

РАССЕЯНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА АТОМАХ

*В. И. Радченко**

*Уральский государственный технический университет
620002, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 30 марта 2000 г.

Развивается замкнутый вариант борновского приближения для расчета дифференциальных сечений рассеяния в ион-атомных столкновениях. Для матричного элемента, описывающего в формуле для дифференциального сечения атом мишени, найдено выражение через матричные элементы J_{ij} по одноэлектронным состояниям атома. Матричные элементы J_{ij} усреднены по взаимной ориентации переданного в соударении импульса и оси симметрии электронных орбиталей атома мишени при использовании одноэлектронных волновых функций Рутаана—Хартри—Фока. Представление матричных элементов J_{ij} в алгебраической форме обеспечивает возможность проведения расчетов для атомов с любым номером Z . На основе разработанной модели выполнены расчеты сечений σ_{Σ} и характерных углов θ_c рассеяния для процесса потери электронов ионами H^- с энергией $E = 0.1-100$ МэВ в мишенях из атомов с номером $Z = 2-54$. Показано, что $\sigma_{\Sigma} \propto E^{-1}$, $\theta_c \propto E^{-1/2}$ для всех Z , а при фиксированном значении E поведение зависимостей $\sigma_{\Sigma}(Z)$ и $\theta_c(Z)$ определяется порядком заполнения электронных оболочек атомов мишени (потенциалом ионизации). Результаты расчетов анализируются и сравниваются с экспериментальными данными и результатами других расчетов.

PACS: 03.65.Nk; 34.50.-s

1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из основных задач физики ион-атомных столкновений заключается в установлении зависимости полного сечения рассеяния налетающих частиц A на атомных частицах B мишени в том или ином процессе взаимодействия от атомного номера Z частиц мишени и кинетической энергии E падающих частиц: $\sigma = \sigma(Z, E)$. Под «атомными частицами» будем понимать атомы и их ионы как в основном, так и в возбужденном состоянии.

Обычно изучается энергетическое поведение сечений при $Z = \text{const}$ для ограниченного набора мишеней, что с экспериментальной точки зрения обусловлено трудностью создания газообразных, пучковых или плазменных мишеней строго контролируемой толщины для произвольных химических элементов, а с теоретической — резко возрастающей при увеличении Z сложностью описания атомарных частиц мишеней (и падающих частиц). Указанные причины играют еще большую роль в объяснении отсутствия достаточно полных экспериментальных

и теоретических зависимостей сечений от атомного номера мишени при фиксированном значении кинетической энергии падающих частиц:

$$\sigma = \sigma(Z, E = \text{const}). \quad (1)$$

Очевидно, что взаимно дополняющие друг друга результаты экспериментальных и теоретических исследований зависимостей (1) позволяют осуществлять целенаправленный поиск мишеней для решения разнообразных прикладных задач, а также вести проверку или определять области применимости теоретических моделей.

Широкий класс процессов ион-атомных столкновений двух частиц A и B можно описать формулой

$$A(\alpha_i) + B(\beta_i) \rightarrow A(\alpha_f) + B(\Sigma). \quad (2)$$

При этом α_i , β_i и α_f , β_f — начальные и конечные состояния частиц соответственно, символ Σ означает, что в расчет принимаются все возможные конечные состояния β_f мишени B , принадлежащие как дискретному (включая основное состояние), так и непрерывному спектру. Формула (2) охватывает процессы упругого рассеяния и возбуждения час-

*E-mail: rad@nich.ustu.ru

тиц А, а также процессы потери частицей А электронов. Процессы захвата электронов, перезарядки, электронного обмена в дальнейшем не рассматриваются.

Будем считать, что скорость падающих частиц А принадлежит диапазону скоростей, ограниченных с одной стороны условием применимости борновского приближения, а с другой — требованием применимости нерелятивистской теории. Если взаимодействие сталкивающихся частиц в процессе (2) описывается кулоновским потенциалом, то в замкнутом борновском приближении (closure approximation) дифференциальное сечение рассеяния частиц А на угол ν в телесный угол do в системе центра инерции при использовании правила сумм по конечным состояниям частиц мишени записывается в виде [1–3]

$$\frac{d\sigma_{\alpha_f}(\nu)}{do} = \frac{4a_0^2}{(\bar{q}a_0)^4} \left(\frac{M}{m}\right)^2 \times \frac{\bar{k}_f}{k_i} \left| F_{\alpha_f\alpha_i}^A(\bar{q}) \right|^2 M(\bar{\mathbf{q}}), \quad (3)$$

где a_0 — радиус первой борновской орбиты; m, M — масса электрона и приведенная масса сталкивающихся частиц; $F_{\alpha_f\alpha_i}^A$ — атомный формфактор системы А; $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f$ — волновые векторы частицы А в системе центра инерции до и после соударения; $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$; $\bar{\mathbf{q}}, \bar{k}_f$ — средние (по β_f) значения соответствующих векторов, способ определения которых указан в статье [2]. Величина $M(\mathbf{q})$ в (3) — матричный элемент, определяемый для начального состояния частицы В:

$$M(\mathbf{q}) = \langle \psi_{\beta_i} | \left| Z - \sum_{b=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) \right|^2 | \psi_{\beta_i} \rangle, \quad (4)$$

здесь ψ_{β_i} — волновая функция начального состояния частицы В; N — число электронов, принадлежащих частице В; \mathbf{r}_b — радиус-вектор b -го электрона. Проблема получения зависимостей (1) при использовании замкнутого борновского приближения как раз и связана с трудоемкостью вычисления матричных элементов (4) для частиц В, содержащих большое количество электронов.

Замечательной особенностью соотношения (3) является то, что его можно разбить на три сомножителя: первый из них содержит фундаментальные постоянные m, a_0 , параметры задачи M, k_i и переменные величины $\bar{\mathbf{q}}, \bar{k}_f$; второй сомножитель — формфактор F^A (и/или функция некогерентного рассеяния [1, 2]) — описывает только частицу А; третий сомножитель — матричный элемент $M(\bar{\mathbf{q}})$ — содержит

величины, характеризующие только частицу В. Таким образом, получение выражения, позволяющего вычислить матричный элемент (4), в принципе решает задачу определения зависимостей $\sigma(Z, E)$ для любых процессов вида (2).

В данной работе получено алгебраическое выражение для матричного элемента (4), позволяющее вести расчеты сечений взаимодействия частиц в процессах типа (2) для атомарных частиц мишени с произвольным значением атомного номера Z . Для процесса $(\bar{1}0) + (\bar{1}1)$ потери электронов отрицательными ионами водорода H^- с энергией $E = 10$ МэВ выполнены расчеты сечений (1) для диапазона $Z = 2-54$.

2. ТЕОРИЯ

Как мы видели, проблема вычисления сечений рассеяния в замкнутом варианте борновского приближения (3) упирается в нахождение матричного элемента $M(\mathbf{q})$. Пусть $M(\mathbf{q})$ определяется для частицы В, которая в общем случае может быть ионом с зарядом ядра Z и числом электронов N . Запишем операторную часть матричного элемента $M(\mathbf{q})$ в развернутом виде:

$$\left| Z - \sum_{b=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) \right|^2 = Z^2 - Z \sum_{b=1}^N [\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) + \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b)] + \sum_{b,c=1}^N \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)). \quad (5)$$

Будем считать, что волновая функция частицы В представляет собой детерминант Слэтера одноэлектронных волновых функций, а сама частица в момент столкновения может находиться в произвольном состоянии. Одноэлектронные состояния будем обозначать индексом i , понимая под ним весь набор квантовых чисел, необходимых для полного описания состояния: $|i\rangle \equiv |nlm\sigma\rangle$ — где n, l — главное и орбитальное квантовые числа; m, σ — проекции орбитального и спинового моментов вращения электрона. Использование буквы i для обозначения как мнимой единицы, так и одноэлектронного состояния не приведет к недоразумениям, поскольку состояние будет обозначаться буквой i лишь в виде индекса.

Подставим (5) в выражение для матричного элемента $M(\mathbf{q})$:

$$M(\mathbf{q}) = Z^2 - Z \sum_{b=1}^N (\langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle + \langle \psi | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle) + N + \sum_{\substack{b,c=1 \\ (b \neq c)}}^N \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) | \psi \rangle. \quad (6)$$

Поскольку $|\psi|^2$ является симметричной функцией относительно инверсии вектора \mathbf{r}_b , справедливо равенство

$$\langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle = \langle \psi | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle, \quad (7)$$

с помощью которого для матричного элемента (6) получается соотношение

$$M(\mathbf{q}) = Z^2 + N - 2Z \sum_{b=1}^N \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle + 2 \sum_{b=1}^{N-1} \sum_{c=b+1}^N \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) | \psi \rangle. \quad (8)$$

Рассмотрим матричный элемент в третьем слагаемом соотношения (8) под знаком суммы, раскрыв ψ как детерминант Слэтера и помня, что нормировочный множитель функции ψ равен $(N!)^{-1/2}$:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle &= \frac{1}{N!} \times \\ &\int \left[\sum_{s=1}^{N!} P_s^{(t)} (-1)^s \psi_{t_1}^*(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{t_i}^*(\mathbf{r}_b) \dots \psi_{t_N}^*(\mathbf{r}_N) \right] \times \\ &\times \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) \times \\ &\times \left[\sum_{u=1}^{N!} P_u^{(\nu)} (-1)^u \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \dots \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_b) \dots \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \right] d\tau, \end{aligned} \quad (9)$$

где интегрирование ведется по конфигурационному пространству N электронов частицы В; $P_s^{(t)}$ — оператор попарных перестановок элементов упорядоченного множества t_1, t_2, \dots, t_N , составленного из элементов $1, 2, \dots, N$; символ t в обозначении оператора перестановок $P_s^{(t)}$ указывает на последующие функции с элементами t_k , на которые распространяется действие оператора; аналогично для оператора $P_u^{(\nu)}$. В формуле (9) операторы перестановок действуют на индексы, нумерующие одноэлектронные состояния частицы В.

Ввиду ортогональности одноэлектронных волновых функций в выражении (9) отличными от нуля останутся лишь следующие слагаемые:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle &= \frac{1}{N!} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) \times \\ &\times \sum_{s=1}^{N!} P_s^{(t)} |\psi_{t_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \dots |\psi_{t_i}(\mathbf{r}_b)|^2 \dots |\psi_{t_N}(\mathbf{r}_N)|^2 d\tau. \end{aligned} \quad (10)$$

Если зафиксировать b -ый электрон с радиусом-вектором \mathbf{r}_b в i -ом состоянии (волновая функция с индексом t_i), то оператор $P_s^{(t)}$ будет осуществлять перестановку остальных $N - 1$ индексов состояний у одноэлектронных волновых функций, каждая из которых зависит от одного из $N - 1$ оставшихся радиусов-векторов, отличных от \mathbf{r}_b . Число размещений $N - 1$ электронов по $N - 1$ состояниям без повторов равно $(N - 1)!$, поэтому

$$\begin{aligned} \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{i=1}^N \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) |\psi_{t_i}(\mathbf{r}_b)|^2 \times \\ &\times \sum_{s=1}^{(N-1)!} P_s^{(t)} |\psi_{t_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \dots |\psi_{t_N}(\mathbf{r}_N)|^2 d\tau. \end{aligned} \quad (11)$$

Интеграл от произведения $N - 1$ сомножителей вида $|\psi_{t_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \dots |\psi_{t_N}(\mathbf{r}_N)|^2$ равен единице вследствие ортонормированности одноэлектронных волновых функций. Число слагаемых, состоящих из произведений такого типа, очевидно, равно $(N - 1)!$, так что

$$\langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N J_i(\mathbf{q}), \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} J_i(\mathbf{q}) &\equiv J_{ii} = \langle \psi_i | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_i \rangle = \\ &= \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) |\psi_i(\mathbf{r})|^2 dV. \end{aligned} \quad (13)$$

Легко видеть, что $J_i(-\mathbf{q}) = J_i^*(\mathbf{q}) = J_i(\mathbf{q})$, а значит J_i — действительная функция. Заметим, что правая часть равенства (13) от индекса b , как и должно быть, не зависит, поэтому

$$\sum_{b=1}^N \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b) | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N J_i(\mathbf{q}). \quad (14)$$

Рассмотрим теперь матричный элемент в четвертом слагаемом формулы (8) точно так же, как это

делалось при получении выражений (9)–(11). Но, поскольку экспоненциальный оператор этого матричного элемента содержит радиусы-векторы b -го и c -го электронов, данный матричный элемент будет содержать две группы слагаемых (остальные равны нулю вследствие ортогональности одноэлектронных волновых функций):

$$\begin{aligned} \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) | \psi \rangle &= \frac{1}{N!} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) \times \\ &\times \sum_{s=1}^{N!} P_s^{(t)} |\psi_{t_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \dots |\psi_{t_i}(\mathbf{r}_c)|^2 \dots |\psi_{t_j}(\mathbf{r}_b)|^2 \dots \\ &\dots |\psi_{t_N}(\mathbf{r}_N)|^2 d\tau + \frac{1}{N!} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) \times \\ &\times \sum_{s=1}^{N!} P_s^{(t)} |\psi_{t_1}(\mathbf{r}_1)|^2 \dots \psi_{t_i}^*(\mathbf{r}_c) \psi_{t_j}^*(\mathbf{r}_b) \dots \\ &\dots \psi_{t_i}(\mathbf{r}_b) \psi_{t_j}(\mathbf{r}_c) \dots |\psi_{t_N}(\mathbf{r}_N)|^2 (-1)^{2s+1} d\tau. \end{aligned} \quad (15)$$

Появление множителя $(-1)^{2s+1} \equiv -1$ во втором слагаемом выражения (15) обусловлено тем, что слагаемые детерминанта Слэтера входят в (15) в виде суммы попарных произведений, отличающихся друг от друга лишь одной перестановкой (и знаком комплексного сопряжения).

Зафиксируем b -ый и c -ый электроны в i -ом или j -ом состояниях и осуществим перестановки индексов состояний у оставшихся одноэлектронных волновых функций (при неизменном порядке следования радиусов-векторов электронов). Индексы выбираются из числа индексов, соответствующих оставшимся $N - 2$ состояниям (кроме i -го и j -го). Другими словами, осуществим все возможные перестановки остальных $N - 2$ электронов по оставшимся $N - 2$ состояниям. Число размещений без повторения равно $(N - 2)!$. В итоге найдем

$$\begin{aligned} \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) | \psi \rangle &= \frac{1}{N(N - 1)} \times \\ &\times \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N [J_i(\mathbf{q}) J_j(\mathbf{q}) - J_{ij}(\mathbf{q}) J_{ji}(-\mathbf{q})], \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} J_{ij}(\mathbf{q}) &= \langle \psi_i | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | \psi_j \rangle = \\ &= \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) dV, \quad (17) \\ J_{ji}(-\mathbf{q}) &= J_{ij}^*(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Волновые функции $\psi_i(\mathbf{r})$, $\psi_j(\mathbf{r})$ из (17) либо симметричны, либо антисимметричны относительно

инверсии вектора \mathbf{r} . Если состояния i, j обладают симметрией одного и того же типа относительно инверсии вектора \mathbf{r} , то из (17) следует, что $J_{ij}(\mathbf{q}) = J_{ij}(-\mathbf{q})$. Если же состояния i и j имеют противоположную симметрию, то $J_{ij}(\mathbf{q}) = -J_{ij}(-\mathbf{q})$. Поэтому в любом случае, используя (17), будем иметь

$$\begin{aligned} |J_{ij}(\mathbf{q})|^2 &= [\pm J_{ij}^*(-\mathbf{q})] [\pm J_{ij}(-\mathbf{q})] = \\ &= |J_{ij}(-\mathbf{q})|^2 = |J_{ji}(\mathbf{q})|^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Правая часть (16) опять-таки от индексов b и c не зависит, поэтому с учетом (13) и (17) найдем, что

$$\begin{aligned} 2 \sum_{b=1}^{N-1} \sum_{c=b+1}^N \langle \psi | \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b)) | \psi \rangle &= \\ &= \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N J_i J_j - \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N |J_{ij}|^2. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь мы воспользовались равенством

$$\sum_{b=1}^{N-1} \sum_{c=b+1}^N 1 = \frac{N(N - 1)}{2}.$$

Подставим найденные соотношения (14), (19) в (8):

$$\begin{aligned} M(\mathbf{q}) &= Z^2 + N - 2Z \sum_{i=1}^N J_i + \\ &+ \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N (J_i J_j - |J_{ij}|^2). \end{aligned} \quad (20)$$

При выводе выражения (20) никаких упрощающих предположений или допущений не делалось. Однако очевидно, что входящие в него функции J_{ij} проще матричных элементов, суммируемых в формуле (8).

Выражение (20) можно упростить, если воспользоваться соотношением

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N J_i J_j &= 2 \sum_{i=1}^{N-1} J_i \sum_{j=i+1}^N J_j = \\ &= \left(\sum_{i=1}^N J_i \right)^2 - \sum_{i=1}^N J_i^2, \end{aligned} \quad (21)$$

которое легко получить, замечая, что, с одной стороны,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} J_i \sum_{j=i+1}^N J_j &= \sum_{i=1}^{N-1} J_i \left(\sum_{j=i}^N J_j - J_i \right) = \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} J_i \sum_{j=1}^N J_j - \sum_{i=1}^{N-1} J_i^2 = \\ &= \sum_{i=1}^N J_i \sum_{j=i}^N J_j - \sum_{i=1}^N J_i^2, \end{aligned} \quad (22)$$

а с другой,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N-1} J_i \sum_{j=i+1}^N J_j &= \sum_{i=2}^N J_i \sum_{j=1}^{i-1} J_j = \\ &= \sum_{i=2}^N J_i \left(\sum_{j=1}^i J_j - J_i \right) = \\ &= \sum_{i=1}^N J_i \sum_{j=1}^i J_j - \sum_{i=1}^N J_i^2. \end{aligned} \quad (23)$$

Складывая (22) и (23), получаем формулу (21), подставляя которую в (20), найдем

$$\begin{aligned} M(\mathbf{q}) &= Z^2 + N - 2ZD + D^2 - G - \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N |J_{ij}|^2, \quad (24) \\ D &= \sum_{i=1}^N J_i, \quad G = \sum_{i=1}^N J_i^2. \end{aligned} \quad (25)$$

Перейдем теперь к нахождению матричных элементов J_{ij} . Волновые функции из формулы (17) имеют вид [4, 5] $\psi_i(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)\chi(\sigma)$, где $R_{nl}(r)$ — радиальная волновая функция; $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ — сферическая функция; $\Phi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2}e^{im\varphi}$; $\chi(\sigma)$ — спиновая функция. Присутствие спиновых функций в выражении для J_{ij} приведет к появлению символа Кронекера $\delta_{\sigma\sigma'}$.

Сферические координаты r, θ, φ электронов атома мишени задаются с помощью правой тройки векторов $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$, связанной с ядром атома. Ось \mathbf{z} традиционно выбирается полярной и является осью симметрии одноэлектронных орбиталей атома мишени. В этой же сферической системе координат направление волнового вектора \mathbf{q} зададим полярным углом α и азимутальным углом β . Тогда скалярное произведение в показателе экспоненты в формуле (17) будет равно

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = qr [\cos \theta \cos \alpha + \sin \theta \sin \alpha \cos(\varphi - \beta)]. \quad (26)$$

Взаимная ориентация в пространстве векторов \mathbf{q} и \mathbf{z} может быть произвольной, поэтому следует провести усреднение дифференциальных сечений рассеяния (3), а значит, и матричных элементов $M(\mathbf{q})$ по направлениям \mathbf{q} относительно оси \mathbf{z} . Вероятность обнаружить вектор \mathbf{q} внутри телесного угла $d\Omega_q = \sin \alpha d\alpha d\beta$ равна $d\Omega_q/4\pi$. Задача усреднения $M(\mathbf{q})$ нуждается в упрощении. С этой целью используем приближенный статистический метод, согласно которому усредненное значение $M(q)$ принимается равным величине, полученной в результате усреднения матричных элементов J_{ij} и их подстановки в формулу (24) для вычисления $M(q)$.

Вычисление и усреднение матричных элементов J_{ij} может быть выполнено аналитически. Интегрирование при этом рационально проводить по переменным в следующем порядке: $\beta, \varphi, \alpha, \theta, r$. Сохраним для усредненного матричного элемента J_{ij} прежнее обозначение. Опуская громоздкие, но по сути простые выкладки, связанные с использованием табличных интегралов, приведем для J_{ij} выражение, найденное после интегрирования по угловым переменным:

$$J_{ij} = \frac{1}{q} \int_0^\infty R_{nl}R_{n'l'} \sin(qr)r dr. \quad (27)$$

Заметим, что в ходе интегрирования появляются символы Кронекера $\delta_{mm'}$, $\delta_{ll'}$ по магнитному и орбитальному квантовому числам, а сами матричные элементы J_{ij} от величины m не зависят, что использовано при записи формулы (27). Одноэлектронные волновые функции $R_{nl}, R_{n'l'}$, входящие в состав детерминанта Слэтера и выражение (27), могут быть записаны в виде [5]

$$\begin{aligned} R_{nl} &= \sum_c a_c r^{n_c-1} \exp(-\zeta_c r), \\ R_{n'l'} &= \sum_d a'_d r^{n'_d-1} \exp(-\zeta'_d r). \end{aligned} \quad (28)$$

Подставляя функции $R_{nl}, R_{n'l'}$ в форму (28) в интеграл (27), выполняя элементарное интегрирование и используя формулу бинома Ньютона, получим окончательное соотношение для усредненного матричного элемента J_{ij} :

$$\begin{aligned} J_{ij} &= \sum_{c,d} \frac{a_c a'_d (n_{cd} - 1)!}{\zeta_{cd} [\zeta_{cd}(1 + x_{cd})]^{n_{cd}}} \times \\ &\times \sum_{s=0}^S C_{n_{cd}}^{2s+1} (-x_{cd})^s, \end{aligned} \quad (29)$$

где $n_{cd} = n_c + n'_d$, $\zeta_{cd} = \zeta_c + \zeta'_d$, $x_{cd} = q^2 a_0^2 / \zeta_{cd}^2$, $C_{n_{cd}}^{2s+1}$ — биномиальные коэффициенты, а верхний предел суммирования

$$S = \begin{cases} \frac{n_{cd}-1}{2}, & \text{если } n_{cd} \text{ — нечетное число,} \\ \frac{n_{cd}}{2}-1, & \text{если } n_{cd} \text{ — четное число.} \end{cases} \quad (30)$$

Радиус r в формулах (28) измеряется обычно в атомных единицах, чем и вызвано появление множителя a_0 в выражении для x_{cd} из (29).

3. РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Обратимся к вычислению сумм по i и j в формуле (24) для $M(\mathbf{q})$ при использовании усредненных матричных элементов J_{ij} . При этом удобно перейти от суммирования по номерам состояний i, j к суммированию по соответствующим квантовым числам n, l, m, σ и ввести функцию занятости состояния $|nlm\sigma\rangle$:

$$\mu_{nlm\sigma} = \begin{cases} 1, & \text{если состояние занято,} \\ 0, & \text{если состояние не занято.} \end{cases} \quad (31)$$

Пусть n_e — главное квантовое число внешней оболочки частицы В, т. е. максимальное значение n из набора занятых состояний. Тогда для суммы D из (24), (25) получим выражение (далее $J_i = J_{nl}$)

$$D = \sum_{n=1}^{n_e} \sum_{l=0}^{n-1} J_{nl} \sum_{m=-l}^l \sum_{\sigma=-1/2}^{1/2} \mu_{nlm\sigma}, \quad (32)$$

в котором учтено, что матричные элементы J_{ij} не зависят от квантового числа m и значения спина σ , поэтому здесь и далее числа m и σ среди индексов J опускаем. Для суммы G из (24), (25) найдем аналогичное соотношение.

Последнюю сумму в равенстве (24), пользуясь свойством (18) и присутствием символа Кронекера δ_{ij} в формуле для усредненных матричных элементов $J_{ij} = J_{nl,n'l}$ представим в виде

$$2V = \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^N |J_{ij}|^2 = 2 \sum_{nlm\sigma} \sum_{\substack{n'l'm'\sigma \\ (n' > n)}} |J_{nl,n'l}|^2, \quad (33)$$

где

$$V = \sum_{n=1}^{n_e-1} \sum_{n'=n+1}^{n_e} \sum_{l=0}^{n-1} J_{nl,n'l}^2 \times \sum_{m=-l}^l \sum_{\sigma=-1/2}^{1/2} \mu_{nlm\sigma} \mu_{n'l'm'\sigma}. \quad (34)$$

Знак модуля матричного элемента J в формуле (34) опущен, поскольку матричные элементы (29) действительны.

В настоящей работе на основе изложенной выше теории вычислены полные сечения $\sigma_{\Sigma} = \sigma_{\bar{1}0} + \sigma_{\bar{1}1}$ и характерные углы θ_c рассеяния ионов H^- с энергией $E = 0.1-100$ МэВ на атомах с номерами $Z = 2-54$ для процесса $(\bar{1}0) + (\bar{1}1)$ потери одного и двух электронов (далее сечения σ_{Σ} и углы θ_c , вычисленные с помощью замкнутого борновского приближения, не будут снабжаться какими-либо отличительными индексами). Под характерным углом θ_c рассеяния частиц понимается такое значение угла θ , при котором достигается максимум функции $\sin \theta d\sigma(\theta)/d\Omega$, где θ — угол рассеяния в лабораторной системе координат. Для расчета σ_{Σ} и θ_c использовалась формула (3), просуммированная по всем возможным конечным состояниям $\alpha_f \neq \alpha_i$ налетающей частицы и записанная в лабораторной системе координат. После суммирования по α_f квадрат модуля формфактора налетающей частицы A в формуле (3) заменяется функцией некогерентного рассеяния [1, 2], которая определяется волновой функцией основного состояния частицы А. В данной работе, как и в статье [3], основное состояние ионов H^- описывалось волновой функцией Чандрасекара.

Матричные элементы (4) из формулы (3) определялись согласно равенству (24), которое, напомним, является точным и в котором для нахождения соответствующих слагаемых использовались выражения (32)–(34). И наконец, вычисление функций J_{ij} из формул (32), (34) и из аналогичной формулы для суммы G (см. (24)) осуществлялось с помощью соотношения (29). Отметим, что при $q \rightarrow 0$ матричные элементы $J_{ii} \rightarrow 1$, а $J_{ij} \rightarrow 0$; следовательно, для функций D, G и V в случае атомов мишени с номером Z в том же пределе $q \rightarrow 0$ получим $D \rightarrow Z$, $G \rightarrow Z$, $V \rightarrow 0$ (см. формулы (25), (33)). Проверка указанных пределов служит критерием правильности работы алгоритма расчета и введенных параметров волновых функций.

Кроме того, в данной работе для тех же диапазонов энергий E и номеров Z были выполнены аналогичные расчеты сечений σ_{Σ}^d и углов θ_c^d в прибли-

жении дипольного момента для описания атома мишени (указанные сечения и углы снабжены дополнительным индексом d). В приближении дипольного момента предполагается, что в течение времени ион-атомного столкновения атом можно рассматривать как электрический диполь, обладающий некоторым эффективным дипольным моментом d . Теория приближения дипольного момента подробно изложена в статьях [6, 7], поэтому здесь будут приведены только результаты соответствующих расчетов.

В той и другой моделях расчета одноэлектронные состояния атома мишени описывались волновыми функциями Рутаана—Хартри—Фока [5].

В таблице и на рис. 1, 2 представлены сечения и характерные углы рассеяния ионов H^- с энергией 10 МэВ как зависимости от Z , полученные в рамках обоих теоретических подходов. Значение $E = 10$ МэВ выбрано потому, что, во-первых, необходимо наиболее полно удовлетворить условию $v > 2Zv_0$ применимости борновского приближения для атомов мишени с большим номером Z (здесь v — скорость иона, $v_0 = 2.19 \cdot 10^8$ см/с, т. е. E следует увеличивать; см. [11, 12]), во-вторых, поправочные коэффициенты для расчета сечений в приближении дипольного момента играют при данном значении энергии несущественную роль [7], в-третьих, при этом значении энергии имеются экспериментальные данные для газовых мишеней.

Обе теоретические модели показывают, что при фиксированном значении E сечение $\sigma_{\Sigma}(Z)$ испытывает скачкообразный рост при переходе от мишени из атомов инертных газов к мишени из атомов соседних с ними элементов первой и второй групп периодической системы. При каждом таком переходе сечение увеличивается в первом приближении на одну и ту же величину, поэтому относительный рост сечения наиболее ярко проявляется при переходе от He к Li. Этот вывод подтверждается результатами экспериментальных исследований из работы [13] для $E = 30\text{--}200$ кэВ.

Сечения, найденные в приближении дипольного момента (рис. 1), а также в приближении свободных столкновений [14–16], в целом лучше согласуются с имеющимися экспериментальными данными для мишеней из инертных газов, нежели сечения, вычисленные по изложенной в данной статье теории. Однако замкнутое борновское приближение является строго последовательной теорией, приближенный характер которой обусловлен лишь естественными ограничениями скорости налетающей частицы и использованием правила сумм по конечным состояниям сталкивающихся частиц. Окончательное постро-

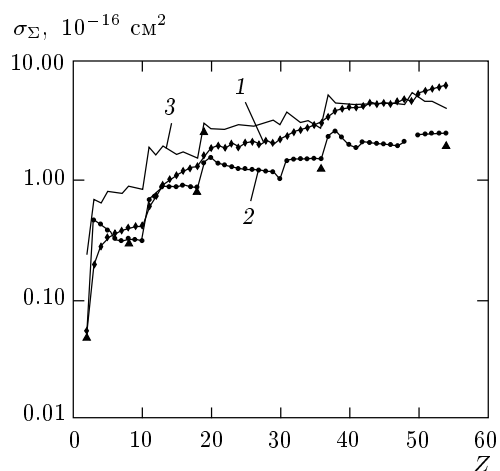


Рис. 1. Сечение потери электронов ионами H^- с энергией $E = 10$ МэВ при взаимодействии с атомами, имеющими номер $Z = 2\text{--}54$: 1 — расчет по теории, развитой в данной работе; 2 — расчет в приближении дипольного момента [6, 7]; 3 — расчет по формуле (54); \blacktriangle — экспериментальные данные для $E = 10.4$ МэВ [8] (результат для калиевой мишени взят из работы [6] для $E = 5.14$ МэВ и пересчитан на энергию $E = 10$ МэВ в предположении, что сечение для мишеней из K и соседнего Ag имеют одну и ту же энергетическую зависимость)

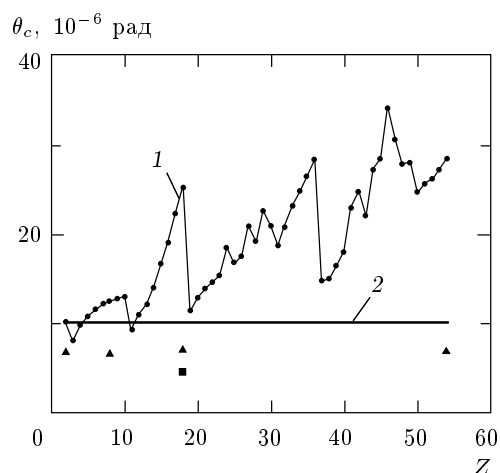


Рис. 2. Зависимость характерного угла рассеяния частиц водорода для процесса потери электронов ионами H^- с энергией $E = 10$ МэВ от атомного номера Z мишени: 1 — результаты расчета по теории, изложенной в настоящей работе; 2 — расчет в приближении дипольного момента [6, 7]; \blacksquare — расчет в трехчастичном борновском приближении для угла $\theta_{1/2}$ [9]; \blacktriangle — экспериментальные данные для $\theta_{1/2}$ из работы [10]

Характерные углы и сечения рассеяния для процесса $(\bar{1}0) + (\bar{1}1)$ потери электронов ионами H^- с энергией 10 МэВ при взаимодействии с атомными мишенями, имеющими номера $Z = 2-54$ (величины θ_c и σ_Σ вычислены по теории, изложенной в данной работе, а сечение σ_Σ^d рассчитано в приближении дипольного момента [6, 7])

Z	Атом мишени	θ_c , 10^{-6} рад	σ_Σ , 10^{-16} см ²	σ_Σ^d , 10^{-16} см ²
2	He	10.2	0.0546	0.0500
3	Li	8.12	0.199	0.464
4	Be	9.81	0.279	0.426
5	B	10.8	0.334	0.384
6	C	11.6	0.363	0.328
7	N	12.2	0.380	0.313
8	O	12.5	0.400	0.322
9	F	12.8	0.411	0.320
10	Ne	13.0	0.418	0.312
11	Na	9.28	0.604	0.684
12	Mg	11.0	0.746	0.757
13	Al	12.1	0.902	0.948
14	Si	14.0	1.01	0.887
15	P	16.6	1.10	0.888
16	S	19.0	1.19	0.916
17	Cl	22.2	1.25	0.884
18	Ar	25.1	1.31	0.867
19	K	11.4	1.60	1.41
20	Ca	12.8	1.85	1.55
21	Sc	13.8	1.92	1.39
22	Ti	14.5	1.87	1.34
23	V	15.3	2.01	1.30
24	Cr	18.4	1.89	1.26
25	Mn	16.7	2.05	1.25
26	Fe	17.4	2.09	1.23
27	Co	20.8	1.99	1.21
28	Ni	19.1	2.13	1.19
29	Cu	22.5	2.03	1.18
30	Zn	20.8	2.16	1.03
31	Ga	18.6	2.34	1.45
32	Ge	20.7	2.49	1.50
33	As	23.0	2.62	1.50
34	Se	24.6	2.75	1.52
35	Br	26.3	2.88	1.52
36	Kr	28.1	2.99	1.50
37	Rb	14.7	3.37	2.30
38	Sr	14.9	3.72	2.56
39	Y	16.4	3.91	2.26

Продолжение таблицы

40	Zr	17.9	4.04	1.97
41	Nb	22.8	4.01	1.86
42	Mo	24.6	4.10	2.05
43	Tc	21.9	4.36	2.03
44	Ru	27.0	4.29	2.00
45	Rh	28.2	4.37	1.97
46	Pd	33.9	4.28	1.95
47	Ag	30.4	4.50	1.91
48	Cd	27.6	4.72	2.07
49	In	27.8	4.53	—
50	Sn	24.5	5.24	2.35
51	Sb	25.4	5.46	2.38
52	Te	26.0	5.69	2.42
53	I	27.0	5.90	2.43
54	Xe	28.2	6.09	2.43

ение замкнутого борновского приближения, связанное по существу с получением точного алгебраического выражения для усредненного матричного элемента $M(q)$, позволит дать ответ на вопрос о точности и области применимости этого приближения. Для атомов He, Li и Be, находящихся в основном состоянии и содержащих электроны только на сферически-симметричных s -орбиталях, матричные элементы (4) не зависят от взаимной ориентации векторов \mathbf{q} и \mathbf{z} , поэтому для этих атомов усредненные матричные элементы $M(\mathbf{q})$ и соответствующие сечения рассеяния являются в рамках замкнутого борновского приближения точными.

Для описания зависимости $\sigma_{\bar{1}0}(Z, E)$ в работе [17] предложена формула:

$$\sigma_{\bar{1}0} = N_i \pi a_0^2 \frac{Z^\alpha(Z)}{v^\gamma u_i u(Z)}, \quad (35)$$

в которой N_i — число эквивалентных электронов у налетающего иона; $\alpha(Z)$, $\gamma \equiv 1$ — параметры; $u_i = \sqrt{I_i/I_0}$ — средняя орбитальная скорость удаляемого электрона для налетающего иона; $u(Z) = \sqrt{I(Z)/I_0}$ — средняя орбитальная скорость внешнего электрона для атома среды с номером Z ; $I_0 = 13.6$ эВ; I_i — энергия связи электрона в оболочке иона; $I(Z)$ — потенциал ионизации атома среды; в формуле (35) все скорости берутся в атомных единицах v_0 . На рис. 1 приведены результаты расчета по формуле (35) для $N_i = 1$, $I_i = 0.754$ эВ и $\alpha(Z) = 0.75$ (см. [17]). Сечения (35) при $E = 10$ МэВ

в 2–4 раза больше экспериментальных значений для мишеней из инертных газов. Общее сравнение зависимости (35) с результатами измерений (см. ниже) приводит к выводу о том, что показатель γ является функцией Z и E .

Как видно на рис. 2, поведение функции $\theta_c(Z, E = \text{const})$ с ростом Z определяется последовательностью заполнения электронных оболочек атома мишени. Согласно же физической модели, заложенной в приближении дипольного момента, угол θ_c^d не зависит от типа мишени. Кроме θ_c с помощью замкнутого борновского приближения были вычислены углы $\theta_{1/2}$, соответствующие полуширине дифференциального сечения рассеяния частиц на половине его высоты. Расчеты показали, что теоретическая зависимость углов $\theta_{1/2}$ от энергии ионов H^- и атомного номера Z мишени не согласуется с экспериментальными фактами. На возможность такой ситуации было указано авторами статьи [2]. Дело в том, что замкнутое борновское приближение основано на использовании правила сумм по конечным состояниям сталкивающихся частиц, а это приводит к автоматическому включению в рассмотрение конечных состояний, которые не удовлетворяют законам сохранения энергии и импульса. Ошибка, возникающая при вычислении дифференциальных сечений рассеяния из-за использования правила сумм, будет тем больше, чем меньше величина среднего импульса, переданного в столкновении, т. е. когда $\theta \rightarrow 0$. Значение же

$d\sigma(\theta = 0)/d\Omega$ используется для определения угла $\theta_{1/2}$, чем и обуславливается более высокая методическая ошибка вычисления $\theta_{1/2}$ по сравнению с θ_c . По указанным причинам результаты расчетов $\theta_{1/2}$ далее не приводятся.

Результаты наших расчетов характерных углов рассеяния сравниваются на рис. 2 с экспериментальными значениями из работы [10] для углов $\theta_{1/2}$, соответствующих полуширине на половине высоты пространственно-углового распределения атомов водорода, полученных в процессе ($\bar{1}0$) нейтрализации ионов H^- в CO_2 -мишени. Следует отметить, что в работе [10] измерения $\theta_{1/2}$ были сделаны для пучка частиц ленточного вида. Экспериментальные значения $\theta_{1/2}$ не зависят в пределах погрешности измерений от номера Z атома мишени ([10], см. также [9, 18]) и лежат существенно ниже теоретических значений θ_c . Последнее обстоятельство объясняется в первую очередь тем, что замкнутое борновское приближение и приближение дипольного момента являются двухчастичными, т. е. угол θ задает в этих моделях направление движения центра масс частиц, образовавшихся в процессе потери одного или двух электронов ионом H^- . В эксперименте же измеряется распределение именно атомов H^0 для процесса ($\bar{1}0$). Анализ процесса ($\bar{1}0$) в трехчастичном борновском приближении [9] показывает, что форма дифференциального сечения рассеяния атомов водорода практически не зависит от выбора мишени, а расчетное значение угла $\theta_{1/2} \propto E^{-1/2}$ и примерно в полтора раза ниже экспериментальных данных для ленточного пучка частиц (рис. 2).

Энергетические зависимости сечений σ_Σ и характерных углов θ_c , вычисленных для мишеней из He и Xe, представлены на рис. 3 и 4. Для атомов мишени с произвольным значением Z сечения ведут себя по закону близкому к $\sigma_\Sigma \propto E^{-1}$, а углы — по закону $\theta_c \propto E^{-1/2}$ (за исключением гелиевой мишени при $E < 1$ МэВ; см. рис. 4). Закономерность $\theta_c \propto E^{-1/2}$ совпадает с экспериментальной зависимостью $\theta_{1/2} \propto E^{-1/2}$ [10, 18]. Сечения σ_Σ и углы θ_c , найденные в данной работе для He-мишени, практически совпадают с аналогичными расчетами в [3]. В случае легких атомов мишени (He, Li) зависимость $\sigma_\Sigma(E)$ хорошо согласуется с экспериментальными данными во всем диапазоне применимости замкнутого борновского приближения по E . С увеличением Z приближенная экспериментальная зависимость $\sigma_\Sigma^{exp} \propto E^{-n(Z)}$ становится все более пологой, т. е. показатель степени $n(Z)$ систематически уменьшается (от $n \approx 1$ для He до $n \approx 0.45$ для Xe). Расхождение между теоретическими и эксперимен-

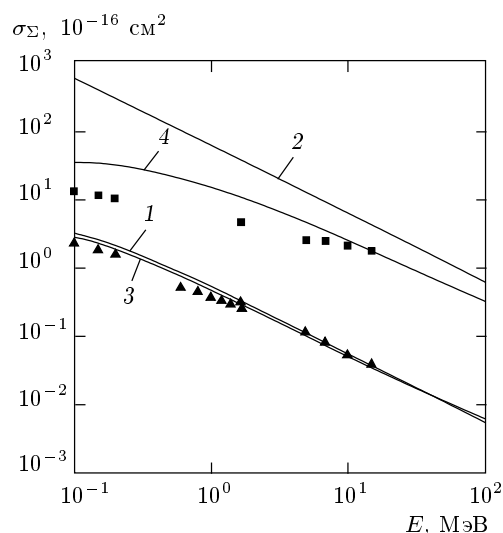


Рис. 3. Зависимости сечений потери электронов ионами H^- от энергии E для мишеней из атомов He и Xe: 1 и 2 — результаты расчета по теории из данной работы для атомов He и Xe соответственно; 3 и 4 — расчеты в приближении дипольного момента для атомов He и Xe соответственно; \blacktriangle — экспериментальные данные для He из работ [8, 13, 19]; \blacksquare — экспериментальные данные для Xe из работ [8, 13]

тальными значениями сечений возрастает с увеличением Z и уменьшением E . Это объясняется тем, что борновское приближение не учитывает движения электронов, находящихся в составе сталкивающихся частиц, и динамики ион-атомных столкновений.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В разработанном варианте замкнутого борновского приближения матричный элемент (4), ответственный за описание атома мишени, в результате тождественных преобразований сводится к выражению, содержащему матричные элементы J_{ij} по одноэлектронным состояниям атома (формулы (20), (24)), а усреднение матричного элемента $M(\mathbf{q})$ по направлениям вектора \mathbf{q} относительно оси \mathbf{z} атома выполняется приближенно, а именно — путем подстановки в формулу (24) усредненных (по взаимной ориентации векторов \mathbf{q} и \mathbf{z}) матричных элементов J_i и J_{ij} (формула (29)). При усреднении матричных элементов J_{ij} использовались одноэлектронные волновые функции Рутаана—Хартри—Фока. В итоге соотношение для дифференциального сечения рассеяния приобрело вид алгебраического выражения, что

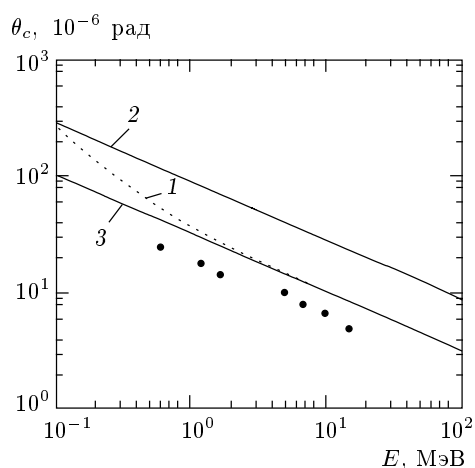


Рис. 4. Энергетические зависимости характерных углов рассеяния частиц водорода в процессе потери электронов ионами H^- для мишеней из атомов He и Xe: 1 и 2 — результаты расчета по теории из данной работы для атомов He и Xe соответственно; 3 — расчет в приближении дипольного момента для He-мишени [6, 7]; • — экспериментальные данные для угла $\theta_{1/2}$, соответствующего полуширине на половине высоты пространственно-углового распределения атомов водорода, появляющихся при рассеянии ионов H^- на CO_2 -мишени [10]

позволяет проводить вычисления сечений рассеяния частиц на атомах мишени с произвольным номером Z . Для атомов He, Li и Be, содержащих в основном состоянии электроны на сферически-симметричных s -орбиталях, результаты расчетов матричных элементов $M(\mathbf{q})$ являются в рамках замкнутого борновского приближения точными.

2. Выполнены систематические расчеты сечений σ_Σ и характерных углов θ_c для процесса потери электронов ионами H^- с энергией $E = 0.1\text{--}100$ МэВ при соударении с атомами среды, имеющими номер $Z = 2\text{--}54$. Согласно расчетам, при переходе от мишени из атомов инертного газа к мишени из атомов соседнего щелочного металла сечение σ_Σ скачкообразно возрастает, а угол θ_c — уменьшается; наилучшими угловыми характеристиками будет обладать пучок атомов водорода, полученных при нейтрализации ионов H^- в мишени из паров лития (если пренебречь процессами рассеяния ионов H^- и атомов H^0 без изменения заряда [3, 10]).

Выражаю глубокую благодарность В. С. Кортову и А. В. Кружалову за поддержку в работе, а также Ю. Г. Лазареву за помощь в отладке программ расчета.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
2. Y. T. Lee and J. C. Y. Chen, Phys. Rev. A **19**, 526 (1979).
3. В. И. Радченко, ЖЭТФ **103**, 40 (1993).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
5. E. Clementi and C. Roetti, Atomic data and nuclear data tables **14**, 177 (1974).
6. В. И. Радченко, ЖЭТФ **105**, 834 (1994).
7. В. И. Радченко, Д. А. Кожухов, В. Н. Кудрявцев, ЖТФ **70**(2), 12 (2000).
8. В. И. Радченко, Г. Д. Ведьманов, ЖЭТФ **107**, 3 (1995).
9. J. A. Johnstone, NIM Phys. Res. B **52**, 1 (1990).
10. Г. Д. Ведьманов, Ю. Г. Лазарев, В. И. Радченко, ЖТФ **70**(2), 81 (2000).
11. Н. Бор, *Прохождение атомных частиц через вещество*, Изд-во иностр. лит., Москва (1950).
12. И. С. Дмитриев, Я. М. Жилейкин, В. С. Николаев, ЖЭТФ **49**, 500 (1965).
13. C. J. Anderson, R. J. Girnius, A. M. Howald, and L. W. Anderson, Phys. Rev. A **22**, 822 (1980).
14. K. Riesselmann, L. W. Anderson, L. Durand, and C. J. Anderson, Phys. Rev. A **43**, 5934 (1991).
15. И. С. Дмитриев, В. С. Николаев, ЖЭТФ **44**, 660 (1963).
16. D. P. Dewangan and H. R. J. Walters, J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. **11**, 3983 (1978).
17. И. С. Дмитриев, Я. Ф. Теплова, Ю. А. Файнберг, ЖЭТФ **107**, 55 (1995).
18. Б. А. Дьячков, В. И. Зиненко, Г. В. Казанцев, ЖТФ **47**, 416 (1977).
19. D. P. Almeida, N. V. de Castro, F. L. Freite et al., Phys. Rev. A **36**, 16 (1987).