

А. К. КАМИНСКИЙ, В. С. НИКОЛАЕВ, М. И. ПОПОВА

РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ ПОТЕРИ K -ЭЛЕКТРОНА АТОМОМ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРИЦЕЛЬНОГО ПАРАМЕТРА СТОЛКНОВЕНИЯ С ЯДРОМ

Получено выражение для вероятности $W(x)$ потери K -электрона атомом при столкновении с тяжелой заряженной частицей в зависимости от прицельного параметра x . Вероятность $W(x)$ выражена через борновский матричный элемент M_{if} -перехода электрона в непрерывный спектр. Выполнены численные расчеты $W(x)$, для K -ионизации атомов водорода, серебра и селена протонами, результаты расчетов для атомов Ag и Se согласуются с экспериментальными данными. Предварительные результаты работы сообщались ранее [1, 2].

Использование метода совпадений в физике ионно-атомных столкновений позволило проводить детальное исследование как полных, так и дифференциальных эффективных сечений возбуждения и ионизации. В ряде работ приведены результаты измерения эффективных сечений вырывания электронов из внутренних (K и L) оболочек [3]. В последние годы получены экспериментальные значения вероятности $W(x)$ ионизации в зависимости от прицельного параметра x столкновения [4—6].

Величины вероятности $W(x)$ для процессов ионизации и возбуждения необходимы для теоретических расчетов и интерпретации экспериментальных исследований прохождения заряженных частиц через монокристаллы, в частности, связанных с эффектами каналирования частиц. Исследование зависимости $W(x)$ для ионизации позволяет получить вклад различных прицельных параметров x в эффективное сечение σ процесса при различных относительных скоростях сталкивающихся частиц. Это дает информацию о механизме процесса, необходимую при использовании различных моделей для расчетов эффективных сечений ионизации сложных атомов [7] и сечений кратной ионизации [1, 8].

В [9, 10] был развит квазиклассический метод расчета вероятности $W(x)$ ионизации. Предполагалось, что ионизирующая заряженная частица движется по прямолинейной или гиперболической траектории. Использовалась теория возмущений, зависящих от времени.

В настоящей работе получено выражение для вероятности $W(x)$ вырывания K -электрона ядром без предположения о фиксированной форме траектории ионизирующего ядра. Вероятность $W(x)$ выражена через борновский матричный элемент M_{if} -перехода электрона из связанного состояния в непрерывный спектр.

Ниже приведен вывод выражения для $W(x)$, проведено сравнение с квазиклассическим методом [9] и имеющимися экспериментальными данными.

Вывод выражения для $W(x)$

В качестве исходного выражения выберем формулу первого борновского приближения для эффективного сечения σ вырывания электрона из K -оболочки атома при столкновении с ядром заряда Z_c [11]:

$$\sigma = \frac{16\pi^2 a_0^2 n Z_c^2 M^2 p'}{Z^4 m^2 p} \int_0^{k_{\max}} k^2 dk \int_0^\pi \sin \psi d\psi \int_0^\pi \frac{|M_{if}|^2}{q^2} \sin \theta d\theta. \quad (1)$$

Здесь и далее использованы обозначения: M — приведенная масса сталкивающихся частиц, m — масса электрона, p и p' — импульс налетающего ядра до и после столкновения соответственно, q и k — изменение импульса налетающего ядра и импульс выбитого электрона в атомных единицах, θ — угол рассеяния налетающего ядра, ψ — угол между векторами k и q . Через n обозначено число электронов в K -оболочке до столкновения. Начальное и конечное состояния вырываемого электрона описывались нерелятивистскими кулоновскими волновыми функциями с одним и тем же эффективным зарядом Z^* . Волновая функция атома с двумя электронами в K -оболочке выбиралась в виде произведения двух кулоновских функций. Использование более точных волновых функций приводит к значительному усложнению расчета. Матричный элемент перехода M_{if} в принятых обозначениях имеет вид [12]

$$M_{if} = 2^{3/2} \pi^{-1} e^{\pi i/2k} \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) (1 + q^2 + 2kq \cos \psi + k^2)^{\frac{i}{k} - 2} \times \\ \times (1 + q^2 - k^2 - 2ik)^{-\frac{i}{k} - 1} (k \cos \psi + q - i \cos \psi). \quad (2)$$

Так как массы атомных ядер значительно больше массы электрона, движение сталкивающихся ядер можно описывать квазиклассически в широкой области относительных скоростей v [10, 13]. В квазиклассическом приближении эффективное сечение σ выражается через вероятность $W(x)$:

$$\sigma = 2\pi n \int_0^\infty W(x) x dx. \quad (3)$$

Найдем выражение для $W(x)$ через матричный элемент M_{if} . Так как M_{if} является функцией q , k и ψ и интегрирование по k и q в (1) может быть выполнено только численно, введем $W_k(x)$:

$$W(x) = \int_0^{k_{\max}} k^2 dk \int_0^\pi W_k(x) \sin \psi d\psi. \quad (4)$$

Связь между q и углом рассеяния θ и выражение для k_{\max} в (1) и (4) определяются законами сохранения. Из определения q следует равенство:

$$\frac{\hbar^2 Z^* q^2}{a_0^2} = p^2 + p'^2 - 2pp' \cos \theta. \quad (5)$$

Импульс p' может быть определен из закона сохранения энергии:

$$\frac{p^2}{2M} - \frac{p'^2}{2M} = \frac{k^2 \hbar^2 Z^{*2}}{2ma_0^2} + \frac{\theta m v_0^2 Z^{*2}}{2} \quad (6)$$

Здесь $\theta = 2I/mv_0^2 Z^{*2}$ — параметр внешней экранировки, I — энергия связи удаляемого электрона, $v_0 = e^2/\hbar$. Энергией отдачи ядра и различием приведенных масс до и после столкновения пренебрегаем.

Из (5) и (6) следует:

$$q^2 = \frac{2M^2 s^2}{m^2} \left\{ 1 - \frac{m(k^2 + \theta)}{2Ms^2} - \left[1 - \frac{m(k^2 + \theta)}{Ms^2} \right]^{1/2} \cos \theta \right\}, \quad (7)$$

$$k_{\max} = \left(\frac{Ms^2}{m} - \theta \right)^{1/2}, \quad (8)$$

где $s = v/Z^* v_0$ приведенная скорость, v — скорость налетающего ядра. Запишем (1) в виде

$$\sigma = n \int_0^{k_{\max}} k^2 dk \int_0^\pi \sigma_k \sin \gamma d\gamma, \quad (9)$$

где σ_k — эффективное сечение неупругого рассеяния налетающего ядра на угол θ , при котором из K -оболочки атома мишени вырывается электрон с импульсом \mathbf{k} , направленным под углом γ к вектору передачи импульса \mathbf{q} . Сечение σ_k может быть описано амплитудой рассеяния $f(\theta)$ [14]:

$$\sigma_k = \frac{2\pi p'}{p} \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta, \quad (10)$$

где

$$f(\theta) = \frac{2^{3/2} \pi^{1/2} a_0 Z_c M}{Z^* m q^2} M_{if} \quad (11)$$

(амплитуда $f(\theta)$ является также функцией k и γ , мы опускаем эти аргументы для краткости).

Выразим $W_k(x)$ через $f(\theta)$. Для этого воспользуемся разложением $f(\theta)$ по полиномам Лежандра:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l p_l(\cos \theta), \quad (12)$$

$$f_l = \frac{1}{2} \int_0^\pi f(\theta) p_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (13)$$

тогда [14]

$$\sigma_k = \frac{4\pi p'}{p} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l|^2. \quad (14)$$

При ионизации выбиваемому электрону и ядру атома передается лишь незначительная часть Δp -импульса p налетающего ядра, т. е. $\Delta p \ll p$. Угловое распределение ядер после столкновения имеет, следовательно, очень узкий максимум при $\vartheta \rightarrow 0$, вероятность отклонения на большие углы крайне мала. Поэтому в (12) и (14) существенны лишь большие ($l \sim 10^3$) значения l , и сумму в (14) по l можно заменить интегралом

$$\sigma_k = 4\pi \frac{p'}{p} \int_0^{\infty} |f_l|^2 2l dl. \quad (15)$$

Так как движение ядер можно описывать квазиклассически, то можно принять $l \approx Mvx/\hbar$.

При малых углах ϑ с хорошей точностью выполняется приближенное равенство $p_l(\cos\vartheta) \approx J_0(l\vartheta)$, где $J_0(l\vartheta)$ — функция Бесселя нулевого порядка. Воспользовавшись этим равенством и классическим выражением для l , получим для σ_k выражение

$$\sigma_k = \frac{8\pi M^2 v^2}{\hbar^2} \int_0^{\infty} |f_x|^2 x dx, \quad (16)$$

где

$$f_x = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} f(\vartheta) J_0\left(\frac{Mvx\vartheta}{\hbar}\right) \sin\vartheta d\vartheta. \quad (17)$$

Сравнивая (16) и (3), получим для $W_k(x)$ выражение

$$W_k(x) = \frac{2M^2 v^2}{n\hbar^2} |f_x|^2, \quad (18)$$

определяющее вместе с (4) искомую зависимость $W(x)$ от M_{if} .

Аналогичный анализ эффективного сечения перезарядки был выполнен Шиффом [15].

Отметим, что из (18) не следует, что $W(x)$ пропорциональна M^2 и v^2 , так как явная зависимость $W(x)$ от M компенсируется скоростью осцилляции J_0 в (17), а зависимость $W(x)$ от v также должна определяться с учетом зависимости $|f_x|^2$ от v .

Для ряда приложений представляет интерес вероятность $W(k, x)$ ионизации при прицельном параметре x и фиксированной абсолютной величиной импульса электрона, равная

$$W(k, x) = \int_0^{\pi} W_k(x) \sin^2 \gamma d\gamma. \quad (19)$$

В частности средняя потеря энергии $\bar{\epsilon}_x$ ядра при отрыве K -электрона в столкновении с прицельным параметром x равна:

$$\bar{\epsilon}_x = \int_0^{k_{\max}} \left(I + \frac{k^2 \hbar^2 Z^{*2}}{2ma_0^2} \right) W(k, x) k^2 dk. \quad (20)$$

Вероятность $W(x)$ при заданном θ пропорциональна Z_c^2/Z^{*2} , зависимость $W(x)$ от θ является сложной. Для оценок $W(x)$ вырывания K -электрона из любого атома ядром удобно ввести приведенные величины

$$y = \frac{Z^*x}{a_0}, \quad W_0(y) = \frac{Z^{*2}}{Z_c^2} W\left(\frac{Z^*x}{a_0}\right) \quad (21)$$

и записать (2) в виде

$$\sigma = \frac{2\pi a_0^2 Z_c^2}{Z^{*4}} \int_0^\infty W_0(y) y dy. \quad (22)$$

Приведенная вероятность $W_0(y)$ определяется заданием параметров s и θ и не зависит от Z_c и Z^* . Формулы (21) и (22) позволяют получить оценки $W(x)$ и σ для любой пары сталкивающихся частиц при θ , близком к 1, взяв в качестве $W_0(y)$ вероятность ионизации $W(x)$ атома водорода протоном.

Сравним полученное выше выражение для $W(x)$ с квазиклассическим расчетом [9].

В формулах [9] состояние вылетевшего электрона описывается волновой функцией Ψ_f с фиксированным значением энергии E_f , момента количества движения l_1 и его проекции m_1 . Для фиксированного состояния f вероятность $W_f(x)$ из формул (11) и (3, 3), (3, 4) работы [9] следует выражение

$$W_f(x) = \frac{4Z_c^2 a_0^2}{v^2} |M_x|^2, \quad (23)$$

где

$$M_x = \int \Psi_f \Psi_f^* e^{iq_0 \rho} K_0(q_0 \rho) d\xi d\eta d\zeta, \quad (24)$$

$$\rho^2 = \xi^2 + (x - \eta)^2. \quad (25)$$

Здесь ξ, η, ζ — координаты вырываемого электрона, q_0 — минимальное значение передачи импульса при столкновении, $K_0(q_0 \rho)$ — модифицированная функция Бесселя III рода нулевого порядка. Для вычисления $W(x)$ выражение для $W_f(x)$ надо проинтегрировать по E_f и просуммировать по l_1 и m_1 .

Эквивалентность первого борновского приближения квазиклассическому расчету [9] по теории возмущений, зависящих от времени, с прямолинейными траекториями ионизирующей частицы отмечалась ранее [9, 16, 17]. Однако в каждом из этих методов есть возможность вычисления различных поправок, например, учет искривления траектории тяжелой частицы в квазиклассическом расчете [9] или учет взаимодействия электрона с двумя ядрами в конечном состоянии в квантовом расчете [12]. При этом часто бывает трудно сопоставить эти расчеты друг с другом, сравнить роль различных поправок [13]. Полученное выше выражение $W(x)$ через M_{if} устраняет эту трудность.

По сравнению с методом [9] наше выражение для $W(x)$ требует менее трудоемких расчетов из-за отсутствия суммирования по l_1 и m_1 . Лишь для малых скоростей $s \leq 0,2$, когда в бесконечной сумме по l_1 и m_1 в [9] можно ограничиться одним членом с $l_1 = 0$ в [9], получено простое выражение, сводящееся к однократному интегралу по E_f (см. (3.12) в [9]).

Обсуждение результатов расчета

На рис. 1 приведены результаты расчета $W(x)$ для ионизации атомов водорода протонами, являющееся также приведенной $W_0(y)$ при $\theta=1$. Отметим ряд характерных свойств $W(x)$. При любых начальных скоростях S ионизирующего ядра $W(x)$ приблизительно экспоненциально убывает с ростом прицельного параметра. Существенно, что для любого ионизируемого атома лишь при $S=1$ показатель этой экспоненты совпа-

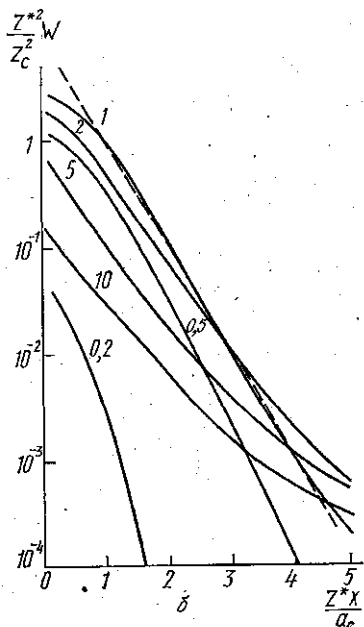


Рис. 1. Вероятность $W(x)$ ионизации атома водорода протоном и приведенная вероятность (21) для $\theta=1$. Значения приведенной скорости s указаны над кривыми. Пунктиром дано распределение электронной плотности для K -электронов

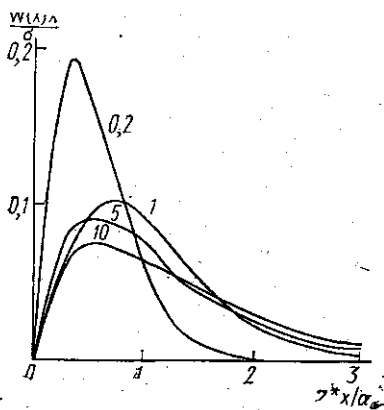


Рис. 2. Относительный вклад $xW(x)/\sigma$ различных параметров в эффективное сечение вырывания K -электрона ядром. Значения s указаны над кривыми, σ — в единицах 10^{-16} см², x — в единицах a_0/Z^*

дает с показателем экспоненты, описывающей распределение электронной плотности в атоме $\rho(r) \sim \exp(-2z^*r/a_0)$. Крутизна кривых $W(x)$ монотонно уменьшается с ростом s , что соответствует росту вклада далеких столкновений в эффективное сечение ионизации.

На рис. 2 приведена величина $W(x) \cdot x/\sigma$, описывающая относительный вклад в эффективное сечение σ ионизации различных прицельных параметров x при $\theta=1$. При $\theta \neq 1$ кривые сдвигаются и деформируются, но их качественный вид остается прежним. Видно, что при малых приведенных скоростях $s < 1$ ионизация происходит в основном при $x < a_0/Z^*$, т. е. при проникновении ионизирующего ядра внутрь K -оболочки. Так, при $s=0,2$ вклад прицельных параметров $x < a_0/Z^*$ в эффективное сечение σ ионизации составляет 90%, а оставшиеся 10% соответствуют значениям $x < 2a_0/Z^*$. При $S \geq 1$ значительная часть сечения σ обусловлена большими прицельными параметрами $x > a_0/Z^*$ (около 40% при $S=1$, 50% при $S=5$ и 55% при $S=10$). С ростом s возрастает вклад

прицельных параметров $x > 2a_0/Z^*$ от 5% при $s=1$ до 10% при $s=5$ и 20% при $s=10$.

В области прицельных параметров $x < 2a_0/Z^*$, дающих основной вклад в σ во всей рассматриваемой нами области скоростей $s \leq 10$, вероятность $W(x)$ вырывания K -электрона из любого атома достигает максимальной величины при $s=1$ и убывает как и при увеличении, так и при уменьшении s . При $s=1$ максимальное значение $W(x)$ для ионизации атомов He и H протонами равно 0,75 и 2,1 соответственно.

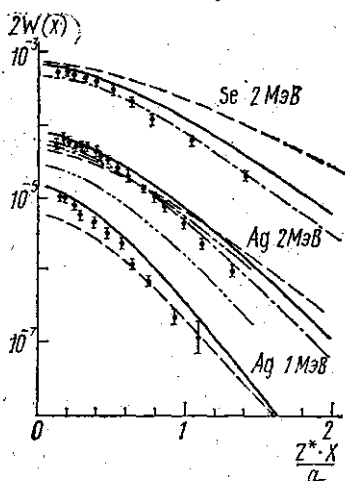


Рис. 3. Теоретические и экспериментальные [4] значения $2W(x)$ для потери K -электрона атома Ag и Se при столкновении с протонами. Ионизируемые атомы и энергии протонов указаны над кривыми и точками. Сплошные кривые — наш расчет с $z^* = z - 0,3$ и $\theta \neq 1$, соответствующими энергии связи электрона, пунктирные — расчет по формуле (3.12) из [9]. Для $E=2$ МэВ нанесены также результаты нашего расчета с $\theta=1$. Кривые — соответствуют $z^*=41,87$ для Ag и $z^*=30,6$ для Se, кривая — — — $z^*=z-0,3$ для Ag. Кривая — — — — данные из табл. 3 [11]

Ранее отмечалось [18], что расчеты $W(x)$ для возбуждения и ионизации должны давать численное совпадение с экспериментом при $W_{\max} \leq 0,1$. Для вычисления полных сечений возбуждения примем $W(x) = 0,5$ для всех x , где вычисленное значение $W(x) > 0,5$. Расчет показывает, что при $s=1$ такое срезание $W(x)$ ионизации на уровне 0,5 приводит к уменьшению борновского полного сечения ионизации атома водорода протоном в 1,4 раза, α -частицей в 4 раза, атома He α -частицей в 2,5 раза. Сравнение с экспериментом указывает, что при $s \approx 2$ это уменьшение является слишком сильным, лучшее согласие дает срезание на уровне $W_{\max} = 1$.

Для сравнения с имеющимися в литературе [4] экспериментальными данными нами были вычислены значения $W(x)$ для ионизации атомов Ag и Se протонами с энергией 2 МэВ и атомов Ag протонами с энергией 1 МэВ (рис. 3). Экспериментальные значения $W(x)$ в [4] нормированы на атом (удвоены из-за наличия двух K -электронов в атоме), поэтому на рис. 3 даны удвоенные теоретические значения $W(x)$. Во всех формулах и на всех остальных рисунках значения $W(x)$ нормированы на 1 электрон. Наш расчет $W(x)$ для ионизации атомов Se и Ag со значениями параметров $Z^* = Z - 0,3$, $\theta = 2 / (m_0 v^2 Z^*)$ хорошо согласуется с экспериментальными данными при малых прицельных параметрах $x < 0,6 a_0 / Z^*$, дающих основной вклад в σ для значений $S < 0,3$, соответствующих эксперименту [4]. При $x > 0,6 a_0 / Z^*$ экспериментальные значения $W(x)$ сильнее убывают с ростом x .

Для иллюстрации зависимости $W(x)$ от выбора Z^* и θ мы провели также расчеты с другими значениями этих параметров для атомов Ag и Se при $E=2$ МэВ. На рис. 3 штрихпунктирными кривыми представлены результаты расчета с $\theta=1$ и значениями Z^* , соответствующими

энергии связи K -электрона в атомах ($Z^* = 41,87$ для Ag и $Z^* = 30,5$ для Se). Видно, что кривые согласуются с экспериментальными данными. Это иллюстрирует точность, с которой можно проводить оценки $W(x)$ путем масштабных преобразований (21). Чувствительность $W(x)$ к выбору θ при фиксированном значении Z^* иллюстрируется расчетом $W(x)$ с $\theta = 1$ и $Z^* = Z - 0,3$ для Ag при $E = 2$ МэВ. Соответствующая кривая (— · — · —) дает значения $W(x)$ примерно в 2 раза ниже экспериментальных из-за неверного значения энергии связи вырываемого электрона.

На рис. 3 нанесены также результаты расчета $W(x)$ по формуле (3.12) из [9], учитывающей лишь S -волну в конечном состоянии (параметры Z^* и θ соответствуют сплошным кривым). Наклон соответствующих кривых меньше, чем это следует из экспериментальных данных и наших расчетов. По-видимому, учет следующих членов в разложении по l_1, m_1 улучшит согласие с экспериментом, как следует из кривой (2), построенной по данным табл. 3 из [10].

В то же время вычисленные величины $W(x)$ для вырывания K -электрона из атома Си ядрами кислорода передают лишь форму кривой $W(x)$, превышая экспериментальные значения [6] примерно в 6 раз.

ЛИТЕРАТУРА

1. Каминский А. К., Николаев В. С. У ВКЭАС. Тезисы докладов. Ужгород, 1972 г., стр. 69.
2. Kaminsky A. K., Nikolaev V. S., Popova M. I. «Phys. Lett.», 1975, 53A, 419.
3. Burch D. VIII ICPEAC Invited Lectures and Progress Report. Beograd, 1973.
4. Laegsgaard E., Andersen J. U., Feldman L. C. «Phys. Rev. Lett.», 1972, 29, 1206.
5. Brandt W., Jones K. W., Kramer H. W. «Phys. Rev. Lett.», 1973, 30, 351.
6. Cocke C. L., Randall R. «Phys. Rev. Lett.», 1973, 30, 1016.
7. Salop A. «Phys. Rev.», 1973, A8, 3032.
8. Hansteen J. M., Mosebekk O. P. «Phys. Rev. Lett.», 1972, 29, 1361.
9. Bang J., Hansteen J. M. «Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.», 1959, 31, N 13.
10. Hansteen J. M., Mosebekk O. P. «Nucl. Phys.», 1973, A201, 541.
11. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., 1969, с. 444.
12. Masek J. «Phys. Rev.», 1970, A1, 235.
13. Mc Carrol R., Salin A. «J. Phys.», 1968, B1, 163.
14. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1963, с. 634.
15. Schiff H. «Can. Journ. Phys.», 1954, 32, 393.
16. Crothers D. S., Holt A. R. «Proc. Phys. Soc.», 1966, 88, 75.
17. Arthurs A. M. «Proc. Camb. Phil. Soc.», 1961, 57, 904.
18. Атомные и молекулярные процессы. Под ред. Д. Бейтса. М., 1964, с. 507.

Поступила в редакцию
28.6 1974 г.
после переработки
6.7 1976 г.

НИИЯФ

14 мес.