

УДК 539.186

В. С. СЕНАШЕНКО, В. С. НИКОЛАЕВ, В. Ю. ШАФЕР, И. С. ДМИТРИЕВ

**РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНЫХ СЕЧЕНИЙ ПОТЕРИ К-ЭЛЕКТРОНА
БЫСТРЫМИ ВОДОРОДОПОДОБНЫМИ ИОНАМИ
ПРИ СОУДАРЕНИИ С АТОМАМИ АЗОТА**

В нерелятивистском борновском приближении вычислены сечения потери К-электрона быстрыми водородоподобными ионами любых элементов при соударении их с атомами азота. Получены простые приближенные выражения для сечений в предельных случаях.

Ранее [1, 2] в нерелятивистском борновском приближении были вычислены сечения потери К-электрона различными водородо- и гелиеподобными ионами в соударениях с атомами водорода и гелия. В настоящей работе аналогичный расчет проведен для случаев потери К-электрона водородоподобными ионами при соударениях с атомами азота. Получены простые приближенные выражения для сечений в предельных случаях. Результаты расчета сравниваются с экспериментом. На основании надежных вычисленных и экспериментальных данных приводятся сечения потери электронов в азоте для любых водородоподобных частиц в широкой области скоростей.

Общие формулы

Согласно [3], полное сечение потери электрона ионами в соударениях с атомами среды в первом борновском приближении определяется выражением

$$\sigma = S_{nc} \frac{M_0^2 v_1}{4\pi^2 \hbar^4 v} \iint |\langle m, m_c | \hat{N} | n, n_c \rangle|^2 d\vec{K} d\Omega, \quad (1)$$

где M_0 — приведенная масса иона и атома среды, v и v_1 — скорости иона относительно атома среды до и после столкновения, $\langle m, m_c | \hat{N} | n, n_c \rangle$ — матричный элемент перехода иона и атома среды из начальных состояний m и m_c в конечные состояния n и n_c . Конечные состояния иона принадлежат непрерывному спектру и характеризуются волновым вектором электрона \vec{K} относительно ядра иона. Для атома среды конечное состояние может быть любым. Получение полного сечения предполагает в (1) интегрирование по всем значениям \vec{K} , допу-

скаемым законами сохранения энергии и импульса, и телесному углу Ω , в который происходит рассеяние сталкивающихся частиц, а также суммирование S_{n_c} по всем допустимым конечным состояниям n_c атома среды, включая интегрирование по состояниям непрерывного спектра.

После учета соотношения между углом рассеяния сталкивающихся частиц и величиной импульса $\hbar Q$, передаваемого ионом атому среды, для сечения σ из (1) получаем следующую формулу:

$$\sigma = 8\pi a_0^2 \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 \left\{ Z_c^2 \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} (1 - F_c)^2 \frac{dQ}{Q^3} \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} |\varepsilon(m, n)|^2 d\vec{K} + S'_{n_c} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \left| \sum_{j=1}^{z_c} \varepsilon_j(m_c, n_c) \right|^2 \frac{dQ}{Q^3} \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} |\varepsilon(m, n)|^2 d\vec{K} \right. \quad (2)$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ и $v_0 = \frac{e^2}{\hbar}$ — атомные единицы длины и скорости, $Z_c e$ — заряд ядра атомов среды, $F_c = \frac{1}{Z_c} \sum_{j=1}^{z_c} \varepsilon_j(m_c, m_c)$ — атомный формфактор, $\varepsilon(m, n)$

и $\varepsilon_j(m_c, n_c)$ — матричные элементы перехода иона из состояния m в состояние n и атома среды из состояния m_c в n_c :

$$\varepsilon(m, n) = \langle \Psi_n(\vec{r}) | e^{i\vec{Q}\vec{r}} | \Psi_m(\vec{r}) \rangle,$$

$$\varepsilon_j(m_c, n_c) = \langle \Psi_{m_c}(\vec{r}_{c1} \dots \vec{r}_{cj}) | e^{i\vec{Q}\vec{r}_{cj}} | \Psi_{n_c}(\vec{r}_{c1} \dots \vec{r}_{cj}) \rangle.$$

Здесь \vec{r} и \vec{r}_{cj} — радиус-векторы электрона иона и j -того электрона атома среды.

Первое слагаемое в выражении (2) дает сечение потери электрона σ_y в псевдоупругих столкновениях иона с атомами среды, а сумма S'_{n_c} соответствует потере электрона в псевдонуэупругих столкновениях, которые сопровождаются возбуждением или ионизацией атомов среды (значение $n_c = m_c$ из суммы S'_{n_c} по n_c исключено).

Пределы интегрирования в (2) по Q и K определяются законами сохранения энергии и импульса, из которых при обычно выполняемом условии $|v_1 - v| \ll v$ следует $\hbar Q_{\min} = \frac{\Delta E}{v}$ и $\hbar Q_{\max} = 2M_0 v$, где ΔE — изменение внутренней энергии сталкивающихся частиц. Величина Q_{\max} настолько велика, что значения сечений не изменяются, если считать $Q_{\max} \rightarrow \infty$. Для процессов ионизации $K_{\min} = 0$, а величина K_{\max} определяется из уравнения $\hbar Q v = \Delta E = I + \frac{\hbar^2 K_{\max}^2}{2\mu} + \Delta E_c$, где I — энергия связи электрона в ионе, ΔE_c — энергия, затраченная на возбуждение или ионизацию атома среды. Для псевдоупругой части сечения $\Delta E_c = 0$, а для членов, входящих в сумму S'_{n_c} , имеем $\Delta E_c \geq I_c^*$, где I_c^* — энергия, необходимая для перехода атома среды в низшее возбужденное состояние.

После интегрирования (2) по \vec{r} , \vec{r}_{cj} и угловым переменным пространства импульсов \vec{K} для псевдоупругой части сечения получаем

$$\sigma_y = 8\pi a_0^2 \left(\frac{Z_c}{Z_{2s}}\right)^2 \int_{1/2S}^{\infty} (1 - F_c)^2 \frac{dq}{q^3} \int_0^{(2qs-1)^{1/2}} \varepsilon_{kq}^2 dk, \quad (3)$$

где Z_e — заряд ядра иона, $s = \frac{v}{Zv_0}$, $q = \frac{Qa_0}{Z}$, $k = \frac{Ka_0}{Z}$.

Выражение для ε_{kq}^2 , вычисленное с кулоновской волновой функцией для электрона в непрерывном спектре, в удобной для расчетов форме приведено в работе [1].

Формула (3) отличается от соответствующего выражения для σ_y в случае столкновения ионов с атомами водорода и гелия (формула (7) работы [1]) только формфактором F_c . В одноэлектронном приближении, когда волновая функция атома среды представляется в виде линейной комбинации произведений волновых функций отдельных атомных электронов, формфактор атомов азота ($1s^2 2s^2 2p^3$)^{4S} может быть записан следующим образом:

$$F_N = \frac{1}{Z_c} [N_{1s}F_{1s,1s} + N_{2s}F_{2s,2s} + N_{2p}F_{2p,2p}], \quad (4)$$

где N_{1s} , N_{2s} , N_{2p} — число $1s$ -, $2s$ - и $2p$ - электронов в атоме азота ($N_{1s} + N_{2s} + N_{2p} = Z_c$), а $F_{1s,1s}$, $F_{2s,2s}$ и $F_{2p,2p}$ — одноэлектронные матричные элементы $\varepsilon_j(m_c, m_c)$ для тех же электронов.

Если использовать водородоподобные волновые функции, то

$$F_{1s,1s} = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{Zq}{2Z_{1s}}\right)^2\right]^2}, \quad F_{2s,2s} = \frac{2\left(\frac{Zq}{Z_{2s}}\right)^4 - 3\left(\frac{Zq}{Z_{2s}}\right)^2 - 1}{\left[1 + \left(\frac{Zq}{Z_{2s}}\right)^2\right]^4},$$

$$F_{2p,2p} = \frac{1 - \left(\frac{Zq}{Z_{2p}}\right)^2}{\left[1 + \left(\frac{Zq}{Z_{2p}}\right)^2\right]^4}, \quad (5)$$

где Z_{1s} , Z_{2s} и Z_{2p} — эффективные заряды ядра для соответствующих электронов.

При вычислении псевдонуэругой части сечения σ_{ny} мы, как и в работах [1, 2, 5], использовали правило сумм, которое для многоэлектронного атома имеет следующий вид [6]:

$$S'_{n_c} \left| \sum_{j=1}^{z_c} \varepsilon_j(m_c, n_c) \right|^2 = Z_c \left[1 - Z_c F_c^2 + \frac{1}{Z_c} \langle m_c \left| \sum_{i \neq j} e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_{ci} - \vec{r}_{cj})} \right| m_c \rangle \right]. \quad (6)$$

Отсюда для атома азота, если его волновая функция представлена в виде линейной комбинации произведений одноэлектронных волновых функций $\varphi_a(\vec{r}_{cj})$, получаем

$$S'_{n_c} \left| \sum_{j=1}^{z_c} \varepsilon_j(m_c, n_c) \right|^2 = Z_c (1 - F_N^{*2}) = N_{1s} (1 - F_{1s}^{*2}) + N_{2s} (1 - F_{2s}^{*2}) + N_{2p} (1 - F_{2p}^{*2}) \quad (7)$$

при

$$F_{1s}^{*2} = F_{1s,1s}^2 + F_{1s,2s}^2 + -\frac{1}{2} F_{1s,2p}^2, \quad F_{2s}^{*2} = F_{2s,2s}^2 + F_{2s,1s}^2 + \\ + \frac{1}{2} F_{2s,2p}^2, \quad F_{2p}^{*2} = F_{2p,2p}^2 + F_{2p,2s}^2 + F_{2p,1s}^2,$$

где $F_{1s,2s}$, $F_{1s,2p}$, $F_{2s,2p}$ — недиагональные одноэлектронные матричные элементы $F_{a,b} = \langle \Phi_a(\vec{r}_{cj}) | e^{i\vec{Q}\vec{r}_{cj}} | \Phi_b(\vec{r}_{cj}) \rangle$.

При использовании водородоподобных волновых функций получим

$$F_{1s,2s} = 2\sqrt{2} \frac{Z_{1s}^{3/2} Z_{2s}^{3/2} [(Z_{1s} - Z_{2s}) + \alpha_1^2 (Z_{1s} + Z_{2s})]}{\left[Z_{1s} + \frac{1}{2} Z_{2s} \right]^4 [1 + \alpha_1^2]^3}, \\ F_{1s,2p} = 4\sqrt{2} \frac{Z_{1s}^{3/2} Z_{2p}^{5/2} \alpha_2}{\left[Z_{1s} + \frac{1}{2} Z_{2p} \right]^4 [1 + \alpha_2^2]^3}, \quad (8) \\ F_{2s,2p} = 32 \frac{Z_{2s}^{3/2} Z_{2p}^{5/2} \alpha_3 [2Z_{2s} (\alpha_3^2 - 2) + Z_{2p} (1 + \alpha_3^2)]}{[Z_{2s} + Z_{2p}]^5 [1 + \alpha_3^2]^4},$$

где

$$\alpha_1 = \frac{Zq}{Z_{1s} + \frac{1}{2} Z_{2s}}, \quad \alpha_2 = \frac{Zq}{Z_{1s} + \frac{1}{2} Z_{2p}}, \quad \alpha_3 = \frac{2Zq}{Z_{2s} + Z_{2p}}.$$

Из вариационных расчетов [4] следует, что $Z_{1s} = 6,688$; $Z_{2s} = 4,5$ и $Z_{2p} = 3,54$. При этом волновые функции $1s$ и $2s$ -электронов оказываются неортогональными, вследствие чего при $Zq \ll 1$ будет $(1 - F_{1s}^{*2}) < 0$ и соответствующее сечение становится отрицательным. Для устранения этого нефизического результата вместо водородоподобной функции $\Phi_{2s}(\vec{r}_{cj})$ для $2s$ -электрона была использована функция

$\Phi'_{2s}(\vec{r}_{cj}) = [1 - \langle \Phi_{1s}(\vec{r}_{cj}) | \Phi_{2s}(\vec{r}_{cj}) \rangle]^{-1/2} [\Phi_{2s}(\vec{r}_{cj}) - \Phi_{1s}(\vec{r}_{cj}) \langle \Phi_{1s}(\vec{r}_{cj}) | \Phi_{2s}(\vec{r}_{cj}) \rangle]$, ортогональная функции $1s$ -электрона.

При этом для $F_{1s,2s}$ вместо (8) получается выражение

$$F_{1s,2s} = 2\sqrt{2} \frac{Z_{1s}^{3/2} Z_{2s}^{3/2} (Z_{1s} - Z_{2s})}{\left[Z_{1s} + \frac{1}{2} Z_{2s} \right]^4} \left[\frac{1 + \alpha_1^2 \frac{Z_{1s} + Z_{2s}}{Z_{1s} - Z_{2s}}}{(1 + \alpha_1^2)^3} - \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{Zq}{2Z_{1s}} \right)^2 \right]^2} \right]. \quad (8')$$

Небольшими изменениями всех других из указанных выше матричных элементов пренебрегаем.

Применение правила сумм для расчета σ_{HY} затруднено различием в величине ΔE_c для разных членов суммы S'_{nc} . В результате этого области значений K и Q , по которым производится интегрирование в (2), оказываются для них неодинаковыми. Поэтому в соотношении (7) вместо точного значения ΔE_c для каждого члена суммы берутся усредненные величины $\overline{\Delta E_c}$.

Из (2) и (7) для псевдонеупругой части сечения σ_{ny} получаем

$$\sigma_{ny} = \sigma_{1s} + \sigma_{2s} + \sigma_{2p}, \quad (9)$$

где каждое из парциальных сечений σ_{1s} , σ_{2s} , σ_{2p} определяется выражением

$$\sigma_a = 8\pi a_0^2 \frac{Na}{(Z^2 S)^2} \int_{q_{\min,a}}^{\infty} (1 - F_a^{*2}) \frac{dq}{q^3} \int_0^{k_{\max,a}} \epsilon_{kq}^2 dk. \quad (9')$$

Здесь $q_{\min,a} = (1 + \overline{u_a^2} / Z^2) / 2v$, $k_{\max,a} = (2qv - 1 - \frac{\overline{u_a^2}}{Z^2})^{1/2}$ при $\overline{u_a^2} = \overline{\Delta E_a} / \frac{1}{2} \mu v_0^2$. (Индекс a означает $1s$, $2s$ и $2p$.)

Для каждого из слагаемых в (9) значения $\overline{u_a^2}$ различны. Величина $\overline{\Delta E_a}$ не может быть меньше минимальной энергии возбуждения электрона, которая для $1s$ - и $2s$ -электронов близка к энергии их связи. Поэтому $\overline{u_{1s}^2} \geq 29,4$; $\overline{u_{2s}^2} \geq 2,0$ и $\overline{u_{2p}^2} > 0,73$ [7,8]. Уменьшение значения $\overline{u_a^2}$ приводит к расширению области интегрирования по q и k в (9') и соответственно к увеличению σ_a . Поэтому расчет при $\overline{u_a^2} = 0,73$ дает верхнюю границу сечений, а расчет при $\overline{u_a^2} = 29,4$ позволяет оценить нижнюю границу возможных значений σ_{ny} . Этих оценок для практических целей вполне достаточно.

Используя свойства подынтегральных функций, подобно тому, как это сделано в [1, 2], из (3) и (9) можно получить простые приближенные формулы для $s \ll 1$ и $s \geq 3$. В случае $s \ll 1$ предельное выражение для σ совпадает с формулой (8) работы [1]. В области высоких скоростей значения σ_y , σ_{ny} , σ_{1s} , σ_{2s} и σ_{2p} существенно зависят от функций $(1 - F_N)^2$, $(1 - F_N^{*2})$, $(1 - F_{1s}^{*2})$, $(1 - F_{2s}^{*2})$, $(1 - F_{2p}^{*2})$, которые не очень сильно отличаются от аналогичных функций для атомов водорода и гелия с выбранными должным образом эффективными зарядами: Z_y^* , Z_{ny}^* , Z_{1s}^* , Z_{2s}^* , Z_{2p}^* . Поэтому при $s \geq 3$ для этих сечений справедливы соотношения, аналогичные формулам (8) и (11) работы [2].

Величину эффективных зарядов можно оценить из асимптотических выражений указанных выше функций при малых значениях q . Если для атомов водорода и гелия [1] при $Zq \ll 1$ имеем

$$(1 - F)^2 \approx \left(\frac{Z^2 q^2}{2Z_c^{*2}} \right)^2, \quad (1 - F^2) \approx \left(\frac{Zq}{Z_c^*} \right)^2, \quad (10)$$

то для атомов азота из (4), (5), (7) и (8) получаем

$$(1 - F_N)^2 \approx \frac{Z^4}{Z_c^2} \left(\frac{1}{Z_{1s}^2} + \frac{14}{Z_{2s}^2} + \frac{15}{Z_{2p}^2} \right) q^4,$$

$$(1 - F_N^{*2}) \approx \frac{Z^2}{Z_c} \left[\frac{N_{1s}}{Z_{1s}^2} + 14 \frac{N_{2s}}{Z_{2s}^2} + 10 \frac{N_{2p}}{Z_{2p}^2} - \left(\frac{1}{2} N_{2s} + N_{2p} \right) f(Z_{2s}, Z_{2p}) \right] q^2,$$

$$(1 - F_{1s}^{*2}) \approx \frac{Z^2}{Z_c} \frac{N_{1s}}{Z_{1s}^2} q^2, \quad (11)$$

$$(1 - F_{2s}^{*2}) \approx \frac{Z^2 N_{2s}}{Z_c} \left[\frac{14}{Z_{2s}^2} - \frac{1}{2} f(Z_{2s}, Z_{2p}) \right] q^2,$$

$$(1 - F_{2p}^{*2}) \approx \frac{Z^2 N_{2p}}{Z_c} \left[\frac{10}{Z_{2p}^2} - f(Z_{2s}, Z_{2p}) \right] q^2,$$

где

$$f(Z_{2s}, Z_{2p}) = \frac{2^{12} Z_{2s}^3 Z_{2p}^5 (Z_{2p} - 4Z_{2s})^2}{(Z_{2s} + Z_{2p})^{12}}.$$

Из сравнения (10) с (11) при $Z_{1s} = 6,69$, $Z_{2s} = 4,5$, $Z_{2p} = 3,54$ получаем $Z_y^* = 1,35$, $Z_{ny}^* = 2,2$, $Z_{1s}^* = 6,7$, $Z_{2s}^* = 1,6$, $Z_{2p}^* = 2,2$.

В соответствии с этим для σ_y в области $s \geq 3$ имеем: при $1 \leq Z \leq 4$

$$\sigma_y = 4\pi a_0^2 \left(\frac{Z_c}{Z_{2s}} \right)^2 \left[\frac{Z}{4} - \frac{1}{4s^2} \right], \quad (12)$$

а при $Z > 4$

$$\sigma_y = 4\pi a_0^2 \left(\frac{Z_c}{Z_{2s}} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{4s^2} + 0,56 \ln A \right], \quad (12')$$

где

$$A = \min \left\{ \frac{Z}{4}; 2s \right\}.$$

Для сечений σ_{ny} , σ_{1s} , σ_{2s} , σ_{2p} , если выполнены условия $s \geq 3$ и $s > 1/2 (1 + \overline{u_a^2}/Z^2)$, имеем: при $Z < \frac{1}{2} Z_a^*$

$$\sigma_a = 4\pi a_0^2 \frac{N_a}{(Z^2 s)^2} \left[\frac{Z^2}{Z_a^{*2}} \ln \left(1,35 \frac{Z_a^{*2}}{Z^2} \right) - \frac{1}{s^2} \right], \quad (13)$$

при $\frac{1}{2} Z_a^* \leq Z \leq Z_a^*$

$$\sigma_a = 4\pi a_0^2 \frac{N_a}{(Z^2 s)^2} \left[\frac{Z}{Z_a^*} - \frac{1}{s^2} \right]. \quad (13')$$

при $Z > Z_a^*$

$$\sigma_a = 4\pi a_0^2 \frac{N_a}{(Z^2 s)^2} \left[1 - \frac{1}{s^2} + 0,56 \ln B \right], \quad (13'')$$

где

$$B = \min \left\{ \frac{Z}{Z_a^*}, \frac{2s}{\left(1 + \frac{\overline{u_a^2}}{Z^2} \right)} \right\}$$

(индекс a означает $1s$, $2s$, $2p$, ny).

Справедливость приближенных соотношений (12) — (13) с

$$Z_{ny}^* = 2,2, \quad Z_{1s}^* = 6,7, \quad Z_{2s}^* = 1,6, \quad Z_{2p}^* = 2,2$$

в пределах 15 %-ной точности была проверена прямыми расчетами по формулам (3) и (9).

Результаты расчетов и их обсуждение

Полные сечения потери K -электрона, вычисленные по формулам (3) и (9) при значениях эффективных зарядов $Z_{1s}^2=6,688$ и $Z_{2s}=Z_{2p}=3,9$, найденных по правилам Слетера [8, 9], и $\bar{u}_c=0,73$ (что соответствует значению ΔE_C , равному наименьшей энергии возбуждения атомов азота [8]), представлены на рис. 1. Там же для сравнения приведены и псевдоупругие части сечений σ_y . Из рисунка видно, что в обла-

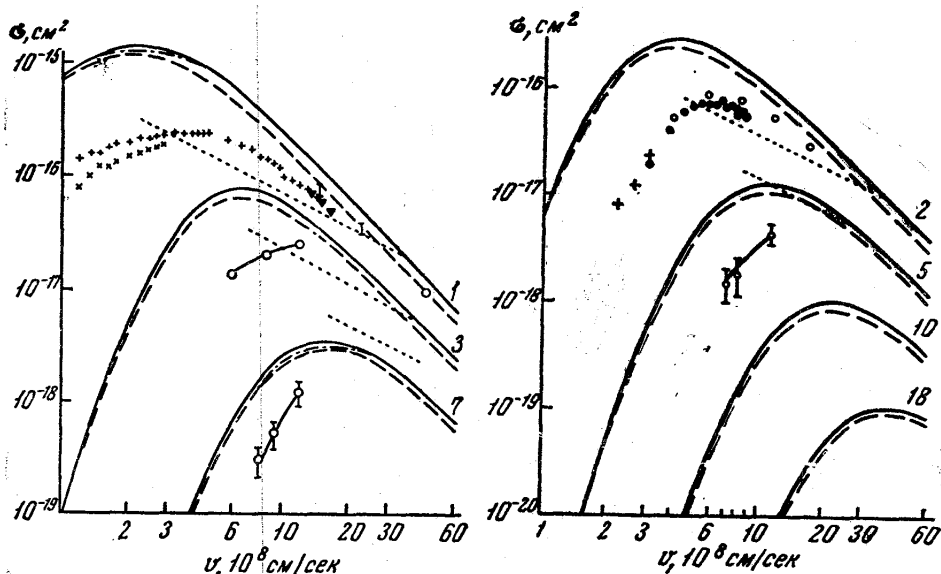


Рис. 1. Полные сечения потери K -электрона водородоподобными ионами при столкновениях с атомами азота, вычисленные при $Z_{1s}=6,688$; $Z_{2s}=Z_{2p}=3,9$, $\bar{u}_c^2=0,73$ в зависимости от скорости v . Пунктиром даны значения σ_y . Штрих-пунктиром — значения σ при $\bar{u}_{1s}^2=29,4$, $\bar{u}_{2s}^2=2,0$ и $\bar{u}_{2p}^2=0,73$ для $Z=1$ и при $\bar{u}_c^2=29,4$ для $Z=7$. Точечные прямые — по формуле (14). Экспериментальные сечения в молекулярном азоте для $Z=1$ из работ: + и \times [10], \blacktriangledown — [11], \blacktriangle — [12], \bullet — [13], \sqcap — [14]; для $Z \geq 2$: \bullet — [15], \circ — [16]; + — для $Z=2$ при $v \leq 3 \cdot 10^8$ см/сек значения σ в воздухе из обзора [10]. Около кривых указаны значения Z .

сти $v > Zv_0$ для ионов с $Z=1$ и 2 в соответствии с (12) и (13') значения σ_y составляют 80% от σ , а для ионов с $Z \geq 10$ в соответствии с (12') и (13') отношение σ_y/σ близко к $Z_c^2/(Z_c^2 + Z_c) = 0,875$ и $\sigma_{ny}/\sigma \approx 1/8$. В области меньших скоростей ($v < Zv_0$) столкновения, которые сопровождаются возбуждением и ионизацией атомов среды, вносят меньший вклад в величину σ . Это позволяет при расчете полных сечений потери электрона ограничиваться приближенным вычислением σ_{ny} и использовать, в частности, правило сумм (6).

Для выяснения влияния выбора значений \bar{u}_c^2 на получаемые сечения, а также оценки относительной роли столкновений с различными электронами атомов среды, по формуле (9') для ионов с $Z=1$ были вычислены значения величин σ_{1s} , σ_{2s} и σ_{ny} при $\bar{u}_{1s}^2=29,4$ и $0,73$; $\bar{u}_{2s}^2=2,0$ и $0,73$; а также значения σ_{2p} при $\bar{u}_{2p}^2=0,73$. Значения $\bar{u}_{1s}^2=29,4$ и $\bar{u}_{2s}^2=2,0$ соответствуют энергии связи $1s$ - и $2s$ -электронов 400 и 27,2 эв [8], а значение $\bar{u}_c^2=0,73$ — энергии перехода внешних $2p$ -элек-

тронов на низший из возбужденных уровней (10 эв) [7]. Результаты этих расчетов с хартри-фоковскими значениями эффективных зарядов ($Z_{1s}=6,688$, $Z_{2s}=4,5$ и $Z_{2p}=3,54$ [4]) представлены на рис. 2. Пунктирная кривая 8 дает значения σ_{ny} при $u_c^2=0,73$ и $Z_{1s}=6,688$, $Z_{2s}=Z_{2p}=3,9$, т. е. с эффективными зарядами, найденными по правилам Слетера [8, 9].

Из рис. 2 видно, что при $Z=1$ в области $v>v_0$ значения σ_{ny} определяются величинами σ_{2s} и σ_{2p} , столкновения же с возбуждением 1s-электронов в соответствии с (12) и (13) составляют не более 6% величины σ_{ny} и менее 1,5% полного сечения потери электрона σ .

Для ионов с большими значениями Z отношение σ_{1s}/σ_{ny} согласно (13') повышается до $2/7$.

При высоких скоростях, в соответствии с (13), сечения очень слабо зависят от u_c^2 . В области же скоростей, где сечение σ_{ny} достигает максимума, значения σ_{ny} , вычисленные при $u_{1s}^2=29,4$, $u_{2s}^2=2,0$, $u_{2p}^2=0,73$ (кривая 6) и при $u_{1s}^2=u_{2s}^2=u_{2p}^2=0,73$ (кривая 7) различаются в полтора раза. Однако даже и в этом случае разница между величинами полных сечений не превышает 10% (см. рис. 1). Сопоставление сечений, получаемых при $u_{1s}^2=0,73$ и 29,4 для $Z=7$ (см. рис. 1), показывает, что этот вывод остается справедливым и для ионов с большими значениями Z . Замена хартри-фоковских значений зарядов слетеровскими при $Z=1$, как видно из сравнения кривых 7 и 8 на рис. 2, приводит к увеличению величины σ_{ny} на 5%. Сечение σ_y при этом увеличивается менее чем на 0,5%, а σ — не более чем на 1,5%. Для ионов с $Z \geq 10$ такая замена эффективных зарядов в соответствии (12') и (13'') ведет к увеличению сечений σ_y , σ_{ny} и σ на 0,5%.

Проведенный ранее в [1] анализ возможности использования борновского приближения при расчете сечений потери электрона водородоподобными ионами в соударениях с атомами водорода и гелия показал, что для ионов с $Z \leq Z_c$ борновское приближение справедливо при $v \geq 2Zc v_0$, а для ионов $Z > Z_c$ — при $v \geq (0,1-0,2)Zv_0$. Этот вывод остается правильным и в случае столкновения ионов с атомами азота. Экспериментальные данные о сечениях потери электрона водородоподобными частицами в азоте при $v \geq 2Zc v_0 \approx 3 \cdot 10^9$ см/сек имеются только для атомов водорода [12, 13]. Эти сечения отличаются от вычисленных на 20% (см. рис. 1)¹. Разница такого порядка между экспериментальными и вычисленными сечениями может, как известно [14, 17], возникнуть в результате того, что эксперимент выполнен для молекулярного азота, а расчет относится к атомной мишени. Вычисленные сечения для $Z=1$ совпадают с экспериментальными, если эффективные заряды Z_y^* и Z_{ny}^* увеличить на 15%. Сечения с учетом этой поправки при $v > 2Zc v_0$ представлены на рис. 3, б. При этом для ионов с большими Z сечения в соответствии с (12') и (13') почти не изменяются.

В области меньших скоростей известные сейчас экспериментальные сечения для ионов с $Z=1, 2, 3, 5$ и 7 значительно ниже вычисленных (в 4 раза при $v \sim 3v_0$ и в 8—10 раз при $v \sim v_0$). В этой области скоростей более близкие к эксперименту значения сечений должны давать расчет в рамках классической механики [18]. Это подтверждается результатами расчета, представленными на рис. 1 и 3, где для $v > Zv_0$ точными прямыми изображены сечения, даваемые простейшей фор-

¹ Экспериментальные сечения определяются, как правило, с точностью до $\sim 10-15\%$.

мулой, полученной Бором [18] в результате классического рассмотрения рассеяния электронов в сильно экранированном поле атома

$$\sigma = \pi a_0^2 Z_c^{2/3} \frac{v_0}{Zv}. \quad (14)$$

Как в классическом, так и в борновском приближении по мере уменьшения Z , вследствие повышения роли экранировки, величины $Z^4\sigma$ для одних и тех же значений v/Z понижаются (см. рис. 3). Однако классический расчет приводит к значительно более сильному понижению

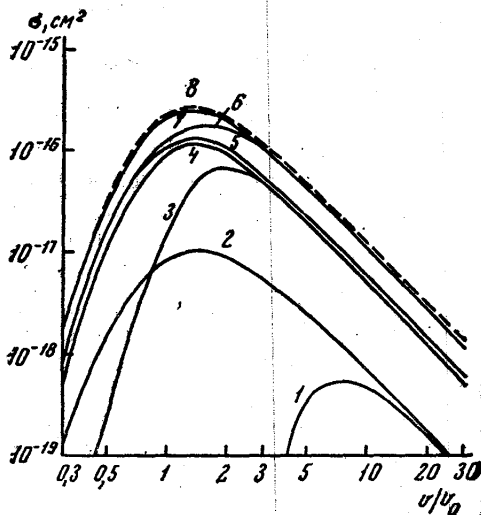


Рис. 2. Сечения σ_{1s} , σ_{2s} , σ_{2p} , σ_{ny} , рассчитанные при $Z_{1s} = 6,688$; $Z_{2s} = 4,5$; $Z_{2p} = 3,54$ и различных значениях u_c^2 в зависимости от v/v_0 : 1 и 2 сечения σ_{1s} при $\bar{u}_{1s}^2 = 29,4$ и $0,73$ соответственно; 3 и 4 — σ_{2s} при $\bar{u}_{2s}^2 = 2,0$ и $0,73$; 5 — σ_{2p} при $\bar{u}_{2p}^2 = 0,73$; 6 — значения σ_{ny} при $\bar{u}_{1s}^2 = 29,4$, $\bar{u}_{2s}^2 = 2,0$, $\bar{u}_{2p}^2 = 0,73$; 7 — σ_{ny} при $\bar{u}_c^2 = 0,73$; пунктирная кривая 8 дает значения σ_{ny} при $Z_{1s} = 6,688$ и $Z_{2s} = Z_{2p} = 3,9$ и $\bar{u}_c^2 = 0,73$

сечений, что соответствует эксперименту. Для ионов с $Z=1, 2, 3$ в области v от Zv_0 до $\sim 2Zv_0$ формула (14) приводит к сечениям, отличающимся от экспериментальных не более чем в 1,5—2 раза. Для ионов с $Z > Z_c^{3/2}$, т. е. для ионов с $Z \gtrsim 5$, формула Бора дает завышенные сечения.

Результаты расчета и имеющиеся экспериментальные данные, как видно из рис. 3, б, дают возможность путем интерполяции между надежными вычисленными и экспериментальными сечениями предсказать с достаточно хорошей точностью сечения потери электрона в азоте для любых водородоподобных частиц в области $v \gtrsim Zv_0$. Предполагаемые

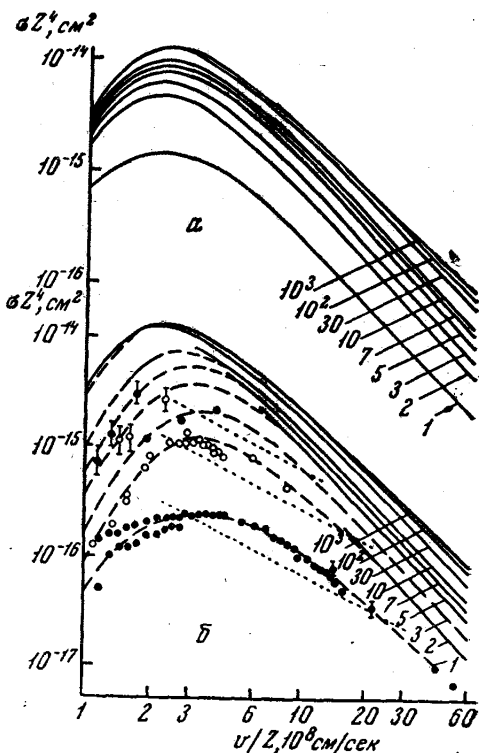


Рис. 3. Значения $Z^4\sigma$ в зависимости от v/Z , а — вычисленные в борновском приближении для случая соударений ионов с атомами азота; б — сплошные линии — результаты тех же расчетов с поправкой для молекулярного азота, пунктирные — результат интерполяции между экспериментальными и вычислительными значениями, точечные прямые — результат расчета по формуле (14)

полуэмпирические величины $Z^4\sigma$ для ионов со значениями $Z=1, 2, 3, 5, 7, 10$ и 30 изображены на рис. 3, б пунктиром. С помощью таких кривых (см. [1]) можно производить оценку сечений потери электрона в азоте и для других ионов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дмитриев И. С., Жилейкин Я. М., Николаев В. С. ЖЭТФ, **49**, 500, 1965.
2. Сенашенко В. С., Николаев В. С., Дмитриев И. С. ЖЭТФ, **54**, 1203, 1968.
3. Мотт М., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., ИЛ, 1951.
4. Хартри Д. Расчеты атомных структур. М., ИЛ, 1960.
5. Adler J., Moiseiwisch B. L. Proc. Phys. Soc., **A70**, 117, 1957.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
7. Moore Ch. Atomic Energy Levels I. Washington, 1949.
8. Ванстра А. Х., Ниик Г. И., Ван-Лишут Р. Таблицы по ядерной спектроскопии. М., Атомиздат, 1960.
9. Slater J. C. Phys. Rev., **36**, 57, 1930.
10. Аллисон С., Гарсиа-Муньос М. Сб. «Атомные и молекулярные процессы», под ред. Д. Бейтса. М., «Мир», 1964, стр. 624.
11. Димов Г. И., Дудинов В. Г. ЖЭТФ, **36**, 1239, 1966.
12. Smith R., Toevs J. W. Phys. Rev., **139A**, 15, 1965.
13. Berkner K. H., Kaplan S. N., Paulikas G. A., Ryle R. V. Phys. Rev., **140A**, 729, 1965.
14. Welsh L. M., Berkner K. H., Kaplan S. N. Phys. Rev., **158**, 85, 1967.
15. Пивовар Л. И., Тубаев В. М., Новиков М. Т. ЖЭТФ, **41**, 26, 1961.
16. Дмитриев И. С., Николаев В. С., Фатеева Л. Н., Теплова Я. А. ЖЭТФ, **42**, 16, 1962.
17. Wittkower A. V., Levy G., Gilbody H. V. Proc. Phys. Soc., **91**, 306, 1967.
18. Бор Н. Прохождение атомных частиц через вещество. М., ИЛ, 1950.

Поступила в редакцию
27.2 1969 г.

НИИЯФ