



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

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

Исследование сходимости
расчетов сечений
электронной
столкновительной
ионизации в приближении
искаженных волн

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Исследование сходимости расчетов сечений электронной столкновительной ионизации в приближении искаженных волн / Б.Н.Четверушкин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 262. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2018-262](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-262)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-262>

**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**

**Исследование сходимости расчетов сечений
электронной столкновительной ионизации
в приближении искаженных волн**

Москва — 2018

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

Исследование сходимости расчетов сечений электронной столкновительной ионизации в приближении искаженных волн

Рассматриваются вопросы сходимости, возникающие при применении приближения искаженных волн для расчета сечений процессов ионизации атомов и ионов электронным ударом. Сходимость обосновывает применимость приближения для расчета сечений ударной ионизации ионов и молекул электронами в газоплазменных образованиях. Для вычисления волновых функций электронов дискретного и непрерывного спектра использован самосогласованный потенциал, рассчитываемый по квантово-статистической модели Хартри-Фока-Слэтера. На примере атомов азота и ионов железа показано, что пределы индексов суммирования при расчетах сечений существенно зависят от энергий частиц, что имеет большое значение для оптимизации вычислений и возможности проведения пакетных расчетов сечений в широком диапазоне энергий и большом наборе атомных элементов.

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

The convergence of electron collisional ionization cross-section computations for atoms and ions in distorted-wave approximation

The problems of convergence of electron ionization cross-sections of atoms and ions in distorted-wave approximation are considered. The convergence justifies the applicability of the approximation for calculating the cross sections for impact ionization of ions and molecules by electrons in gas-plasma formations. Discrete and continuous electron wave functions needed for cross-section computation are calculated in the self-consistent potential obtained upon quantum-statistical Hartree-Fock-Slater model. It is shown using the case of nitrogen atoms and iron ions that the summation index limits in calculations substantially depend on electron energy. It has considerable meaning on optimization of computations and execution capabilities of batch cross-section calculations for a wide range of electron energies and a broad set of atomic elements.

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

Данные о сечениях ионизации атомов и ионов необходимы во многих областях исследований. Примером является взаимодействие электромагнитного излучения с газо-плазменными образованиями. Плазменные слои возникают, например, в окрестности спускаемых космических аппаратов за счет температурной ионизации воздушной среды [1]. Наличие плазмы оказывает воздействие на распространение электромагнитных волн между аппаратом и наземными станциями.

Электромагнитное поле влияет на энергию свободных электронов в плазме и может изменять ее параметры. Исследование этого процесса средствами математического моделирования в рамках кинетических моделей требует рассмотрения столкновений электронов не только с нейтральными молекулами газов воздуха, но и с ионами азота, кислорода и т.д.

Оценки сечений столкновительных процессов проводятся на основе аппроксимационных и эмпирических формул [2-6]. Эти формулы имеют ограниченные рамки применимости, они могут использоваться для быстрых и грубых оценок. Зачастую наблюдаются существенные различия в результатах между ними, а также и значительные отклонения от экспериментальных данных. Известные квазиклассические модели, основанные на упрощенных теоретических подходах, такие как приближение бинарных соударений [7] и импульсное приближение [8-10], даже с искусственными поправками не обеспечивают достаточной точности в околопороговых областях и при больших энергиях частиц [11, 12]. Более точные значения сечений могут быть получены только при использовании квантово-механических моделей.

Для вычисления сечений элементарных процессов разработан ряд методов, дающих хорошие результаты в припороговых областях, главным образом для легких элементов, таких, например, как метод сильной связи, где учитываются связи многих каналов рассеяния [4]. Но часто эти методы не подходят для многоэлектронных атомов и ионов в широком диапазоне энергий. Также из-за необходимости учета большого количества связанных состояний для сходимости системы уравнений они достигают значительной вычислительной сложности, и такие методы можно использовать только для одиночного расчета отдельных переходов в узком интервале энергий.

Наиболее популярным квантово-механическим методом расчета сечений является борновское приближение [13, 14]. Состояния налетающей частицы описываются плоскими волнами, а вероятности переходов рассчитываются в приближении первого порядка теории возмущений. Для частичного учета обменных эффектов, которые могут вносить существенные поправки в величину вычисляемых сечений, предложен ряд улучшений [15, 16]. Однако отсутствие учета влияния атомного потенциала на налетающую частицу приводит к существенному снижению точности получаемых сечений, особенно для неупругих

столкновительных взаимодействий электронов с ионами. Это наиболее заметно при анализе дифференциальных сечений.

В приближении искаженных волн состояние электронов описывается волновыми функциями, полученными в результате решения уравнений Шредингера и Дирака в заданном электростатическом атомном потенциале [4, 17, 18]. В данном случае волновые функции налетающего и атомного электронов вычисляются с использованием одного и того же потенциала, что решает проблему их неортогональности и позволяет корректно учесть обменные и интерференционные эффекты. В целом, приближение искаженных волн дает наиболее надежные результаты для сечений процессов неупругого взаимодействия электронов с атомами и ионами среди методов первого порядка теории возмущений и при этом является наиболее общим и универсальным методом, позволяющим применять его в большом диапазоне энергий и зарядов ионов. К недостаткам метода искаженных волн относится то, что он является гораздо более трудоемким методом с точки зрения численных расчетов по сравнению с борновским приближением, поскольку использование численных волновых функций приводит к необходимости прямого численного интегрирования, и в особенности многократного суммирования медленно сходящихся рядов, возникающих в процессе вычисления матричных элементов и квантово-механических коэффициентов. Это приводит к ограниченному применению приближения искаженных волн; как правило, оно используется только для отдельных расчетов. Необходимо также отметить высокую чувствительность получаемых результатов к используемому атомному потенциалу при расчете волновых функций электронов.

Более точные методы второго и третьего порядка теории возмущений, «многочастичные» методы, уже не являются универсальными, а их применение возможно лишь для конкретных элементов с определенными в каждом частном случае всеми возможными переходами, что для многоэлектронных элементов является трудноразрешимой и крайне трудоемкой задачей.

Таким образом, для корректного и универсального метода расчета сечений столкновительных процессов и получения надежных результатов требуется применение приближения искаженных волн с использованием достаточно совершенных квантово-статистических моделей вещества описания состояний плазмы в широком диапазоне температур и плотностей, например, таких, как модель самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) [19, 20]. В модели ХФС используется 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 настоящей работе рассматриваются вопросы сходимости сечений процессов неупругой ионизации атомов и ионов электронным ударом при расчетах в приближении искаженных волн с целью оптимизации вычислений, а также их

применения при проведении массовых вычислений дифференциальных и полных сечений. В качестве примеров для иллюстраций скорости сходимости выбраны результаты расчетов сечений ионизации атомов азота и иона железа с зарядом $3+$ (Fe IV) различных атомных оболочек. Для расчета волновых функций электронов дискретного и непрерывного спектров использован самосогласованный потенциал, рассчитываемый по квантово-статистической модели Хартри-Фока-Слэтера. Обнаружено, что пределы индексов суммирования при расчетах сечений, в первую очередь, существенно зависят от энергий частиц, а выраженной зависимости от степени ионизации, атомного номера и состояния иона не наблюдается. Показано, что количество членов ряда может быть существенно снижено по сравнению с теоретическими пределами.

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 Приближение искаженных волн

Столкновительные процессы возбуждения и ионизации атомов и ионов электронами не имеют точного аналитического решения, т.к. относятся к ряду 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 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 [17, 21]

$$d\sigma_{\gamma_0\gamma}^{ion} = \sum_{\kappa} [d\sigma'_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) + d\sigma''_{\kappa}(nl, \varepsilon^* \lambda^*)] = N_{nl} d\sigma_{\gamma_0\gamma}, \quad (1)$$

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:

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

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

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 [17]:

$$P_{\kappa}^d = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)}{2\kappa + 1}} \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times R_{nl, \varepsilon^* \lambda^*; \varepsilon \lambda, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa)}, \quad (4)$$

$$P_{\kappa'\kappa}^e = (-1)^{\kappa + \kappa'} \sqrt{(2\kappa + 1)(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \lambda^* \end{Bmatrix} R_{\varepsilon \lambda, \varepsilon^* \lambda^*; nl, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa')}. \quad (5)$$

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, $r_{<} = \min(r', r'')$, $r_{>} = \max(r', r'')$. Если опустить суммирование по орбитальным моментам налетающего электрона до и после столкновения λ , λ' в (2) и (3), то получаемые по формуле (1) дифференциальные сечения носят название парциальных дифференциальных сечений для заданных λ и λ' .

Учет интерференционных и обменных эффектов существенно меняет поведение дифференциальных сечений (1).

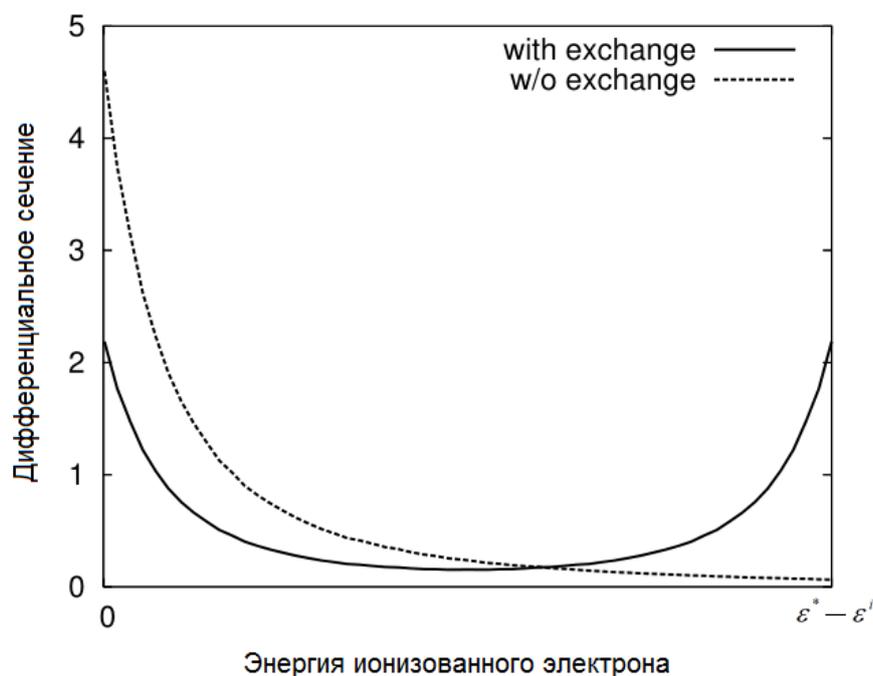


Рис. 1. Зависимость дифференциального сечения ионизации от энергии ионизованного (выбитого электрона) с учетом (with exchange) и без учета (w/o exchange) интерференционного и обменного членов в приближении искаженных волн

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 (6) 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.

Для вычисления эффективного сечения ионизации электрона с квантовыми числами $n\ell$ необходимо просуммировать полученные дифференциальные сечения (1) по моментам λ^* и проинтегрировать по энергиям ε^* ионизованного электрона:

$$\sigma_{\gamma_0\gamma} = \sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon - \varepsilon^i} \frac{d\sigma_{\gamma_0\gamma}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*, \quad (6)$$

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

Диапазон значений κ и κ' , по которым производится суммирование прямых и обменных интегралов в (1), (2) и (3) соответственно, определяется отличием от нуля соответствующих символов Вигнера в (4) и (5). Что же касается максимальных значений орбитальных чисел λ^* , λ и λ' , по которым проводится суммирование в (2), (3) и (6), 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. Далее будет показано, что в расчетах не всегда следует проводить суммирование до значений $\lambda = \lambda_{max}$ – количество членов в соответствующих суммах в (2), (3) и (6), необходимое для корректного расчета сечений, можно будет сократить с ростом энергии рассеянного электрона.

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.

2 Сходимость рядов суммирования парциальных сечений

В формулах для вычисления сечений столкновительных процессов присутствует суммирование по орбитальным моментам λ свободных электронов. Как было отмечено ранее, это сильно усложняет расчеты.

Максимальные значения λ_{max} определяются условием существования классической области движения внутри атомной ячейки для свободного электрона с энергией ε , то есть условием

$$2\varepsilon + 2V(r_0) - \frac{\lambda_{max}(\lambda_{max} + 1/2)}{r_0^2} > 0, \quad (7)$$

Величина λ_{max} , определяемая по условию (7), растет с увеличением энергии ε и, очевидно, может достигать значений, абсолютно неприемлемых для практических расчетов. Например, для азотной плазмы при плотности 10^{-5} г/см³ и энергии электрона 300 эВ λ_{max} оказывается равным примерно 700, а для энергии электрона 30 кэВ – порядка 7000. В связи с этим возникает вопрос сходимости дифференциальных и полных сечений с ростом количества членов в рядах суммирования по орбитальным моментам электронов.

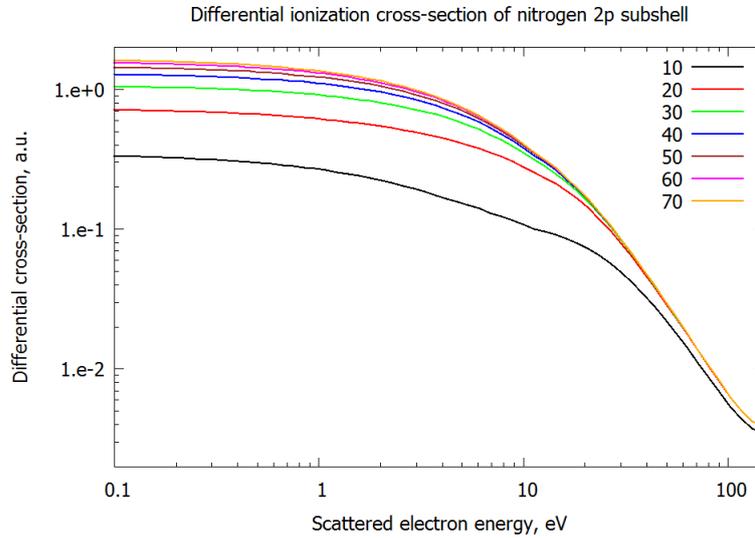


Рис. 2. Дифференциальные сечения ионизации подболочки 2p атома азота с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 300$ эВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$)

На Рис. 2 и Рис. 3 представлены дифференциальные сечения ионизации атома азота, рассчитанные для различного количества членов в суммах рядов по λ , λ' и λ^* в выражениях (2), (3) и (6). Как можно видеть, упомянутые ряды сходятся достаточно медленно, особенно в районе малых энергий рассеянного электрона. С ростом энергии ионизованной частицы сходимость дифференциальных сечений улучшается, однако все равно необходимо учитывать 60-70 первых членов. Сходимость по λ , λ' и λ^* также снижается при увеличении энергии налетающего электрона, это также можно видеть по результатам расчетов полного сечения ионизации атома азота в зависимости от количества членов ряда (Рис. 4). Из представленных на Рис. 5, Рис. 6, Рис. 7 сечений ионизации иона железа с зарядом 3+ можно видеть схожую степень сходимости. Таким образом, исходя из результатов проведенных расчетов следует, что сходи-

мость по λ, λ' и λ^* в выражениях (2), (3) и (6) в заметной степени не зависит от номера элемента и степени заряда иона. Также можно сделать вывод, что для корректного вычисления сечений можно ограничить величину λ_{max} гораздо меньшим значением по сравнению с получаемым из соотношения (7), однако для больших значений энергий свободных электронов ряд по λ, λ' и λ^* сходится достаточно медленно и приходится учитывать уже не менее 70-80 членов, а при энергиях налетающего электрона, превышающих 10 кэВ – 100 членов.

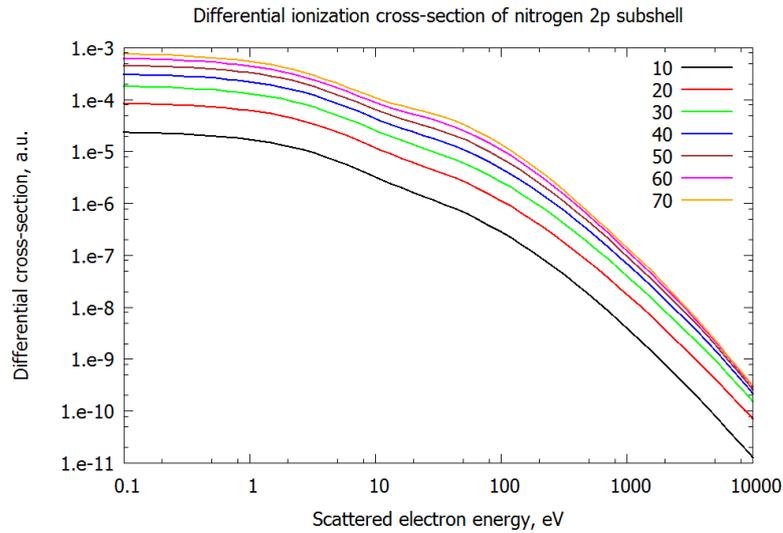


Рис. 3. Дифференциальные сечения ионизации подоболочки 2p атома азота с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 63$ кэВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$)

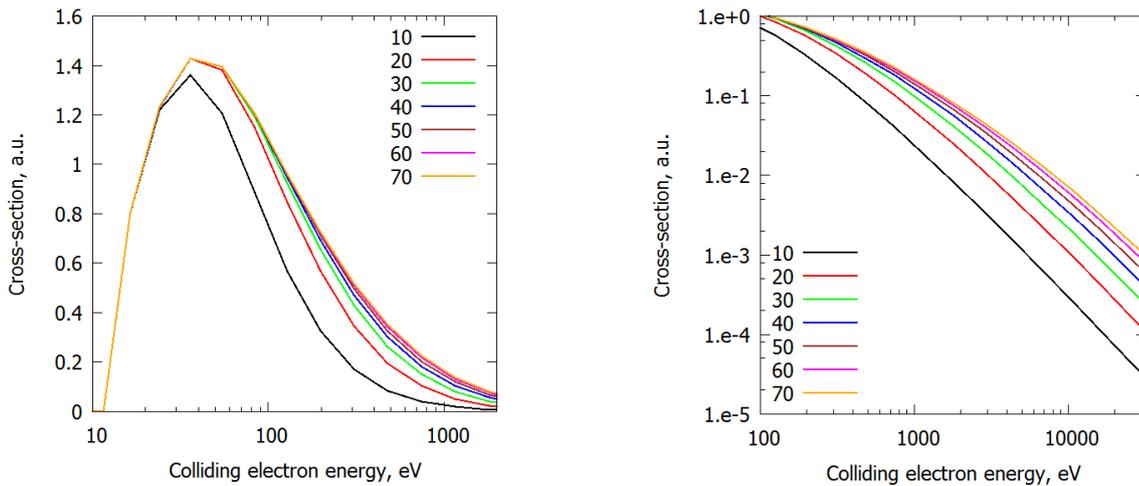


Рис. 4. Полные сечения ионизации подоболочки 2p атома азота, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$) [линейная шкала для сечений – рисунок слева, логарифмическая – справа]

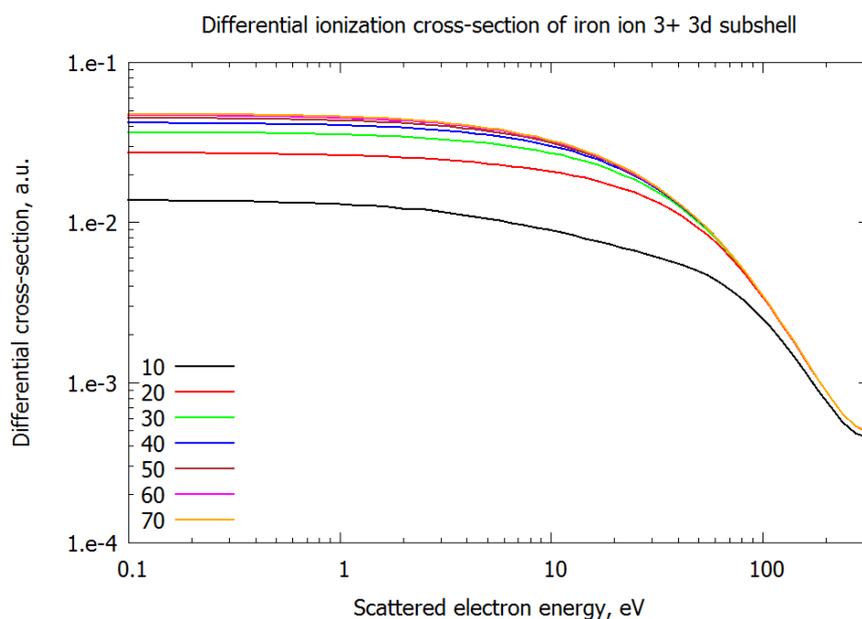


Рис. 5. Дифференциальные сечения ионизации подоболочки 3d иона железа 3+ с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 640$ эВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$)

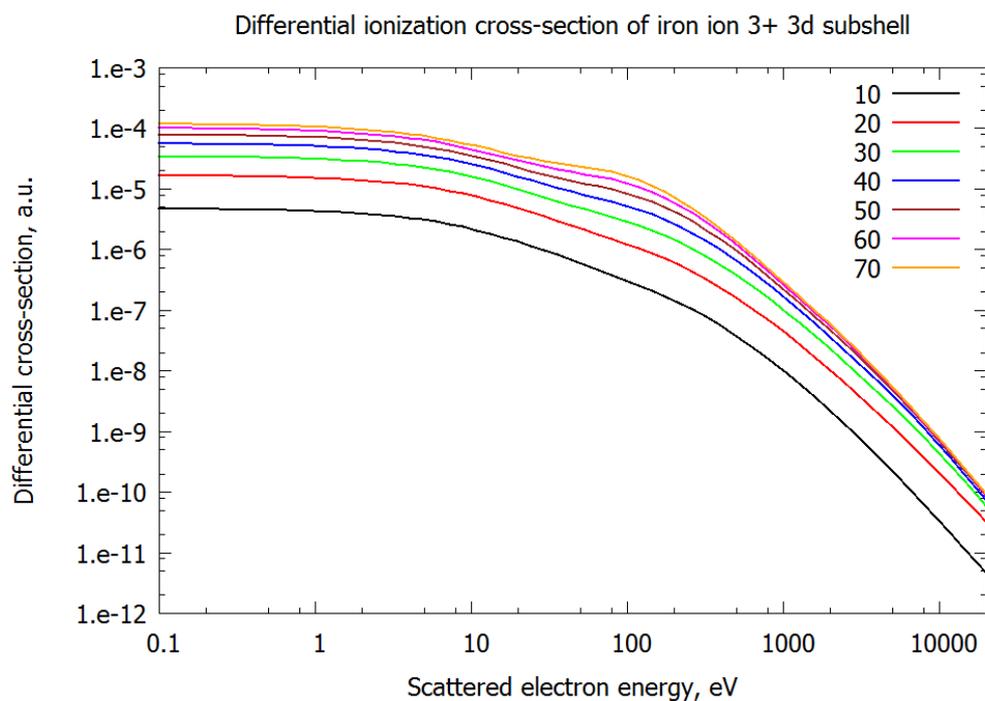


Рис. 6. Дифференциальные сечения ионизации подоболочки 3d иона железа 3+ с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 63$ кэВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$)

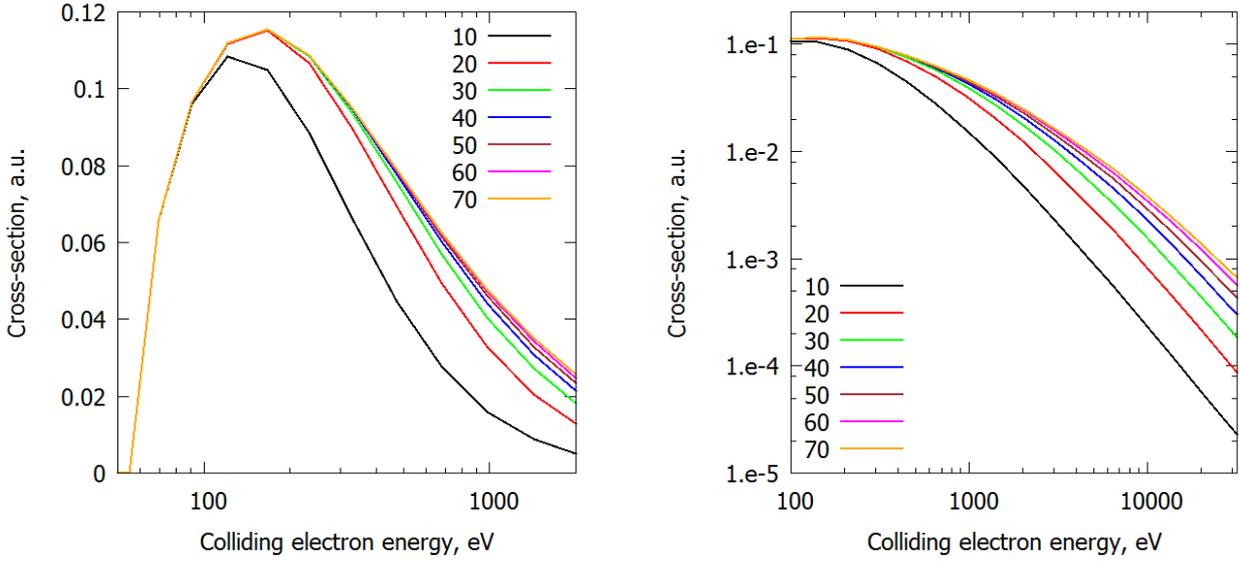


Рис. 7. Полные сечения ионизации подболочки 3d иона железа с зарядом 3+, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений λ_{max} ($\lambda_{max}=10, \dots, 70$) [линейная шкала для сечений – рисунок слева, логарифмическая – справа]

3 Сходимость по прочим индексам суммирования

Наряду с суммированием по орбитальным числам, в формулах для расчета сечений (1), (2) и (3) присутствует суммирование по индексам κ, κ' . Следует заметить, что физический смысл индекса κ для прямого и обменного члена различен. Если для первого члена κ соответствует мультипольности взаимодействия, то для второго члена κ является дополнительным индексом суммирования, а мультипольность взаимодействия учитывается при суммировании по κ' . Диапазон значений κ и κ' определяется отличием от нуля соответствующих $3jm$ и $6j$ символов и лежит в пределах:

$$\kappa_{min} \leq \kappa \leq \kappa_{max}, \quad \kappa'_{min} \leq \kappa' \leq \kappa'_{max},$$

где

$$\begin{aligned} \kappa_{min} &= \max(|\lambda^* - \ell|, |\lambda' - \lambda|), & \kappa_{max} &= \min(\ell + \lambda^*, \lambda + \lambda'), \\ \kappa'_{min} &= \max(|\lambda^* - \lambda|, |\lambda' - \lambda^*|), & \kappa'_{max} &= \min(\lambda^* + \lambda, \lambda' + \ell). \end{aligned}$$

Как можно видеть, что для прямой части сечения значение κ_{max} ограничено величиной $\ell + \lambda^*$, т.к. максимальная величина $\lambda + \lambda'$ гораздо больше, принимая во внимание сходимость рядов по λ и λ' . Аналогично при вычислении обменного и интерференционного членов пределы суммирования по κ' ограничены $\lambda' + \ell$. Таким образом, предел по максимальной величине κ и κ' , а значит и по количеству членов суммирования, должен быть ограничен также в пределах

λ_{max} , принимая во внимание сравнительную малость ℓ . Но, учитывая смысл индексов κ и κ' , можно ожидать по ним более быстрой сходимости рядов в (1), (2) и (3) в сравнении со скоростью сходимости по λ , λ' и λ^* .

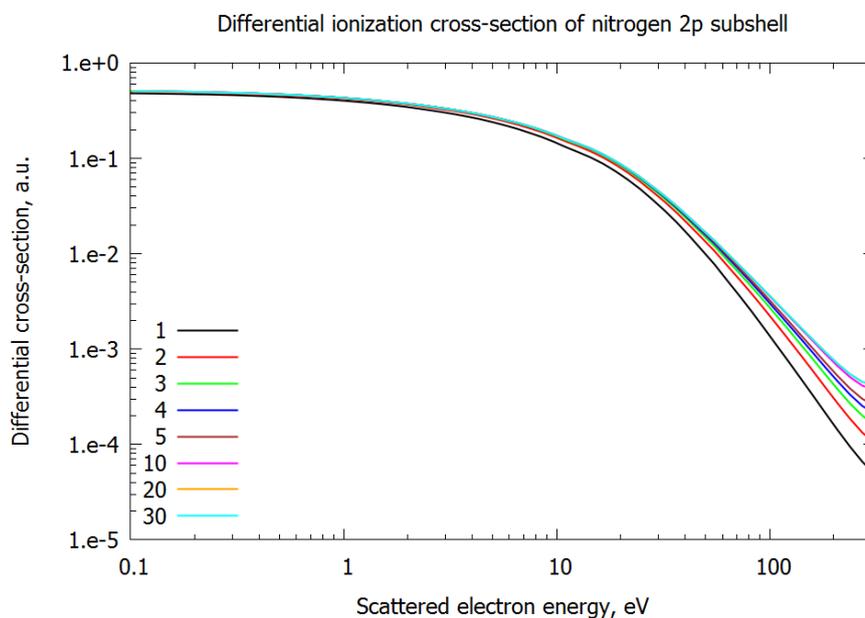


Рис. 8. Дифференциальные сечения ионизации подболочки 2p атома азота с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 630$ эВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ_{max} ($\kappa_{max}=1, \dots, 30$)

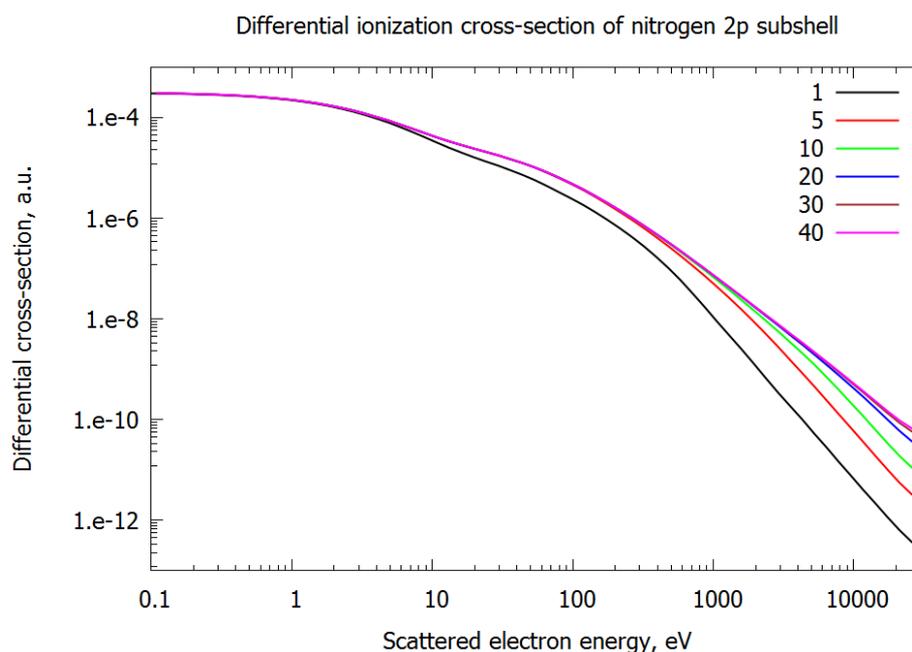


Рис. 9. Дифференциальные сечения ионизации подболочки 2p атома азота с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 63$ кэВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ_{max} ($\kappa_{max}=1, \dots, 40$)

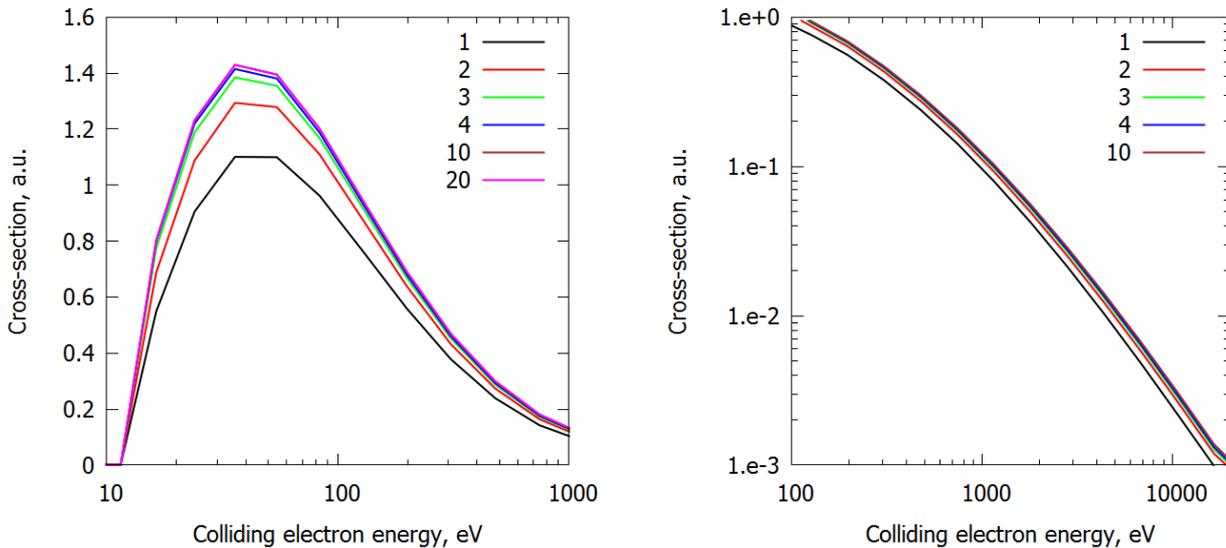


Рис. 10. Полные сечения ионизации подболочки 2р атома азота, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ_{max} ($\kappa_{max}=1, \dots, 20$) [линейная шкала для сечений – рисунок слева, логарифмическая – справа]

На 8 и 9 представлены результаты расчета дифференциальных сечений ионизации атома азота для различного количества членов в сумме (1) по κ . Видно, что сходимость дифференциальных сечений ухудшается при росте энергии ионизованного электрона. В итоге при близких энергиях вылетающих частиц предел достигается в районе $\kappa_{max}=30-40$. Однако с ростом энергии налетающего электрона эти области вносят все меньший вклад в результирующее полное сечение ионизации из-за крайне малых значений дифференциальных сечений, поэтому сходимость полного сечения ионизации остается примерно одинаковой независимо от энергии ионизирующей частицы (10). Следовательно, при необходимости применения только полных сечений ионизации необходим учет только первых 10-20 членов в сумме (1). Схожую сходимость по κ демонстрируют результаты расчетов для ионизации иона железа с зарядом 3+ (11 и 12).

Исходя из отмеченного выше физического смысла индексов κ и κ' в выражениях прямого и обменного членов соответственно, можно ожидать схожей с κ сходимости и при суммировании рядов по κ' (13). Следует, однако, заметить, что поскольку интерференционный и обменный эффекты приводят к уменьшению значения сечения, то сечение ионизации соответственно уменьшается с ростом количества членов в суммах по κ' .

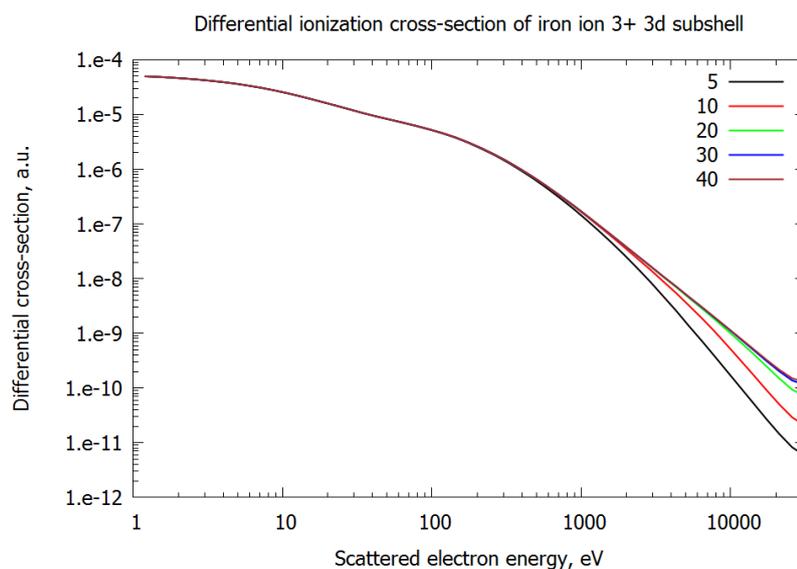


Рис. 11. Дифференциальные сечения ионизации подболочки 3d иона железа 3+ с энергией налетающего электрона $\varepsilon = 63$ кэВ, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ_{max} ($\kappa_{max} = 5, \dots, 40$)

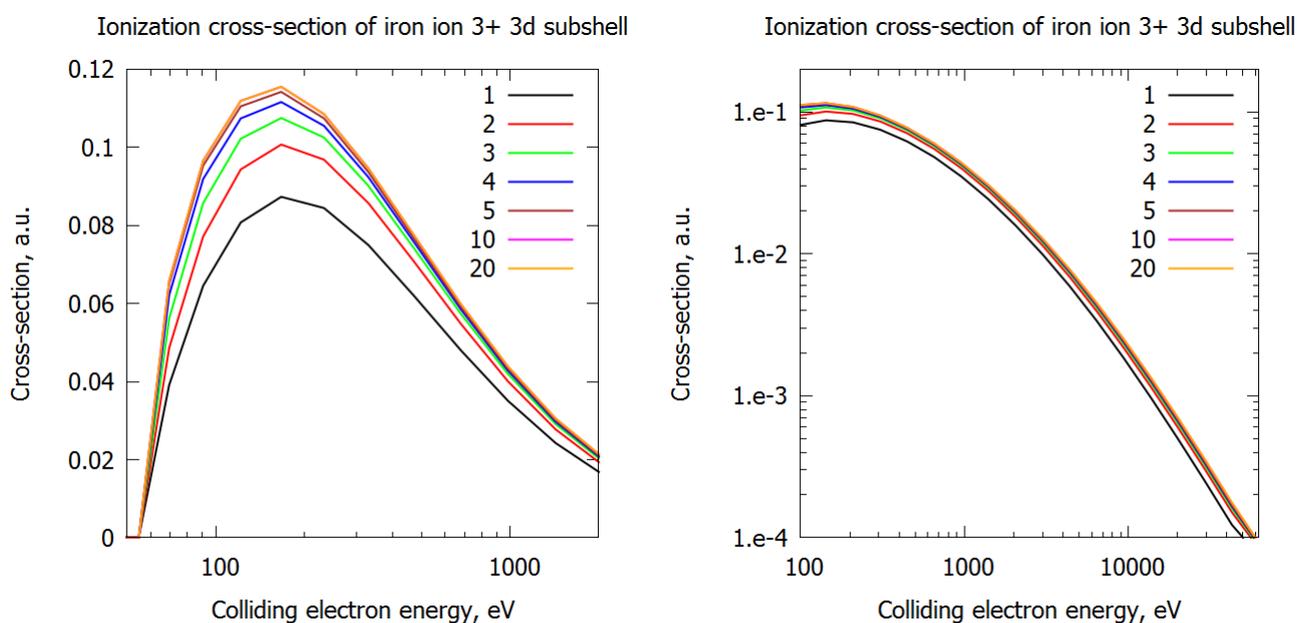


Рис. 12. Полные сечения ионизации подболочки 3d иона железа с зарядом 3+, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ_{max} ($\kappa_{max} = 1, \dots, 20$) [линейная шкала для сечений – рисунок слева, логарифмическая – справа]

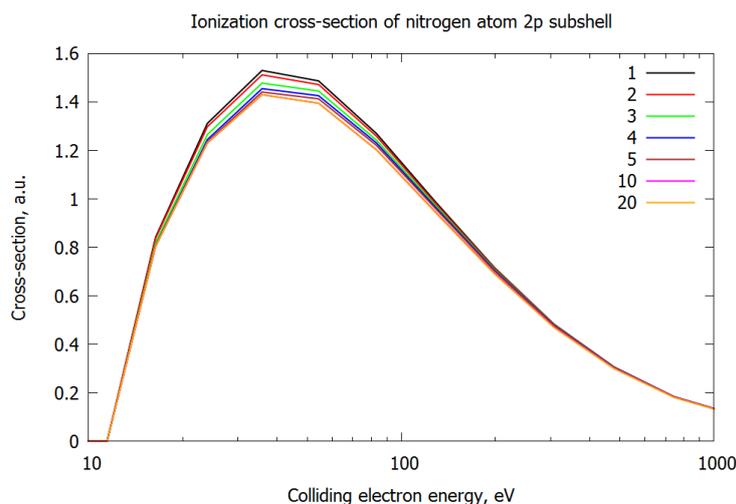


Рис. 13. Полные сечения ионизации подоболочки 2p атома азота, рассчитанные в приближении искаженных волн для различных значений κ'_{max} ($\kappa'_{max} = 1, \dots, 20$)

В общем случае при оптимизации расчета сечений ионизации следует учитывать интересующий диапазон энергий, в котором ведется расчет сечений, наличие необходимости в значениях дифференциальных сечений, а также желательно контролировать сходимость по κ и κ' в процессе счета. Можно также отметить, что для гарантированного результата в общем случае, при энергиях частиц, не превышающих 50 кэВ, требуется учитывать порядка 40-50 первых членов по κ и κ' .

4 Волновые функции по модели Хартри-Фока-Слэтера

Для вычисления сечений столкновительной ионизации необходимо иметь следующие характеристики атома: волновые функции электронов, уровни энергии и населенности уровней. Они 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 ХФС, уравнения и способы решения нижеприведенных уравнений по-

дробно описаны в [19, 21]. Ниже приведены только некоторые основные выражения и формулы.

В модели ХФС плотность распределения электронов в среднем атоме может быть представлена в виде двух слагаемых от связанных и свободных электронов

$$\rho(r) = \rho_1(r) + \rho_2(r),$$

плотность связанных электронов описывается суммой вклада электронов с энергиями ε_{nl} и числами заполнения N_{nl}

$$\rho_1(r) = \sum_{\varepsilon_{nl} < \varepsilon_0} N_{nl} |\psi_{nl}(r)|^2, \quad N_{nl} = \frac{2(2\ell + 1)}{1 + \exp \frac{\varepsilon_{nl} - \mu}{\theta}},$$

где ε_0 есть эффективная граница непрерывного спектра, μ – химический потенциал, θ – температура вещества.

Плотность свободных электронов описывается интегралом

$$\rho(r) = \int n(r, p) \frac{2d^3 p}{(2\pi)^3} \quad (8)$$

по распределению Ферми-Дирака

$$n(r, p) = \frac{1}{1 + \exp \left(\frac{p^2 / 2 - V(r) - \mu}{\theta} \right)} \quad (9)$$

и интегрированием по области

$$\frac{p^2}{2} - V(r) > \varepsilon_0 \quad (p \geq 0). \quad (10)$$

Таким образом, из (8), используя (9) и (10), получим выражение для плотности свободных электронов

$$\rho_2(r) = \frac{(2\theta)^{3/2}}{2\pi^2} \int_{y_0}^{\infty} \frac{y^{1/2} dy}{1 + \exp \left(\frac{y - V(r) - \mu}{\theta} \right)},$$

$$y_0 = y_0(r) = \max \left\{ 0; \frac{V(r) + \varepsilon_0}{\theta} \right\}.$$

Полный потенциал представляется в виде суммы кулоновской и обменной частей

$$V(r) = V_c(r) + \delta V_{ex}(r). \quad (11)$$

Потенциал $V_c(r)$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta V_c = -4\pi Z\delta(\vec{r}) + 4\pi\rho(r).$$

Обменная поправка к потенциалу выражается формулой

$$\delta V_{ex}(r) = \frac{\pi\rho(r)}{\theta} \left[1 + 5.7 \frac{\rho(r)}{\theta^{3/2}} + \frac{\pi^4}{3} \frac{\rho^2(r)}{\theta^3} \right]^{-1/3}.$$

Для нахождения волновой функции электрона $\psi(\vec{r})$ потенциал, полученный по модели Хартри-Фока-Слэтера, подставляется в уравнение Шредингера

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi + U(r)\psi = \varepsilon\psi,$$

где $U(r)$ – потенциальная энергия рассматриваемого электрона, определяемая потенциалом ХФС (11):

$$U(r) = -V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}.$$

Применяя метод разделения переменных в сферических координатах, то есть полагая

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} R(r) (-1)^m Y_{\ell m}(\vartheta, \phi),$$

получим уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции $R(r)$

$$-\frac{1}{2}R'' + \left[-V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} \right] R = \varepsilon R. \quad (12)$$

Уравнение (12) имеет решения, отвечающие как дискретному, так и непрерывному спектру. Для его решения используются прямые численные методы, например фазовый метод [23, 24]. На 14 показаны численные решения уравнения с потенциалом в модели ХФС и более простой модели Томаса-Ферми в сравнении с водородоподобным приближением. Как можно увидеть, радиальные волновые функции $R(r)$ существенно отличаются в зависимости от ис-

пользуемого метода или приближения. Особенно эти отличия заметны для водородоподобного приближения, которое имеет область применения, ограниченную водородоподобными ионами. Различия в результатах между моделями растут по мере повышения плотности вещества.

Однако при расчете сечений и скоростей столкновительных процессов, ввиду многократного суммирования по моментам свободных электронов и интегрирования по энергиям, требуется вычисление большого количества волновых функций электронов непрерывного спектра. Поэтому фазовый метод численного решения уравнения Шредингера целесообразно использовать для расчета волновых функций электронов дискретного спектра, а для вычисления волновых функций свободных электронов в поле иона использовать квазиклассическое приближение [25], которое требует меньших вычислительных затрат.

В квазиклассическом приближении радиальные компоненты волновых функций вычисляются следующим образом [19]:

$$R_{\varepsilon\lambda}(r) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\xi(r)}{|p(r)|}} K_{1/3}(\xi(r)) & (r \leq \tilde{r}), \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{\xi(r)}{p(r)}} [J_{-1/3}(\xi(r)) + J_{1/3}(\xi(r))] & (r \geq \tilde{r}), \end{cases} \quad (13)$$

$$\xi(r) = \left| \int_{\tilde{r}}^r p(r') dr' \right|,$$

\tilde{r} – точка поворота,

$$p = p_{\varepsilon\lambda}(r) = \sqrt{2\varepsilon + 2V(r) - \frac{(\lambda + 1/2)^2}{r^2}}.$$

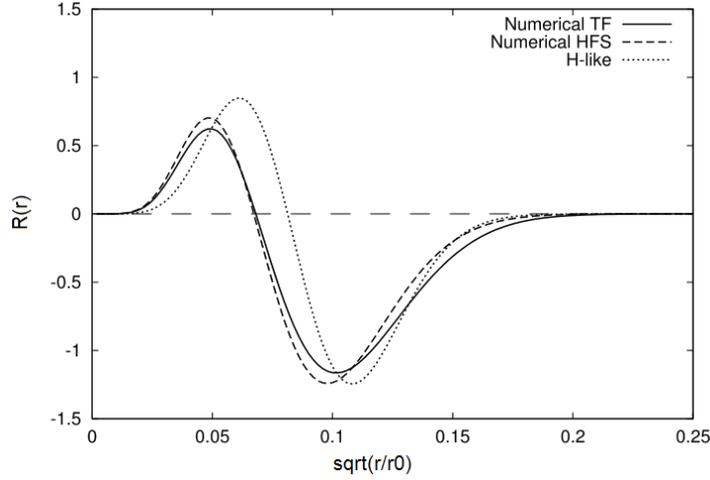


Рис. 14. Численные решения уравнения Шредингера в потенциалах Томаса-Ферми (Numerical TF) и Хартри-Фока-Слэтера (Numerical HFS) и водородоподобное приближение (H-like)

Используя асимптотику функций Бесселя и интерполяцию в окрестности точки поворота \tilde{r} , формулы (13) можно представить в виде, более удобном при проведении расчетов:

$$R_{\varepsilon\lambda}(r) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi|p|}} e^{-\xi} & (\xi \geq 0.5; r < \tilde{r}), \\ \frac{\sqrt{2}}{3} \left[b(r)(r - \tilde{r}) + \frac{0.826994}{b(r)} \right] & (\xi < 0.5), \\ \sqrt{\frac{2}{\pi p}} \sin\left(\xi + \frac{\pi}{4}\right) & (\xi \geq 0.5; r > \tilde{r}), \end{cases}$$

$$b(r) = 1.11985 \left\{ \frac{2}{9r^2} [\varepsilon(r + \tilde{r}) + \tilde{r}V(\tilde{r})] \right\}^{1/6}.$$

При $r_0 \gg \tilde{r}$ квазиклассические функции удовлетворяют следующим условиям нормировки:

$$\int_0^{r_0} R_{\varepsilon\lambda}^2(r) dr \approx \int_{\tilde{r}}^{r_0} \frac{2}{\pi p} \sin^2\left(\xi + \frac{\pi}{4}\right) dr \approx \frac{1}{\pi} \int_{\tilde{r}}^{r_0} \frac{dr}{p_{\varepsilon\lambda}(r)}.$$

При этом, если $r_0 \rightarrow \infty$, то

$$\int_0^{\infty} R_{\varepsilon\lambda}(r) R_{\varepsilon'\lambda}(r) dr = \delta(\varepsilon - \varepsilon'),$$

что соответствует нормировке, обычно применяемой для волновых функций непрерывного спектра, имеющих при $r \rightarrow \infty$ асимптотику

$$R_{\varepsilon\lambda}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin(kr + \varphi_0),$$

где $k = \sqrt{2\varepsilon}$, φ_0 – некоторый сдвиг фазы, определяемый видом потенциала $V(r)$ и зависящий от λ и ε .

В практических расчетах применение квазиклассического приближения значительно ускоряет вычислительный процесс, обеспечивая при этом необходимую точность волновых функций. Вид радиальных частей волновых функций непрерывного спектра, рассчитанных в квазиклассическом приближении, и численные решения уравнения Шредингера представлены на 15.

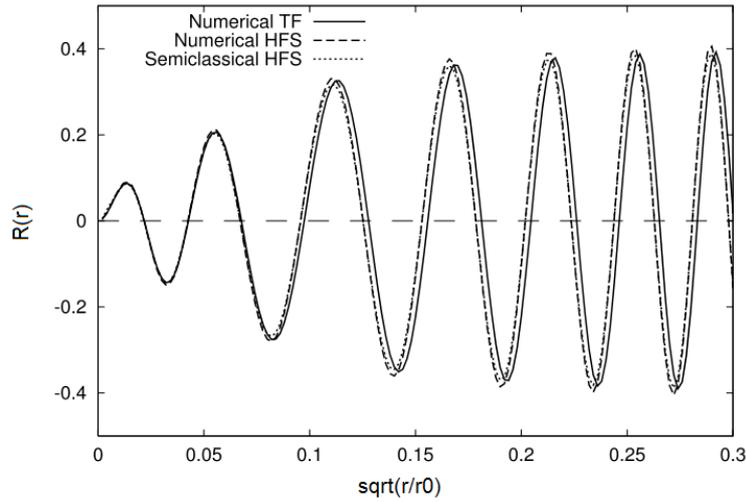


Рис. 15. Численные решения уравнения Шредингера в потенциалах Томаса-Ферми (TF) и Хартри-Фока-Слэтера (HFS) и квазиклассическое приближение в потенциале Хартри-Фока-Слэтера (Semiclassical HFS)

Как видно из асимптотики, частота осцилляций волновых функций непрерывного спектра пропорциональна k и при больших энергиях ε требуется детализированная сетка.

В таком случае период осцилляций непрерывных волновых функций слабо зависит от r и оптимально использовать линейную сетку, т.е.

$$r_i = r_0(i / i_{\max}). \quad (14)$$

Минимально допустимое число узлов сетки i_{max} вычисляется из асимптотики, которая применима для больших ε . Вблизи границы атомной ячейки $r_0 = r_{i_{max}}$ можно записать соотношение:

$$r_2 - r_1 \approx \pi / N,$$

где r_1 и r_2 – последовательные нули радиальной части волновой функции $R_{\varepsilon l}$, N – число узлов на одну осцилляцию.

Таким образом, для выбора числа узлов сетки i_{max} для функции $R_{\varepsilon l}$ получим следующую формулу

$$i_{max} = \frac{N r_0 \sqrt{2\varepsilon}}{\pi}.$$

При проведении расчетов следует полагать $n \geq 10$.

С другой стороны, для волновой функции электронов дискретного спектра удобно использовать сетку вида

$$r_i = (i / i_{max})^2 r_0. \quad (15)$$

Так как в процессе вычисления сечений необходимо проводить интегрирование произведений волновых функций непрерывного и дискретного спектра энергий, при проведении расчетов сетку следует выбирать следующим образом. Поскольку волновые функции дискретного спектра, как правило, отличны от нуля в малой части атомной ячейки $[0, r']$, то в этой области выбирается сетка вида (15). Исходя из анализа волновых функций, число узлов на отрезке $[0, r']$ должно быть ≥ 1000 . На оставшейся части ячейки $[r', r_0]$ используется равномерная сетка вида (14) с шагом, равным

$$\Delta r = \frac{r_0}{i_{max}} = \frac{\pi}{n \sqrt{2\varepsilon}}.$$

В случаях, когда подынтегральной функцией является произведение волновых функций одного вида спектра, выбирается одинаковая сетка на всем отрезке интегрирования.

Заключение

По результатам проведенных исследований сходимости сечений ионизации можно сделать следующие выводы. Сходимость сечений по различным индексам суммирования имеет разную скорость и разнородный характер в зависимости от энергий налетающих и ионизованных частиц. Эти различия не всегда хорошо заметны при рассмотрении зависимостей сечений от энергий налетающего электро-

на, но серьезно проявляются при сравнениях дифференциальных сечений ионизации, особенно в областях больших энергий. Это накладывает определенные трудности на процесс оптимизации расчетов. С другой стороны, становится очевидным, что при проведении практических расчетов пределы по количеству членов в рядах суммирования, особенно для парциальных сечений, могут быть существенно уменьшены по сравнению с теоретическими оценками. Такая разница растет с ростом энергий электронов и мало зависит от параметров плазмы. Это способно существенно ускорить вычисления и делает возможным проведение массовых расчетов сечений при современном развитии вычислительных комплексов. При этом необходимо заметить, что при проведении оптимизации и повышении эффективности счета следует уделять особое внимание тому факту, что индексы, по которым проводится суммирование, связаны между собой посредством квантово-механических коэффициентов, поэтому требуется применять тщательно продуманные и взвешенные критерии определения пределов суммирования с целью корректного учета всех значащих членов.

Библиографический список

- 1 Е. И. Попов Спускаемые аппараты. — М: Знание, 1985.
- 2 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.
- 3 W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$ // Ztschr. Phys. — 1970. — V. 232 — P. 101.
- 4 Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений. — М.: Издательство иностранной литературы, 1951.
- 5 Н. Bethe. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie // Ann. Phys. — 1930. — V. 397. — P. 325-400.
- 6 U. Fano. Ionizing collisions of very fast particles and the dipole strength of optical transitions // Phys. Rev. — 1954. — V. 95, N. 5. — P. 1198.
- 7 L. Vriens. Binary-encounter electron-atom collision theory // Phys. Rev. — 1966. — V. 141, N. 1. — P. 88.
- 8 R. C. Stabler. Classical impulse approximation for inelastic electron-atom collisions // Phys. Rev. — 1964. — V. 133. — P. A1268–A1273.
- 9 M. Gryziński. Two-Particle Collisions. I. General Relations for Collisions in the Laboratory System // Phys. Rev. — 1965. — V. 138. — P. A305, A332, A336.
- 10 C. Moller. Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie // Ann. Phys. — 1932. — V. 14. — P. 531-585.
- 11 S. M. Seltzer. Cross Sections for Bremsstrahlung Production and Electron-Impact Ionization // Monte Carlo Transport of Electrons and Photons / Ed. by T. M. Jenkins, W. R. Nelson, and A. Rundi. New York: Plenum, 1988. P. 81.
- 12 Y. K. Kim and M. E. Rudd. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization // Phys. Rev. A. — 1994. — V. 50. — P. 3954-3967.

13 H. A. Bethe and R. Jackiw. *Intermediate Quantum Mechanics*. Westview Press, 1986, 1997.

14 H. Bethe. Bremsformel für Elektronen relativistischer Geschwindigkeit // *Zeitschrift für Physik* – 1932. – V. 76, N. 5-6. – P. 293–299.

15 В.И. Очкур. О методе Борна-Оппенгеймера в теории атомных столкновений // *ЖЭТФ*. – 1963. – Т. 45 – С. 735.

16 V. I. Ochkur. Ionization of the hydrogen atom by electron impact with allowance for the exchange // *Sov. Phys. JETP*. – 1965. – V. 20. – P. 1175-1178.

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

18 D. Bote, F. Salvat. Calculations of inner-shell ionization by electron impact with the distorted-wave and plane-wave Born approximations // *Phys. Rev. A*. – 2008. V. 77. – P. 042701.

19 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.

20 V.F. Rozsnyai. Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density // *Phys. Rev. A*. – 1972. – V. 5, N. 3. – P. 1137.

21 В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная, В.С. Захаров. *Квантово-статистические методы расчета оптических и термодинамических свойств плотной плазмы // Энциклопедия низкотемпературной плазмы Том VII-1. Ч. 2. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме; Серия Б/ Под ред. Фортова В.Е. Москва: Янус-К, 2008. С. 378-435.*

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

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

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

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

Оглавление

Введение	3
1 Приближение искаженных волн	5
2 Сходимость рядов суммирования парциальных сечений	8
3 Сходимость по прочим индексам суммирования	12
4 Дополнение. Волновые функции по модели Хартри-Фока-Слэтера	16
Заключение.....	22
Библиографический список.....	23