Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 1, с. 13 – 17

Скейлинг для сечений образования K-вакансий при атомных столкновениях

А. Н. Зиновьев[1)], П. Ю. Бабенко, А. П. Шергин

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 мая 2021 г.
После переработки 7 июня 2021 г.
Принята к публикации 8 июня 2021 г.

Предложена универсальная зависимость (скейлинг) для оценки сечений образования K-вакансий при столкновениях ионов и атомов кэВ-энергий. Скейлинг базируется на результатах исследования спектров неупругих потерь энергии и сечений эмиссии характеристических Оже-электронов и излучения при распаде K-вакансий. Для столкновений атомов с $Z > 10$ предложена формула, объясняющая процесс ионизации K-оболочки переходами, обусловленными супервыдвижением термов. Скейлинг позволяет оценить сечения образования K-вакансий для неисследованных случаев атомных столкновений, тем самым оценить возможные электронные тормозные потери при прохождении ионов через твердое тело, а также может использоваться для диагностики состава вещества при ионном облучении.

DOI: 10.31857/S1234567821130048

Столкновения в диапазоне кэВ-энергий соударения относятся к так называемым медленным столкновениям, когда скорость сближения сталкивающихся атомов меньше орбитальных скоростей электронов. Как следствие, в момент столкновения формируется квазимолекула, уровни которой перестраиваются по мере сближения и разлета частиц. В недавних работах [1–6] основное внимание уделяется коррелированным переходам и каскадам при распаде K-вакансий, а также образованию K-вакансий в релятивистском случае.

Разработка скейлинга для расчета сечений образования K-вакансий представляет интерес для анализа состава вещества при ионном облучении и для расчетов торможения частиц в веществе. В реальности имеют место быть два принципиально различающихся случая образования K-вакансий:

1) при наличии вакансии на $2p\pi$-орбитали до столкновения K-вакансия образуется вследствие вращательных переходов в пределе объединенного атома с $2p\sigma$ на $2p\pi$-орбиталь. Для этого случая может быть предложен скейлинг для сечения образования K-вакансий по аналогии с разработанным авторами скейлингом для образования L-вакансий [7]. К возможности уточнения описания в этом случае мы вернемся ниже;

2) при столкновениях атомов и ионов с $Z > 10$ $2p\pi$-орбиталь заполнена и переходы с $2p\sigma$ на $2p\pi$-орбиталь невозможны. Делались неоднократные попытки [8–10] предложить эмпирические скейлинги для образования K-вакансий для этого случая. Однако сами авторы указывали на отсутствие теоретического объяснения данного явления. Рассмотрению возможного, с нашей точки зрения, механизма образования K-вакансий в столкновениях, когда $2p\pi$-орбиталь заполнена, посвящена следующая часть данной работы.

В работе [11] исследовалось поведение термов квазимолекулы в комплексной плоскости межъядерных расстояний. Было обнаружено существование точек ветвления, связывающих различные термы. В рамках этой теории вероятность перехода электрона в континуум рассчитывается как интеграл по обходу точек ветвления. В работе [12] в рамках указанной теории было предложено выражение для сечения испускания электрона с энергией E:

$$\sigma(E) = \frac{4\pi|R(E)|^2 \mathrm{Im}\, R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right), \quad \alpha(E) = 2\int_{E_0}^{E} \mathrm{Im}\, R(\varepsilon) d\varepsilon, \tag{1}$$

где $R(E)$ – функция обратная зависимости рассматриваемого терма $E(R)$ от межъядерного расстояния

[1)]e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

R, v – скорость соударения, $\operatorname{Im} R(E)$ – мнимая часть зависимости $R(E)$.

Проинтегрируем данное выражение по энергиям испущенного электрона и найдем сечение ионизации σ_i рассматриваемого терма:

$$\sigma_i = \int_0^\infty \sigma(\varepsilon) d\varepsilon =$$

$$= \int_0^\infty \frac{4\pi |R(E)|^2 \operatorname{Im} R(E)}{\alpha(E)} \exp\left(-\frac{\alpha(E)}{v}\right) dE.$$

Принимая во внимание, что $2 \cdot \operatorname{Im} R(E) \cdot dE = d\alpha$, можно заменить переменную

$$\sigma_i = \int_{\alpha(0)}^\infty 2\pi |R[E(\alpha)]|^2 \frac{v}{\alpha} \exp\left(-\frac{\alpha}{v}\right) d\alpha.$$

Интеграл приближенно вычисляется методом перевала

$$\sigma_i = 2\pi R_0^2 \frac{v}{\alpha(0)} \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{v}\right). \qquad (2)$$

Поясним значения переменных. Введем зависимость терма от межъядерного расстояния R.

$$E = -U_0 \left[1 + \left(\frac{R}{R_0}\right)^m\right].$$

Тогда $\alpha(0) \approx 2\frac{m}{m+1} \cdot U_0 \cdot \operatorname{Im} R_0$. Рассмотрим ионизацию терма $2p\sigma$ при столкновениях $p{-}H$, в этом случае $m = 2$, $U_0 = 0.5$ а.е. (в атомных единицах) – энергия терма в пределе объединенного атома. Положение точки квазипересечения терма $2p\sigma$ с континуумом было вычислено в работе [13], при этом $\operatorname{Im} R_0(p{-}H) = 1.01$. Таким образом, для системы $p{-}H$ – $\alpha(0) \approx 0.67$. Нужно также учитывать, что орбиталь $2p\sigma$ заполнена с вероятностью $P = 50\,\%$.

В случае столкновений сложных атомов на орбитали $2p\sigma$ находятся два электрона ($P = 2$). В пределе объединенного атома энергия уровня $U_0 = 0.5 \cdot Z_{\text{eff}}^2/N^2$, где Z_{eff} – эффективный заряд для рассматриваемого уровня, $N = 2$ – главное квантовое число. $R_0 = N/Z_{\text{eff}}$, таким образом $Z_{\text{eff}} = (8 \cdot U_0)^{0.5}$, $R_0^2 = 0.5/U_0$. Положение точки квазипересечения масштабируется при изменении Z_{eff}

$$\operatorname{Im} R_0(Z_{\text{eff}}) = \operatorname{Im} R_0(p{-}H) \cdot \frac{2}{Z_{\text{eff}}}.$$

Следовательно:

$$\alpha(Z_{\text{eff}}) = \frac{m}{m+1} \operatorname{Im} R_0(p{-}H) \cdot \frac{4}{Z_{\text{eff}}} U_0 \approx \alpha(0) \cdot (2U_0)^{0.5} \qquad (3)$$

или

$$U_0 \approx \frac{1}{2} \left[\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{\alpha(0)}\right]^2.$$

Для сечения ионизации $2p\sigma$ получаем выражение (в а.е.):

$$\sigma_i = \pi P \frac{v}{\alpha(Z_{\text{eff}}) U_0} \exp\left(-\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v}\right), \qquad (4)$$

здесь P – число электронов на уровне $2p\pi$.

Для сравнения с экспериментом удобно ввести переменную x:

$$x = \frac{m_e}{M} \cdot \frac{E}{U_0},$$

где m_e/M – отношение массы электрона к массе налетающей частицы, E – энергия соударения.

Можно увидеть, что:

$$\frac{\alpha(Z_{\text{eff}})}{v} = \frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}},$$

и формулу для сечения переписать в виде:

$$\sigma_i(\text{см}^2) \cdot U_0(\text{кэВ}) = \text{К} \cdot \frac{\sqrt{x}}{\alpha(0)} \cdot \exp\left(-\frac{\alpha(0)}{\sqrt{x}}\right), \qquad (5)$$

где константа $\text{К} = 1.196 \cdot 10^{-18}$.

На рисунке 1 показана зависимость приведенного сечения от приведенной энергии для различных экспериментально исследованных комбинаций сталкивающихся частиц. Видно, что в этих координатах экспериментальные точки для большинства случаев ложатся на общую кривую. Эта зависимость хорошо описывается формулой (5). Наилучшее согласие с экспериментом достигается при значении $\alpha(0) = 0.75$ и $m = 3$. На этом же рисунке изображено сечение ионизации для столкновений $p{-}H$, умноженное на 4. Видно, что эта зависимость также очень хорошо согласуется с первой группой экспериментальных данных и формулой (5). Видно также, что область применимости предложенной формулы ограничена диапазоном $x < 1$. При больших v подключаются другие каналы ионизации (Т-ионизация, см. [13]). При $v > 1$ для оценки К-ионизации используется борновское приближение.

На рисунке 1 приведены также данные для случаев N^+-N_2, Ne^+-Ne.В этих случаях образование К-вакансий связано с переходами между орбиталями $2p\pi$ и $2p\sigma$ в пределе объединенного атома при наличии вакансий на $2p\pi$-орбитали. Видно, что сечения начинают возрастать при значительно меньших энергиях соударения, что связано с меньшим значением параметра Месси вследствие меньшего расщепления уровней между $2p\pi$ и $2p\sigma$ орбиталями по сравнению с переходами в континуум.

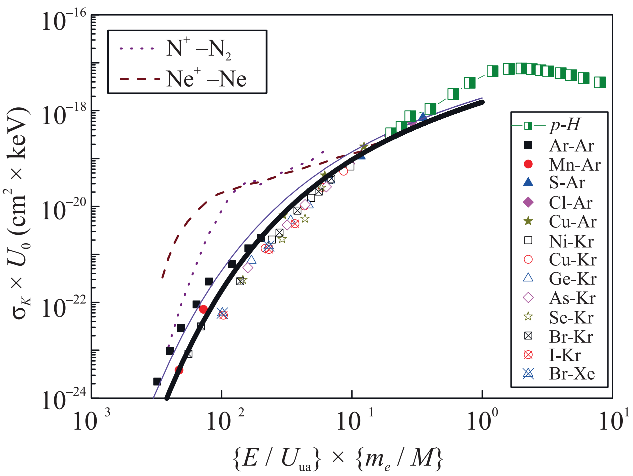

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость сечения ионизации K-оболочки в универсальных координатах. Приведены экспериментальные данные для различных комбинаций "ион–атом" из работы [8], а также для столкновений $p-H$ из [14]. Из-за различия в начальной заселенности $2p\sigma$ уровня сечение ионизации в случае $p-H$ умножено на 4. Жирной сплошной линией приведена кривая для $\alpha(0) = 0.75$, $m = 3$ (формула (5)), которая наилучшим образом описывает эксперимент. Тонкой сплошной линией приведена кривая для случая $\alpha(0) = 0.67$, $m = 2$. Пунктирными линиями приведены экспериментальные данные для столкновений N^+-N_2 [15] и Ne^+-Ne [16], когда разрешены переходы между $2p\sigma$ и $2p\pi$ уровнями

Сечение пропорционально фактору f, отражающему вероятность наличия вакансии на $2p\pi$-орбитали, которая формируется из $2p$-оболочки партнера соударения с бо́льшим Z. В статическом случае фактор f_s равен $2/3$ числа вакансий на $2p$-уровне партнера с бо́льшим Z, а для случая одинаковых атомов $1/3$ от суммы числа $2p$-вакансий в партнерах соударения. Зависимость вероятности образования K-вакансии от фактора f была проверена экспериментально [17]. При столкновениях Ne-Ne $2p\pi$-орбиталь полностью заполнена, а при столкновениях Ne^+-Ne и Ne^{2+}-Ne на орбитали имеется, соответственно, одна и две вакансии. Как было показано экспериментально, вероятность образования K-вакансии при одинаковых условиях соударения соотносится как 0.06 : 1 : 2 [18]. Это означает, что помимо статической вероятности f_s иметь вакансию на $2p\pi$-орбитали, может происходить дополнительное образование вакансий вследствие связи $2p\pi$-орбитали с верхними незаполненными уровнями, описываемое динамической поправкой f_d к фактору f.

Как видно из рис. 2, приведенные зависимости хорошо описываются формулой $f_d = A\exp(-c/v)$. Значения параметров A и c для исследованных случаев приведены в табл. 1.

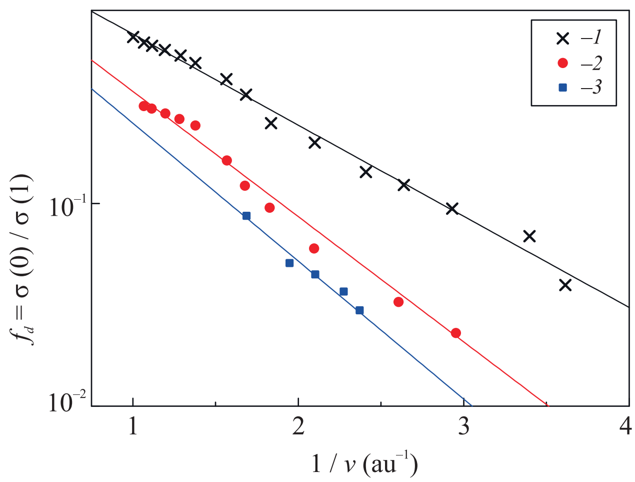

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость динамической поправки к ионизационному фактору $2p\pi$-орбитали (фактор f_d) от $1/v$. Представлено отношение сечений для случаев, когда вакансия на $2p\pi$ первоначально отсутствует (случаи N^+-Ne, Na^+-N_2, Na^+-Ne), к случаям, когда имеется одна вакансия (соответственно, столкновения Ne^+-N_2, Ne^+-N_2, Ne^+-Ne), которое определяет вероятность динамического образования вакансии. Обозначения: *1* – $\sigma(N^+\text{-Ne})/\sigma(Ne^+\text{-}N_2)$, *2* – $\sigma(Na^+\text{-}N_2)/\sigma(Ne^+\text{-}N_2)$, *3* – $\sigma(Na^+\text{-Ne})/\sigma(Ne^+\text{-Ne})$

Таблица 1. Значение параметров A и c для вероятности динамического образования вакансий в рассматриваемых случаях

Номер	Отношение сечений для случаев	A	c
1	$(N^+\text{-Ne})/(Ne^+\text{-}N_2)$	1.94	1.04
2	$(Na^+\text{-}N_2)/(Ne^+\text{-}N_2)$	1.49	1.42
3	$(Na^+\text{-Ne})/(Ne^+\text{-Ne})$	1.20	1.57

Значение фактора $f = f_s + f_d$, т.е. в реальных столкновениях, складывается из статической вероятности иметь вакансию на $2p\pi$-орбитали f_s и динамической поправки f_d, которая может быть оценена с использованием параметров, приведенных в табл. 1.

Как показывает рис. 1, для легких атомов использование параметра U_0 не обеспечивает группировку экспериментальных данных вследствие значительного влияния экранировки заряда ядра электронами. На основе работы Бриггса–Масека [19] может быть предложен скейлинг для сечения образования K-вакансий:

$$\sigma_{\rm vac}(E_{\rm cms}) = f \cdot \pi R_{2p}^2 \cdot F\left(\frac{E_{\rm cms}}{(Z_1+Z_2-\delta)^2}\right), \qquad (6)$$

где $E_{\rm cms}$ – энергия соударения в системе центра масс, R_{2p} – радиус $2p$-оболочки объединенного атома, $R_{2p} \sim (Z_1 + Z_2 - \delta)^{-1}$, Z_1 и Z_2 – заряды ядер сталкивающихся атомов, $\delta = 4$ – поправка на экранировку $2p$-оболочки электронами $1s$ и $2s$-оболочки объединенного атома. Универсальная функция $F(x)$ может быть описана выражением:

$$\log_{10} F(x) = y_0 + A_1 \cdot e^{-\frac{x}{t_1}} + A_2 \cdot e^{-\frac{x}{t_2}}. \qquad (7)$$

Значения параметров в формуле (7): y_0, A_1, t_1, A_2, t_2 приведены в табл. 2.

Таблица 2. Значения параметров в формуле (7): y_0, A_1, t_1, A_2, t_2

Параметр	Значение
y_0	−15.823
A_1	−1.208
t_1	1.221
A_2	−9.264
t_2	0.048

Как видно из рис. 3, предложенный скейлинг позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные единой универсальной кривой, что делает возможным оценивать сечения ионизации K-оболочек для неисследованных случаев.

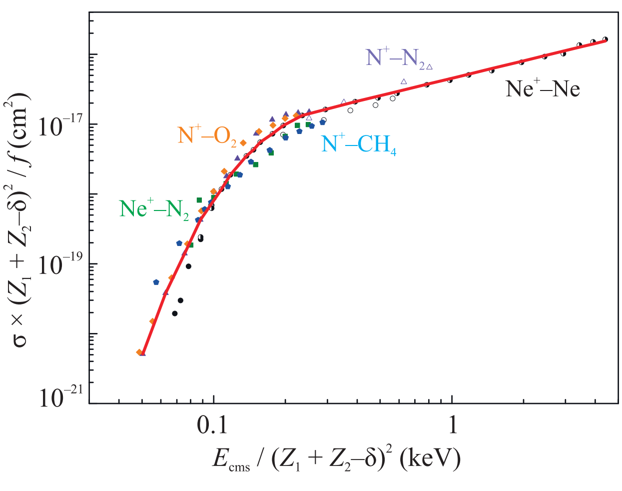

Рис. 3. (Цветной онлайн) Скейлинг для сечений образования K-вакансий при соударении легких атомов с $Z \leq 10$. Точками на рисунке показаны экспериментальные данные из работ [15, 16]. Жирная линия – предложенная нами универсальная кривая (формула (6))

Следует также иметь в виду, что K-вакансия, образующаяся в легком партнере соударения, может перейти на K-оболочку более тяжелого партнера вследствие динамической связи $2p\sigma$ и $1s\sigma$-состояний, так называемый механизм *vacancy sharing*. Вероятность этого процесса может быть оценена по формулам, предложенным в [20].

Интересно сопоставить два возможных механизма образования K-вакансий. Как видно из рис. 4, расчет сечения образования K-вакансий в системе Ne$^+$-

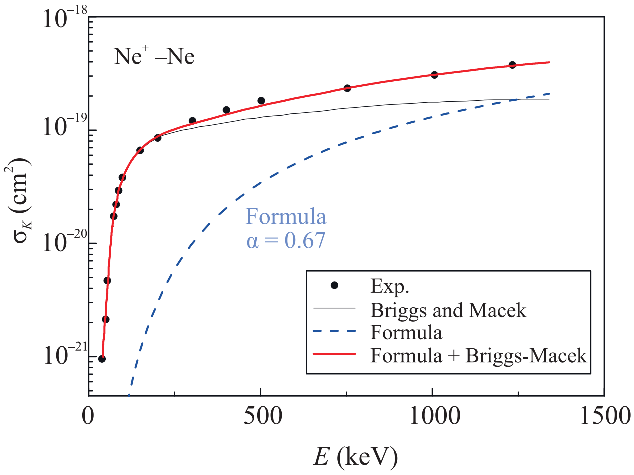

Рис. 4. (Цветной онлайн) Сравнение экспериментального сечения образования K-вакансий в столкновениях Ne$^+$-Ne [16] с расчетами без учета [19] и с учетом поправки на динамическую ионизацию $2p\sigma$-уровня (настоящая работа, формула (5)), соответственно

Ne, выполненный в работе [19], при энергиях свыше 200 кэВ дает значения сечений ниже эксперимента [16]. Учет поправки на ионизацию $2p\sigma$-орбитали вследствие переходов в континуум с использованием формулы (5), приводит к практически полному совпадению с экспериментом. Значение $\alpha(0) = 0.67$ соответствует $m = 2$, что хорошо согласуется с расчетами поведения молекулярных орбиталей для случая Ne$^+$-Ne [21]. Таким образом, при оценке сечения образования K-вакансий необходимо учитывать оба механизма.

При небольших энергиях соударения механизм, связанный с переходами между орбиталями, приводит к значительно большим сечениям образования K-вакансий по сравнению с сечениями образования вакансий вследствие динамической ионизации из-за супервыдвижения термов в комплексной плоскости R, а при больших энергиях необходимо учитывать оба механизма. Следует различать столкновения атомов в газовой и твердой фазе. При столкновениях в твердой фазе имеет место каскад соударений и может происходить дополнительное образование вакансий во внешних оболочках, которые могут дожить до следующего соударения и привести к большим сечениям образования K-вакансий вследствие разрешенной возможности $2p\sigma - 2p\pi$ переходов.

Можно ожидать, что предложенный для сечений образования K-вакансий в оболочках сталкивающихся атомов скейлинг найдет применение для расчета электронных тормозных потерь при ионном облучении твердых тел. Применение для этих целей скейлинга, разработанного авторами для сечений образования L-вакансий, было продемонстрировано в [22, 23].

---

1. S. Kucas, A. Momkauskaite, and R. Karazija, Astrophys. J. **810**, 26 (2015).
2. A. Kucukonder and M. Erguven, AIP Conf. Proc. **2042**, 020021 (2018).
3. S. Santra, A. C. Mandal, D. Mitra, M. Sarkar, and D. Bhattacharya, Radiat. Phys. Chem. **74**, 282 (2005).
4. I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, A. I. Bondarev, G. B. Deyneka, I. A. Maltsev, S. Hagmann, G. Plunien, and Th. Stohlker, Phys. Rev. A **85**, 032712 (2012).
5. P. Verma, P. H. Mokler, A. Bräuning-Demian, C. Kozhuharov, H. Bräuning, J. Anton, B. Fricke, F. Bosch, S. Hagmann, D. Liesen, Z. Stachura, and M. A. Wahab, Phys. Scr. **T144**, 014032 (2011).
6. G. Lapicki, ICPEAC XXX Abstracts. 26 July – 1 August. Australia. WE-124, Cairns (2017).
7. P. Yu. Babenko, A. N. Zinoviev, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B **354**, 142 (2015).
8. W. N. Lennard, I. V. Mitchell, and J. S. Forster, Phys. Rev. A **18**, 1949 (1978).
9. C. Foster, T. P. Hoogkamer, P. Woerlee, and F. W. Saris, J. Phys. B **9**, 1943 (1976).
10. А. Н. Зиновьев, С. Ю. Овчинников, Ю. С. Гордеев, Письма в ЖТФ **7**, 139 (1981) [A. N. Zinoviev, S. Yu. Ovchinnikov, and Yu. S. Gordeev, Tech. Phys. Lett. **7**, 139 (1981)].
11. С. Ю. Овчинников, Е. А. Соловьев, Письма в ЖЭТФ **91**, 477 (1986) [S. Yu. Ovchinnikov and E. A. Solov'ev, JETP Lett. **64**, 280 (1986)].
12. G. N. Ogurtsov, A. G. Kroupyshev, M. G. Sargsyan, Yu. S. Gordeev, and S. Yu. Ovchinnikov, Phys. Rev. A **53**, 2391 (1996).
13. M. Pieksma and S. Yu. Ovchinnikov, J. Phys. B **24**, 2699 (1991).
14. С. В. Авакян, Р. Н. Ильин, В. М. Лавров, Г. Н. Огурцов, *Сечения процессов ионизации и возбуждения*, ГОИ, СПб. (2000) [S. V. Avakyan, R. N. Il'in, V. M. Lavrov, and G. N. Ogurtsov, *Collision Processes and Excitation of UV Emission from Planetary Atmospheric Gases*, Gordon and Breach, NY (1998)].
15. Г. Г. Месхи, Дисс. канд. физ.-матем. наук, *Особенности радиационного и Оже-распада внутренних вакансий,образующихся в атомных столкновениях*, ФТИ им. А. Ф. Иоффе (1983).
16. N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, B. Aagaard, E. Bgving, and B. Fastrup, Phys. Rev. A **12**, 1313 (1975).
17. B. Fastrup, E. Boving, G. A. Larsen, and P. Dah1, J. Phys. B **7**, L206 (1974).
18. B. Fastrup, G. Hermann, Q. Kessel, and A. Crone, Phys. Rev. A **9**, 2518 (1974).
19. J. S. Briggs and J. Macek, J. Phys. B **5**, 579 (1972).
20. W. E. Meyerhof and K. Taulbjerg, Ann. Rev. Nucl. Sci. **27**, 279 (1977).
21. J. Eichler and U. Wille, Phys. Rev. A **11**, 1973 (1975).
22. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, Д. С. Мелузова, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **108**, 666 (2018) [A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, JETP Lett. **108**, 633 (2018)].
23. A. N. Zinoviev, P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, and A. P. Shergin, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B **467**, 140 (2020).