



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 263 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Четверушкин Б.Н., Гасилов В.А.,
Жуковский М.Е., Захаров В.С.,
Марков М.Б.

Расчет сечений электронной
столкновительной
ионизации атомов и ионов
азота и кислорода по
модели Хартри-Фока-
Слэтера

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Расчет сечений электронной столкновительной ионизации атомов и ионов азота и кислорода по модели Хартри-Фока-Слэтера / Б.Н.Четверушкин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 263. 23 с. doi:[10.20948/prepr-2018-263](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-263)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-263>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**Б.Н. Четверушкин, В.А. Гасилов, М.Е. Жуковский,
В.С. Захаров, М.Б. Марков**

**Расчет сечений электронной
столкновительной ионизации
атомов и ионов азота и кислорода
по модели Хартри-Фока-Слэтера**

Москва — 2018

Четверушкин Б.Н., Гасилов В.А., Жуковский М.Е., Захаров В.С., Марков М.Б.

Расчет сечений электронной столкновительной ионизации атомов и ионов азота и кислорода по модели Хартри-Фока-Слэтера

Представлен прямой расчет дифференциальных и полных сечений процессов неупругой ионизации атомов и ионов электронным ударом в приближении искаженных волн на основе характеристик состояния атомов и ионов, получаемых в квантово-статистической модели Хартри-Фока-Слэтера. Полученные сечения ионизации сравниваются с результатами расчетов в приближении бинарных соударений и в квазиклассическом импульсном приближении, а также с доступными экспериментальными данными. Результаты расчетов показывают, что предложенный метод дает надежные результаты. В сочетании с применимостью модели Хартри-Фока-Слэтера в большом диапазоне температур и плотностей это позволяет использовать его в широком интервале энергий и зарядов ионов.

Ключевые слова: столкновительная ионизация, сечения атомных процессов, приближение искаженных волн, квантово-статистические модели плазмы

Boris Nikolaevich Chetverushkin, Vladimir Anatolievich Gasilov, Vasily Sergeevich Zakharov, Mikhail Evgenievich Zhukovskiy, Mikhail Borisovich Markov

Computation of electron collisional ionization cross-sections of nitrogen and oxygen atoms and ions on Hartree-Fock-Slater model basis

The direct calculation of the differential and total cross sections of the processes of inelastic ionization of atoms and ions by electron impact in the distorted-wave approximation based on the characteristics of the state of atoms and ions obtained in the Hartree-Fock-Slater quantum-statistical model is presented. Calculated differential and total ionization cross-sections are compared to classical binary-encounter approximation, semiclassical impulse approximation and available experimental data. Results of calculations point to the computational approach proposed gives consistent results. Considering applicability of Hartree-Fock-Slater model in wide scope of temperatures and densities, such approach to the electron ionization cross-section calculation can be used in a broad range of energies and ion charges.

Работа выполнена при поддержке Президиума Российской академии наук, программа №56.

Key words: impact ionization, cross-sections, distorted wave approximation, quantum-statistical models of plasma

Введение

Нагрев и динамика плазмы под действием электромагнитного излучения в значительной степени определяются эффектами ионизации, возбуждения и излучения. Скорости этих процессов определяют ионизационный состав плазмы, распределение ионов по уровням ионизации и энергиям возбуждения и, в конечном счете, эмиссионную способность и спектральные характеристики. Атомные процессы отличаются разнообразием за счет сложного взаимодействия свободных и связанных электронов. Благодаря относительно высокой скорости электронов электрон-ионные или электрон-атомные столкновения преобладают над столкновениями тяжелых частиц даже в слабоионизованном газе. Для моделирования этих и других видов неравновесной плазмы необходимы данные о сечениях и скоростях атомных процессов.

Примером плазменного образования, нагрев которого электромагнитным излучением представляет практический интерес, является шлейф ионизованного воздуха в окрестности космического аппарата [1], спускаемого с орбиты на поверхность Земли. Торможение аппарата сопровождается нагревом и температурной ионизацией воздуха [2]. В результате образуется газо-плазменное образование, включающее нейтральные молекулы, ионы и свободные электроны. Степень ионизации образования зависит от скорости и конструкции аппарата. Ионизованная среда влияет на распространение электромагнитного излучения и вносит помехи в каналы радиосвязи. Электромагнитные сигналы, принимаемые антенно-фидерными устройствами аппарата, просто искажаются ионизованной средой. Сигналы, передаваемые аппаратом, имеют существенно более высокую амплитуду, поэтому не только искажаются плазменным образованием, но и дополнительно его ионизируют. Электроны плазмы под действием электрического поля ускоряются и приобретают энергию, достаточную для ионизации молекул воздуха [3]. Математическое моделирование данного процесса на основе кинетических уравнений для свободных электронов плазмы требует рассмотрения столкновений. При этом имеют место столкновения не только с нейтральными молекулами, но и с ионами. Количественное описание этих процессов требует надежных данных о сечениях столкновений, особенно ударной ионизации.

Надежное вычисление сечений ионов и скоростей атомных процессов в широком диапазоне температур и плотностей требует применения квантово-статистических подходов, например, модели самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) [4, 5]. В модели ХФС используются самосогласованное поле Хартри и приближение локального обмена, уточняющее обменный потенциал Слэтера. В результате решения уравнения Шредингера с полученным самосогласованным потенциалом может быть найдена энергетическая структура атома или иона, соответствующие волновые функции, а также средние числа заполнения и средний заряд.

В данной работе получаемые в модели ХФС характеристики состояния атомов и ионов используются для прямого расчета сечений столкновительных процессов ионизации. Потенциал и волновые функции электронов дискретного и непрерывного спектра, рассчитанные по модели Хартри-Фока-Слэтера, используются для вычисления дифференциальных и полных сечений столкновительной ионизации в приближении искаженных волн. Получаемые сечения процессов ионизации хорошо соответствуют доступным экспериментальным результатам. Универсальность модели самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера в широком диапазоне плотностей, температур и большом наборе атомных элементов позволяет распространить это свойство на предложенную методику расчета сечений атомных процессов.

Всюду ниже в выражениях используются атомные единицы, если не указано иное. На рисунках для дифференциальных и полных сечений по умолчанию используются единицы $\pi a_0^2 / \text{Hartree}$ и πa_0^2 соответственно.

1 Аналитические и эмпирические формулы расчета сечений ионизации

Теоретическое описание столкновительной ионизации является намного более сложным по сравнению с процессом столкновительного возбуждения связанных электронов из-за присутствия двух свободных частиц в результате процесса взаимодействия.

Первой значимой работой по теории ионизации атомов электронным ударом является работа Томсона на основе нерелятивистской классической механики [6, 7]. Томсон вывел выражение для расчета дифференциального сечения ионизации, исходя из предположения, что ионизируемый электрон находится в покое:

$$\frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} = \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^2}, \quad (1)$$

где ε – энергия налетающего электрона, ε^* – энергия ионизованного электрона, ε^i – энергия ионизации атома (иона) с необходимого электронного уровня (подоболочки), a_0 – боровский радиус. В системе центра масс дифференциальное сечение Томсона схоже с сечением рассеяния частиц, получаемым по формуле Резерфорда, а формула (1) получается при смене системы отсчета на лабораторную, в которой ионизируемый электрон перед столкновением находится в покое.

Для получения сечения ионизации необходимо проинтегрировать дифференциальное сечение ионизации (1) по всему диапазону значений энергии ионизованного электрона:

$$\sigma^{ion} = \int_0^{\varepsilon - \varepsilon^i} \frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^* = \pi a_0^2 \frac{\varepsilon - \varepsilon^i}{\varepsilon^2 \varepsilon^i}. \quad (2)$$

Следующим шагом в развитии теории столкновений было предположение, что ионизируемый электрон равномерно движется с некоторой кинетической энергией ε^k . Отсюда получается выражение для дифференциального сечения ионизации по классической модели бинарных столкновений (приближение бинарных соударений) [8]:

$$\frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} = \begin{cases} \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon} \left(\frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^2} + \frac{4\varepsilon^k}{3(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^3} \right) & (\varepsilon^* \leq \varepsilon - \varepsilon^i - \varepsilon^k), \\ \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon} \left(\frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^2} + \frac{4(\varepsilon - \varepsilon^* - \varepsilon^i)}{3(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^3} \right) \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon^* - \varepsilon^i}{\varepsilon^k} \right)^{1/2} & (\varepsilon^* > \varepsilon - \varepsilon^i - \varepsilon^k). \end{cases} \quad (3)$$

Кинетическая энергия ε^k ионизируемого электрона соответствует средней кинетической энергии связанного атомного электрона на соответствующей электронной оболочке (уровне).

Однако получаемые по формулам (1)-(3) дифференциальные и полные сечения ионизации не согласуются с теорией Бете по зависимости от энергии электрона [9, 10]. В поисках лучшего соответствия была предложена следующая формула для сечения ионизации:

$$\sigma^{ion} = \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon^2} \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon^i}{\varepsilon + \varepsilon^i} \right)^{3/2} \left[1 + \left(\frac{2}{3} - \frac{2\varepsilon^i}{6\varepsilon} \right) \ln \left(2.7 + \sqrt{\frac{\varepsilon - \varepsilon^i}{\varepsilon^i}} \right) \right]. \quad (4)$$

Выражение (4) можно получить, полагая, что ионизируемый атомный электрон движется со средней скоростью \bar{v} , а сама функция распределения скорости имеет вид:

$$f(v) = \left(\frac{\bar{v}}{v} \right)^3 \exp \left(-\frac{v}{\bar{v}} \right). \quad (5)$$

Данное распределение по скоростям введено искусственно для получения логарифмической зависимости. Тем не менее, это позволяет добиться серьезного улучшения в поведении сечений с ростом энергии налетающего электрона по сравнению с формулой Томсона (2), и полуэмпирическое выражение (4) использовалось и продолжает широко использоваться для быстрой оценки сечений.

Дифференциальные и полные сечения ионизации, рассчитываемые по формулам (1)-(4), сильно отличаются от значений, получаемых в результате экспериментальных измерений и детальных расчетов по квантово-механическим моделям. Для правильного соответствия классической теории необходим учет некоторых особенностей из квантовой физики. Одной из основных таких особенностей является неразличимость сталкивающихся частиц, т.е. необходим учет обменных эффектов. Попытка учета обмена приводит к следующему выражению [11]:

$$\frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} = \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon} \left(\frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^2} + \frac{1}{\varepsilon'^2} - \frac{1}{\varepsilon'(\varepsilon^* + \varepsilon^i)} \cos \left(\sqrt{\frac{\text{Hartree}}{\varepsilon}} \ln \left[\frac{\varepsilon^* + \varepsilon^i}{\varepsilon'} \right] \right) \right), \quad (6)$$

где ε' – энергия рассеянного электрона (налетающего электрона после столкновения). Так же как и (1), формула (6) описывает систему, в которой ионизуемый электрон первоначально находится в покое. Второй и третий члены выражения в скобках введены для учета обменного и интерференционного эффектов. Приведенное выражение «симметрично» относительно энергий $\varepsilon^* + \varepsilon^i$ и $\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon^* - \varepsilon^i$, что в некоторой степени отражает неразличимость двух электронов. Однако конечные энергии обоих электронов ε^* и ε' , поэтому формула (6) по-прежнему не совсем правильно передает зависимость дифференциального сечения от энергии ионизованного электрона.

Для установления симметрии при обменном эффекте необходимо учесть взаимодействие налетающего электрона с ядром атома или иона. Справедливо считать, что налетающая частица приобретает некоторую кинетическую энергию величиной порядка потенциальной энергии ионизуемого электрона и теряет эквивалентное количество потенциальной энергии. Вводимая таким образом поправка улучшает соответствие расчетных сечений экспериментально наблюдаемым данным и сложным квантовомеханическим расчетам, особенно в районе максимальных значений сечения. Получаемое в конечном счете выражение для вычисления дифференциального сечения является т.н. квазиклассическим импульсным приближением [12, 13]:

$$\frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} = \frac{\pi a_0^2}{\varepsilon + \varepsilon^i + \varepsilon^k} \left(\frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^2} + \frac{1}{(\varepsilon' + \varepsilon^i)^2} + \frac{4}{3} \varepsilon^k \left[\frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)^3} + \frac{1}{(\varepsilon' + \varepsilon^i)^3} \right] - \frac{1}{(\varepsilon^* + \varepsilon^i)(\varepsilon' + \varepsilon^i)} \cos \left(\sqrt{\frac{\text{Hartree}}{2(\varepsilon + \varepsilon^i)}} \ln \left[\frac{\varepsilon^* + \varepsilon^i}{\varepsilon' + \varepsilon^i} \right] \right) \right). \quad (7)$$

Поскольку выражение (7) учитывает обмен электронов, для определения полного сечения ионизации получаемые дифференциальные сечения необходимо проинтегрировать на полуинтервале диапазона энергий вылетающих частиц:

$$\sigma^{ion} = \int_0^{(\varepsilon - \varepsilon^i)/2} \frac{d\sigma^{ion}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*. \quad (8)$$

Квазиклассическое импульсное приближение и прочие приведенные модели полезны и часто применяются для быстрого расчета сечений. Они также могут быть использованы для разработки полуэмпирических выражений с подгоночными коэффициентами. Однако их точность недостаточна для полноценного практического применения. Это связано с тем, что они дают большую погрешность при околопороговых энергиях. Также эти приближения не позволяют воспроизвести правильное поведение сечений при больших энергиях частиц согласно теории Бете. Более качественные результаты можно получить только при применении квантово-статистических методов.

2 Приближение искаженных волн

Столкновительные процессы возбуждения и ионизации атомов и ионов электронами не имеют точного аналитического решения, т.к. относятся к разряду задач теории многих тел. Для расчета сечений этих процессов по квантово-механическим моделям используется соответствующая теория возмущений. В качестве малого возмущения можно рассматривать взаимодействие налетающего электрона с электронами, связанными в ионе. Это взаимодействие мало по сравнению со взаимодействием налетающего или связанных электронов с потенциальным полем иона.

В квантово-механической теории возмущений сечения электрон-ионных столкновительных процессов зависят от матричных элементов взаимодействия. При расчетах такие матричные элементы вычисляются различными методами с использованием волновых функций электронов дискретного и непрерывного спектров через силы осцилляторов и интегралы Слэтера.

В первом порядке теории возмущений универсальным и наиболее общим для вычисления сечений электрон-ионных столкновительных процессов в плазме является метод искаженных волн и его модификации [1, 14]. В методе искаженных волн волновая функция сталкивающегося электрона является не плоской волной, а учитывается, что на движение свободного электрона оказывает влияние поле иона. Волновая функция электрона является решением уравнения Шредингера в поле иона с учетом взаимодействия по модели Хартри-Фока-Слэтера. Как правило, используется одноэлектронное приближение в центрально-симметричном поле. После усреднения по моментам в приближении LS -связи выражение для дифференциального сечения ионизации электронным ударом с переходом иона из состояния \mathcal{Y}_0 в состояние \mathcal{Y} (с ионизацией электрона с квантовыми числами n, ℓ в непрерывный спектр с энергией ε^* и моментом λ^*) представляется в виде [14, 15]:

$$d\sigma_{\gamma_0\gamma}^{ion} = \sum_{\kappa} [d\sigma'_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) + d\sigma''_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*)] = N_{nl} d\sigma_{\gamma_0\gamma}, \quad (9)$$

где $d\sigma'_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*)$ и $d\sigma''_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*)$ – дифференциальные сечения, причем $d\sigma'_{\kappa}$ включает прямую и интерференционную части сечения, а $d\sigma''_{\kappa}$ – обменную часть:

$$d\sigma'_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) = \frac{4\pi^3 a_0^2}{(2\ell + 1)k^2} \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\kappa}^d (P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e) d\varepsilon^*, \quad (10)$$

$$d\sigma''_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) = \frac{4\pi^3 a_0^2}{(2\ell + 1)k^2} \sum_{\lambda, \lambda'} (\sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e)^2 d\varepsilon^*, \quad (11)$$

где $k = (2\varepsilon)^{1/2}$ – импульс налетающего электрона; ε , ε' и λ , λ' – энергии и орбитальные моменты этого электрона до и после столкновения, P_{κ}^d и $P_{\kappa'\kappa}^e$ – так называемые прямые и обменные радиальные интегралы, которые выражаются через интегралы Слэтера с использованием $3jm$ и $6j$ символов Вигнера [16]:

$$P_{\kappa}^d = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)}{2\kappa + 1}} \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times R_{nl, \varepsilon^* \lambda^*; \varepsilon \lambda, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa)}, \quad (12)$$

$$P_{\kappa'\kappa}^e = (-1)^{\kappa + \kappa'} \sqrt{(2\kappa + 1)(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \lambda^* \end{Bmatrix} R_{\varepsilon \lambda, \varepsilon^* \lambda^*; nl, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa')}. \quad (13)$$

Здесь $R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)}$ – интеграл Слэтера:

$$R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)} = \iint R_{\alpha}(r') R_{\beta}(r') \frac{r_{<}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} R_{\gamma}(r'') R_{\delta}(r'') dr' dr'',$$

где $R_{\alpha}(r)$, $R_{\beta}(r)$, $R_{\gamma}(r)$, $R_{\delta}(r)$ – радиальные части одноэлектронных волновых функций дискретного и непрерывного спектра, $r_{<} = \min(r', r'')$, $r_{>} = \max(r', r'')$.

Для вычисления эффективного сечения ионизации электрона с квантовыми числами $n\ell$ необходимо просуммировать полученные дифференциальные сечения (9) по моментам λ^* и проинтегрировать по энергиям ε^* ионизованного электрона:

$$\sigma_{\gamma_0\gamma} = \sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon - \varepsilon^i} \frac{d\sigma_{\gamma_0\gamma}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*, \quad (14)$$

где ε^i – энергия ионизации атома (иона) с уровня $n\ell$ ($\varepsilon^i \approx -\varepsilon_{n\ell}$).

Для вычисления сечений столкновительной ионизации необходимо иметь следующие характеристики атома: волновые функции электронов, уровни энергии и населенности уровней. Последние, помимо явного включения, также могут быть получены на основе модели среднего атома (иона), когда ион со средними числами заполнения рассматривается в электронейтральной сферической атомной ячейке. Взаимодействие между электронами в ионе учитывается в модели самосогласованного поля. Модель самосогласованного поля состоит в том, что для приближенного описания системы можно ввести волновые функции для каждой частицы. При этом взаимодействие с другими частицами приближенно учитывается введением поля, усредненного по движению остальных частиц системы с помощью их одночастичных волновых функций. Одночастичные волновые функции должны быть согласованными в том смысле, что, с одной стороны, они являются решением уравнения Шредингера для одной частицы, движущейся в среднем поле, создаваемом другими частицами, а с другой – эти же одночастичные волновые функции определяют средний потенциал поля, в котором движутся частицы. Модель Хартри-Фока-Слэтера, уравнения и способы их решения подробно описаны в [4, 15].

Учет интерференционных и обменных эффектов существенно меняет поведение дифференциальных сечений (1). При неучете обмена дифференциальное сечение неупругого рассеяния падающего электрона с энергией ε^* вычисляется на всем диапазоне возможных энергий рассеянного электрона $[0, \varepsilon^* - \varepsilon^i]$, т.е. не принимается во внимание «неразличимость» рассеянного и ионизованного электронов. В таком случае при расчете полного сечения ионизации по формуле (14) необходимо проводить интегрирование по всему диапазону $[0, \varepsilon^* - \varepsilon^i]$. Получаемое таким образом сечение оказывается сильно завышенным относительно экспериментальных данных. Это связано с интерференцией между падающей и рассеянной волнами. Интерференционные эффекты приводят к существенному снижению дифференциального сечения, а следовательно, и полного сечения ионизации, особенно при малых энергиях электронов. Таким образом, учет интерференционного и обменного эффектов крайне важен при расчете сечений неупругих процессов.

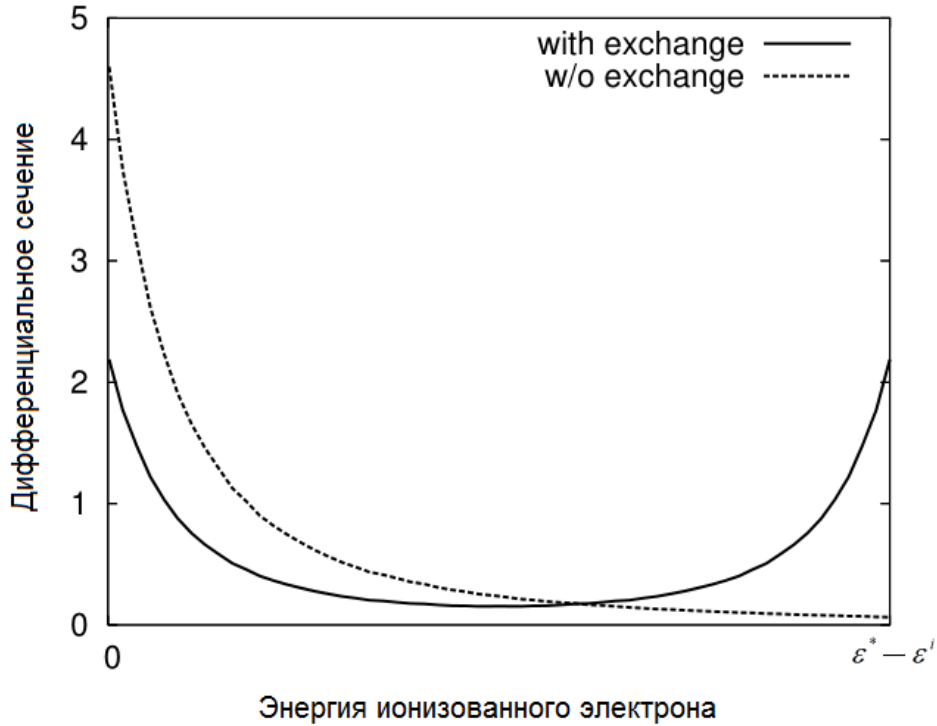


Рис. 1. Зависимость дифференциального сечения ионизации от энергии ионизованного (выбитого электрона) с учетом (with exchange) и без учета (w/o exchange) интерференционного и обменного членов в приближении искаженных волн

Диапазон значений κ и κ' , по которым производится суммирование прямых и обменных интегралов в (9), (10) и (11) соответственно, определяется отличием от нуля соответствующих символов Вигнера в (12) и (13). Что же касается максимальных значений орбитальных чисел λ^* , λ и λ' , по которым проводится суммирование в (10), (11) и (14), то их значения ограничены условием существования классической области движения внутри атомной ячейки для свободного электрона с энергией ε , то есть условием

$$2\varepsilon + 2V(r_0) - \frac{\lambda_{max}(\lambda_{max} + 1/2)}{r_0^2} > 0,$$

где $r_0 = 1.388(A/\rho)^{1/3}$ – радиус атомной ячейки, ρ – плотность плазмы в г/см³, A – атомный вес. Таким образом, можно видеть, что значение λ_{max} не ограничено сверху и при больших значениях энергии электронов может достигать величин, абсолютно неприемлемых для расчетов даже на суперкомпьютере. С другой стороны, в расчетах далеко не всегда следует проводить суммирование до значений $\lambda = \lambda_{max}$, принимая во внимание, что при увеличении энергии рассеянного электрона вклад P_{κ}^d и $P_{\kappa\kappa}^e$ снижается с ростом λ .

Как можно видеть, при вычислении сечений ионизации присутствует суммирование по моментам и интегрирование по энергиям электронов, что усложняет расчеты. Поскольку с ростом энергии электронов частота осцилляций волновых функций растет, интегрирование таких сильно осциллирующих функций представляет дополнительные вычислительные сложности. Как правило, для повышения эффективности счета используются сетки, динамически меняющиеся с ростом энергий взаимодействующих частиц. Однако бесконечное увеличение детализации сеток невозможно, и с ростом энергий электронов, в ряде случаев, когда необходимо получить только значения полных сечений, без данных о дифференциальных сечениях, разумно использовать вышеприведенные аналитические выражения или известную асимптотику для сечений ионизации [2]:

$$\sigma_{\gamma\gamma} \cong \frac{\ln(\varepsilon / \varepsilon^i)}{\varepsilon}. \quad (15)$$

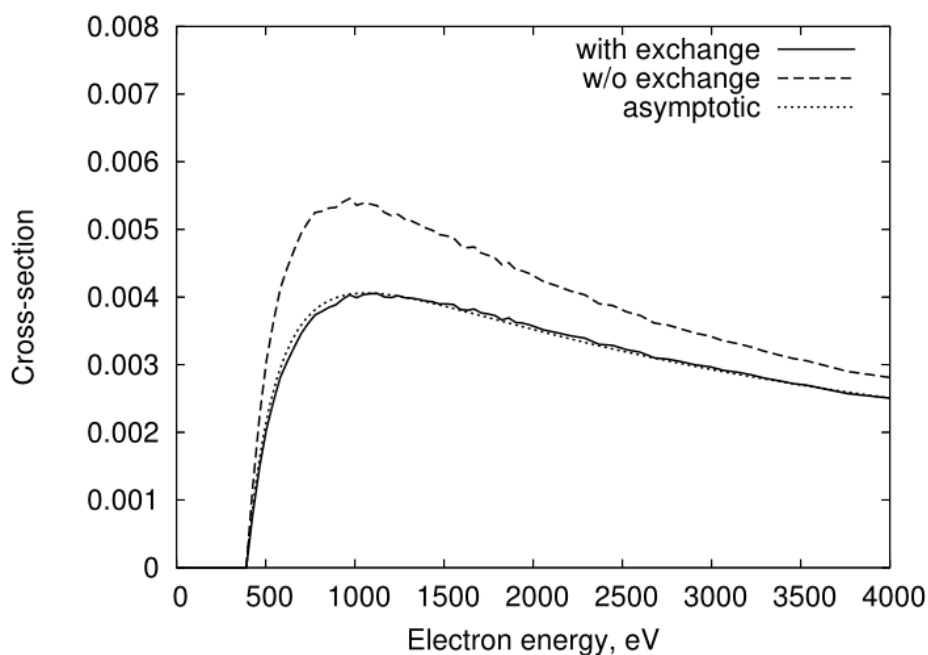


Рис. 2. Расчет сечения ионизации методом искаженных волн в потенциале ХФС с учетом обменного члена (with exchange), без учета (w/o exchange) и с использованием асимптотики (asymptotic)

В ряде случаев асимптотика (15) достаточно хорошо описывает поведение сечения с учетом интерференционных и обменных эффектов не только при больших энергиях налетающего электрона, но также в окрестностях максимальных значений сечения (т.е. ~2-3 пороговых энергий) (см. 2).

3 Результаты расчетов и обсуждение

В рамках данной работы были рассчитаны дифференциальные сечения и полные сечения ионизации атомов и ионов кислорода и азота в приближении искаженных волн с волновыми функциями в потенциале Хартри-Фока-Слэтера. Большинство расчетов сечений, ввиду значительной сложности вычислений, проводилось на многопроцессорной параллельной вычислительной системе К-100 [17]. Полученные результаты сравнивались с данными по дифференциальным и полным сечениям неупругой ионизации нейтральных атомов электронным ударом, полученными из библиотеки ENDF/B-VII.1, и с результатами вычислений по приведенному выше приближению бинарных соударений (3) и квазиклассическому импульсному приближению (7). Для сечений ионизации положительных ионов азота проведено сравнение результатов расчетов с доступными экспериментальными и рекомендованными данными [18-21]. Следует, однако, иметь в виду, что экспериментальные данные имеют невысокую точность и расхождения в значениях между различными экспериментами зачастую могут достигать 50%. Также многие приводимые данные основываются на аппроксимации и экстраполяции экспериментальных значений в область больших энергий с использованием классических приближений и эмпирических моделей.

На 3 – 8 представлены результаты расчетов для сечений ионизации электрона с 1s, 2s и 2p оболочек атома кислорода. Можно видеть, что, учитывая референсные данные ENDF, приближение искаженных волн, как правило, гораздо корректнее описывает поведение сечений, чем приближение бинарных соударений и импульсное приближение. Это особенно выражено в областях энергий электронов, составляющих по величине менее нескольких энергий ионизации. При отсутствии учета интерференции и обмена сечения, получаемые в приближении бинарных соударений, оказываются сильно завышенными (5 и 8). Также существенные отклонения от референсных данных наблюдаются для сечений ионизации верхних оболочек, вычисленных в квазиклассическом импульсном приближении (8).

Приведенные выше замечания справедливы и при расчетах сечений ионизации других элементов, в т.ч., например, азота (9 и 10).

На 11, 12 и 13 приведено сравнение результатов расчетов с рекомендованными и аппроксимированными экспериментальными данными для полных сечений ионизации ионов азота и кислорода с зарядом 1+ (N II и O II) и иона азота с зарядом 5+ (N VI) соответственно. Заявленная ошибка экспериментальных данных и их аппроксимации составляет $\pm 10\%$ для ионов N II и O II, и $\pm 20\%$ – для иона N VI. Сечения, полученные по методу искаженных волн, неплохо соответствуют эксперименту. Следует заметить, что сравнение сечений ионизации с экспериментальными данными требует тщательного анализа, поскольку значимый вклад в сечения могут вносить дополнительные эффекты, такие как возбуждение внутренних оболочек и последующая автоионизация.

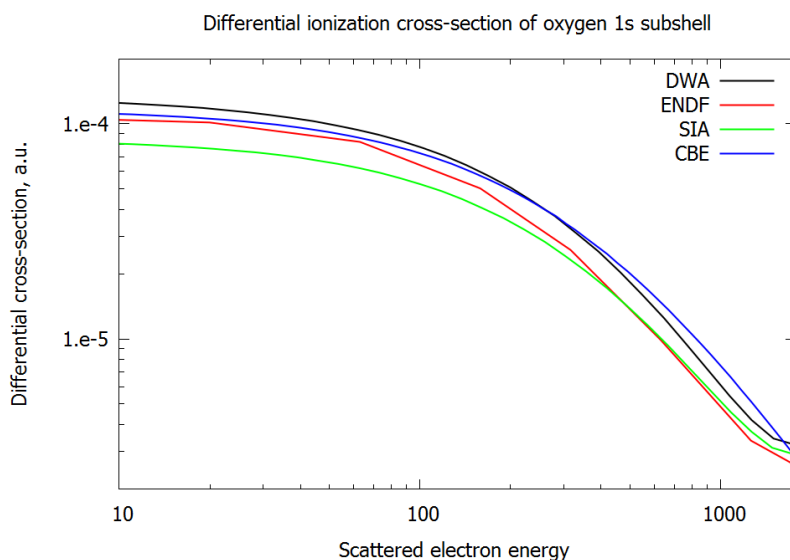


Рис. 3. Дифференциальное сечение ионизации электрона с 1s оболочки нейтрального атома кислорода для энергии налетающего электрона 3.9 кэВ, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), как функция от энергии ионизованного электрона, в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

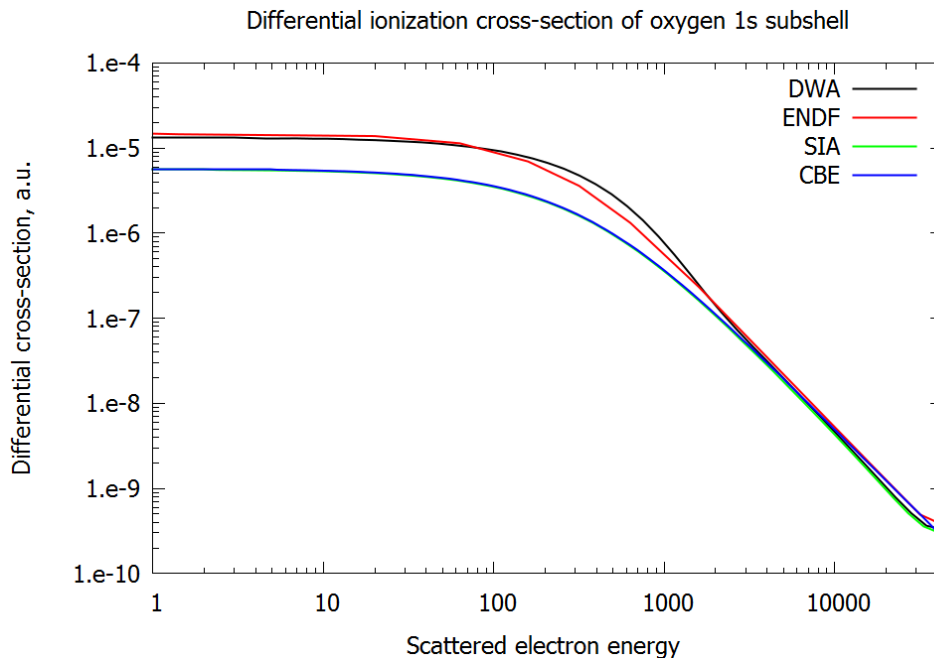


Рис. 4. Дифференциальное сечение ионизации электрона с 1s оболочки нейтрального атома кислорода для энергии налетающего электрона 81 кэВ, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), как функция от энергии ионизованного электрона, в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

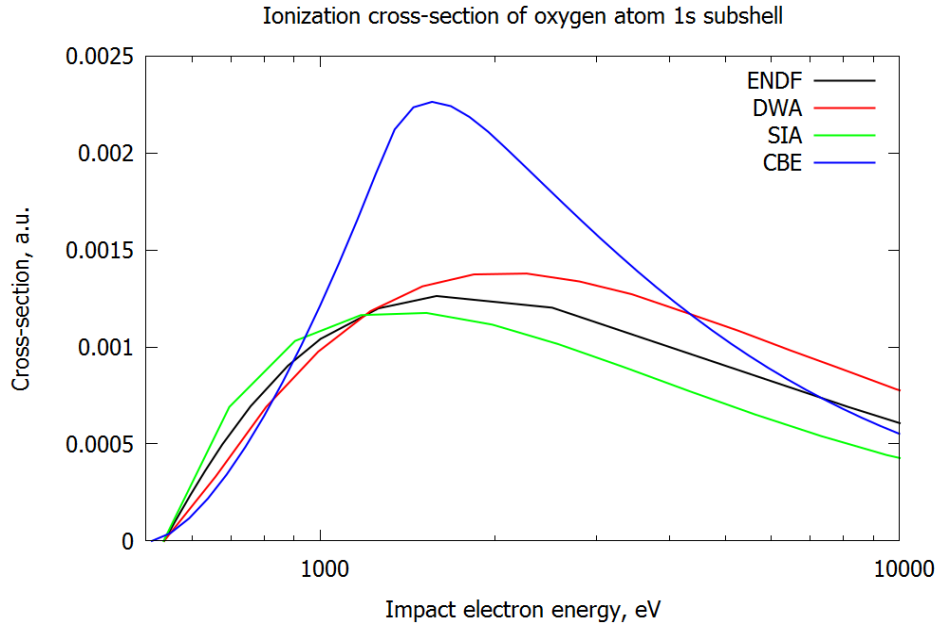


Рис. 5. Сечение ионизации электрона с 1s оболочки нейтрального атома кислорода, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

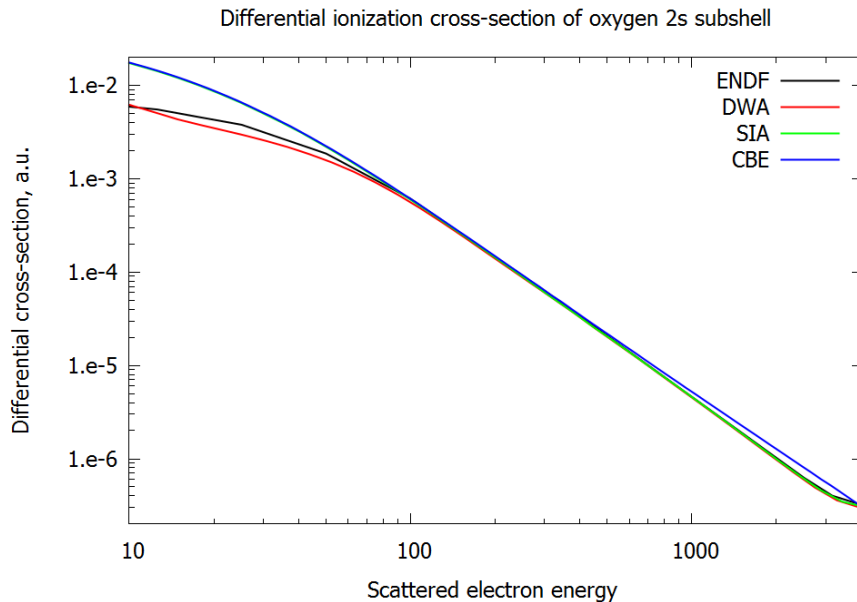


Рис. 6. Дифференциальное сечение ионизации электрона с 2s оболочки нейтрального атома кислорода для энергии налетающего электрона 8.1 кэВ, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), как функция от энергии ионизованного электрона, в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

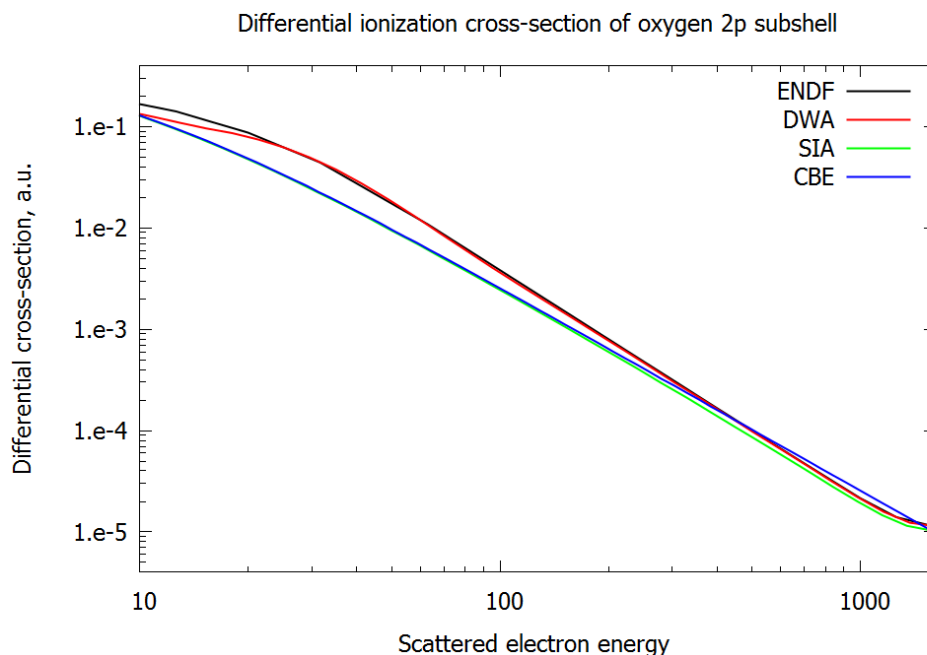


Рис. 7. Дифференциальное сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома кислорода для энергии налетающего электрона 3.1 кэВ, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), как функция от энергии ионизованного электрона, в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

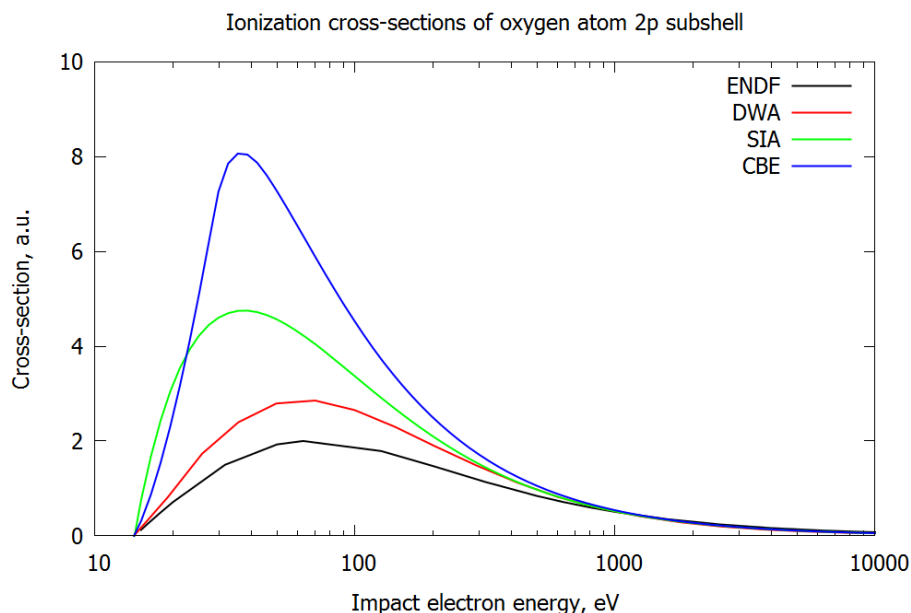


Рис. 8. Сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома кислорода, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

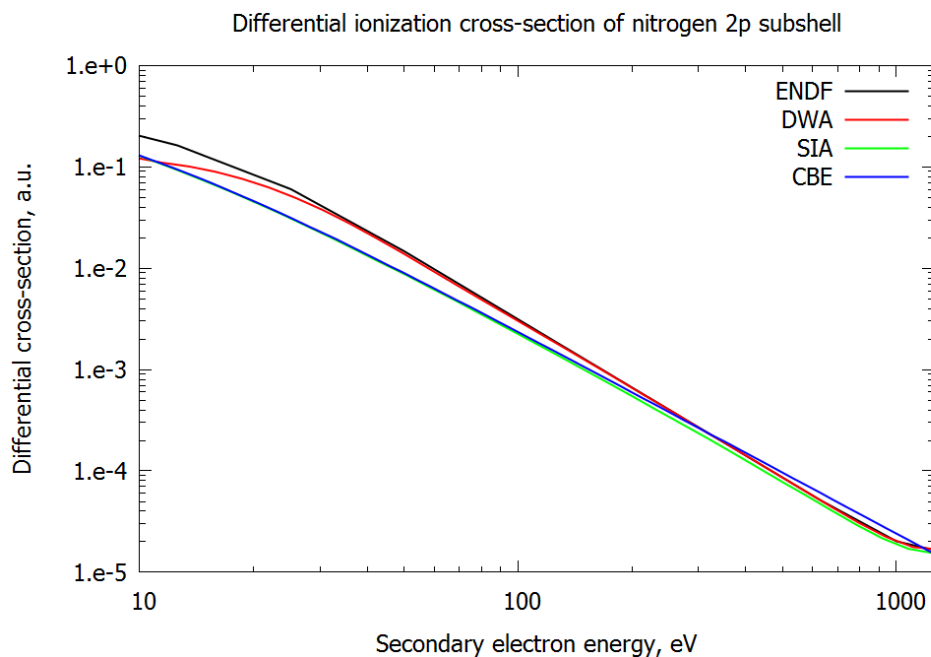


Рис. 9. Дифференциальное сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома азота для энергии налетающего электрона 2.5 кэВ, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), как функция от энергии ионизованного электрона, в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

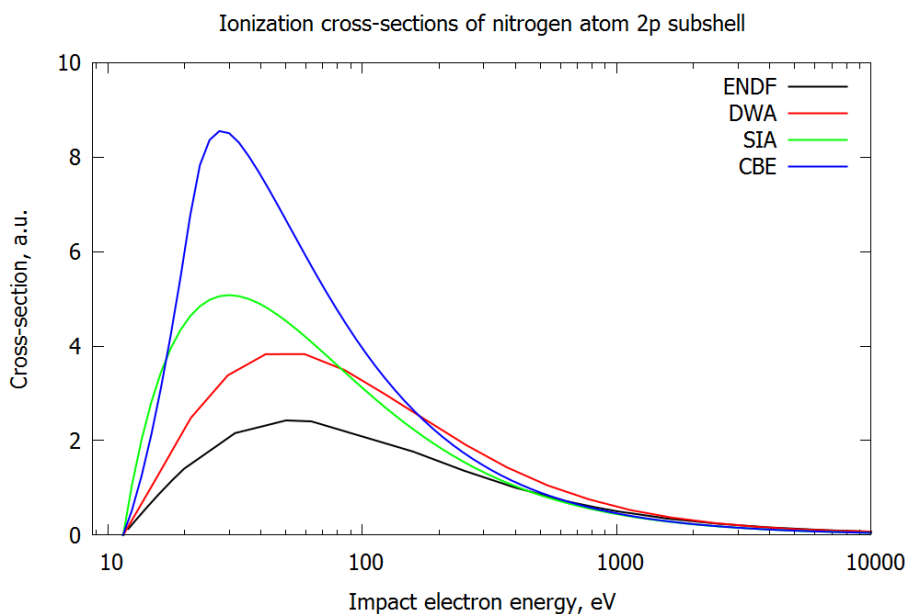


Рис. 10. Сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома азота, рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с данными ENDF/B-VII.1 (ENDF) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

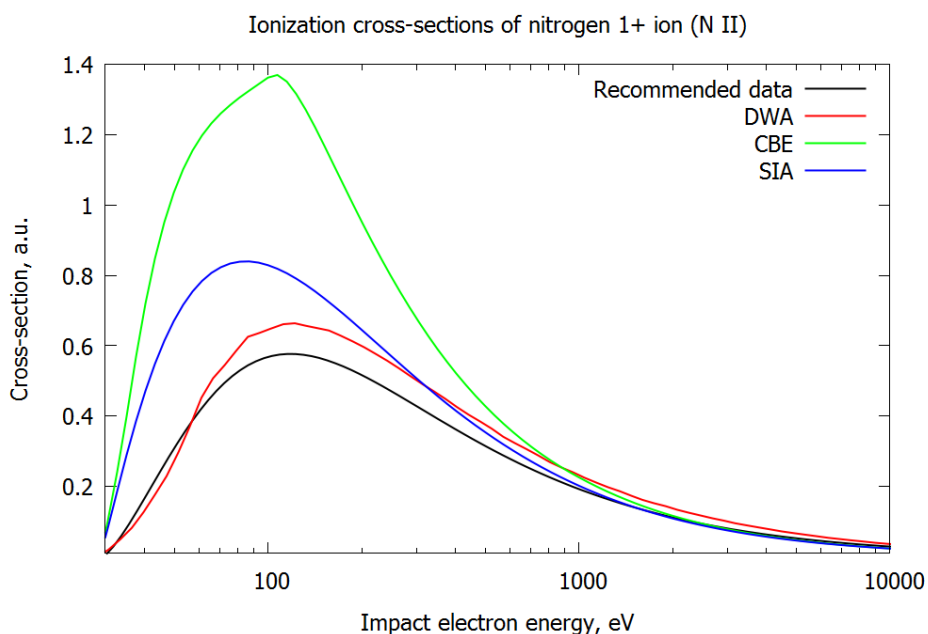


Рис. 11. Полное сечение ионизации иона азота с зарядом 1+ (N II), рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с рекомендованными экспериментальными данными [19, 20] (Recommended data) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

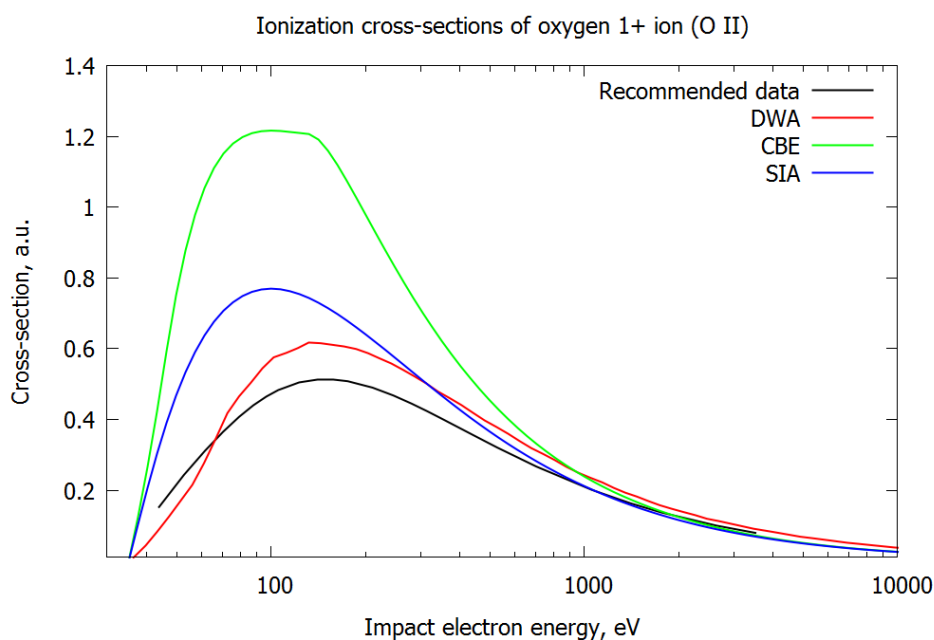


Рис. 12. Полное сечение ионизации иона кислорода с зарядом 1+ (O II), рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с рекомендованными экспериментальными данными [19, 20] (Recommended data) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

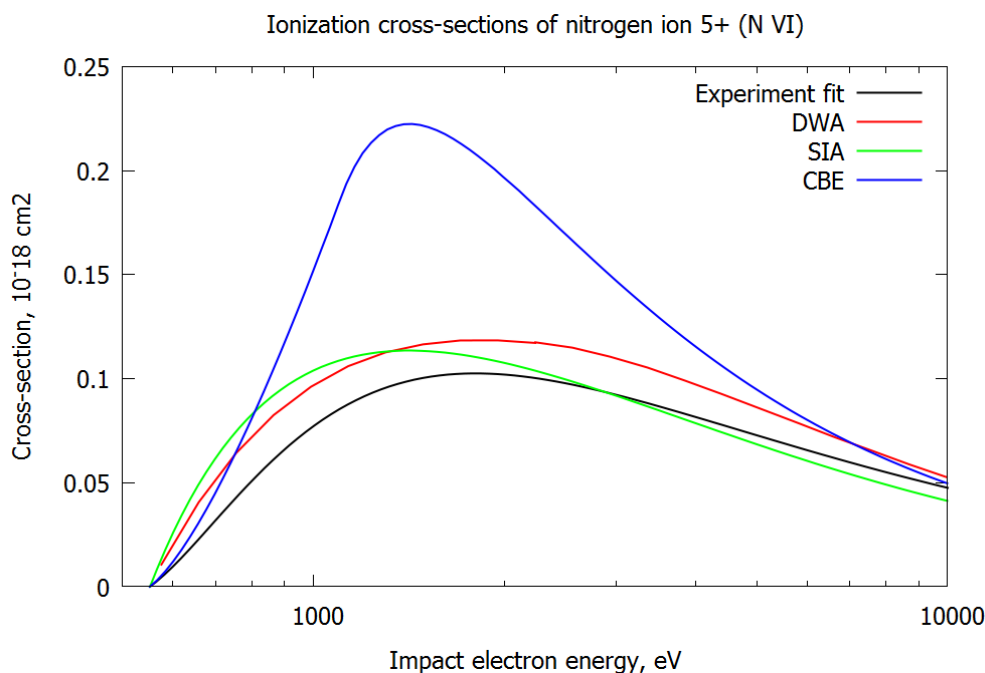


Рис. 13. Полное сечение ионизации иона азота с зарядом 5+ (N VI), рассчитанное в приближении искаженных волн (DWA), в сравнении с аппроксимированными экспериментальными данными [19, 21] (Experiment fit) и результатами вычислений в квазиклассическом импульсном приближении (SIA) и в приближении бинарных соударений (CBE)

4 Сравнение сечений ионизации нейтралов и ионов

На 14 и 15 представлены сравнения сечений ионизации электронов с 2p оболочки нейтральных атомов и ионов с зарядом 1+ для азота и кислорода, соответственно, вычисленные в приближении искаженных волн с потенциалом Хартри-Фока-Слэтера. В случае обоих этих элементов 2p оболочка является внешней электронной оболочкой, а значит, ионизация электронов с нее вносит основной вклад в полное сечение ионизации атома или иона в широком диапазоне энергий и определяет максимальное значение сечений. Кривые на 16 и 17 иллюстрируют отношения $\sigma_{io}^{2p \text{ NI}} / \sigma_{io}^{2p \text{ NII}}$ и $\sigma_{io}^{2p \text{ OI}} / \sigma_{io}^{2p \text{ OII}}$ соответственно между значениями упомянутых сечений в зависимости от энергии налетающего электрона.

Отметим, что при взаимодействии электронов с ионами потенциальное поле последних уже не может быть экранировано полем связанных внешних электронов, эффекты влияния потенциала на налетающую частицу проявляются гораздо сильнее и не могут быть игнорированы. Поэтому использование приближения искаженных волн совместно с квантово-статистической моделью Хартри-Фока-Слэтера необходимо для корректного расчета сечений электрон-ионного взаимодействия.

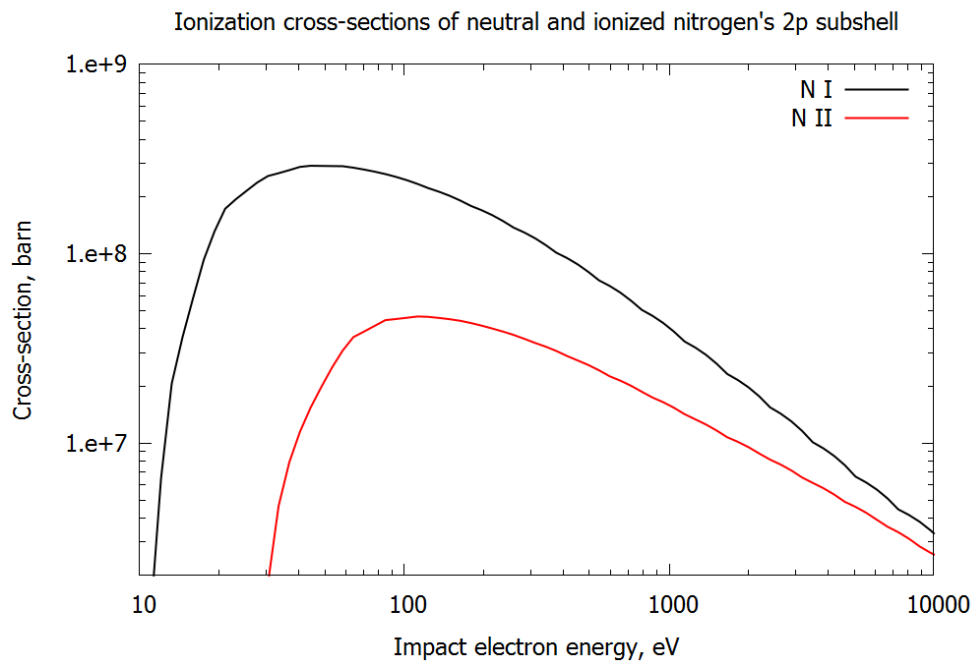


Рис. 14. Сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома азота (N I) и его иона с зарядом 1+ (N II), рассчитанное в приближении искаженных волн

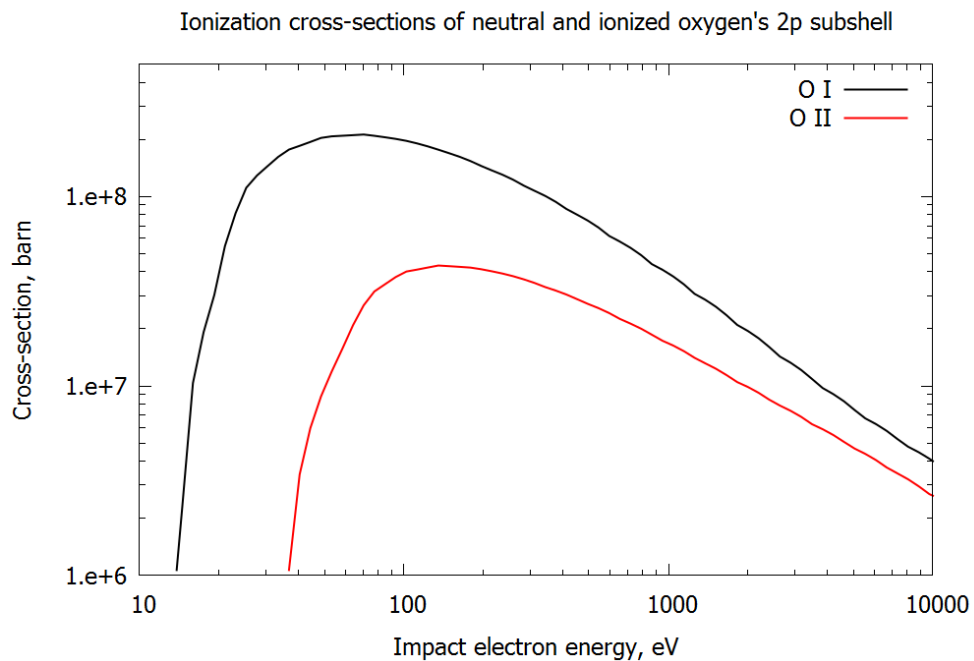


Рис. 15. Сечение ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома кислорода (O I) и его иона с зарядом 1+ (O II), рассчитанное в приближении искаженных волн

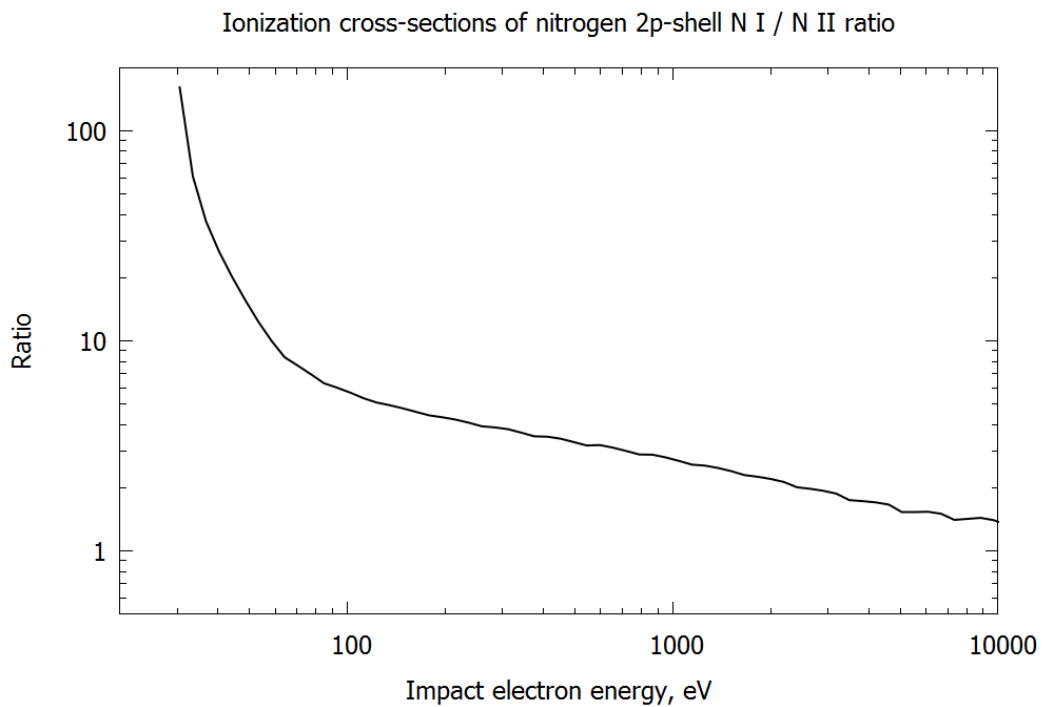


Рис. 16. Отношение сечений ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома азота и его иона с зарядом 1+, рассчитанных в приближении искаженных волн

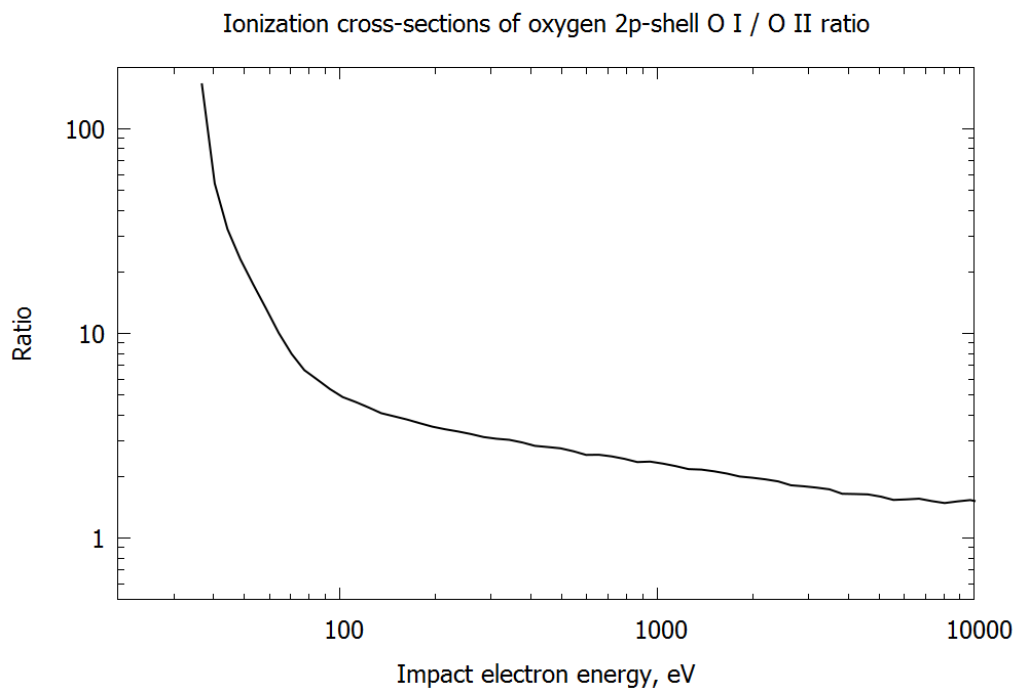


Рис. 17. Отношение сечений ионизации электрона с 2p оболочки нейтрального атома кислорода и его иона с зарядом 1+, рассчитанных в приближении искаженных волн

Заключение

На основании полученных результатов можно утверждать, что метод искаженных волн дает наиболее надежные результаты для сечений процессов неупругой ионизации среди методов первого порядка теории возмущений.

Более точные методы второго и третьего порядка теории возмущений уже не являются универсальными, их применение возможно лишь для конкретных элементов с определенными в каждом конкретном случае всеми возможными переходами, что для многоэлектронных элементов является трудно разрешимой задачей.

Величина сечения ионизации нейтральных атомов является наибольшей и снижается с ростом заряда иона. Это связано, в первую очередь, с уменьшением числа эквивалентных электронов на внешней оболочке, а также с ростом энергии ионизации. Кроме того, с увеличением заряда иона растут энергии связей атомных (связанных) электронов, что приводит к повышению пороговой энергии его ионизации (14 и 15). Это происходит по причине роста потенциального поля в окрестности иона, обусловленного увеличением его заряда. Особенно заметно это влияние проявляется для внешних оболочек, которые определяют величину порога ионизации иона.

Библиографический список

- 1 Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений. – М.: Издательство иностранной литературы, 1951.
- 2 W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$ // *Ztschr. Phys.* – 1970. – V. 232 – P. 101.
- 3 В.И. Очкур. О методе Борна-Оппенгеймера в теории атомных столкновений // *ЖЭТФ.* – 1963. – Т. 45 – С. 735.
- 4 А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, В.Б. Уваров. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. – М.: Физматлит, 2000.
- 5 B.F. Rozsnyai. Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density // *Phys. Rev. A.* – 1972. – V. 5, N. 3. – P. 1137.
- 6 J.J. Thomson. XLII. Ionization by moving electrified particles // *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science.* – 1912. – V. 23, N. 136. – P. 449-457.
- 7 M. R. H. Rudge. Theory of the ionization of atoms by electron impact // *Rev. Mod. Phys.* – 1968. – V. 40, N. 3. – P. 564.
- 8 L. Vriens. Binary-encounter electron-atom collision theory // *Phys. Rev.* – 1966. – V. 141, N. 1. – P. 88.
- 9 H. Bethe. Bremsformel für Elektronen relativistischer Geschwindigkeit // *Zeitschrift für Physik* – 1932. – V. 76, N. 5-6. – P. 293–299.
- 10 U. Fano. Ionizing collisions of very fast particles and the dipole strength of optical transitions // *Phys. Rev.* – 1954. – V. 95, N. 5. – P. 1198.

11 N. F. Mott. The collision between two electrons // Proc. of royal society. – 1930. – V. 126, N. 801. – 259-267.

12 R. C. Stabler. Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions // Phys. Rev. – 1964. – V. 133. – P. A1268–A1273.

13 M. Gryziński. Two-Particle Collisions. I. General Relations for Collisions in the Laboratory System // Phys. Rev. – 1965. – V. 138. – P. A305, A332, A336.

14 В.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. – М.: Наука, 1979.

15 В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная, В.С. Захаров. Квантово-статистические методы расчета оптических и термодинамических свойств плотной плазмы. С. 378-435 в Энциклопедии низкотемпературной плазмы. Серия Б, Том VII-1. Москва: Янус-К, 2008.

16 Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. – Л.: Наука, 1975.

17 URL: <http://www.kiam.ru/MVS/resourses/k100.html>.

18 E. Brook, M.F.A. Harrison, and A.C.H. Smith. Measurements of the electron impact ionisation cross sections of He, C, O and N atoms // J. Phys. B. – 1978. – V. 11, N. 17. – P. 3115.

19 K.L. Bell et al. Recommended data on the electron impact ionization of light atoms and ions // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1983 – 12(4), – P. 891-916.

20 D.H. Crandall. Electron Impact Ionization of Multicharged Ions // Physica Scripta. – 1981. – V. 23, N. 2 – P. 153.

21 D.H. Crandall, R.A. Phaneuf, and D.A. Gregory. Electron Impact Ionization of Multicharged Ions // Report No. ORNL/TM-7020. – 1979, Oakridge National Lab., Tennessee, USA.

22 В.Б. Уваров, В.И. Алдонясов. Фазовый метод определения собственных значений энергий для уравнения Шредингера // ЖВМиМФ. – 1967. – Т. 7(2). – С. 436.

23 А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков. Применение фазового метода для определения собственных значений энергии. Математическое моделирование. – 1998. – Т. 10(10). – С. 64.

24 А.С. Давыдов. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1963.

Оглавление

Введение	3
1 Аналитические и эмпирические формулы расчета сечений ионизации	4
2 Приближение искаженных волн	7
3 Результаты расчетов и обсуждение	12
4 Сравнение сечений ионизации нейтралов и ионов.....	18
Заключение.....	21
Библиографический список.....	21