

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 530.145

ВОЗМОЖНОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ КОРРЕЛЯЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ
В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ОДНОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ
ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

К. А. Кузаков, Ю. В. Попов

(НИИЯФ)

Исследуется поведение дифференциальных сечений реакций $A(e, 2e)A^+$ и $A(e, 2e)A^{+*}$ в гелии в зависимости от типа волновой функции атома. Теоретические расчеты этих сечений показали, что результаты $(e, 2e)^*$ -экспериментов с возбуждением иона-остатка дают возможность делать по крайней мере качественные заключения о характере межэлектронных корреляций, учитываемых явно в волновой функции мишени.

Более 30 лет тому назад Смирнов и Неудачин [1] предложили перенести известную в ядерной физике методику $(p, 2p)$ - и (p, pn) -реакций в атомную физику в качестве $(e, 2e)$ -метода, впоследствии получившего название электронной импульсной спектроскопии (ЭИС). Вскоре после этого предложения были поставлены первые $(e, 2e)$ -эксперименты на атомах инертных газов [2, 3], продемонстрировавшие эффективность ЭИС-метода в исследованиях одноэлектронных волновых функций атомных мишеней.

Кинематика ЭИС-метода отвечает процессу ионизации электронным ударом, в котором быстрый налетающий электрон с энергией много больше энергии ионизации выбивает электрон мишени, передавая ему большую часть своего импульса. В «чистых» ЭИС-экспериментах используется так называемая симметричная компланарная кинематика: энергия начального электрона делится пополам между двумя конечными электронами, а углы вылета последних относительно направления начального импульса равны между собой и их величины примерно равны 45° .

Такая геометрия уникальна тем, что механизм классического квазиупругого удара доминирует среди прочих. Это обстоятельство позволяет упростить теоретическое описание ЭИС-процессов, например представить волновую функцию конечного состояния в виде произведения двух плоских волн, отвечающих паре быстрых конечных электронов, на волновую функцию иона-остатка, что в свою очередь дает возможность прямого исследования импульсного распределения электрона в мишени [1]. Кроме того, даже в случае не очень высоких начальных энергий электронов эффекты искажения плоских волн легко учитываются эйконалными [4] и квазиклассическими [5] поправками, что немаловажно, поскольку дифференциальное сечение $(e, 2e)$ -ионизации быстро падает с ростом начальной энергии.

Исследования Левина [6] показали, что $(e, 2e)$ ЭИС-эксперименты, проведенные с некоторыми мишенями, дают также информацию о ee -корреляциях, учитываемых взаимодействием хартри-фоковских

оболочек. В частности, было показано, что $(e, 2e)$ энергетические спектры в случае углерода и кислорода в качестве мишеней включают дополнительные пики, которые можно вполне наблюдать при определенном разрешении по энергии.

В данной работе мы хотим показать, как ee -корреляции могут проявляться в угловых спектрах $(e, 2e)^*$ ЭИС-экспериментов, в которых ион-остаток находится в возбужденном состоянии. Показано, что дифференциальные сечения этих процессов во многом определяются характером ee -корреляций в мишени, которые в простой $(e, 2e)$ -ионизации играют менее значительную роль. Небольшое число $(e, 2e)^*$ -экспериментов в несимметричной некомпланарной кинематике было проведено австралийской группой Мак-Карти [7–9], однако мы не ставим своей целью их анализ, поскольку в некомпланарных экспериментах (т.е. когда импульсы падающих на мишень электронов не лежат в плоскости разлета электронов после удара) начинают сказываться механизмы перераспределения, вклад которых требует специальных теоретических исследований.

Для упрощения теоретического анализа в качестве мишени рассматривается атом гелия, координатная составляющая волновой функции которого $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ является симметричной функцией своих переменных. В литературе существует много различных моделей волновой функции основного состояния атома He, дающих одни и те же значения энергий связи одного и обоих электронов, но по-разному учитывающих ee -корреляции. Поэтому представляет интерес возможность селекции среди этого множества моделей с помощью $(e, 2e)$ и $(e, 2e)^*$ ЭИС-экспериментов.

Приведем основные определения и уравнения ЭИС-метода. Прежде всего обозначим через (E_0, \mathbf{p}_0) , (E_a, \mathbf{p}_a) и (E_b, \mathbf{p}_b) энергии и импульсы соответственно начального и обоих быстрых конечных электронов. Традиционно определим переданный импульс $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a$, хотя в случае бинарной кинематики выбор вектора \mathbf{p}_a ничем специально не обусловлен.

Законы сохранения энергии и импульса имеют вид

$$E_0 + \varepsilon_0^{\text{He}} = E_a + E_b + \varepsilon_n^{\text{He}^+},$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b + \mathbf{q}.$$

Для бинарных реакций $E_a \simeq E_b \sim E_0/2$ и плоские углы $\theta_a \simeq \theta_b \sim 45^\circ$.

В современных $(e, 2e)^*$ -экспериментах с возбуждением различают только главное квантовое число, поэтому трехкратное дифференциальное сечение (TDCS — triple differential cross section) выглядит следующим образом:

$$\frac{d^3\sigma_n}{dE_b d\Omega_a d\Omega_b} = \frac{2p_a p_b}{(2\pi)^3 p_0} (d\sigma)_{ee}^{\text{Mott}} \rho_n(q). \quad (1)$$

В формуле (1) $(d\sigma)_{ee}^{\text{Mott}}$ представляет собой моттовское сечение рассеяния двух электронов:

$$(d\sigma)_{ee}^{\text{Mott}} = \frac{4}{Q^4} f(x) C(y), \quad (2)$$

где

$$f(x) = \frac{2\pi x}{e^{2\pi x} - 1}; \quad C(y) = [1 + y^4 - y^2 \cos(2x \ln y)];$$

$$x = |\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b|^{-1}; \quad y = \frac{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a|}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_b|}.$$

Функция $\rho_n(q)$ записывается в виде

$$\rho_n(q) = \sum_{l=0}^{l=n-1} \sum_{m=-l}^{m=l} \left| \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_{nl}(r_1) Y_{lm}^*(\mathbf{r}_1) \times \right. \\ \left. \times e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_2} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right|^2. \quad (3)$$

В формуле (3) функции $\varphi_{nl}(r) Y_{lm}(\mathbf{r})$ — это собственные функции дискретного спектра водородоподобного атома с зарядом $Z = 2$. Таким образом, сечение (1) содержит фурье-образы проекций волновой функции мишени на состояния этого спектра. Вместе с тем обратный фурье-анализ здесь невозможен в силу следующих причин. Во-первых, сечение (1) для данного n зависит от суммы квадратов модулей парциальных амплитуд, отвечающих квантовым числам l и m . Во-вторых, выражение (1) для сечения справедливо только в области достаточно малых значений q , сравнимых с величиной среднего импульса электрона в атоме. Поэтому информация, которую можно извлечь из анализа бинарных сечений $(e, 2e)$ - и $(e, 2e)^*$ -процессов, имеет достаточно ограниченный характер и отражает только наиболее характерные черты волновой функции мишени.

Для дальнейшего будет более удобно несколько упростить формулу (3), используя парциальные разложения входящих в нее функций:

$$\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \Phi_{0l}(r, r') \langle Y_l(\mathbf{r}) Y_l(\mathbf{r}') \rangle,$$

$$\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(qr) \langle Y_l(\mathbf{q}) Y_l(\mathbf{r}') \rangle. \quad (4)$$

В формулах (4) $j_l(qr)$ — сферическая функция Бесселя;

$$\langle Y_l(\mathbf{a}) Y_l(\mathbf{b}) \rangle \equiv \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Omega_a) Y_{lm}(\Omega_b) = \\ = \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\cos \theta_{\mathbf{ab}}).$$

В результате для сечения (1) получим следующее выражение:

$$\frac{d^3\sigma_n}{dE_b d\Omega_a d\Omega_b} = 2^8 \pi \frac{p_a p_b}{p_0} (d\sigma)_{ee}^{\text{Mott}} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \times \\ \times \left| \int_0^{\infty} r_1^2 j_l(qr_1) dr_1 \int_0^{\infty} r_2^2 \varphi_{nl}(r_2) \Phi_{0l}(r_1, r_2) dr_2 \right|^2. \quad (5)$$

В компланарной симметричной кинематике с фиксированными значениями энергий начального и двух конечных электронов сечение (5) зависит только от угла вылета двух конечных электронов θ .

Для качественных оценок были выбраны три простые функции, воспроизводящие энергию связи гелия с точностью не хуже 95%. Это хартри-фоковская функция из известного справочника Клементи-Роетти [10], которую мы будем обозначать индексом RHF:

$$\Phi_0^{(\text{RHF})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi(\mathbf{r}_1) \phi(\mathbf{r}_2), \\ \phi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^5 \alpha_i \varphi_i^{1s}(r), \quad (6)$$

одна из функций Сильвермана-Платаса-Матсена (SPM) [11], включающая явно как радиальные, так и угловые корреляции:

$$\Phi_0^{(\text{SPM})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}} \times \\ \times \left\{ N[\varphi^{1s}(r_1) \varphi^{1s'}(r_2) + \varphi^{1s'}(r_1) \varphi^{1s}(r_2)] + \right. \\ \left. + \frac{4\pi\lambda}{\sqrt{3}} \varphi^{2p}(r_1) \varphi^{2p}(r_2) \langle Y_1(\mathbf{r}_1) Y_1(\mathbf{r}_2) \rangle \right\}, \quad (7)$$

и одна из функций типа Хиллерааса (H), также содержащая радиальные и угловые корреляции [12]:

$$\Phi_0^{(\text{H})}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ = N[\varphi^{1s}(r_1) \varphi^{1s'}(r_2) + \varphi^{1s'}(r_1) \varphi^{1s}(r_2)] (1 + C_0 e^{-\lambda r_{12}}). \quad (8)$$

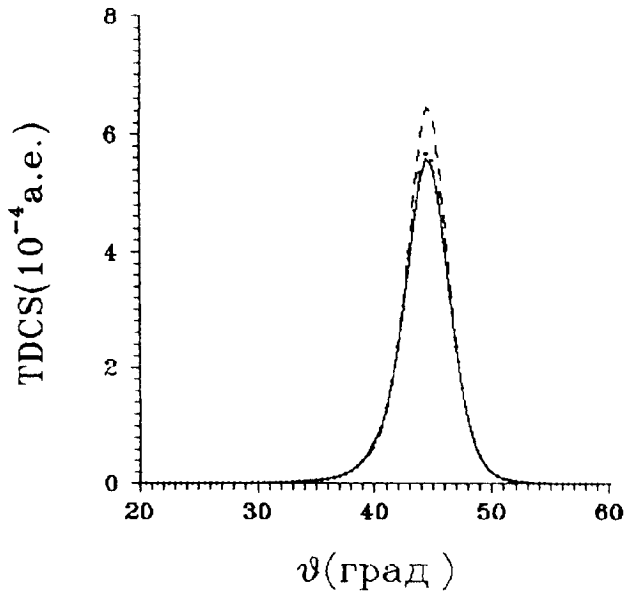


Рис. 1. TDCS реакции $\text{He}(e, 2e)\text{He}^+$ в случае $n = 1$, $E_a = E_b = 2000$ эВ для функции RHF (сплошная линия), SPM (штриховая) и H (точки)

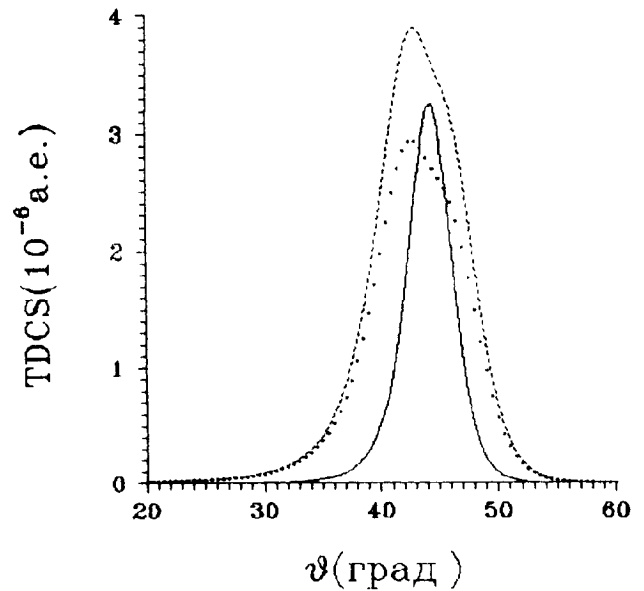


Рис. 2. TDCS реакции $\text{He}(e, 2e)\text{He}^{+*}$ в случае $n = 2$, $E_a = E_b = 2000$ эВ для функции RHF ($\times 0,25$) (сплошная линия), SPM (штриховая) и H (точки)

В формулах (6)–(8)

$$\varphi^{1s}(r) = \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma r}; \quad \varphi^{2p}(r) = \sqrt{\frac{\delta^5}{3\pi}} r e^{-\delta r}.$$

В каждом случае параметры γ и δ зависят от типа модели. Характерной особенностью приведенных функций, как, впрочем, всех имеющихся в литературе моделей, является то, что в них доминирует (составляет 95–97%) вклад 1S_0 -компоненты, т.е. $(1s)^2$ -состояние в случае RHF и $(1s1s')$ -состояние в случаях SPM и H.

На рис. 1 изображены TDCS для всех трех функций, когда ион He^+ остается в основном состоянии. При очевидном различии типов рассматриваемых функций основного состояния атома He все они воспроизводят сечения, практически совпадающие по форме и абсолютной величине.

На рис. 2 и 3 представлены TDCS $(e, 2e)^*$ -реакций для случаев $n = 2$ и $n = 3$. Как видно, сечения для моделей с явным учетом ee -корреляций отличаются и по абсолютной величине, и по форме от сечения для хартри-фоковской функции. Это отличие возникает благодаря концептуальной разнице 1S_0 -состояний исследуемых функций. Действительно, в случае функций SPM и H возможны два механизма: либо выбивается электрон из $1s$ -состояния, а оставшийся электрон из $1s'$ -состояния «переходит» в возбужденное состояние иона He^+ , либо выбивается электрон из $1s'$ -состояния, а оставшийся электрон из $1s$ -состояния «переходит» в возбужденное состояние иона He^+ . Интерференция амплитуд, отвечающих этим двум механизмам, приводит к смещению бинарного пика в сторону меньших углов и размыванию его формы, причем в случае $n = 3$ можно говорить даже о двух бинарных пиках в сечении (см. рис. 3).

Здесь особо следует подчеркнуть, что расщепление бинарного пика на два пика различной интенсивности возникает в первую очередь благодаря

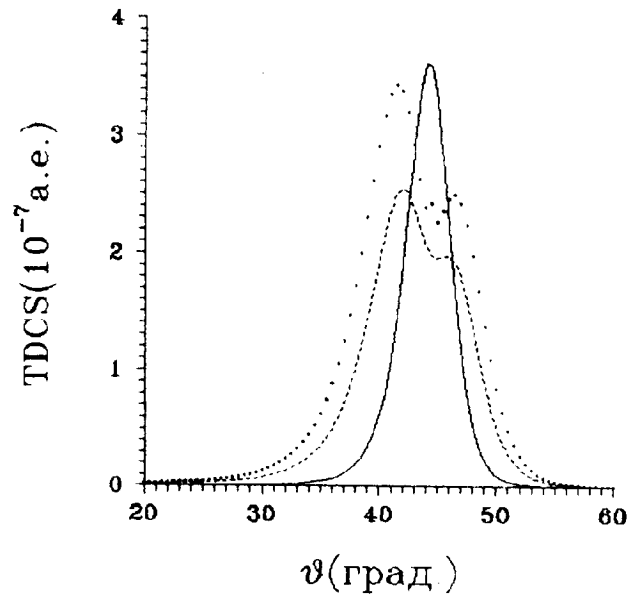


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, в случае $n = 3$

радиальным ee -корреляциям, хотя из вида (5) можно было бы заключить, что этот эффект вызван вкладом высших волн в TDCS, т.е. угловыми ee -корреляциями.

Таким образом, из приведенных результатов следует, что $(e, 2e)$ ЭИС-ионизация практически не дает нам какой-либо определенной информации о характере ee -корреляций в мишени, в то время как $(e, 2e)^*$ ЭИС-ионизация в этом отношении достаточно информативна. Прежде всего в ЭИС-экспериментах с возбуждением иона-остатка можно изучать радиальные ee -корреляции, поскольку их присутствие в мишени значительно влияет не только на абсолютную величину, но и, самое главное, на форму соответствующих дифференциальных сечений. Что касается угловых ee -корреляций, то их наличие в волновой

функции мишени слабо отражается на рассчитанных сечениях. Однако эти выводы во многом обусловлены спецификой атома He, и в случае их обобщения на более тяжелые двухэлектронные атомы, например Mg, необходимо учитывать, что только состояния иона He⁺ описываются аналитически и что все модели волновой функции гелия дают доминирующие вклады ¹S₀-состояния.

Литература

1. Смирнов Ю.Ф., Неудачин В.Г. // Письма в ЖЭТФ. 1966. 3. С. 298.
2. Amaldi U., Egidi A., Marconero R., Pizzella J. // Rev. Sci. Instr. 1969. 40. P. 1001.
3. Ehrhardt H., Shulz M., Tekaatt T., Willmann K. // Phys. Rev. Lett. 1969. 22. P. 89.
4. Guire J.H., Hidalgo M.B., Doolen G.D., Nuttal J. // Phys. Rev. 1973. A7. P. 973; Jones S., Madison D.H. // Ibid. 1997. A55. P. 444.

5. Avaldi L., Camilloni R., Popov Yu.V., Stefani G. // Phys. Rev. 1986. A33. P. 851; Понов Ю.В., Авалди Л., Камиллони Р., Стефани Дж. // ЖЭТФ. 1986. 90. С. 1191.
6. Levin V.G. // Phys. Lett. 1972. A39. P. 125.
7. McCarthy I.E., Ugbabe A., Weigold E., Teubner P.J.O. // Phys. Rev. Lett. 1974. 33. P. 459.
8. Dixon A.J., McCarthy I.E., Weigold E. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. 9. P. L195.
9. Cook J.P.D., McCarthy I.E., Steblovics A.T., Weigold E. // Ibid. 1984. 17. P. 2339.
10. Clementi E., Roetti C. // At. Data and Nucl. Data Tables. 1974. 14. P. 177.
11. Silverman J.N., Platas O., Matsen F.A. // J. Chem. Phys. 1960. 32. P. 1402.
12. Bonham R.A., Kohl D.A. // Ibid. 1966. 45. P. 2471.

Поступила в редакцию
24.12.97

УДК 539.186

РАСЧЕТЫ СЕЧЕНИЙ ПОТЕРИ ЭЛЕКТРОНОВ ИОНАМИ КИСЛОРОДА В ГАЗООБРАЗНЫХ СРЕДАХ

И. С. Дмитриев

(НИИЯФ)

Выполнены расчеты сечений $\sigma_{i,i+1}$ потери электрона ионами кислорода с зарядами $i = 1 \div 7$ в водороде, азоте и аргоне в области изменения энергии ионов от 0,1 до 200 МэВ/нуклон. Величины сечений потери электрона многоэлектронными ионами получены путем суммирования парциальных сечений σ_{nl} потери электронов из всех nl оболочек иона. Определен зарядовый состав в пучках ионов кислорода после прохождения заданного слоя вещества. Результаты расчетов в большинстве случаев удовлетворительно согласуются с известными экспериментальными данными.

Сведения о величинах сечений изменения заряда быстрыми ионами важны для решения ряда прикладных задач, в том числе в физике высоких энергий в связи с проектированием и модернизацией ускорителей тяжелых ионов [1], в космофизике в связи с исследованиями зарядового состава аномальной компоненты космических лучей, состоящей в значительной степени из ионов кислорода [2]. В настоящей работе выполнены расчеты сечений $\sigma_{i,i+1}$ потери электрона ионами кислорода с зарядами $i = 1 \div 7$ в водороде, азоте и аргоне в области изменения энергии ионов E от 0,1 до 200 МэВ/нукл. Ранее в работе [3] были проведены оценки сечений $\sigma_{i,i+1}$ потери электронов ионами кислорода в водороде при $E = 10$ МэВ/нукл.

1. Ионы с числом электронов $N = 1$ и 2

Расчеты сечений потери электронов из K -оболочки с использованием точных нерелятивистских волновых функций электрона в кулоновском поле проводились в борновском приближении в работах [4–7], а также в более поздних работах [8, 9] для случаев соударения водородоподобных и гелиеподобных ионов с атомами водорода, гелия и азота. В первом приближении эти расчеты приводят к универсальным кривым сечений потери электрона, зависящим только от

энергии связи K -электрона I_k , от ядерного заряда атома среды Z_t и от относительной скорости сталкивающихся частиц V/U , где U — средняя орбитальная скорость удаляемого электрона.

В области малых скоростей ионов $V/U \ll 1$ сечение вырывания K -электрона с ростом V быстро возрастает по закону $\sigma_{i,i+1} \sim Z_t^2 V^8 U^{-12}$ [4]. В области $V/U \approx 1$ сечения достигают максимальных значений и определяются главным образом значениями U , так что $\sigma_{i,i+1}$ пропорционально U^{-4} . При дальнейшем увеличении V/U сечения $\sigma_{i,i+1}$ начинают уменьшаться. В области $U \leq V \leq 2Z_t$, где $\sigma_{i,i+1}$ пропорционально V^{-1} , величины сечений близки к значениям, следующим из формулы Бора, полученной в результате классического рассмотрения рассеяния электронов в сильно экранированном поле [10]:

$$\sigma_{i,i+1} = \pi a_0^2 q_{nl} Z_t^{2/3} (ZV)^{-1}, \quad (1)$$

где q_{nl} — число эквивалентных электронов в nl -оболочке иона с зарядом ядра Z .

В предельном случае наиболее высоких скоростей: $V \geq 2Z_t$, согласно борновскому приближению, сечения $\sigma_{i,i+1}$ пропорциональны V^{-2} . Соответствующие асимптотические формулы для тяжелых ионов, дви-