.е. для любых $n \gg 1$ мы имеем приблизительно одинаковую зависимость от Z, v. Предыдущие оценки для многоэлектронной ионизации атомов быстрыми МЗИ [11] также показывают, что $\sigma_n \sim Z^2/v^2$ $(n \geqslant 2)$ в случае, если вероятность $w_a(b)$ насыщается при малых b. Комбинируя зависимость $\sigma_n \sim Z^2/v^2$ с рекуррентным соотношением (13) можно предложить следующее простое выражение для сечений многоэлектронной ионизации:

$$\sigma_n \simeq A I_n^{-1} Z^2/v^2; \qquad n \gg 1, \tag{15}$$

где A — постоянная для данного атома (атомной оболочки) величина, которая может быть определена, например, из сравнения с экспериментальными данными. Ряд таких данных по ионизации аргона представлен в [19]. Анализируя их для случая, когда скорости МЗИ гораздо меньше скорости света, мы получаем, что $A \simeq 270$ (если сечения измерять в единицах 10^{-16} см^2, I_n в эВ и v в а.е.). На рис. 4,5 представлено

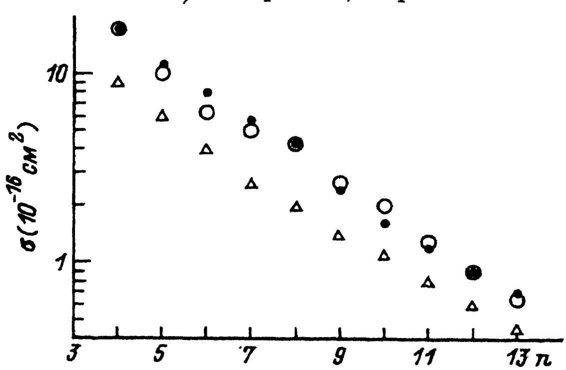

Рис. 4. Сечения ионизации атомов аргона ионами U^{+75} (15.5 МэВ/а.е.м.).
Кружки и треугольники — соответственно экспериментальные и теоретические данные, приведенные в [19]; точки — результаты, полученные по формуле (15).

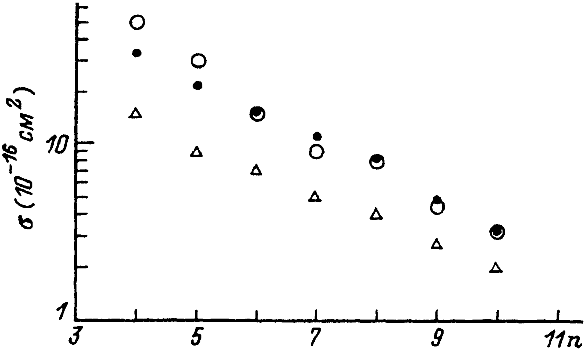

Рис. 5. Сечения ионизации атомов аргона ионами U^{+65} (5.9 МэВ/а.е.м.).
Остальные параметры те же, что и на рис. 4.

сравнение расчетов по формлуе (15) с экспериментальными и теоретическими данными по ионизации аргона ионами U^{+65} (5.9 МэВ/а.е.м., $v = 15.4$ а.е.) и U^{+75} (15.5 МэВ/а.е.м., $v = 25$ а.е.), приведенными в [19]. При этом для определения величин I_n мы использовали данные из [21] ($n \leqslant 18$). Отметим, что для очень больших n согласие наших результатов с экспериментальными данными становится хуже. Причиной для этого расхождения может быть, по нашему мнению, следующее: для рассматриваемых значений скорости возмущение уже не является внезапным для внутренних, сильно связанных электронов и в этом случае наш подход, основанный на приближении внезапных возмущений, приводит к завышенным значениям для вероятности w_a и соответственно для сечений.

Список литературы

[1] *Cocke C.L., Olson R.E.* // Phys. Rep. 1991. Vol. 205. P. 205.
[2] *McGuire J.H.* // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 29. P. 217–323.
[3] *Eichler J.* // Phys. Rev. 1977. Vol. A15. P. 1856.
[4] *Дыхне А.М. и Юдин Г.Л.* // УФН. 1978. Т. 125. С. 377.
[5] *Sidorovich V.A., Nicolaev V.S., McGuire J.H.* // Phys. Rev. 1985. Vol. A31. P. 2139.
[6] *Nicolaev V.S., Sidorovich V.A.* // Nucl. Instr. Meth. 1988. Vol. B36. P. 239.
[7] *Bransden A., McDowell R.* Charge Exchange and the Theory of Ion-atom collisions. Oxford: Clarendon Press, 1992.
[8] *Reinhold C.O., Falcon C.A.* // J. Phys. 1988. Vol. B21. P. 1829.
[9] *Voitkiv A.B., Pazdzersky V.A.* // J. Phys. 1988. Vol. B21. P. 3469.
[10] *Войткив А.Б., Коваль А.В.* // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 3. С. 181.
[11] *Alimov R.A., Pazdzersky V.A., Voitkiv A.B.* // J. Phys. 1989. Vol. B22. P. 1346.
[12] *Schlahter A.S., Groh W., Muller A.* et al. // Phys. Rev. 1982. Vol. A26. P. 1373.
[13] *Reinhold C.O., Falcon C.A., Miraglia J.E.* // J. Phys. 1987. Vol. B20. P. 3737–3745.
[14] *Mott N.F., Massey H.S.W.* The Theory of Atomic Collisions. Oxford, 1965.
[15] *Войткив А.Б., Матвеев В.И.* // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 7. С. 188.
[16] *Ben-Itzhak I., Gray T.J., Legg J.S., McGuire J.H.* // Phys. Rev. 1988. Vol. A37. P. 3685.
[17] *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
[18] *DuBois R.D., Manson S.T.* // Phys. Rev. 1987. Vol. A35. P. 2007.
[19] *Ullrich J., Schmidt-Bocking H., Kelbch S.* et al. // Nucl. Instr. Meth. 1987. Vol. B23. P. 131–136.
[20] *Кикоин И.И.* Таблицы физических величин. М.: Атомиздат, 1976.
[21] *Радциг А.А., Смирнов В.М.* Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.