ЖЭТФ, 2006, том 129, вып. 4, стр. 659–663

ИМПУЛЬСНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ СЕЧЕНИЯ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

И. Л. Бейгман *

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 31 октября 2005 г.

Сформулировано импульсное приближение для процесса прямой (без возбуждения автоионизационных уровней) двухэлектронной ионизации атомов и ионов при столкновениях с электронами. Получены аналитические выражения для сечения, качественно отражающие основные зависимости от энергии внешнего электрона и атомных характеристик.

PACS: 34.80.Dp, 34.80.Kw

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследованию процессов двухэлектронной ионизации атомов и ионов электронным ударом посвящен ряд теоретических и экспериментальных работ (см., например [1–4] и ссылки в них). В области энергий внешнего электрона, бóльших потенциала ионизации внутренних оболочек, сечение процесса дается сечением однократной ионизации из внутренней оболочки с последующим распадом получившегося автоионизационного состояния: $A_Z + e \to A^{**}_{Z+1} + 2e \to \to A_{Z+2} + 3e$. Этот процесс детально исследован как экспериментально, так и теоретически (см. соответствующие ссылки в работе [3]), однако в области энергий, бóльших порога двухэлектронной ионизации, но меньших потенциала ионизации внутренних оболочек, остается лишь прямая (без возбуждения автоионизационных уровней) двухэлектронная ионизация: $A_Z + e \to A_{Z+2} + 3e$. Возможны два канала этого процесса. Первый описывается как последовательная ионизация атомных электронов внешним налетающим электроном в течение столкновения и на квантовом языке соответствует второму порядку теории возмущений по взаимодействию атома с налетающим электроном. Второй также может быть описан как последовательная ионизация, но при этом ионизация второго атомного электрона происходит благодаря взаимодействию с уже выбитым (первым) атомным электроном. На квантовом языке это соответствует первому порядку теории возмущений по взаимодействию атома с налетающим электроном, но с учетом межэлектронного взаимодействия атомных электронов (другими словами, выходом за рамки одноэлектронного приближения при расчете атомных волновых функций). В наиболее интересной области энергий (вблизи порога и максимума сечения прямой ионизации), как правило, доминирующую роль играет первый процесс.

Теоретическое описание процесса прямой двухэлектронной ионизации связано с большими вычислительными трудностями. К настоящему времени детальные расчеты проведены лишь для атома He и He-подобных ионов (см. соответствующие ссылки в работах [1, 2]). Вместе с тем известно, что для однократной ионизации простое «классическое» импульсное приближение дает правильный порядок величины сечения и отражает основные зависимости от параметров столкновения. В работе [5] было предложено (без вывода) использовать импульсное приближение для описания двухэлектронной ионизации. Цель настоящей работы — дать последовательную формулировку импульсного приближения для процесса прямой двухэлектронной ионизации. Приведено также явное аналитическое выражение для эффективного сечения.

Для простоты будем рассматривать атомы с двумя оптическими электронами.

*E-mail: beig@sci.lebedev.ru

2. ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ

В рамках метода параметра удара сечение ионизации имеет вид

$$\sigma = 2\pi \int\limits_0^\infty \rho\, d\rho \left(W_{12}(\rho) + W_{21}(\rho)\right), \qquad (1)$$

где ρ — параметр удара, W — вероятности последовательной ионизации первого и второго электронов. Рассматривая оптический электрон как облако с плотностью распределения $|\phi(r)|^2$ (ϕ — волновая функция оптического электрона), в импульсном приближении имеем

$$\begin{aligned} &W_{12} = SF, \\ &S = \int\limits_{I_2}^{E-I_1} dE_1 f(E,E_1) \int\limits_0^{E_1-I_2} dE_2 f(E_1,E_2). \end{aligned} \qquad (2)$$

Здесь E, E_1, E_2 — энергии налетающего электрона соответственно до столкновения, после первой и второй ионизаций; I_1, I_2 — потенциалы ионизации; формфактор F и сечение передачи энергии $f_T \equiv d\sigma/d(\Delta E)$ (по формуле Томсона) даются выражениями

$$\begin{aligned} &F = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dz\, \times \\ &\times \int\limits_z^\infty dz' \left|\phi_1\left(\sqrt{\rho^2+z^2}\right)\phi_2\left(\sqrt{\rho^2+(z')^2}\right)\right|^2, \\ &f_T(E,E_1) = \frac{4\pi a_0^2}{E}\left(\frac{\mathrm{Ry}}{E-E_1}\right)^2, \end{aligned} \qquad (3)$$

где a_0 — боровский радиус, Ry — единица Ридберга для энергии. Формулы (2) описывают канал последовательной ионизации: налетающий электрон сначала передает атомному электрону энергию $E-E_1$, затем второму (эквивалентному) электрону энергию E_1-E_2. Другая возможность состоит в том, что вторая ионизация осуществляется первым выбитым атомным электроном:

$$\begin{aligned} &W_{12}^{(e)} = S_e F, \\ &S_e = \int\limits_0^{E-I_1-I_2} dE_1 f(E,E_1)\, \times \\ &\times \int\limits_0^{E-I_1-E_1-I_2} dE_2 f(E-E_1-I_1, E_2), \end{aligned} \qquad (4)$$

где E_2 — конечная энергия выбитого первого атомного электрона. Выражение для W_{21} отличается перестановкой индексов. Нетрудно видеть, что в аналогичном подходе для одноэлектронной ионизации

$$2\pi \int\limits_0^\infty \rho\, d\rho\, F = 1,$$

и мы получаем обычное «классическое» выражение для сечения.

3. ФУНКЦИИ S

Волновые функции ϕ_1 и ϕ_2 мало отличаются друг от друга, поэтому формфакторы для W_{12} и W_{21} можно считать равными, и тогда для суммарной функции S из формулы (2) находим:

$$\begin{aligned} &S = (4\pi a_0^2)^2 \left(\frac{\mathrm{Ry}}{E}\right)^2 \frac{(\mathrm{Ry})^2}{I_1 I_2}\{Y_1+Y_2\}, \\ &Y_1 = \frac{E(I_1+I_2)-4I_1I_2}{E^2} \ln\frac{(E-I_1)(E-I_2)}{I_1I_2}, \\ &Y_2 = \frac{(E-I_1-I_2)(2E^2-3E(I_1+I_2)+4I_1I_2)}{(E-I_1)(E-I_2)E}. \end{aligned} \qquad (5)$$

Отметим, что S имеет размерность квадрата площади. Аналогично из (4) следует:

$$\begin{aligned} &S_e = (4\pi a_0^2)^2 \frac{\mathrm{Ry}}{E}\frac{(\mathrm{Ry})^3}{(I_1I_2)^{3/2}}\{Y_3+Y_4\}, \\ &Y_3 = \left(\frac{I_2}{I_1}\right)^{1/2}\left(2\frac{I_2}{I_1}+1\right)\ln\frac{(I_1+I_2)(E-I_1)}{I_2E} + \\ &+ \left(\frac{I_2}{I_1}\right)^{1/2}\left(2\frac{I_1}{I_2}+1\right)\ln\frac{(I_1+I_2)(E-I_2)}{I_1E}, \\ &Y_4 = \sqrt{I_1I_2}\,\frac{E-I_1-I_2}{E}\, \times \\ &\qquad \times \left(\frac{I_1-2E}{(E-I_1)I_1} + \frac{I_2-2E}{(E-I_2)I_2}\right). \end{aligned} \qquad (6)$$

4. ФОРМФАКТОР

Интеграл в выражении для F (3) вычисляется по «треугольной» области $z' > z$, приближенно он равен интегралу по области $z' < z$, т. е.

$$\begin{aligned} &2\pi \int\limits_0^\infty F\rho\, d\rho \approx \pi \int\limits_0^\infty f_1(\rho) f_2(\rho)\rho\, d\rho, \\ &f_{1,2}(\rho) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dz \left|\phi_{1,2}\left(\sqrt{\rho^2+z^2}\right)\right|^2. \end{aligned} \qquad (7)$$

Функции $f_{1,2}$ удовлетворяют условию нормировки:

$$2\pi \int_0^\infty f(\rho)\rho\, d\rho = 1.$$

Для оценки $f_{1,2}$ в качестве волновых функций оптических электронов можно использовать слетеровские функции:

$$\phi^2 = \frac{2\alpha^3}{\pi\Gamma(2\nu+3)}(2\alpha r)^{2\nu}\exp(-2\alpha r),$$

где $\alpha = \sqrt{I/\mathrm{Ry}}/a_0$ и $\nu = n-1$ (n — главное квантовое число). С этими функциями интеграл во втором выражении формулы (7) находится с помощью интегрального представления:

$$K_1(x) = \int_1^\infty e^{-tx}\frac{t\,dt}{\sqrt{t^2-1}},$$

где K_1 — функция Макдональда. Для наиболее интересных случаев $n = 1, 2$ получаем

$$\begin{aligned} f(\rho) &= 2\frac{\alpha^3}{\pi}\rho K_1(2\alpha\rho), \quad n=1,\\ f(\rho) &= \frac{2\alpha^5}{3\pi}\rho^3 P(2\alpha\rho),\\ P(x) &= K_1(x)\left(1+\frac{2}{x^2}\right) + K_0(x)\frac{1}{x}, \quad n=2. \end{aligned} \tag{8}$$

Из формул (8) для интеграла (7) находим:

$$\pi\int_0^\infty f_1 f_2\rho\, d\rho = \frac{\sqrt{I_1 I_2}}{4\pi a_0^2}\, q. \tag{9}$$

Здесь безразмерные константы q, соответственно, равны:

$$\begin{aligned} q &= \int_0^\infty K_1(px)K_1\left(\frac{x}{p}\right)x^3 dx, \quad n=1,\\ q &= \frac{1}{16\cdot 9}\int_0^\infty P(px)P\left(\frac{x}{p}\right)x^7 dx, \quad n=2, \end{aligned} \tag{10}$$

где $p = \sqrt{\alpha_1/\alpha_2} = \sqrt[4]{I_1/I_2}$. Величины q слабо зависят от p. Для $p=1$ они равны 2/3 и 0.21.

5. ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СЕЧЕНИЯ

С помощью формул (1)–(8) сечение прямой двухэлектронной ионизации можно записать в виде

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \sigma_i + \sigma_e,\\ \sigma_i &= 4\pi a_0^2\frac{(\mathrm{Ry})^3}{\sqrt{I_1 I_2}\,E^2}\{Y_1+Y_2\}\,q,\\ \sigma_e &= 4\pi a_0^2\frac{(\mathrm{Ry})^3}{I_1 I_2 E}\{Y_3+Y_4\}\,q, \end{aligned} \tag{11}$$

где Y_1, Y_2, Y_3, Y_4 приведены в (5), (6). Вблизи порога процесса, когда энергия $E_i = E - I_1 - I_2 \to 0$, имеем

$$\begin{aligned} \sigma_i &\xrightarrow[E_i\to 0]{} 2\pi a_0^2\frac{(\mathrm{Ry})^3}{I_1 I_2(I_1+I_2)}\times\\ &\qquad\times\frac{E_i^2}{I_1 I_2}\left\{8+\frac{(I_1+I_2)^2}{I_1 I_2}\right\}q,\\ \sigma_e &\xrightarrow[E_i\to 0]{} 2\pi a_0^2\frac{E_i^2(\mathrm{Ry})^3}{(I_1+I_2)^3}\sqrt{I_1 I_2}\left\{\frac{1}{I_1^3}+\frac{1}{I_2^3}\right\}q, \end{aligned} \tag{12}$$

т. е. сечение пропорционально квадрату превышения энергии налетающего электрона над порогом реакции. При больших энергиях $\sigma_i \sim 1/E^2$, в то время как $\sigma_e \sim 1/E$,

$$\begin{aligned} \sigma_i &\xrightarrow[E\to\infty]{} 4\pi a_0^2\frac{(\mathrm{Ry})^3}{\sqrt{I_1 I_2}E^2}\times\\ &\times\left\{2+\frac{I_1+I_2}{E}\ln\frac{E^2}{I_1 I_2}\right\}q,\\ \sigma_e &\xrightarrow[E\to\infty]{} 4\pi a_0^2\frac{(\mathrm{Ry})^3}{I_1 I_2 E}\times\\ &\times\left\{\left(\frac{I_2}{I_1}\right)^{1/2}\left(2\frac{I_2}{I_1}+1\right)\ln\frac{I_1+I_2}{I_2}+\right.\\ &+\left(\frac{I_1}{I_2}\right)^{1/2}\left(2\frac{I_1}{I_2}+1\right)\ln\frac{I_1+I_2}{I_1}-\\ &\left.-2\left(\left(\frac{I_1}{I_2}\right)^{1/2}+\left(\frac{I_2}{I_1}\right)^{1/2}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{13}$$

6. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сравнение результатов расчетов по формулам (11) с экспериментальными сечениями двойной ионизации атома He и иона B^+ приведено на рис. 1, 2. На рис. 1 показаны также результаты квантового расчета [2]. Импульсное приближение дает максимум сечения, сдвинутый к порогу и по величине в несколько раз больший экспериментального. Резкое увеличение экспериментальных сечений после 230 эВ на рис. 2 связано с ионизацией из внутренней ($1s$) оболочки.

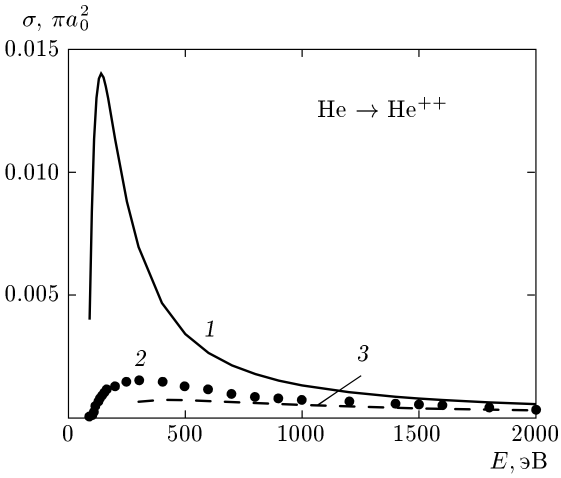

Рис. 1. Сечение прямой двойной ионизации атома He: *1* — импульсное приближение, *2* и *3* — эксперимент и квантовый расчет [2]

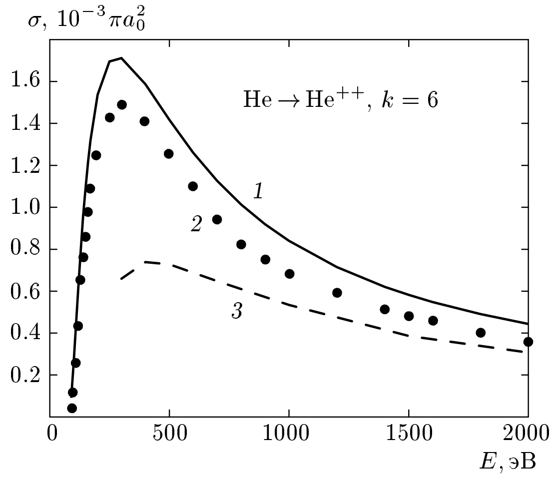

Рис. 3. Сечение прямой двойной ионизации атома He: *1* — модифицированное импульсное приближение при $k = 6$, *2* и *3* — эксперимент и квантовый расчет [2]

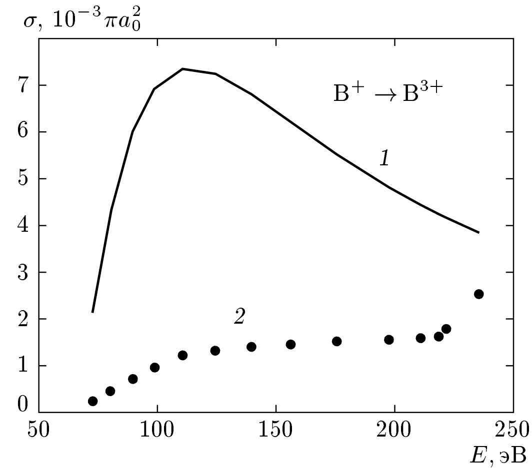

Рис. 2. Сечение прямой двойной ионизации иона B^+: *1* — импульсное приближение, *2* — эксперимент [7]

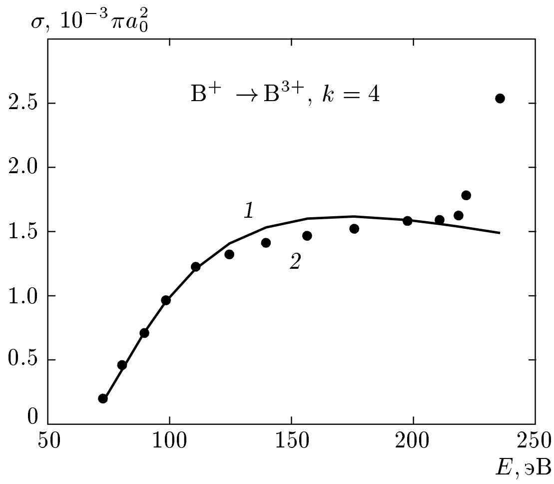

Рис. 4. Сечение прямой двойной ионизации иона B^+: *1* — модифицированное импульсное приближение при $k = 4$, *2* — эксперимент [7]

Следует отметить, что общее выражение для сечения прямой двухэлектронной ионизации по теории возмущений включает две части, дающиеся соответственно первым и вторым порядками теории возмущений по взаимодействию внешнего электрона с атомом. Первая часть при больших энергиях дает такую же зависимость, как и для одноэлектронной ионизации ($\ln E/E$), но отлична от нуля лишь при описании атома с учетом взаимодействия конфигураций, включает малый квадрат коэффициента примеси, пропорциональный $1/Z^2$ (Z — спектроскопический символ), и поэтому величина сечения пропорциональна $1/Z^6$ (в отличие от $1/Z^4$ для одноэлектронного процесса). Вторая часть при больших энергиях дает зависимость $1/E^2$ и также включает параметр малости $1/Z^6$ (благодаря второму порядку теории возмущений). Для энергий вблизи порога процесса $(I_1 + I_2)$ обе части сечения дают одинаковую зависимость $\propto E_i^2$ $(E_i = E - I_1 - I_2)$. Отметим, что из теории Ванье следует пороговое поведение $E_i^{2.27}$ для нейтрального атома и $E_i^{2.16}$ для однократного иона [6].

Импульсное приближение (11) также включает два слагаемых: σ_i соответствует второму порядку теории возмущений по взаимодействию внешнего электрона с атомом, σ_e — первому порядку теории возмущений. Формулы (12), (13) показывают, что импульсное приближение дает такие же качественные зависимости, как и теория возмущений. Вместе с тем импульсное приближение содержит указания на основные масштабные характеристики (scaling) процесса: $(I_1 I_2)^{1/2}$ для энергии и $\pi a_0^2/(I_1 I_2)^{3/2}$ для сечения.

7. МОДИФИЦИРОВАННОЕ ИМПУЛЬСНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Строго говоря, импульсное приближение оправдано лишь при больших энергиях. Однако поведение сечения при промежуточных и малых энергиях можно скорректировать с помощью дополнительного «обрезающего» множителя:

$$\sigma^c = \left(\frac{E}{E + I_1 + I_2}\right)^k \sigma_{tot}. \qquad (14)$$

Рисунки 3, 4 показывают удовлетворительное согласие формул (14) ($k = 6$ для He и $k = 4$ для B^+) с экспериментальными данными. Фактически, (14) являются аппроксимационными формулами. Их ценность определяется тем, насколько сильно эмпирический параметр k зависит от типа иона.

Автор признателен Л. А. Вайнштейну, Л. П. Преснякову и П. Дефрансу (P. Defrance) за обсуждение работы. Работа поддержана РФФИ (гранты №№ 05-02-16658, 06-02-16298).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Defrance, T. M. Kereselidze, Z. S. Machavariani, and I. L. Noselidze, J. Phys. B **33**, 4323 (2000).

2. E. Bahati, H. Cherkani-Hassani, P. Defrance, J. J. Jureta, T. Kereselidze, Z. Machavariani, and I. Noselidze, J. Phys. B **38**, 1261 (2005).

3. V. P. Shevelko, H. Tawara, F. Scheuermann, B. Fabian, A. Mueller, and E. Salzborn, J. Phys. B **38**, 525 (2005).

4. L. P. Presnyakov, H. Tawara, I. Yu. Tolstikhina, and D. B. Uskov, J. Phys. B 28, **785** (1995); Л. П. Пресняков, Д. Б. Усков, Письма в ЖЭТФ **66**, 23 (1997).

5. M. Gryzinski, Phys. Rev. A **138**, 336 (1965).

6. P. Grujic, J. Phys. B **16**, 2567 (1983).

7. M. B. Shah, D. S. Elliott, P. McCallion, and H. B. Gilbody, J. Phys. B **21**, 2751 (1988).