

01;02

Многоэлектронная ионизация атомов быстрыми ионами: приближение нормированных экспонент

© Т. Киршнер,¹ Х. Тавара,² И.Ю. Толтихина,³ А.Д. Уланцев,⁴ В.П. Шевелько,³ Т. Штулькер⁵¹ Институт теоретической физики,
Клаустхаль-Целлерфельд, Германия² Институт ядерной физики М. Планка,
Гейдельберг, Германия³ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
119991 Москва, Россия
e-mail: shev@sci.lebedev.ru v.chevelko@gsi.de⁴ Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина,
Москва, Россия⁵ Институт по исследованию тяжелых ионов (ГСИ),
Дармштадт, Германия

(Поступило в Редакцию 14 ноября 2005 г.)

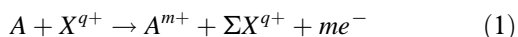
Рассмотрены процессы многоэлектронной ионизации нейтральных атомов быстрыми положительными ионами в модели независимых частиц (МНЧ). Предложен относительно простой метод расчета вероятностей и сечений многоэлектронной ионизации в представлении параметра удара с использованием одноэлектронных вероятностей в виде нормированных экспонент $p_{nl}(b) = p_{nl}(0) \exp(-\alpha_{nl}b)$, где b — параметр удара, nl — квантовые числа оболочки мишени. Показатель экспоненты α_{nl} определяется по борновским сечениям одноэлектронной ионизации электронов мишени, а предэкспонента $p_{nl}(0)$, т.е. вероятность ионизации при нулевом прицельном параметре — по геометрической модели. Предложенный метод обеспечивает условие нормировки $p_{nl}(b) \leq 1$ при всех скоростях и зарядах налетающих ионов и позволяет с точностью до фактора 2 вычислять сечения одно-, двух- и трехэлектронной ионизации, сумма которых дает основной вклад в полное сечение. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

PACS: 12.10.Dm

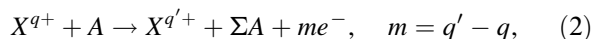
Введение

Многоэлектронные процессы, возникающие при столкновении атомов, молекул и ионов с фотонами и заряженными частицами (включая антипротоны) представляют интерес для многих задач современной атомной физики. Помимо чисто теоретического интереса к физике многоэлектронных переходов (анализ влияния эффектов межэлектронных корреляций) эти процессы важны и для многих приложений, так как при определенных условиях они происходят с вероятностью, сравнимой с вероятностью соответствующих одноэлектронных реакций. Поэтому многоэлектронные процессы должны быть рассмотрены наряду с одноэлектронными при исследовании таких задач, как зарядовое распределение быстрых ионов, проходящих сквозь плотную плазму или твердую мишень, физики УТС, тумотерапии и многих других приложений (см., например, [1–6]).

В случае многоэлектронной ионизации, возникающей при ион-атомных столкновениях, следует отметить два основных процесса ионизацию нейтральных атомов A ионами X^{q+} :



и ионизацию ионов X^{q+} нейтральными атомами A :



где q — заряд иона, m — число выбитых электронов.

Суммы в правой части (1) и (2) означают все возможные состояния, соответственно ионов и атомов, после столкновения. Очевидно, что реакции (1) и (2) несимметричны; ионизация атомов в (1) происходит при больших прицельных параметрах за счет воздействия дальнедействующего кулоновского поля налетающего иона, а в (2) ионизация иона происходит при близких столкновениях в результате воздействия на электроны иона короткодействующего потенциала нейтрального атома. Более сложные случаи, например процессы одновременной ионизации обоих партнеров или перезарядки с ионизацией, требуют отдельного обсуждения и в данной работе не рассматриваются.

Влияние многоэлектронной ионизации в реакциях (1) и (2) довольно велико: в случае (1) сумма эффективных сечений σ_m для ионизации $m \geq 2$ электронов может достигать 30–40% от полного сечения $\sigma_{\text{tot}} = \Sigma_m \sigma_m$, а в (2) при ионизации тяжелых малозарядных ионов — до 50%. Более того, в последнем случае влияние процессов многоэлектронной ионизации приводит к изменению асимптотики полного сечения σ_{tot} при больших энергиях столкновения E : $\sigma_{\text{tot}} \sim E^{1/2}$ вместо обычного закона убывания по энергии $\sigma_{\text{tot}} \sim E^{-1}$ [7–9]. Два последних обстоятельства существенно влияют на время жизни быстрых ионных пучков в ускорителях, определяемое ионизацией ионов атомами и молекулами остаточного газа.

Объем экспериментальных данных по сечениям многоэлектронной ионизации нейтральных атомов быстрыми ионами достаточно велик: они известны для налетающих ионов от H^+ до U^{92+} в интервале энергий 1–120 MeV/u для процессов ионизации с одновременным отрывом $m = 1-35$ электронов (см., например, [10]). Абсолютные значения сечений многоэлектронной ионизации нейтральных атомов положительными ионами могут быть довольно большими. Так, экспериментальное сечение 30-кратной ионизации атома Xe ионами U^{75+} при энергии ионов $E = 15.5$ MeV/u порядка $\sigma_{30} \approx 6 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^{-2}$, в то время как сечение одноэлектронной ионизации $\sigma_1 \approx 2 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2$ [11]. Для столкновений ионов H^+ и He^+ с атомами Ga в диапазоне энергий 0.05–1.5 MeV/u сечения многоэлектронной ионизации заметно превышают сечения многократной перезарядки и перезарядки с ионизацией [12].

Учет корреляций электронов делает задачу о многоэлектронных переходах чрезвычайно трудоемкой, однако она значительно упрощается при использовании статистической модели (переданной энергии [10]) или модели независимых частиц (МНЧ), описанной в [13]. Однако модель переданной энергии, даже в усовершенствованном варианте [14], является полуфеноменологической, поскольку содержит один подгоночный параметр. При использовании МНЧ основная трудность в решении задачи заключается в нахождении вероятностей одноэлектронных переходов $p_{nl}(b)$ для всех оболочек мишени nl , где b — параметр удара, nl — главное и орбитальное квантовые числа.

В случае ионизации атомов быстрыми положительными ионами вероятности $p_{nl}(b)$, как правило, вычисляются в первом борновском приближении в представлении параметра удара, методом внезапных возмущений, методом искаженных волн и методом Монте-Карло (см., например, [4,15]). Однако эти методы достаточно сложны в вычислительном отношении, и некоторые из них в общем случае не обеспечивают нормировку вероятности $p_{nl}(b)$, а значит, и вероятности многоэлектронной ионизации. Использование метода сильной связи атомных орбиталей при учете достаточно большого числа псевдосостояний, описывающих сплошной спектр, возможно практически только при использовании суперкомпьютеров.

Следует отметить, что МНЧ, будучи достаточно простым, в то же время имеет серьезные недостатки. Прежде всего, при использовании МНЧ игнорируется тот факт, что потенциал ионизации заметно меняется при изменении зарядового состояния, что может приводить к неверным значениям вероятности для больших степеней ионизации налетающего иона. В связи с этим при расчетах в рамках МНЧ представляется целесообразным использовать не слишком трудоемкие методы вычисления одноэлектронных вероятностей, обеспечивающие точность порядка точности самой модели.

В настоящей работе предложен относительно простой метод расчета одноэлектронных вероятностей ионизации

ци $p_{nl}(b)$ оболочек мишени как функции параметра удара и скорости налетающего иона. Величины $p_{nl}(b)$ представляются в виде экспонент $p_{nl}(b) = p_{nl}(0) / \exp(-\alpha_{nl}b)$, где вероятность ионизации $p_{nl}(0)$ при нулевом прицельном параметре определяется в приближении геометрической модели [16,17], а экспоненциальный фактор α_{nl} находится с помощью борновских одноэлектронных сечений ионизации электронов из оболочки nl . На основе МНЧ выполнены расчеты вероятностей и сечений многоэлектронной ионизации атомов Ne, Ar и Cs протонами и многозарядными ионами с учетом вклада всех оболочек атома мишени в области энергий $E > 25 \text{ keV/u}$. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными и расчетами методом сильной связи и в борновском приближении.

Модель независимых частиц

Модель независимых частиц в приближении параметра удара описана во многих работах [13,18,19]. В этом подходе вероятность P_m ионизовать m электронов с учетом всех оболочек многоэлектронной мишени имеет вид [19]:

$$P_m(b, \mathbf{v}) = \sum_{\gamma} \prod_{i=1}^T \binom{N_i}{m_i} p_i^{m_i} (1 - p_i)^{N_i - m_i}, \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^T m_i = m, \quad \binom{N}{m} = \frac{N!}{m!(N - m)!}, \quad (4)$$

где суммирование в (3) проводится по всем электронным оболочкам атома мишени, T означает число оболочек, N_i — число эквивалентных электронов в i -й оболочке, и N — полное число электронов в атоме мишени. Согласно (3), для определения вероятностей и сечений многоэлектронной ионизации необходимо задать одноэлектронные вероятности ионизации всех оболочек мишени $p_{nl}(b)$.

Эффективное сечение ионизации m электронов σ_m и полное сечение σ_{tot} имеют вид

$$\sigma_m(\mathbf{v}) = 2\pi \int_0^{\infty} b db P_m(b, \mathbf{v}), \quad (5)$$

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{v}) = \sum_{m=1}^N \sigma_m(\mathbf{v}). \quad (6)$$

Если ввести одноэлектронную вероятность ионизации на один электрон мишени

$$p_s = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N p_i, \quad (7)$$

то из (3) следует обычная биномиальная формула для вероятности многоэлектронной ионизации

$$P_m = \binom{N}{m} p_s^m (1 - p_s)^{N - m}. \quad (8)$$

Сумма вероятностей по всем m

$$\mathbf{P}_{\text{net}} = \sum_{m=1}^N m \mathbf{P}_m \quad (9)$$

называется *net*-вероятностью.

Приближение нормированных экспонент

В настоящей работе предлагается вычислять одноэлектронные вероятности $\mathbf{p}_{nl}(b)$ в виде экспоненты

$$\mathbf{p}_{nl}(b) = \mathbf{p}_{nl}(0) \exp(-\alpha_{nl}b). \quad (10)$$

Вероятности $\mathbf{p}_{nl}(b)$, $\mathbf{p}_{nl}(0)$ — безразмерные величины, а показатель экспоненты α_{nl} имеет размерность см^{-1} ; все величины $\mathbf{p}_{nl}(b)$, $\mathbf{p}_{nl}(0)$ и α_{nl} зависят от скорости v налетающего иона.

При использовании (10) сечение одноэлектронной ионизации электрона из nl -оболочки мишени имеет вид

$$\sigma_{nl}(v) = 2\pi \int_0^{\infty} b db \mathbf{p}_{nl}(0) \exp(-\alpha_{nl}b) = 2\pi \frac{\mathbf{p}_{nl}(0)}{\alpha_{nl}^2}, \quad (11)$$

а показатель экспоненты равен

$$\alpha_{nl} = \left[\frac{2\mathbf{p}_{nl}(0)}{\sigma_{nl}(v)/\pi a_0^2} \right]^{1/2}, \quad (12)$$

где a_0 — борновский радиус, $a_0 \approx 0.529 \cdot 10^{-8}$ см. Заметим, что сечение ионизации в (11) соответствует сечению ионизации, отнесенному к одному электрону оболочки nl^k , т.е. $\sigma_{nl} = \sigma(nl^k)/k$, где k — число эквивалентных электронов оболочки. Таким образом, зная одноэлектронные сечения ионизации всех оболочек мишени (из эксперимента или теории) и величину соответствующих вероятностей при нулевом прицельном параметре, можно определить вероятности одноэлектронной ионизации $\mathbf{p}_{nl}(b)$ в (10) и в соответствии с (3)–(6) вероятности и сечения многоэлектронной ионизации.

Выражения экспоненциального вида (10) для вероятностей ионизации использовались в ряде работ для объяснения зависимости полных экспериментальных сечений многоэлектронной ионизации атомов от скорости налетающих ионов; при этом параметры $\mathbf{p}_{nl}(0)$ и α_{nl} подбирались путем подгонки вычисленных сечений [1,3,4] или энергетических спектров вторичных электронов [20] к экспериментальным данным. Напомним, что в данной работе показатель экспоненты для каждой оболочки мишени определяется по вычисленным борновским сечениям ионизации и значениям $\mathbf{p}_{nl}(0)$.

Выбор параметра $\mathbf{p}_{nl}(0)$ по геометрической модели

Среди приближенных классических методов расчета вероятности ионизации можно выделить приближение, называемое геометрической моделью (ГМ) [16,17]. Это

приближение позволяет определять вероятность ионизации при заданном параметре удара и обеспечивает нормировку вероятности даже при условии $Z_P/v > 1$ и малых параметрах удара b , включая $b = -0$,

$$\mathbf{p}_{nl}(0) \leq 1, \quad \mathbf{p}_{nl}(b) \leq 1, \quad (13)$$

где v и Z_P — скорость и эффективный заряд налетающего иона (о выборе Z_P см. ниже).

Однако в силу классического характера и сделанных упрощений приближение ГМ не обеспечивает желаемой точности при средних и больших параметрах удара, где погрешность может достигать фактора 2–3 (см., например, [21]). Отметим, что сами авторы модели в основном использовали ее для вычисления только $\mathbf{p}_{nl}(0)$.

Согласно ГМ, вероятность $\mathbf{p}_{nl}(0)$ ионизации при кулоновском взаимодействии атомного электрона с полем налетающего иона определяется выражением

$$\mathbf{p}_{nl}(0) = 1 - \int_{b_0}^{\infty} R_{nl}^2(r) [1 - (b_0/r)^2]^{1/2} r^2 dr, \quad (14)$$

$$b_0 \approx \frac{2Z_P}{v v_{nl}}, \quad v \gg v_{nl}, \quad (15)$$

где v_{nl} и $R_{nl}(r)$ — орбитальная скорость и радиальная волновая функция nl — электрона атома мишени с нормировкой

$$\int_0^{\infty} r^2 dr R_{nl}^2(r) = 1. \quad (16)$$

Выражение (14) соответствует той части электронной радиальной плотности атома, которая заключена в цилиндре радиуса b_0 вдоль траектории налетающей частицы с нулевым прицельным параметром, т.е. соответствует вероятности передачи электрону посредством кулоновского взаимодействия энергии E большей, чем энергия связи nl -оболочки I_{nl} : $E \geq I_{nl}$. Заметим, что выражение (14) соответствует вероятности ионизации, усредненной по m -компонентам, т.е. проекциям l .

Если скорость иона превосходит орбитальную скорость атома мишени, $v > v_{nl}$, то радиус цилиндра b_0 мал, и вероятность $\mathbf{p}_{nl}(0)$ убывает с ростом скорости в соответствии с первым борновским приближением для кулоновского взаимодействия

$$\mathbf{p}_{nl}(0) \approx 1 - (1 - b_0^2 \langle r^{-2} \rangle_{nl} / 2) = \text{const} \left(\frac{Z_P}{v} \right)^2, \quad b_0 \ll 1. \quad (17)$$

В случае ионизации водородоподобного иона мишени с зарядом Z_T из состояния nl орбитальная скорость $v_{nl} = Z_T/n$, вероятность $\mathbf{p}_{nl}(0)$ выражается через функции Макдональда $K_n(x)$ [16], а асимптотика (17) имеет вид

$$\mathbf{p}_{nl}(0) \approx \frac{2}{(l+1/2)\mathbf{n}} \left(\frac{Z_P}{v} \right)^2, \quad b_0 = \frac{2n}{Z_T} \frac{Z_P}{v} \ll 1. \quad (18)$$

В настоящей работе для численных расчетов используется общее выражение (14), пригодное при любых значениях Z_p/v , в то время как простые аналитические выражения (17), (18) справедливы только при больших скоростях налетающих ионов: $Z_p/v < 1$.

Подробный анализ пределов применимости ГМ выполнен в работах [17,21]. Напомним, что ГМ является приближением, применимым при скоростях налетающего иона, заметно больших, чем скорость электронов на орбите атома мишени, т.е. при $v \gg v_{nl}$. Вероятность перехода, вычисленная по ГМ, стремится при формальной подстановке $v \rightarrow 0$ к нефизическому значению — единице, вместо очевидного из общих соображений результата — нуля. Поэтому ГМ не позволяет описать вероятности и полные сечения ионизации при энергиях столкновения порядка или меньше энергии, соответствующей максимуму сечения ионизации. В частности, зависимость полного сечения от энергии столкновения, вычисленная в рамках последовательной ГМ, не имеет максимума. С другой стороны, результаты расчетов полных сечений ионизации в первом борновском приближении часто удовлетворительно предсказывают положение максимума полного сечения одноэлектронной ионизации, а величину полного сечения в максимуме дают с погрешностью не более фактора 2 при условии $Z_p/v < 1$. Поэтому область применимости предложенной модели нормированных экспонент может быть более широкой, чем область применимости ГМ.

Возвращаясь к выбору метода расчета $p_{nl}(0)$, следует отметить, что расширение области применимости и уточнение предлагаемого метода нормированных экспонент возможно при использовании для расчета $p_{nl}(0)$ квантово-механических приближенных методов в представлении параметра удара, автоматически обеспечивающих нормировку вероятности. Среди таких методов перспективным представляется приближение внезапных возмущений [22–24]. Правда, расчеты в этом приближении заметно сложнее, чем при использовании ГМ, поскольку требуют расчета трехмерных интегралов от осциллирующих функций, интегрирования по энергии вылетевшего электрона и суммирования по 5–8 парциальным волнам. Однако аналогичный объем вычислений необходим и для расчетов в первом борновском приближении в представлении параметра удара, не гарантирующем нормировку вероятности перехода.

Численные расчеты

В настоящей работе вероятности $P_m(b)$ и сечения m -электронной ионизации σ_m вычислялись по программе **MIT** (Multielectron Ionization Transitions) с использованием формул (3), (5), (10), (12), (14), (15); в качестве входных данных в программе **MIT** используется набор вероятностей $p_{nl}(b)$ для тех оболочек атома мишени, которые учитываются при расчетах. Для функций $p_{nl}(b)$ использовались выражения в виде нормированных экспонент (10), где предэкспонента $p_{nl}(0)$ вычислялась

по формуле (14) с радиальными волновыми функциями $R_{nl}(r)$ из программы **ATOM** [25], а расчет одноэлектронных сечений ионизации в (12) проводился по программе **LOSS** [26] в нерелятивистском борновском приближении методом парциальных волн. В программах **ATOM** и **LOSS** функции $R_{nl}(r)$ оптического электрона в дискретном и непрерывном спектре вычисляются с помощью численного решения уравнения Шредингера в эффективном поле атомного остатка, состоящего из ядра и остальных электронов.

Численные расчеты вероятностей и сечений одно- и многоэлектронной ионизации выполнены для атомов H, Ne, Ar и Cs при столкновении с быстрыми протонами и положительными ионами. При расчетах существен выбор эффективного заряда налетающего иона Z_p в уравнениях (14), (15). Было апробировано несколько приближений для нахождения Z_p , в частности, приближение экранированного заряда ядра по рецепту Слетера [25], приближение Гиллеспи [27], а также способ нахождения Z_p по программе **LOSS**. В последнем случае Z_p определялось по формуле

$$Z_p(nl, \mathbf{v})[\sigma_q(nl, v)/\sigma_{\text{prot}}(nl, v)]^{1/2}, \quad (19)$$

где $\sigma_q(nl, \mathbf{v})$ и $\sigma_{\text{prot}}(nl, \mathbf{v})$ — сечения ионизации nl -оболочки мишени ионом с зарядом q и протоном ($q = 1$) соответственно. Однако сравнение сечений многоэлектронной ионизации, вычисленных с различными зарядами Z_p , с имеющимися экспериментальными данными показало, что наилучшее согласие расчетов по предлагаемой модели достигается, если просто положить $Z_p = q$ и сечения $\sigma_{nl}(\mathbf{v})$ в (12) вычислять по формуле

$$\sigma_{nl}(\mathbf{v}) = q^2 \sigma_{\text{prot}}(nl, \mathbf{v}), \quad (20)$$

т.е. одноэлектронные сечения ионизации электронов всех оболочек мишени вычислять с одним и тем же эффективным зарядом налетающего иона. Тогда для расчета экспоненты α_{nl} в (12) можно использовать более простое выражение

$$\alpha_{nl} = \left[\frac{2p_{nl}(0)}{q^2 \sigma_{\text{prot}}(nl, v)/\pi a_0^2} \right]^{1/2}. \quad (21)$$

Возможно, что при другом представлении базисных вероятностных функций (10) выбор эффективного заряда Z_p будет иным. Тем не менее выражение (21) обладает рядом преимуществ. Во-первых, оно отражает экспериментальный факт, согласно которому сечение m -электронной ионизации зависит в основном от заряда налетающего иона q , но не от его атомной структуры. Например, экспериментальные сечения пятикратной ($m = 5$) ионизации атомов Ne ионами Ne^{4+} и Ar^{4+} при энергии 1.05 MeV/u составляют $1.4 \cdot 10^{-18}$ и $1.2 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ соответственно. Во-вторых, сечения ионизации протонным ударом намного легче вычислять, чем сечения ионизации ионами со сложной атомной структурой. Наконец, при достаточно больших скоростях столкновения сечения ионизации протонным ударом близки к сечениям ионизации электронным ударом, значения которых широко представлены в литературе.

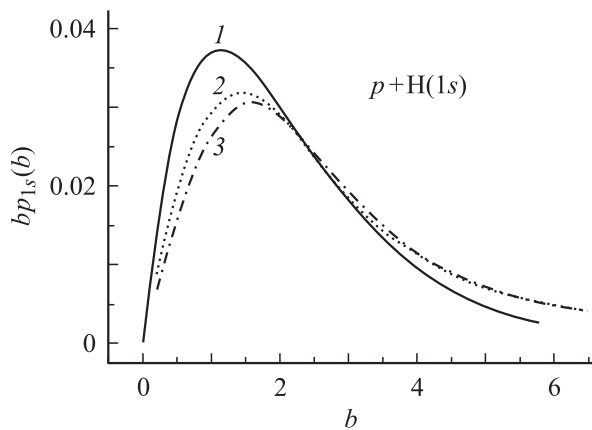


Рис. 1. Взвешенные вероятности $bp_{1s}(b)$ ионизации протонами атома водорода из основного состояния при энергии протонов $E = 1.0 \text{ MeV}$ ($v = 6.32 \text{ at.u.}$) как функции прицельного параметра b в атомных единицах: 1 — метод нормированных экспонент, программа **MIT**, настоящая работа; 2 — метод сильной связи [19]; 3 — борновское приближение в представлении параметров удара [28].

Ионизация атомов водорода протонами: столкновения $p + H(1s)$

На рис. 1 приведены результаты расчетов вероятностей одноэлектронной ионизации протонами атома водорода из основного состояния как функции прицельного параметра b при энергии $E = 1 \text{ MeV}$ (скорость $v = 6.32 \text{ at.u.}$, $1 \text{ at.u.} = 2.2 \cdot 10^8 \text{ cm/s}$). Результаты расчетов в рамках модифицированного метода сильной связи [19] хорошо согласуются с результатами борновского приближения [28], но отличаются от результатов расчетов методом нормированных экспонент, выполненных в настоящей работе по программе **MIT**. Фактически расхождение между результатами, полученными методами сильной связи и нормированных экспонент, определяет точность предложенного нами метода — порядка 30–50%.

Ионизация атомов неона

Для расчета вероятностей и сечений многоэлектронной ионизации сложных атомов необходимо знать сечения одноэлектронной ионизации протонами и параметры $p_{nl}(0)$ и α_{nl} для всех оболочек nl -мишени. Указанные параметры, вычисленные в настоящей работе, указаны в таблице в случае ионизации Ne и Ar мишеней ионами с зарядом $q = 4$ и энергией 1.5 MeV/u (скорость $v = 6.48 \text{ at.u.}$). Скорости электронов на орбите определялись по формуле

$$v_{nl} = \sqrt{I_{nl}/Ry},$$

где I_{nl} — энергия связи атомной оболочки в Ридбергах, $1 Ry = 13.606 \text{ eV}$. Сечения ионизации протонным ударом $\sigma_{\text{prot}}(nl)$ вычислялись по программе **LOSS**, параметры

Орбитальные скорости электронов v_{nl} , сечения ионизации протонами $\sigma_{\text{prot}}(nl)$ на один электрон оболочек nl и параметры одноэлектронных вероятностей (10) $\text{Ne}(1s^2 2s^2 2p^6)$ и $\text{Ar}(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$ мишеней. Все данные приведены в атомных единицах, сечения ионизации даны в единицах $\pi a_0^2 \approx 0.88 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$

Параметры	Ne	Ar	Параметры	Ne	Ar
v_{1s}	8.00	15.4	$p_{1s}(0)$	0.574	0.693
v_{2s}	1.89	4.90	$p_{2s}(0)$	0.554	0.41
v_{2p}	1.26	4.30	$p_{2p}(0)$	0.784	0.51
v_{3s}	—	1.47	$p_{3s}(0)$	—	0.34
v_{3p}	—	1.08	$p_{3p}(0)$	—	0.51
$\sigma_{\text{prot}}(1s)$	$5.22 \cdot 10^{-4}$	$8.39 \cdot 10^{-6}$	α_{1s}	11.72	101.6
$\sigma_{\text{prot}}(2s)$	$3.21 \cdot 10^{-2}$	$3.50 \cdot 10^{-3}$	α_{2s}	1.47	3.72
$\sigma_{\text{prot}}(2p)$	$7.33 \cdot 10^{-2}$	$4.36 \cdot 10^{-3}$	α_{2p}	1.16	3.79
$\sigma_{\text{prot}}(3s)$	—	$6.20 \cdot 10^{-2}$	α_{3s}	—	0.83
$\sigma_{\text{prot}}(3p)$	—	$2.11 \cdot 10^{-1}$	α_{3p}	—	0.56
$b_0(1s)$	0.15	0.080			
$b_0(2s)$	0.65	0.25			
$b_0(2p)$	0.98	0.29			
$b_0(3s)$	—	0.84			
$b_0(3p)$	—	1.14			

$p_{nl}(0)$ по программе **АТОМ**, формула (14), параметры b_0 — по (15), а показатели экспонент α_{nl} — по (12).

Многоэлектронная ионизация атомов Ne протонами и положительными ионами изучена наиболее детально экспериментально и теоретически, поэтому мы рассмотрим этот пример более подробно. На рис. 2 приведены сечения одноэлектронной ионизации атома Ne ($1s^2 2s^2 2p^6$) протонами как функции скорости протонов, вычисленные по программе **LOSS** в борновском приближении. Для сравнения приведены сечения ионизации на один электрон, т.е. значения $\sigma_{1s}/2$, $\sigma_{2s}/2$ и $\sigma_{2p}/6$, так как именно эти сечения входят в (12) для определения одноэлектронных сечений. Как видно из рис. 2, сечения ионизации на один электрон из $2s$ - и $2p$ -оболочек одного порядка, а одноэлектронные сечения $1s$ -оболочки на несколько порядков меньше.

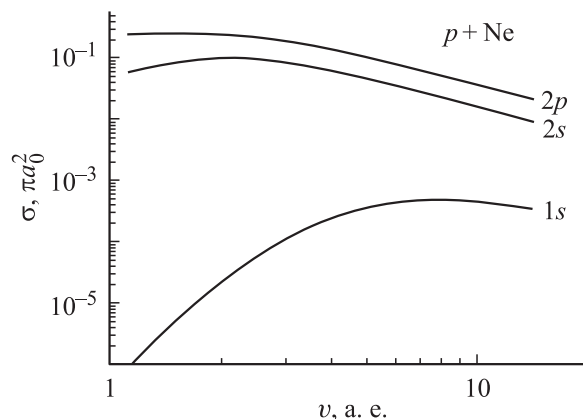


Рис. 2. Сечения ионизации на один электрон всех оболочек атома Ne протонами как функции скорости протона.

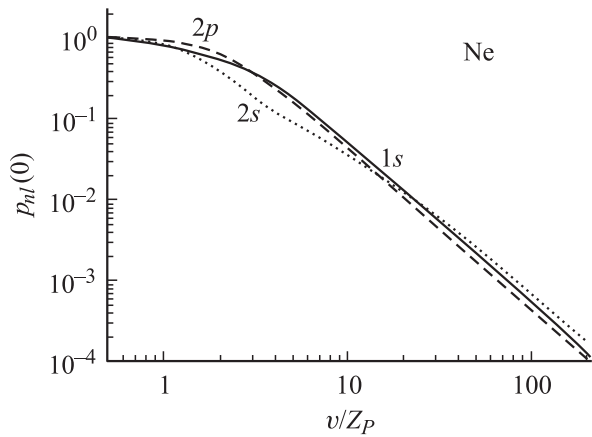


Рис. 3. Вероятности ионизации $p_{nl}(0)$ электронов атома Ne как функции отношения v/Z_p .

Соответствующие вероятности $p_{nl}(0)$ при нулевом параметре удара, вычисленные в геометрической модели (14), (15), приведены на рис. 3 как функции отношения v/Z_p , где v и Z_p — скорость и эффективный заряд налетающего иона. Для расчета волновых функций использовалась программа **АТОМ**, описанная в [25]. Видно, что несмотря на большое отличие в сечениях ионизации, все вероятности $p_{nl}(0)$ имеют одинаковый порядок величины и не превосходят единицы, что обеспечивается формулами (14), (15).

На рис. 4 приведено сравнение взвешенных вероятностей одноэлектронной ионизации электронов оболочек атома неона протонами при энергии 1.05 MeV/u как функции прицельного параметра, вычисленных методом сильной связи и методом нормированных экспонент. Как видно из рис. 4, результаты расчетов обоими методами хорошо согласуются друг с другом, в то время как для вероятности ионизации электронов 1s-оболочки результаты расчетов заметно расходятся. Это расхождение связано с нарушением условия малости (15) орбитальной скорости 1s-электрона ($v_{1s} \approx 8$ at.u.) по сравнению со скоростью налетающего протона ($v \approx 6.5$ at.u.).

Экспериментальные сечения одно-, двух- и трехэлектронной ионизации атомом Ne протонами приведены на рис. 5 в сравнении с результатами расчетов методом сильной связи и настоящей работы. Вычисленные методом нормированных экспонент сечения находятся в довольно хорошем согласии с экспериментальными данными и рассчитанными методом сильной связи, за исключением случая трехэлектронной ионизации ($m = 3$), где экспериментальные сечения убывают значительно медленнее, чем вычисленные сечения. Видно, что приближение, предложенное в данной работе, приводит к завышенным сечениям в области низких энергий по сравнению с методом сильной связи, что характерно для приближения геометрической модели.

Вообще говоря, при больших кратностях ионизации налетающего иона приближение независимых частиц становится неприменимым, так как начинается влияние

процессов Оже-распада мишени в результате ионизации и перезарядки с участием электронов внутренних оболочек атома [30]. Напомним, что наилучшие в настоящее время теоретические результаты для сечений многоэлектронной ионизации были получены в классической модели Монте-Карло для n взаимодействующих частиц (**n-СТМС**, см. [31], где приведены расчеты сечений многоэлектронной ионизации тяжелых ионов при столкновении с атомами). В этом модели преодолены неко-

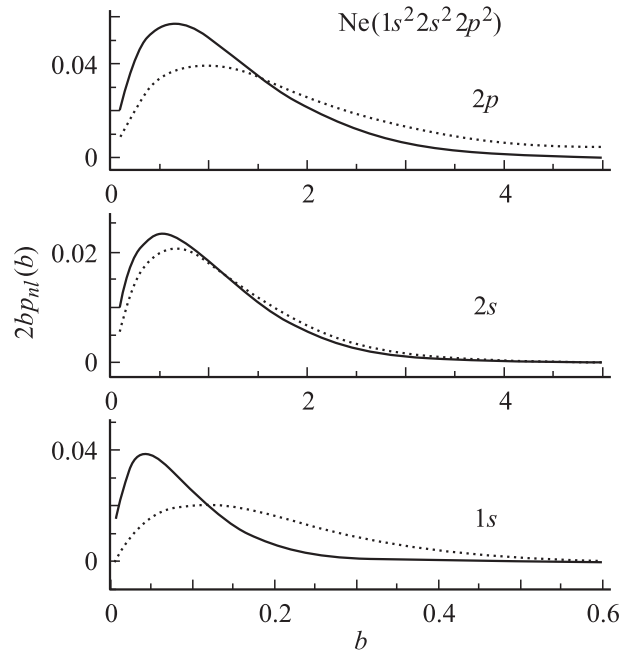


Рис. 4. Взвешенные вероятности ионизации $2bp_{nl}(b)$ (на один электрон) для всех оболочек атомов Ne($1s^2 2s^2 2p^6$) протонами. Пунктир — метод сильной связи [29], сплошные кривые — метод нормированных экспонент, программа **MIT**, настоящая работа. Значения сечений ионизации, соответствующие приведенным вероятностям, даны в таблице.

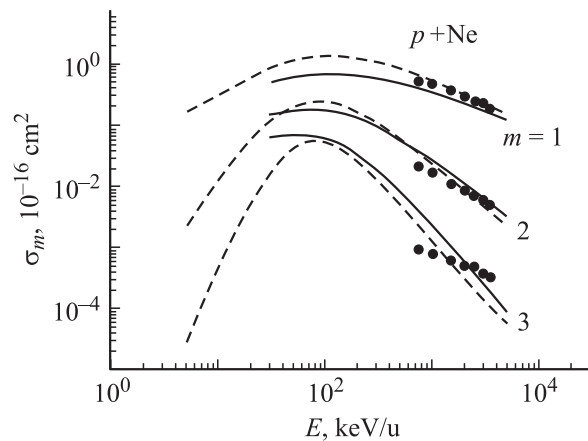


Рис. 5. Сечения ионизации протонами $m = 1, 2, 3$ электронов атомов Ne как функции энергии протонов: кружка — эксперимент [32], пунктир — метод сильной связи [29], сплошные кривые — настоящая работа, программа **MIT**, расчет с $Z_p = 1$.

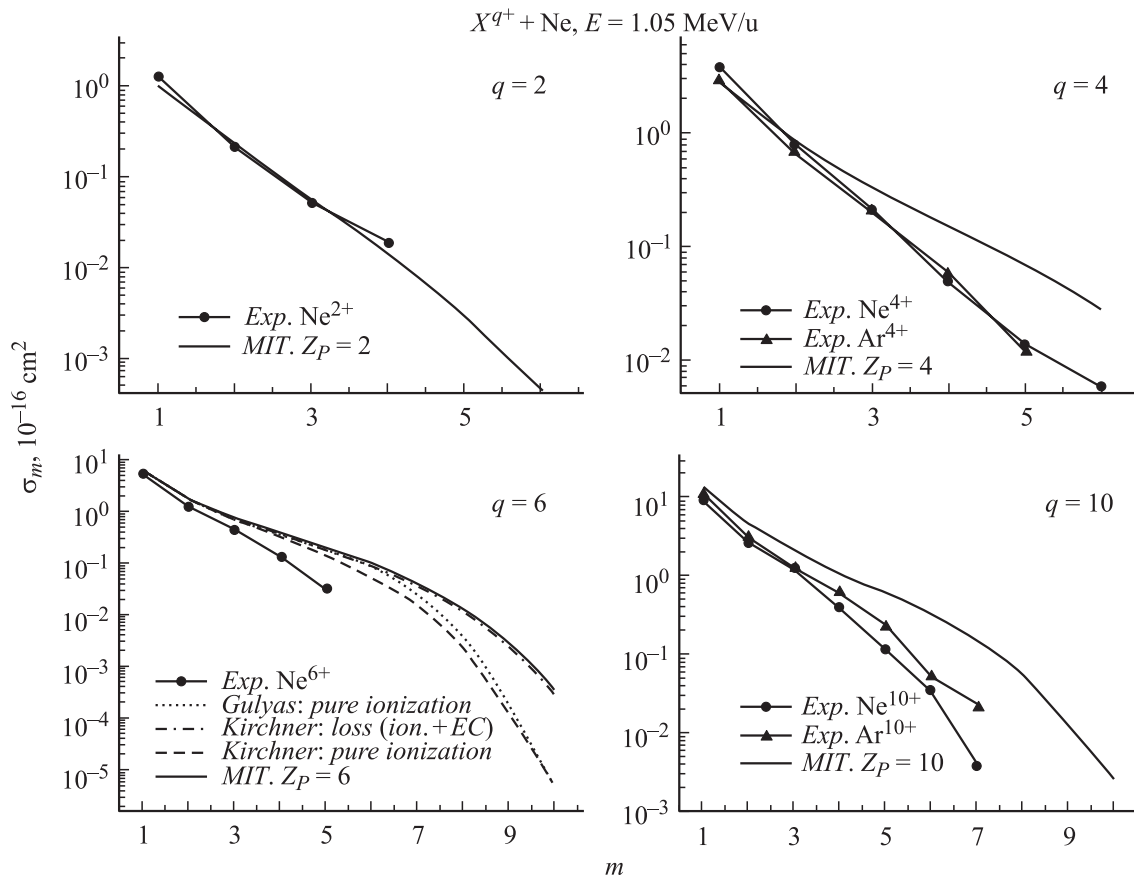


Рис. 6. Сечения m -электронной ионизации атомов неона ионами: сплошные кружки и треугольники — эксперимент: $Ne^{q+} + Ne$ [33]; $Ar^{q+} + Ne$ [34] соответственно. Теория: пунктир — метод сильной связи [19], сплошные кривые — настоящая работа, программа MIT, с $Z_P = 2, 4, 6$ и 10 .

торые недостатки стандартной МНЧ, но ее применение требует использования суперкомпьютеров.

На рис. 6 приведены вычисленные сечения многоэлектронной ионизации атомов Ne ионами с зарядом $q = 2, 4, 6$ и 10 при энергии налетающих ионов $E = 1.05 \text{ MeV/u}$ ($v = 6.48 \text{ at.u.}$) в сравнении с имеющимися экспериментальными данными. Следует отметить, что в литературе, как правило, приведены расчеты многоэлектронных сечений ионизации нейтральных атомов для столкновений только с протонами и голыми ядрами, т.е. с бесструктурными частицами. Эти расчеты приведены на рис. 6 в сравнении с экспериментом и расчетами, выполненными в настоящей работе. Экспериментальные сечения ионизации $m = 1-5$ электронов атомов неона ионами Ne^{4+} и Ar^{4+} имеют весьма близкие значения, что является общим свойством экспериментальных сечений многоэлектронной ионизации при больших энергиях: сечения зависят, главным образом, от заряда налетающего иона, а не от его атомной структуры. Для случая $q = 4$ метод нормированных экспонент описывает экспериментальные данные для ионизации $m = 1, 2$ и 3 электронов с точностью порядка 50%, но гораздо хуже ионизацию $m > 3$ электронов неона. Это связано с тем обстоятельством, что с ростом заряда q нарушается условие применимости борновского приближения ($q/v < 1$), и

сечения одноэлектронной ионизации, вычисленные с помощью программы LOSS, дают завышенные значения.

На рис. 7 приведены сечения ионизации на один электрон всех оболочек атома Ar протонным ударом, вычисленные по программе LOSS. Соответствующие

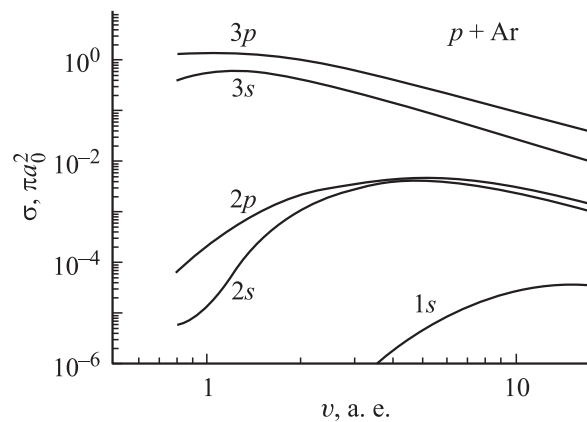


Рис. 7. Сечения ионизации на один электрон всех оболочек атома $Ar(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$ протонами как функции скорости протона (at.u.) — расчет по программе LOSS настоящая работа.

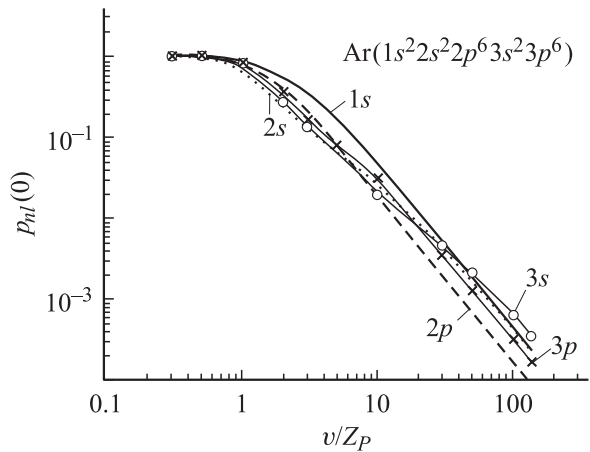


Рис. 8. Вероятности ионизации $p_{nl}(0)$ электронов атома $\text{Ar}(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$ как функции v/Z_p формулы (14), (15).

вероятности $p_{nl}(0)$ при нулевом параметре удара, вычисленные в геометрической модели (14)–(15), приведены на рис. 8 как функции отношения v/Z_p , где v и Z_p — скорость и эффективный заряд налетающего иона. Для расчета волновых функций использовалась программа **АТОМ**, описанная в [25].

На рис. 9 приведены сечения многоэлектронной ионизации атомов Ar ионами аргона. При расчетах настоящим методом учитывался вклад всех 18-ти электронов аргона. Аналогично ионизации атомов неона (рис. 6) вычисленные в настоящей работе сечения сильно превышают экспериментальные данные при $m > 4$, что связано с тем же обстоятельством — нарушением условия применимости борновского приближения ($q/v < 1$) с помощью которого были вычислены параметры α_{nl} , одноэлектронные борновские сечения оказались завышенными, а соответственно параметры α_{nl} — заниженными, что и привело к расхождению расчетов с экспериментом.

Наконец, на рис. 10 приведены сечения многоэлектронной ионизации атомов Cs ионами Cs^{6+} при энергии $E = 6.2 \text{ МэВ}$. Расчеты проводились по программам **LOSS** и **MIT** с учетом вклада всех 55-ти электронов мишени. Полное вычисленное сечение ионизации равно $\sigma_{\text{tot}} = \sum_m \sigma_m = 1.67 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$, при этом парциальные сечения составляют $\sigma_1 = 1.31 \cdot 10^{-15}$, $\sigma_2 = 2.5 \cdot 10^{-16}$, $\sigma_3 = 7.62 \cdot 10^{-17}$ и $\sigma_4 = 2.61 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$, так что суммарный вклад многоэлектронных процессов с $m \geq 2$ в этом случае составляет $\sim 20\%$ от полного сечения σ_{tot} . Экспериментальное значение в работе [36], довольно близко к вычисленному и равно $\sigma_{\text{tot}} = 1.41 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$.

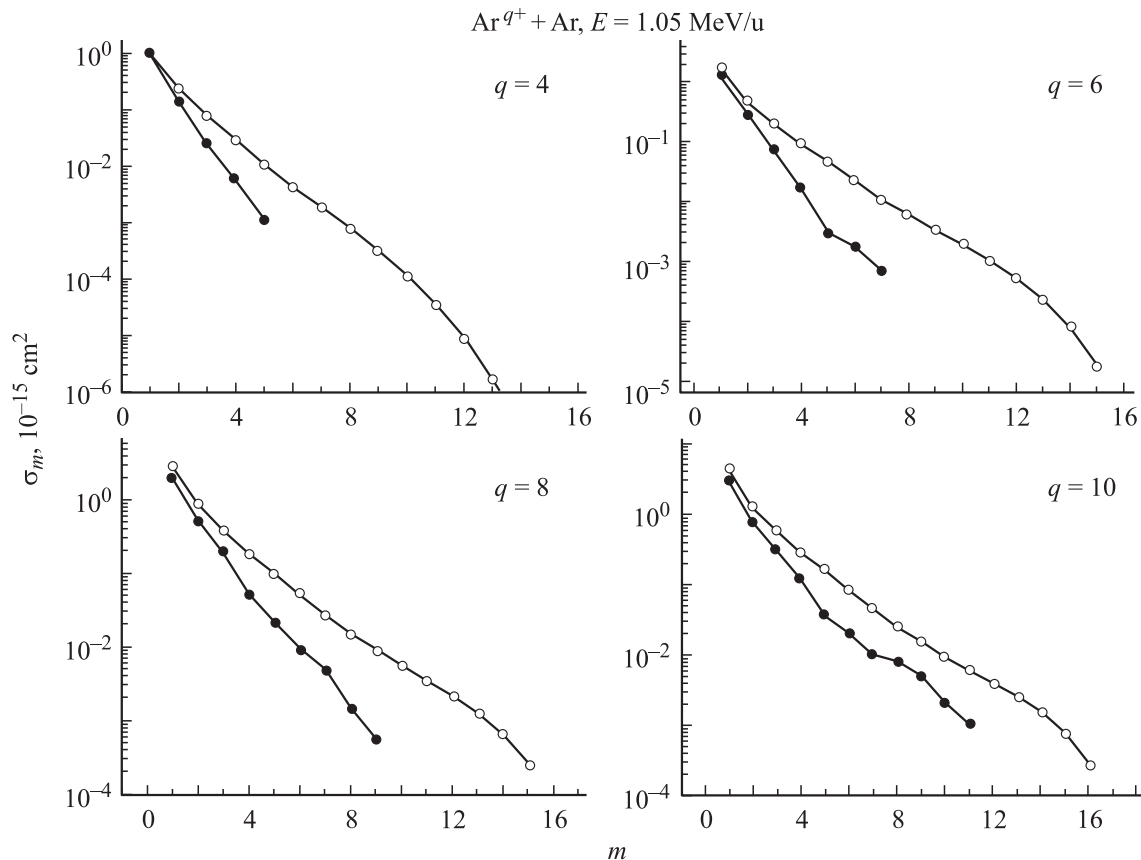


Рис. 9. Сечения m -электронной ионизации атомов аргона ионами с зарядом $q = 4, 6, 8$ и 10 : сплошные кружки — эксперимент [35], открытые кружки — настоящая работа, программа **MIT**, $Z_p = 4, 6, 8$ и 10 соответственно.

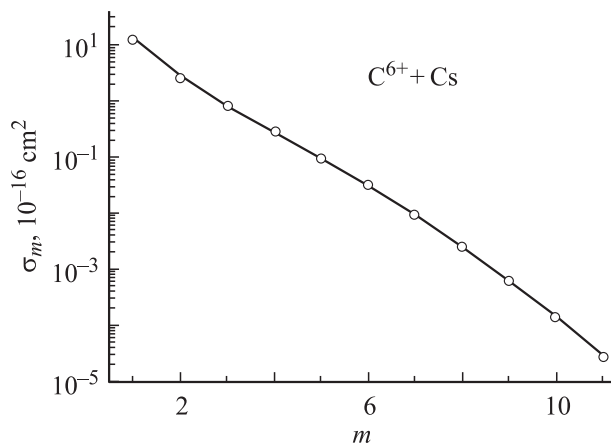


Рис. 10.

Заключение

Предложен метод расчета вероятностей и сечений многоэлектронной ионизации нейтральных атомов быстрыми ионами на основе приближения независимых частиц в представлении параметра удара. Метод основан на использовании одноэлектронных вероятностей ионизации оболочек мишени в виде нормированных экспонент, где предэкспонента вычисляется по геометрической модели, а показатель экспоненты — по борновским сечениям ионизации атома мишени протонным ударом. Метод позволяет описать вероятности и сечения одно-, двух- и трехкратной ионизации с точностью до фактора 2 при достаточно больших энергиях налетающих ионов. Предложенный метод может представлять интерес для расчета сечений многоэлектронной ионизации тяжелых атомных мишеней.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 04-02-16309, 03-02-16053 и ИНТАС гранта № 0354-3604.

Список литературы

- [1] Парилус Э.С., Кишиневский Л.М., Матвеев В.И., Краков Б.Г. Оже-процессы при атомных столкновениях. Ташкент: Фан, 1989.
- [2] McGuire J.H. Introduction to Dynamic Correlation: Multiple Electron Transitions in Atomic Collisions. Tulane University, 1997.
- [3] Stolterfoht N., DuBois R.D., Rivarola R.D. Electron emission in heavy ion-atom collisions. Berlin: Springer, 1997.
- [4] Shevelko V.P., Tawara H. Atomic Multielectron Processes. Berlin: Springer, 1998.
- [5] Atomic Physics with Heavy Ions / Ed. by H.F. Beyer, V.P. Shevelko. Berlin: Springer, 1999.
- [6] The Physics of Multiply and Highly Charged Ions / Ed. by F.J. Currell. Dordrecht: Kluwer Academic Pub., 2003.
- [7] Olson R.E., Watson R.L., Horvat V., Zaharakis K.E. // J. Phys. B. 2002. Vol. 35. P. 1893.
- [8] Watson R.L., Peng Y., Horvat V., Kim G.J., Olson R.E. // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67. P. 022 706.
- [9] Olson R.E., Watson R.L., Horvat V., Perumal A.N., Peng Y., Stöhlker Th. // J. Phys. B. 2004. Vol. 37. P. 4539.
- [10] Cocke C.L., Olson R.E. // Phys. Rep. 1991. Vol. 205. P. 153.
- [11] Kelbch S., Ullrich J., Mann R., Richard P., Schmidt-Böcking H. // J. Phys. B. 1985. Vol. 18. P. 323.
- [12] Lozhkin K.O., Shan M.B., McCartney P.C.E., Geddes J., Gilbody H.B. // Phys. Scr. 1997. Vol. 73. P. 223.
- [13] McGuire J.H., Weaver L. // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 16. P. 41.
- [14] Kabachnik N.M., Kondratyev V.N., Roller-Lutz., Lutz H.O. // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 56. P. 2848.
- [15] Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.
- [16] Sulik B., Hock G., Berényi D. // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. P. 3239.
- [17] Sulik B., Kádár I., Ricz S., Varga D., Végh J., Hock G., Berényi D. // Nucl. Instr. Meth. B. 1987. Vol. 28. P. 509.
- [18] Horbatsch M. // Z. Phys. D. Suppl. 1991. Vol. 21. P. 63.
- [19] Kirchner T., Gulyás L., Lüdde H.J., Engel E., Dreizler R.M. // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 58. P. 2063.
- [20] Yang-Soo Chung, Rudd M.E. // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 54. P. 4106.
- [21] Уланцев А.Д. // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2005 (направлено в печать)
- [22] Eichler J. // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15. P. 1856.
- [23] Voitkiv A.B., Sigaud G.M., Montenegro E.C. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 59. P. 2794.
- [24] Voitkiv A.B., Grün N., Scheid W. // J. Phys. B. 1999. Vol. 33. P. 3431.
- [25] Вайнштейн Л.А., Шевелько В.П. Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М.: Наука, 1986.
- [26] Shevelko V.P., Tolstikhina I.Yu., Stoehlker Th. // Nucl. Instrum. Meth. B. 2001. Vol. 184. P. 295.
- [27] Gillespie G.H. // Phys. Lett. A. 1983. Vol. 93. P. 327.
- [28] Hansteen J.M., Johnsen O.M., Kochach L. // J. Phys. B. 1974. Vol. 7. P. L271.
- [29] Kirchner T., Lüdde H.J., Dreizler R.M. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 61. P. 012 705.
- [30] Spranger T., Kirchner T. // J. Phys. B. 2004. Vol. 37. P. 4159.
- [31] Olson R.E., Ullrich J., Schmidt-Böcking H. // J. Phys. B. 1987. Vol. 20. P. L809.
- [32] Cavalcanti E.G., Sigaud G.M., Montenegro E.C., Sant'Anna M.M., Schmidt-Böcking H. // J. Phys. B. 2002. Vol. 35. P. 3937.
- [33] Tawara H., Tonuma T., Kumagai H., Matsuo T. // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 41. P. 116.
- [34] Matsuo T., Tonuma T., Kumagai H., Tawara H. // Phys. Rev. A. 1994. Vol. 50. P. 1178.
- [35] Tonuma T., Kumagai H., Matsuo T., Tawara H. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 6238.
- [36] Eicke B. PhD Thesis. Heidelberg: MPI, 2002 (unpublished).