

01; 02

© 1990 г

ОБРАЗОВАНИЕ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ БЫСТРЫХ ИОНОВ В ПРОЦЕССАХ ПЕРЕЗАРЯДКИ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Ш. Д. Куникеев, В. С. Сенашенко

Дается теоретическое описание образования автоионизационных состояний в процессах перезарядки с возбуждением быстрых ионов на атомах. Обсуждаются вычисленные в различных приближениях полные сечения возбуждения низших АИС быстрых атомов гелия, образующихся в результате столкновений ${}^3\text{He}^+ - \text{He} \rightarrow {}^3\text{He}^{**} - \text{He}^+$ в области энергий сталкивающихся частиц от 100 до 500 кэВ. Показано, что заселение автоионизационных уровней при больших энергиях столкновения происходит в основном в результате взаимодействия между собой электронов мишени и налетающего иона, а взаимодействие совершающих переходы электронов с ионом-остатком атома мишени оказывается существенным в области промежуточных энергий столкновения и приводит к заметному росту сечений образования АИС. Отмечается влияние угловой анизотропии эжекции электронов на сечения образования АИС, учет которой приводит к систематическому их уменьшению.

Введение

Ионизационные столкновения быстрых водородоподобных ионов с атомами могут сопровождаться возбуждением и последующим распадом не только автоионизационных состояний АИС атома мишени, но и АИС рассеянного иона. Одним из возможных механизмов образования АИС быстрых ионов является перезарядка с возбуждением иона на атоме. Первоначально исследование этого явления, наблюдаемого при столкновениях многозарядных ионов с атомами, были проведены методами рентгеновской спектроскопии и ограничивались измерением полных сечений перезарядки с возбуждением [1]. Однако в дальнейшем при изучении столкновений легких ионов с атомами был использован метод оже-спектроскопии, который позволяет получать более детальную информацию, выделяя вклад от каждого АИС иона в полное сечение перезарядки с возбуждением. В последнее время этим методом были изучены энергетические спектры электронов для $\text{He}^+ - \text{He}$ и $\text{He}^+ - \text{H}_2$ столкновений в области энергий сталкивающихся частиц от 100 до 500 кэВ при нулевом угле эжекции электронов [2, 3].

Теоретический анализ полученных экспериментальных данных показывает, что наблюдаемые двухэлектронные переходы могут происходить под действием электрон-ядерного или электрон-электронного взаимодействия. В первом случае электрон, связанный с налетающей частицей, под действием поля экранированного заряда ядра мишени переходит в возбужденное состояние, а электрон, первоначально связанный с мишенью, под действием поля налетающей частицы захватывается в связанное возбужденное состояние рассеянного иона. При этом АИС рассеянной частицы образуется при некоррелированном движении электронов, участвующих в переходе. Во втором случае электрон, связанный с налетающей частицей, переходит в возбужденное состояние под действием поля захватываемого электрона. Этот процесс сопровождается коррелированным движением электронов и аналогичен резонансному рассеянию электронов на атомах с образованием АИС, сечение которого имеет резонансный характер [4].

Обычно при быстрых ион-атомных столкновениях простых атомных систем межэлектронные корреляции не оказывают существенного влияния и электронные переходы достаточно хорошо описываются в приближении независимых частиц [5]. Однако роль межэлектронных корреляций возрастает с уменьшением заряда ядра атома мишени. В случае двухэлектронных переходов возможны условия, когда они вносят сравнимый вклад, а порой становятся доминирующими [6]. В процессах перезарядки с возбуждением эти условия выполняются при энергии столкновения $E_p \approx M_p (E_r + I_i)$, где M_p — масса налетающей частицы, E_r — энергия возбуждения АИС, I_i — потенциал ионизации атома мишени.

Целью настоящей работы является теоретическое описание образования АИС быстрых ионов в процессах перезарядки с возбуждением. Основное внимание уделяется влиянию межэлектронных корреляций на характер столкновений. Обсуждаются вычисленные в различных приближениях полные сечения возбуждения низших АИС быстрых атомов гелия, образующихся в результате столкновений ${}^3\text{He}^+ + \text{He} \rightarrow {}^3\text{He}^{*+} + \text{He}^+$ в области энергий сталкивающихся частиц от 100 до 500 кэВ. Полученные результаты сравниваются с моделью Брандта—Фейгина [7, 8], развитой для быстрых столкновений сильно асимметричных систем при $Z_p \gg Z_i$, где Z_p, Z_i — заряды ядер налетающей частицы и атома мишени соответственно. Главное отличие предложенного в настоящей работе теоретического описания состоит в учете влияния поля иона остатка атома мишени на движение электронов в АИС, которое становится существенным для симметричных или почти симметричных систем при $Z_p \approx Z_i$ и в области промежуточных энергий значительно изменяет сечения возбуждения АИС, образующихся путем перезарядки с возбуждением ионов на атомах. В работе используются атомные единицы. Часть полученных результатов была представлена в [9].

Основные формулы

В общем случае образование и распад АИС атомных систем происходят в условиях их интерференции с непрерывным спектром, на фоне которого формируется спектр автоионизационных резонансов. Однако для рассматриваемых переходов, как показывают экспериментальные данные [2, 3], интерференция не так существенна и это позволяет обсуждать сечения образования АИС, пренебрегая их взаимодействием с непрерывным спектром. В таком случае амплитуду образования АИС можно представить в следующем виде:

$$\tau_{ex}^{LM} = \langle \chi_a^{LM} | V_{ee} + W | \Psi_i^+ \rangle, \quad (1)$$

где $\langle \chi_a^{LM} | = \langle \Phi_a^{LM}, \bar{k}_p |$ — диагонализационная волновая функция АИС с полным орбитальным моментом L и спином S , \bar{k}_p — импульс относительного движения рассеянного иона и атома мишени; V_{ee} и W — потенциалы взаимодействия электронов между собой и рассеянного иона в АИС с ионом-остатком атома мишени соответственно; Ψ_i^+ — полная волновая функция системы в начальном состоянии.

Волновые функции χ_a^{LM} и Ψ_i^+ удовлетворяют условию $\langle \chi_a^{LM} | \Psi_i^+ \rangle = 0$. Если в волновой функции Ψ_i^+ межэлектронными корреляциями пренебречь, то первый матричный элемент в формуле (1) описывает коррелированные переходы электронов в результате их взаимодействия между собой, а второй — некоррелированные переходы в поле экранированного заряда ядра атома мишени.

Сечение образования АИС определяется через амплитуду (1) следующим образом:

$$\sigma_{ex} = \frac{(2\pi)^4}{v_i^2} (2S + 1) \sum_{\mathbf{M}} \int d\bar{Q}_\perp |\tau_{ex}^{LM}(\bar{Q}_\perp)|^2, \quad (2)$$

где v_i — скорость налетающего иона, \bar{Q}_\perp — поперечная составляющая передаваемого импульса, M — проекция орбитального момента.

В дальнейшем пренебрежем искажением континуума полем заряда Z_i при описании переходов электронов атома мишени через непрерывный спектр в состоянии, связанные относительно быстрой частицы, а также влиянием экранированного поля мишени на электрон, находящийся в связанном состоянии φ_0 относительно налетающей частицы при определении Ψ_i^+ , учитывая при этом взаимодействие активного электрона с полем заряда иона-остатка атома мишени в волновой функции связанного состояния ψ_0 .

Разложим волновую функцию ψ_0 в интеграл Фурье

$$\psi_0(\mathbf{r}_{2i}) = \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_{2i}} \tilde{\psi}_0(\mathbf{q}), \quad (3)$$

где \mathbf{r}_{2i} — радиус-вектор i -го электрона относительно иона остатка атома мишени.

Тогда в рамках сделанных выше предположений

$$\Psi_i^+ = \varphi_0(\mathbf{r}_{1p}) \int d\mathbf{q} \tilde{\psi}_0(\mathbf{q}) \exp \left[i \left(\frac{m_i}{m_i + 1} \mathbf{k}_i + \mathbf{q} \right) \mathbf{R}_f \right] \psi_{\mathbf{q}-\mathbf{v}_i, \varepsilon(\mathbf{q})}^+(\mathbf{r}_{2p}), \quad (4)$$

где \mathbf{r}_{1p} — радиус-вектор i -го электрона относительно налетающего иона, \bar{R}_f — расстояние между рассеянным ионом и атомом мишени, $\psi_{\mathbf{k}, \varepsilon}^+$ — двухчастичная функция рассеяния вне энергетической поверхности

$$\psi_{\mathbf{k}, \varepsilon}^+ = [1 + (\varepsilon + i0 - h_{2p})^{-1} V_{2p}] | \mathbf{k} \rangle, \\ h_{2p} = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_{2p}}^2 + V_{2p}, \quad \varepsilon(\bar{q}) = E - \varepsilon_0 - \frac{1}{2\mu_f} \left(\frac{m_i}{m_i + 1} \mathbf{k}_i + \mathbf{q} \right)^2, \quad (5)$$

V_{2p} — потенциал взаимодействия захватываемого электрона с налетающим ионом, $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ — плоская волна, \mathbf{k}_i — импульс относительного движения налетающего иона и атома мишени, E — полная энергия системы, ε_0 — энергия связи электрона в состоянии φ_0 , m_i — масса иона остатка атома мишени, μ_f — приведенная масса рассеянного иона и иона мишени.

Если $Z_p \sim Z_i$ и $v_i \sim k_a$, где k_a — «средний» импульс электрона в АИС, то влияние дальнедействующего поля иона остатка мишени на электроны становится существенным и его необходимо учитывать в волновой функции χ_a^{LM} . Предполагая, что электроны в АИС взаимодействуют с зарядом Z_i независимо друг от друга, переопределим волновую функцию χ_a^{LM} следующим образом.

$$\chi_{a, LM}^- = \chi_a^{LM} \cdot \Phi_{\bar{v}_i}^-(v_i, \mathbf{r}_{1i}) \cdot \Phi_{\bar{v}_i}^-(v_i, \mathbf{r}_{2i}), \quad (6)$$

где искажающие множители

$$\Phi_{\bar{v}_i}^-(\mathbf{r}_{ii}) = e^{-(\pi v_i/2)} \Gamma(1 - i v_i) \cdot F_1(-i v_i, 1, -i(v_i r + v_i \mathbf{r})), \quad v_i = -\frac{Z_i}{v_i} \quad (7)$$

учитывают влияние поля заряда Z_i иона остатка мишени на электрон, находящийся в АИС рассеянной частицы.

Представим $\Phi_{\bar{v}_i}^-$ в следующем виде:

$$\Phi_{\bar{v}_i}^-(\mathbf{r}_{ii}) = \int d\mathbf{q}_i \tilde{\Phi}_{\bar{v}_i}^-(\bar{q}_i) e^{i\mathbf{q}_i \mathbf{r}_{ii}}, \quad i = 1, 2. \quad (8)$$

Тогда, пренебрегая остаточным взаимодействием W_0 рассеянной частицы с ионом остатком мишени в операторе перехода, с учетом (4)–(6) амплитуда возбуждения (1) принимает следующий вид:

$$\tau_{\sigma\sigma}^{LM} = (2\pi)^3 \int d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \cdot \tilde{\Phi}_{\bar{v}_i}^*(\mathbf{q}_1) \cdot \tilde{\Phi}_{\bar{v}_i}^*(\mathbf{q}_2) \tilde{\psi}_0(\mathbf{q}) \langle \Phi_a^{LM} | V_{\sigma\sigma} | \varphi_0 \psi_{\bar{q}-\bar{v}_i, \varepsilon(\bar{q})}^+ \rangle, \quad (9)$$

где $\bar{q} = -\bar{k}_i + \bar{q}_1 + \bar{q}_2$; \bar{k}_i — импульс, передаваемый иону-остатку мишени при столкновении.

Поскольку $\Phi_{\bar{v}_i}^-$ имеет δ -образную сингулярность при $q_i = 0$, то вынесем из-под знака интеграла в (9) матричный элемент в точке $q_1 = q_2 = 0$. В результате получаем

$$\tau_{ee}^{LM} = \langle \Phi_a^{LM} | V_{ee} | \varphi_0 \psi_{\vec{v}_i - \vec{k}_i, E_r}^+ \rangle \langle (\Phi_{\vec{v}_i}^-)^2 e^{-i\vec{k}_i r} | \varphi_0 \rangle. \quad (10)$$

Первый матричный элемент в формуле (10) соответствует амплитуде диэлектронной рекомбинации: электрон из состояния непрерывного спектра с импульсом $-(\vec{v}_i + \vec{k}_i)$ захватывается в связанное возбужденное состояние, возбуждая при этом электрон, находящийся в связанном состоянии относительно налетающего иона. При этом в отличие от рассеяния свободных электронов рекомбинация происходит из состояния непрерывного спектра налетающего иона вне энергетической поверхности, поскольку электрон совершает переход из связанного состояния φ_0 атома мишени. Второй матричный элемент определяет с учетом искажений АИС амплитуду вероятности захватываемому электрону иметь импульс $-\vec{k}_i$ в связанном состоянии φ_0 .

Если пренебречь искажением АИС и импульсом иона — остатка мишени \vec{k}_i , в первом матричном элементе, то получаем сечение образования АИС путем коррелированных переходов в модели Брандта—Фейгина [7, 8]

$$\sigma_{ee} = \frac{(2\pi)^4}{v_i} (2S + 1) \sum_M |\langle \Phi_a^{LM} | V_{ee} | \varphi_0 \psi_{-v_i, E_r}^+ \rangle|^2 \cdot J(p_i), \quad (11)$$

где

$$J(p_i) = \int dQ |\bar{\psi}_0(Q)|^2 \delta(Qv_i + p_i v_i)$$

— комптоновский профиль электронов атома мишени, $p_i = (E_r + I_i - (v_i^2/2))/v_i$.

Из формулы (11) следует, что σ_{ee} как функция скорости сталкивающихся частиц v_i имеет максимум при $v_i^2/2 = E_r + I_i$.

Обсуждение результатов расчетов

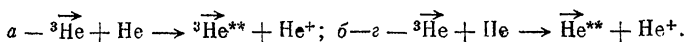
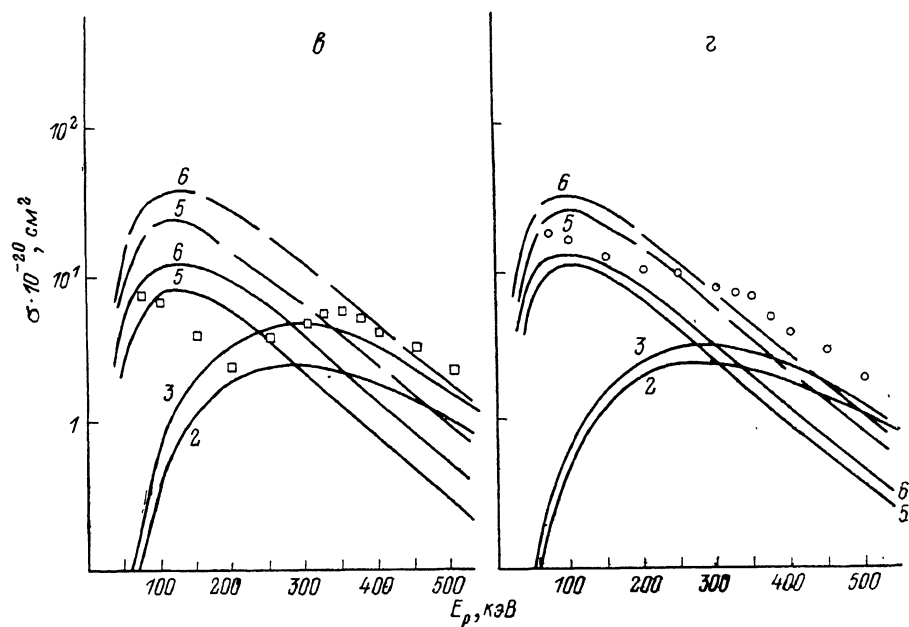
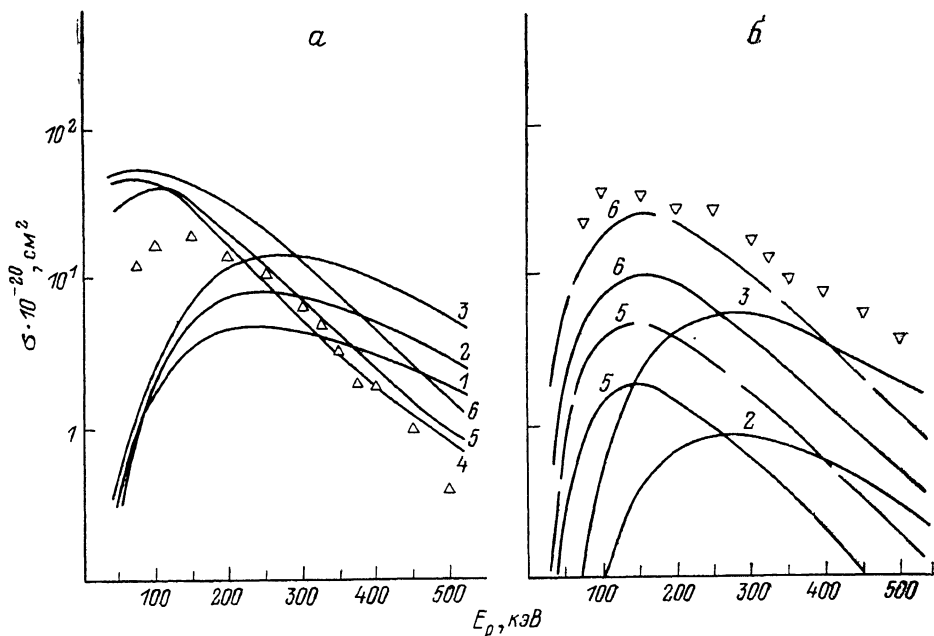
На основе изложенной выше теории были вычислены сечения образования $(2s^2)^1S_-, (2s2p)^3P_-, (2p^2)^1D_-$ и $(2s2p)^1P_-$ резонансов быстрых атомов гелия в столкновениях ${}^3\text{He}^+ + \text{He}$ в области энергий сталкивающихся частиц от 100 до 500 кэВ. Результаты расчетов, выполненных по формулам (2) и (10) в различных приближениях, представлены на рисунке, а—г вместе с имеющимися экспериментальными данными [2]. Для сопоставления экспериментальных и теоретических результатов сечения, вычисленные с амплитудой (10), были разделены на $(2L+1)$, поскольку экспериментальные данные [2] относятся к углу эжекции 0, когда в процессе столкновения заселяются состояния только с $M=0$. Кривые 1—3, показанные на рисунке, вычислялись в пренебрежении влиянием поля остатка атома мишени ($v_i=0$) на движение электронов в АИС. Причем кривая 1 получена в плосковолновом приближении с функцией $\psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+$ в (10) $\psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+ = \exp(i\vec{k}r)$, кривая 2 — в импульсном приближении $\psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+ = \psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+$, где $\psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+$ — кулоновская волна, описывающая состояния непрерывного спектра захватываемого электрона в поле налетающей частицы ($\varepsilon = \hbar^2/2$) [7, 8], а кривая 3 — в полюсном приближении с

$$\psi_{\vec{k}, \varepsilon}^+ = [1 - i\pi\delta(\varepsilon - h_{2p}) V_{2p}]/\langle \mathbf{k} \rangle. \quad (12)$$

Кривые 4—6 получены соответственно в тех же приближениях, что и кривые 1—3, но с учетом искажения АИС ($v_i \neq 0$). Волновая функция начального состояния φ_0 определялась в водородоподобном приближении с эффективным зарядом $Z_i = \sqrt{2I_i}$, а волновая функция АИС Φ_a^{LM} бралась в диагонализационном приближении [10].

Полученные результаты показывают, что сечения образования АИС при $v_i=0$ имеют максимум при энергии налетающего иона $E_p \approx M_p (E_r + I_i)$, а учет взаимодействия захватываемого электрона с налетающим ионом не изменяет качественно энергетической зависимости сечений при больших энергиях сталкивающихся частиц. Искажение АИС полем иона остатка мишени приводит к смещению максимума сечения в сторону меньших энергий столкновения, что ближе соответствует наблюдаемому экспериментально поведению сечений.

В целом качественное поведение рассчитанных сечений образования рассмотренных АИС с ростом энергии столкновения становится практически одинаковым, что согласуется с экспериментальными данными, за исключением $(2p^2)^1D$ -состояния, которое обнаруживает минимум в сечении при энергии



столкновения $E_p=200$ кэВ. Появление этого минимума может быть вызвано двумя причинами: деструктивной интерференцией амплитуд коррелированных и некоррелированных переходов [8] или деструктивной интерференцией двух соседних близко расположенных резонансов $(2p^2)^1D$ и $(2s2p)^1P$, которая может привести к видимому уменьшению выхода $(2p^2)^1D$ -резонанса [11]. Для получения более полного согласия теоретических расчетов с экспериментом в этой

области энергий сталкивающихся частиц необходимо выйти за рамки приближений, используемых в настоящей работе, в частности рассмотреть образование АИС под действием потенциала W_0 , а также отказаться от приближения изолированного резонанса.

Следует отметить, что экспериментальные сечения в [2] были получены в предположении изотропного распределения электронов в зависимости от угла эжекции. Такое предположение выполняется для $(2s^2) \ ^1S$ -резонанса, если пренебречь интерференцией с непрерывным спектром, тогда как для других резонансов остается приближенным и в этом случае. Для оценки влияния угловой анизотропии эжекции электронов на сечения образования АИС наряду с точными расчетами были проведены расчеты для $(2s2p) \ ^1P$, 3P - и $(2p^2) \ ^1D$ -резонансов с изотропным угловым распределением автоионизационных электронов (на рисунке, $a-g$ результаты расчетов показаны штриховыми линиями). Видно, что учет их анизотропии приводит к систематическому уменьшению сечений образования АИС при перезарядке с возбуждением ионов на атомах. Отсюда следует вывод о том, что сечения образования АИС, полученные в работе [2], завышены. Их уточнение может привести к улучшению согласия теоретических результатов с экспериментальными данными.

В заключение следует отметить, что исследование механизмов образования АИС быстрых ионов в процессах перезарядки с возбуждением на атомах, предпринятое в настоящей работе для симметричных сталкивающихся систем $(Z_p \sim Z_t)$, показало следующее: заселение автоионизационных уровней иона при больших энергиях столкновения происходит в основном в результате взаимодействия между собой электронов мишени и налетающего иона, а взаимодействие совершающих переходы электронов с ионом-остатком атома мишени оказывается существенным в области промежуточных энергий столкновения и приводит к заметному росту сечений образования АИС.

Список литературы

- [1] Tanis J. A., Bernstein E. M., Graham W. G. et al. // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 49. N 18. P. 1325—1328.
- [2] Itoh A., Zouros T. J. M., Schneider D. et al. // J. Phys. B. 1985. Vol. 18. N 23. P. 4581—4587.
- [3] Zouros T. J. M., Schneider D., Stolterfoht N. // J. Phys. B. 1988. Vol. 21. N 21. P. L671—L676.
- [4] Pepmiller P. L., Richard P., Newcomb J. // Phys. Rev. A. 1985. Vol. 31. N 2. P. 734—743.
- [5] Stolterfoht N. // XV ICPEAC / Ed. H. B. Gilbody, W. R. Newell, F. H. Read et al. Brighton, 1987. P. 661—667.
- [6] Schowengerdt F. D., Rudd M. E. // Phys. Rev. Lett. 1972. Vol. 28. N 3. P. 127—129.
- [7] Clark M., Brandt D., Swenson J. K. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 54. N 6. P. 544—546.
- [8] Feagin J. M., Briggs J. S., Reeves T. M. // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. N 6. P. 1057—1068.
- [9] Куникеев Ш. Д., Сенашенко В. С. // Тез. докл. X Всесоюз. конф. по физике электронных и атомных столкновений. Ужгород, 1988. Ч. I. С. 120.
- [10] Балашов В. В., Ликовецкий С. С., Павличенков А. В. и др. // Вестник МГУ. Физика, астрономия. 1971. Т. 12. № 1. С. 65—74.
- [11] Van der Straten P., Morgenstern R. J. // J. Phys. B. 1986. Vol. 19. N 9. P. 1361—1370.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт
ядерной физики

Поступило в Редакцию
17 июля 1989 г.