



СООбЩЕНИЯ Объединенного института ядерных исследований дубна

P4-93-200

О.Лхагва\*, Л.Хэнмэдэх<sup>1</sup>

УГЛОВОЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЖЕКТИРУЕМЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ГЕЛИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

<sup>1</sup> Технический университет, Улан-Батор, Монголия \*Постоянный адрес: Монгольский государственный университет, Улан-Батор, 210646, Монголия

1.Введение

Проблема описания электронов, эжектируемых при ионизации атомов и молекул быстрыми заряженными частицами. имеет важное значение в атомной физике и занимает центральное место в изучении переноса энергии в веществе быстрыми частицами [1-4]. Такого рода исследования имеют непосредственное отношение ко многим разделам физики, таким как астрофизика, физика верхней атмосферы и плазмы, созлание летекторов заряженных частиц, а также молелирование радиационного повреждения материлов и биологических тканей и т.д. Известно, что первичный ионизационный процесс сильно зависит от природы ионизирующего пучка, В то время как вторичные процессы ионизации и диссоциативные возбуждения обуславливаются. главным образом. низкоэнергетическими электронами. испушенными NOU В этом отношении первичных процессах. знание характеристик вторичных электронов имеет весьма важное значение. Наряду с этим слектр эжектированных электронов имеет лучшее разрешение. чем спектр потерь рассеянных частии. так как при этом его разрешение не зависит от падающего пучка и отношение сигнала к шуму практически много больше, чем при регистрации остаточных ионов.

При ионизации атома электронным ударом два вылетающих электрона являются идентичными. Однако медленный из двух электронов, появившихся в результате столкновения, как правило, принимается вторичным (эжектируемым), а быстрый электрон-первичным (рассеянным). В дальнейшем эти рассеянный и эжектированный электроны обозначаются индексами а и ь соответственно.

Наиболее полная и надетная проверка теоретического описания динамики ионизационного столкновения может осуществляться ממח помоши эксперимента. в котором оба электрона одновременно регистрируются на совпадение под телесными углами dΩ, dΩ, и тем самым измеряются тройные дифференциальные сечения (TIC) do<sup>3</sup>/dΩ\_dΩ\_dE. Регистрируя только один из двух конечных электронов, можно определить двойное дифференциальное сечение (ДДС) d<sup>2</sup>σ/dΩdE. Этс равносильно интегрированию только что упомянутого ТДС ПO угловому распределению нерегистрируемого (Эжектируемого или рассеянного) электрона. Дальнейшее интегрирование ДДС по оставшемуся телесному углу dΩ дает так называемое одинарное дифференциальное сечение (ОДС) do/dE. определяющее распределение выбитого NJIN рассеянного электрона только по кичетической энергии. Наконец, интегрирование ОДС по энергии потери Е=Е\_-Е\_ или по энергии эжектированного электрона в, определяет полное ионизационное сечение (ПИС). Хотя ДДС менее чувствительно к деталям ионизационного

механизма, чем ТДС, но оно является более эффективным щупом для проверки теории и эксперимента по сравнению с ПИС процесса.

Гелий является простейшей атомной системой с более чем одним электроном, для которой как теоретическое, так и экспериментальное исследования могут быть выполнены с большой точностью. Кроме того, такое исследование представляет специальный интерес для калибровки экспериментальной техники<sup>[3,4]</sup>.

ранние экспериментальные Самые результаты по АДС сообшались<sup>[5,6]</sup> в 1930- е годы. В последние 20 лет проведен ряд экспериментов по измерению ALC ионизации атомов электронным<sup>[3,4,7-12]</sup> ударом. ДДС ионизации атомов некоторых простейших газов были измерены<sup>[7]</sup> (Опал и др., 1972) методом скрещенных пучков при энергиях падающего электрона 50-2000 эВ в области угла эжекции 30°-150°, для энергии выбитого электрона в интервале 4-200 эВ. Ода и др.<sup>(В)</sup> измерили ДДС на гелии и криптоне при энергиях падающего электрона 500 и 1000 эВ в интервале углов эжекции 10°-130°. У них нижнее значение энергии эжекции было 24 эВ. Абсолютные ДДС ионизации атома гелия электронным ударом были измерены<sup>[9]</sup> (Радд и Дубойс, 1977) при энергиях налетаюшего электрона 100 и 200 эВ в угловом интервале 10°-130°. Измерение проведено для энергий эжекции E<sub>ь</sub>≥4 эВ. Также проведены<sup>[10]</sup> (Шин и Шарп, 1979) измерения ДДС реакции Не(e, 2e) Не<sup>+</sup> при энергиях падающего электрона 50, 100, 200 и 300 эВ в области углов эжекции 6°-156°. В работе[11] (Мэнсон и др.1976) были проведены экспериментальное и теоретическое исследования поведения ДДС реакции He(e,2e)He<sup>+</sup> при энергии падающего электрона 2 кэВ.

проводилось несколько<sup>[9-11]</sup> экспериментальных Недавно исследований по угловым и энергетическим распределениям электронов эжекции и рассеяния в He(e,2e)He<sup>+</sup>- реакции. Эрхардт и др.<sup>[3]</sup>(1986) измерили ДДС в угловом интервале 18°-150° при энергиях эжекции 2, И лри этом 4. 10. 20 40 эВ. Энергия падающего электрона варьировалась от 100 до 600 эВ. Для этих измерений использованы теже алпараты, на которых проведены эксперименты по совпадательному (е.2е)-спектру на гелии. Проведены<sup>[4]</sup> (Горуганту и Вонхам, 1986) также измерения ДДС ионизации атома гелия быстрыми электронами при энергиях падающего электрона 200, 500, 1000 и 2000 эВ в угловом интервале 30°-150°. Это явилось первым эксперименто в котором скорости рассеянного и выбитого электронов анализировались по времени пролета. Во всех предыдущих экслериментах скорости электронов определялись<sup>[3]</sup> с использованием электростатического анализатора энергии электрона.

Теоретическому исследованию углового и энергетического распределений электронов рассеяния и эжекции в Не(е, 2е)Не+- реакции скромное внимание. Имеется несколько vделено весьма расчетов<sup>[4,11,13-15]</sup>, проведенных в первом борновском приближении (ПБП) . В работе<sup>[13]</sup> (Белл и Кингстон, 1975) использованы для начального состояния гелия шестипараметрическая функция Хиллерааса, а в континууме поляризованные орбиталы. В расчетах<sup>[11]</sup> (Мэнсон и др.. 1976) в качестве волновых функций начального и конечного в континууме состояний гелия взяты решения уравнения Предингера с одним И тем же центральным потенциалом Германа и Скильмана. В работах<sup>[11,13]</sup> обсуждался вопрос о применимости ПБП к описанию ДДС Не(е,2е)Не+-реакции в рамках имевшихся в то время экспериментальных данных<sup>[7]</sup> Проведены также расчеты с использованием для выбитого электрона кулоновской функции (Балашов и др. 14], 1973) и функции Хартри-Фока с замороженным остовом (Сенашенко и др. 15], 1977). Вышеупомянутые расчеты показали. что с увеличением энергии налетающего улучшается электрона согласие Mexiv теоретическими оценками[11,13-15] и экспериментом[7].

В настоящее время задача описания углового и энергетического распределений электронов рассеяния и эжекции в реакции Не(е,2е)Не+ сталкивается с известными трудностями. Экспериментальные ланные<sup>[3,4,7-11]</sup> по абсолютному ДДС имеют серьезные расхождения, особенно при малых энергиях падающего электрона. Теоретические оценки, имеющиеся в отдельных областях кинематических переменных, получены лишь в ПЕП; они довольно сильно расходятся С экспериментом. Все еще не развито более серьезных теоретических подходов, выходящих за рамки ПБП, при помощи которых можно было бы получить достаточно надежные оценки в широкой области переменных. Вместе с тем необходимость использования таких данных в различных областях физики и в практических задачах требует детального знания зависимости сечений от энергии налетающего электрона Е , энергии Е, и угла 0, электрона эжекции. Остается также невыясненным вопрос о применимости ПБП для описания ААС ионизации гелия ударами быстрых электронов, особенно в свете недавних экспериментальных данных<sup>[3,4]</sup>. В этих экспериментах наряду с угловым и энергетическим распределениями определены также угловые коэффициенты ДДС, что позволяет извлечь информацию о механизме (е,2е)-процесса из спектра эдекции при разных мультипольных моментах.

В последнее время предпринимались некоторые попытки<sup>[1,2]</sup> разработать полуэмпирические модели, которые позволяли бы описать не только экспериментальные данные, но и получить ДДС реакции

Не(е,2е)Не<sup>+</sup> как функцию от переменных  $E_{o}, E_{b}$ и  $\theta_{b}$  в широкой области их изменения. В работе<sup>[2]</sup> (Ким, 1983) ДДС для электрона эжекции было представлено в виде суммы слагаемых, каждое из которых состоит из произведения углового коэффициента фитирования  $A_{n}(E_{o}, E_{b})$  и полинома Лежандра  $P_{n}(Cos\theta_{b})$  от угла эжекции  $\theta_{b}$  (n = 0, 1, ...6). Анализы и подгонки проведены на основе имевшихся в то время экспериментов, главным образом, данных Опала и др.<sup>[7]</sup>, и в области переменных о°< $\theta_{b}$ <180°, о≤ $E_{b}$ ≤40 эв и 100≤ $E_{b}$ ≤2000 зВ; получена таблица соответствующих значений коэффициентов  $A_{n}(E_{c}, E_{b})$ .

Совсем недавно в полуэмпирической модели (Рада, 1991) ЛІС реакции Не(е,2е)Не<sup>+</sup> представлено электрона эжекции в для в функциональной форме ,которая, как полагает автор, верна для любого набора параметров в широкой области энергии падающего электрона и энергии эжекции. В аналитическом выражении для сечения с самого начала заложены основные физические требования. а параметры определены фитированием под экспериментальные ланные<sup>[3,4]</sup> Полуэмпирическая формула<sup>[2]</sup> неплохо описывает ДДС при больших, а модель [1] - при более низких энергиях падающего электрона.

данной работе энергетическое и угловое распределения В электронов эжекции в Не(е,2е)Не<sup>+</sup>- реакции рассматриваются в ПБП в широкой области кинематических переменных. При этом ставилась основная цель выявить кинематические условия, при которых ПБП применимо к описанию характеристик (е.2е)-спектра эжекции на гелии. Провелен комплексный анализ наших результатов И имеющихся экспериментальных данных <sup>[3,4,7]</sup>, а также теоретических[13] полуэмпирических [1,2] оценок по ДДС, ОДС и угловым коэффициентам. Кроме того, исследовались поведение коэффициента угловой анизотропии при разных значениях энергий налетающего и ислущенного электронов. а также влияние разных мультипольных слагаемых ДАС на поведение характеристик электрона эжекции. Обсуждался также вопрос сходимости по числу учитываемых в расчетах ЛДС парциальных волн. ЛДС и ОДС при этом вычислялись путем численного интегрирования ТДС при помощи программы, разработанной и использованной [16,17] нами ранее для He(e,2e)He<sup>+</sup> B реакции совпадательного изучения **УСЛОЕИЯХ** (e,2e)-спектра. Было показано<sup>[16,17]</sup>, что при энергиях падающего электрона Е\_>4000 эВ ПБП применимо к описанию ТДС для (е.2е)-Наши расчеты проводились с использованием структурной процесса. модели гелия. которая привела к весьма хорошим оценкам характеристик (е,2е)-процесса в условиях совпадательного спектра.

В разделе 2 рассматривается теоретический формализм и приведены формулы для ДДС, ОДС и ПИС. В разделах 3 и 4 излагаются модель расчета, результаты, обсуждение и заключение.

## 2. Теоретический формализм

Процесс ионизации атома гелия ударом быстрой заряженной частицы представим как

$$He(\alpha_{\lambda})+P(\mathbf{k}_{\lambda}) \Rightarrow He^{+}(\mathbf{1}s)+P(\mathbf{k}_{\lambda})+e(\mathbf{k}_{\lambda}), \qquad (1)$$

где **к<sub>о</sub>. к<sub>а</sub>. к<sub>ь</sub> – импульсы падающей, рассеянной частиц и выбитого электрона соответственно. Киже будем пренебрегать спин-орбитальным взаимодействием и используем LS-представление для описания (е.ге)прецесса. ТДС ионизации атома в ПБП можно записать в виде<sup>[16-18]</sup>:** 

$$\frac{\mathrm{d}^{3}\sigma}{\mathrm{d}\mathrm{E}\mathrm{d}\Omega_{b}} = \frac{k_{a}}{k_{0}} |\mathrm{T}_{fi}|^{2} . \tag{2}$$

Здесь Т, - амплитуда ионизации:

$$T_{fi} = -\frac{2\pi}{Q^2} < \Phi_{k_{b,f}|k=1,2}^{(-)} | \sum_{e} e^{i Qr_{k}} | \Phi_{o} > , \qquad (3)$$

 $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_{o} - \mathbf{k}_{a}$  - переданный импульс,  $\Phi_{o}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2})$  - волновая функция основного состояния гелия, а  $\Phi_{\mathbf{k}_{o},\mathbf{r}_{1}}(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2})$  - волновая функция его конечного состояния, она должна быть ортогональна к функции основного состояния  $\Phi_{o}$ : таким образом,  $\Phi_{\mathbf{k}_{o},\mathbf{r}_{1}}$  выбирается в виде:

$$\Phi_{\mathbf{k}_{b,f}}^{(-)} = \psi_{\mathbf{k}_{b,f}}^{(-)} - \langle \Phi_{o} | \psi_{\mathbf{k}_{b,f}}^{(-)} \rangle \langle \Phi_{o} | .$$
(4)

Функция  $\psi_{\mathbf{k},f}^{(-)}$  по координате – электрона эжекции удовлетворяет граничным условиям, соответствующим расходящимся волнам, и нормирована как

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}_{\mathbf{b}'},\mathbf{f}'}^{(-)} | \Psi_{\mathbf{k}_{\mathbf{b}'},\mathbf{f}'}^{(-)} \rangle = \delta(\mathbf{E}_{\mathbf{b}} - \mathbf{E}_{\mathbf{b}'}) \delta(\mathbf{k}_{\mathbf{b}} - \mathbf{k}_{\mathbf{b}'}) \delta_{\mathbf{f}\mathbf{f}'} ,$$
 (5)

Для функций  $e^{i\mathbf{Qr}}$ ,  $\hat{\Psi}_{o}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2})$  и  $\psi_{\mathbf{k}_{o}}^{(-)}$  используем следующие разложения b.f

$$e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda\mu} i^{\lambda} j_{\lambda}(\mathbf{Q}\mathbf{r}) \mathbf{Y}^{*}_{\lambda\mu}(\mathbf{Q}) \mathbf{Y}_{\lambda\mu}(\mathbf{r}) , \qquad (6)$$

$$\Phi_{o}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) \approx \sum_{\mathbf{l}_{o},\mathbf{m}_{o}} a_{\mathbf{l}_{o}}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) Y_{\mathbf{l}_{o}\mathbf{m}_{o}}^{*}(\mathbf{r}_{1}) Y_{\mathbf{l}_{o}\mathbf{m}_{o}}(\mathbf{r}_{2}) , \qquad (7)$$

$$\psi_{\mathbf{k}_{b,f}}^{(-)} \approx \sum_{lm} i^{l} e^{i\hat{\delta}_{1}} F_{blm}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) Y_{lm}^{*}(\hat{\mathbf{k}}_{b}) , \qquad (8)$$

где  $j_{\lambda}(\mathbf{Qr})$  - функция Бесселя,  $Y_{1m}(\mathbf{r})$  - сферическая функция. Здесь  $\mathbf{a}_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$  суть коэффициенты разложения функции  $\Phi_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ .Функция  $\mathbf{F}_{\mathbf{b}^{\gamma}m}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$  представляется в виде:

$$F_{blm}(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ f_{E_{b}l}(\mathbf{r}_{1}) Y_{lm}(\mathbf{r}_{1}) \varphi_{1s}(\mathbf{r}_{2}) Y_{oo}(\mathbf{r}_{2}) + (-1)^{5} (1 + 2) \right].$$
(9)

Здесь  $f_{E_{b_{1}}}$  радиальная волновая функция выбитого электрона,  $\delta_{1}$  фаза рассеяния, в-полный спин атома. Подставляя выражения (6)-(7) в формулу (3), учитывая также (4), (8) и (9) и проводя стандартные вычисления<sup>(19)</sup>, можно привести формулу (3) к виду:

$$\mathbf{T}_{\mathbf{f}\mathbf{i}} = \sum_{\mathbf{l}m} \mathbf{t}_{\mathbf{l}}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}, \mathbf{Q}) \mathbf{Y}_{\mathbf{l}m}^{*}(\hat{\mathbf{Q}}) \mathbf{Y}_{\mathbf{l}m}(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{b}}) , \qquad (10)$$

где t<sub>1</sub>(k<sub>b</sub>,Q) ~ парциальная амплитуда, которая имеет вид <sup>[16,17]</sup>:

$$t_1 = -\frac{4\sqrt{2\pi}}{a^2} e^{i\delta_1} R_1(k_b, Q)$$
 (11)

Подставляя выражение (10) в (2) и используя известное соотношение для произведения двух сферических функций от одного и того же аргумента<sup>[19]</sup>, а также проводя суммирование по m и m<sup>-</sup> с учетом ортогональности коэффициента Клебла-Гордона, получаем:

$$\frac{d^{3}\sigma}{dEd\Omega \ d\Omega} = \frac{k_{a}k_{o}}{4\pi E \ /Ry} \sum_{ll \ LM} \frac{(2l+1)(2l+1)}{2L+1} < 10l \ 0 \ |LO>^{2}$$

 $x t_{1}(k_{b},Q)t_{1}, (k_{b},Q)Y_{LM}^{*}(\hat{Q})Y_{LM}(\hat{k}_{b});$  (12)

здесь  $E_{o}/R_{y}$  означает энергию падающего электрона в ридбергах. Отметим, что углы векторов Q и  $k_{o}$  в формуле (12) определены в системе, где ось Z направлена вдоль вектора  $k_{o}$ . В дальнейшем мы ограничиваемся рассмотрением компланарных реакций  $He(e,2e)He^{+}$ , при которых импульсы  $k_{o}, k_{a}$  и  $k_{b}$  (а следовательно, и Q) лежат в одной плоскости. Будем считать, что угловое распределение рассеянной частицы обладает симметрией относительно направления падающего пучка. В этом случае можно проинтегрировать выражение (12) по азимутальному углу рассеянной частицы  $\phi_{a}$ : воспользуемся тем, что он равен азимутальному углу вектора переданного импульса  $\phi_{o}$ . Затем, проводя суммирование по квантовому числу M с учетом ортогональности сферических функций, можно записать:

$$\frac{d^{3}\sigma}{dEd\Omega_{a}d\Omega_{b}} = \sigma^{(3)} = \sum_{L} C_{L}^{(3)} (E_{o}, E_{b}, \theta_{a}) P_{L}(Coe\theta_{b}) .$$
(13)  
3 gecb  $d\overline{\Omega}_{a} = d(Coe\theta_{a})$ . Угловой коэффициент в (13) имеет вид:  
 $C_{L}^{(3)} (E_{o}, E_{b}, \theta_{a}) = \frac{k_{a}k_{o}}{\theta \pi E_{o}/Ry} \sum_{11}^{(21+1)(21+1)<101'0|Lo>^{2}} x t_{1}^{*}(k_{b}, Q)t_{1} \cdot (k_{b}, Q)P_{L}(Coe\theta_{q}) .$ (14)

ДДС для электрона элекции получаем, интегрируя выражение (13) по направлениям рассеяния электрона. Заменяя интегрирование по углу рассеяния θ<sub>а</sub> интегрированием по абсолютному значению переданного импульса Q, можно предстазить ДДС в виде:

$$\frac{d^2\sigma}{dE_bd\Omega_b} = \sigma^{(2)}(E_o, \mathbf{k}_b) = \sum_{\mathbf{L}} C_{\mathbf{L}}(E_o, E_b) P_{\mathbf{L}}(Co_B\theta_b) . \quad (15)$$

Здесь угловой коэффициент С. в ДДС определяется формулой :

$$C_{L}(E_{o}, E_{b}) = \frac{1}{k_{a}k_{o}} \int_{min}^{max} C_{L}(E_{o}, E_{b}, Q) Q dQ \qquad (16)$$

При проведении интегрирования в формулах (15) и (16) использованы следующие соотношения

$$Q^2 = k_0^2 - 2k_0 k_a \cos \theta_a + k_a^2 , \quad d\overline{\Omega}_a = \sin \theta_a d\theta_a = \frac{1}{k_a k_0} Q \, dQ \, . \qquad (17)$$

Из формулы (17) видим, что Q<sub>min</sub>=k<sub>o</sub>-k<sub>a</sub> и Q<sub>max</sub>≈ k<sub>o</sub>+k<sub>a</sub>. Интегрируя выражение (13) по углам эжекции, получаем ДДС для рассеянной частицы:

$$\frac{d^2\sigma}{d\overline{\Omega}_{\mathbf{a}}dE_{\mathbf{a}}} = \sigma^{(2)}(E_{\mathbf{o}}, E_{\mathbf{a}}, \theta_{\mathbf{a}}) = \frac{\frac{\delta \mathbf{k}_{\mathbf{a}}\mathbf{k}_{\mathbf{o}}}{E_{\mathbf{o}}/R\mathbf{y}} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{a}} (21+1) |\mathbf{R}_{\mathbf{a}}(\mathbf{k}_{\mathbf{b}}, Q)|^2 = 4\pi C_{\mathbf{o}}^{(3)} .$$
(18)

Одинарное дифференциальное сечение, как мы видим, можно получить двумя разными путями: интегрированием выражения (15) по углам эжекции θ<sub>и</sub>или же интегрированием (18) по углу θ<sub>2</sub>. В первом случае с учетом формул (11), (16) и (18) мы имеем:

$$\frac{d\sigma}{dE_{b}} = \sigma^{(1)}(E_{o}, E_{b}) \approx 4\pi C_{o}(E_{o}, E_{b}) = \frac{16\pi}{E_{o}/Ry} \sum_{1}^{\infty} (21+1) \int_{Q}^{Max} |R_{1}(K_{b}, Q)|^{2} \frac{dQ}{Q^{3}}.$$
(19)

Легко убедиться в том, что интегрирование сечения (18) по углу рассеяния  $\theta_{a}$  с учетом (18) приводит к идентичному с (19) выражению. Отметим, что такое равенство выполняется в случае приближения, согласно которому ионизация происходит в результате только однократных столкновений. Учитывая формулу (19), ARC (15) можно представить в следующей форме:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_{\mathbf{a}}d\mathbf{E}_{\mathbf{a}}} = \frac{\sigma^{(1)}(\mathbf{E}_{\mathbf{o}},\mathbf{E}_{\mathbf{b}})}{4\pi} \left[1 + \sum_{\mathbf{L}} \beta_{\mathbf{L}}(\mathbf{E}_{\mathbf{o}},\mathbf{E}_{\mathbf{b}}) \mathbf{P}_{\mathbf{L}}(\text{COD}\theta_{\mathbf{b}})\right] . \quad (20)$$

Здесь в, - коэффициент, который равен

$$\beta_{L}(E_{o}, E_{b}) = \frac{C_{L}(E_{o}, E_{b})}{C_{o}(E_{o}, E_{b})}$$
(21)

Интегрирование выражения (19) по энергии эжекции Е<sub>в</sub> дает полное ионизационное сечение:

$$\mathcal{C}(\mathbf{E}_{o}) = 4\pi \int_{0}^{\mathbf{E}_{o}-1} d\mathbf{E}_{o} C_{o}(\mathbf{E}_{o}, \mathbf{E}_{b}) \quad . \qquad (22)$$

## э. Модель и процедура вычисления

В работе используется структурная модель атома , ранее использованная нами<sup>[16,17]</sup> для расчетов характеристик прямой и резонансной .He(e,2e)He<sup>+</sup>-реакции в условиях совпадательного спектра. Волновая функция для эжектированного электрона f<sub>р.</sub> (r)

волновая функция для эжектированного электрона f<sub>Ebl</sub>(r) (форм.(8) и (9)) получена путем численного интегрирования радиального уравнения Шредингера вида:

$$\left[\frac{d^{2}}{dr^{2}} + k_{b}^{2} - \frac{1(1+1)}{r^{2}} + V_{SP}(r)\right] f_{E_{b}1}(r) - \int_{0}^{\infty} dr W_{1}(r,r') f_{k_{b}1}(r') = 0 \quad .$$
(23)

Здесь потенциал  $V_{\rm SP}(\mathbf{r})$  содержит<sup>[23]</sup> статическую и поляризационную компоненты, *а* нелокальный потенциал  $W_1(\mathbf{r},\mathbf{r}')$  обменную часть взаимодействия электрона эжекции с ионом He<sup>+</sup>(1s).

При больших г функция f<sub>Ebl</sub>(r) удовлетворяет асимлтотическому условию

$$f_{1E_{b}}(r) \Rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi k_{b}}} \sin\left[k_{b}r + \frac{1}{k}\ln(2k_{b}r) - \frac{\pi}{2}1 + \delta_{1}\right] . \qquad (24)$$
$$\delta_{1} = \eta_{1} + \sigma_{1}, \qquad \eta_{1} = \arg(1 + 1 - i/k_{b})$$

Здесь

и б<sub>1</sub> является дополнительным сдвигом фазы, вызванным отклонением от чистой кулоновской волны. В качестве функции основного состояния взята шестипараметрическая функция Хиллерааса. Функция f<sub>Eb</sub>(r) была ортогонализована к функции основного состояния с помощью процедуры Шмидта. Для получения ДДС и ОДС мы использовали комплексную программу, разработанную и использованную нами<sup>[16,17,20-22]</sup> ранее при расчетах ТДС и ТДОСО не(e,2e)не<sup>+</sup>реакции. В расчетах парциальные волны включались с тем, чтобы обеспечить точность в трех значащих цифрах в ДДС. Проверка нашей программы проводилась путем сравнения с теоретическими оценками<sup>[13]</sup>, что привело к совпадению в 3 – 4 значащих цифрах.

## 4. Результаты и обсуждения

Основные результаты настоящих расчетов характеристик углового и энергетического распределений электрона эжекции в прямой  $He(e,2e)He^+$  реакции для различных кинематических условий приведены на рисунках 1-9 и в таблицах 1-3 в сравнении с соответствующими экспериментальными данными<sup>[3,4,7]</sup> и полуэмпирическими<sup>[1,2]</sup> и теоретическими<sup>[13]</sup> оценками.

Рис. 1-6 иллюстрируют зависимость угловых коэффициентов  $C_L(E_0,E_b)$  (см. формулу (16)) от мультипольного момента L при энергиях налетающего электрона 200, 300, 500, 600, 1000 и 2000 эВ и электрона эжекции – 2, 10, 20 и 40 эВ. При энергии E>500 эВ падающего электрона для различных энергий эжекции наши результаты согласуются с экспериментальными данными<sup>[3,4]</sup> и полуэмпирическими оценками<sup>[C]</sup> (рис. 1-5,  $E_0=0,5$ , 0,6, 1 и 2 кэВ). Видно, что при  $E_0=1000$  эВ экспериментальные данные<sup>[3,4]</sup> и наши оценки весьма близки (рис. 1-4,  $E_0=1000$  эВ), а при  $E_0=2000$  эВ они выглядят почти совпадающими (рис. 1-4,  $E_0=2000$  эВ), в то же время для  $E_0=500,600$  эВ имеется согласие в пределах ошибок (рис.1-4). При  $E_0=300$  эВ и  $E_b \leq 20$  эВ наши расчеты дают удовлетворительное приближение к экспериментальным данным<sup>[4]</sup> (рис. 6,  $E_b = 2, 10, 20$  эВ).

В случае энергии 200 эВ падающего электрона мы также видим некоторое согласие настоящих расчетов с экспериментом<sup>[3,4]</sup>. Для энергии эжекции 2 эВ наши расчеты дают неплохое приближение к экспериментальным данным Эрхардта<sup>[3]</sup> за исключением некоторого отклонения при L=1. Экспериментальные данные Горуганту и Вонхама<sup>[4]</sup> заметно отличаются от данных Эрхардта и др<sup>[3]</sup> при L=0, 1 и 3 (рис.1, E =200 эВ). При энергиях эжекции E<sub>b</sub>-2 эВ рассчитанные нами значения коэффициента C<sub>L</sub>(E<sub>b</sub>, E<sub>b</sub>) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными при L= 0 и 3. Однако для остальных значений L вычисление значения этого коэффициента расходится с экспериментальными данными, особенно сильное отклонение наблюдается при L=1.

Таким образом, рисунки 1-6 демонстрируют, что при энергиях падающего электрона  $E_{0} \ge 500$  эВ для любых значений энергии выбитого электрона ПБП хорошо опнсывает ДДС для электрона эжекции в  $He(e.2e)He^{+}$ - реакции. Чем выше энергия падающего электрона, тем лучше наши расчеты описывают экспериментальные данные  $^{[3,4]}$  При энергии налетающего электрона 200 и 300 эВ расчеты в ПБП, в общем, качественно описывают экспериментальные данные по ДДС (рис. 1-4,  $E_{0} = 200$  эВ, рис.6).



Рис.1. Зависимость углового коэффициента ( мультипольного момента L



Рис.2.То же, что и на рис.1







E o эΒ 200 2000 эB эксп. теор. эксп. Teop.  $\theta_{\mathbf{b}}$ а с e С ъ ъ е 0 19.4 17.4 19.3 19.5 2.48 30 19.9 2.74 2.53 60 16.0 16.6 17.9 18.3 3.48 3.26 3.35 14.3 14.0 13.8 14.2 2.65 3.48 3.49 90 120 13.8 18.0 12.7 13.2 2.78 2.79 2.89 150 21,0 27.1 15.5 16.1 2.69 2.33 2.40 180 17.4

Табл. 1. ДДС как функция от угла эжекции  $\theta_{\rm n}$  при  $E_{\rm p}$ =200, 2000 и  $E_{\rm p}$ =2 эВ. ДДС в  $10^{-20} {\rm cm}^2 {\rm cp}^{-1} {\rm sB}^{-1}$ 

а-эксп.данные(Эрхардт и др., 1986),

ъ-эксп.данные(Горуганту и Вонхам, 1966)

с-настоящие расчеты.e-оценки(Белл и Кингстон, 1975)

Табл. 2<sup>\*</sup>. Мультипольные слагаемые ДДС как функции от угла эжекции  $\theta_{\rm L}$ .  $E_{\rm L}$ =2 ЭВ, ДДС в  $10^{-20}$  см<sup>2</sup> ср<sup>-1</sup> эВ<sup>-1</sup>

L	β, Ρ,	θъ	0 <sup>0</sup>	30 <sup>0</sup>	60°	90°	120 <sup>0</sup>	150 <sup>0</sup>	180 <sup>0</sup>		
E_= 200 3B											
1	β <sub>1</sub> P <sub>1</sub>	0.	206	0.178	0.103	-0.335 <sup>-7</sup>	-0.103	-0.178	-0.206		
2	$\beta_2 P_2$	0.	204	0.128	-0.026	-0.102	-0.026	0.128	0.205		
3	β <sub>3</sub> Ρ <sub>3</sub>	~0.	146	-0.048	0.064	-0.359 <sup>-7</sup>	-0.064	0.48	0.147		
4.	β <sub>4</sub> P <sub>4</sub>	-0.	23 -	-0.543 <sup>-3</sup>	0.671 <sup>-2</sup>	$-0.870^{-2}$	0.671 <sup>-2</sup>	-0.543 <sup>-3</sup>	-0.232 <sup>-1</sup>		
$E_{2} = 2000 \ B$											
1	β <sub>1</sub> Ρ <sub>1</sub>	0.	069	0.060	0.034	-0.112 <sup>-7</sup>	-0.034	-0.396			
2	$\beta_2 P_2$	-0.	289	-0.181	0.036	0.145	0.036	-0.181			
3	β <sub>3</sub> P <sub>3</sub>	~0.	104	-0.034	0.045	-0.245 <sup>-7</sup>	-0.045	0.034			
4	$\beta_4 P_4$	0.	017	0.393 <sup>-3</sup>	-0.484 <sup>-2</sup>	0.628 <sup>-2</sup>	-0.484 <sup>-2</sup>	0.393 <sup>-3</sup>			

\*) В табл.2 и З принято обозначение а<sup>-b</sup>, соответствующее а.10<sup>-b</sup>.

Табл.3. Зависимость коэффициента анизотропии  $\beta_L(E_o,E_b)$  от мультиполя L при энергиях падающего электрона 200 и 2000 эВ.  $E_{\rm r}$ =2 эВ

L		1	2	3	4	5	6	7	8
 Е <sub>0</sub> =200 эв									
	a	-3.68 <sup>-2</sup>	2.78-1	-2.14 <sup>-1</sup>	6.11 <sup>-2</sup>	5.30 <sup>-2</sup>	-3.06-2	? -	-
β,	ь	-1.95 <sup>-1</sup>	4.45 <sup>-1</sup>	-1.34 <sup>-1</sup>	-1.65 <sup>-1</sup>	-	_		
-	c	-2.06 <sup>-1</sup>	2.05-1	-1.47 <sup>-1</sup>	-2.32 <sup>-2</sup>	-3.26 <sup>-3</sup>	1.03-3	1.56	5
E_=2000 3B									
β <sub>L</sub>	ь	4.03 <sup>-2</sup>	-2.43	<sup>1</sup> 8.50 <sup>-</sup>	-2 -	-		-	-
	с	6.88 <sup>-2</sup>	-2.89	<sup>1</sup> -1.04 <sup>-</sup>	1.68	- <sup>2</sup> 3.09	9 <sup>-3</sup> -	3.92 <sup>-4</sup>	-8.98 <sup>-5</sup>

а-эксп. данные (Эрхардт, 1986), ъ-эксп. данные (Горуганту и Вонхам, 1986) с-настоящие расчеты



Рис.7. ДДС как функция от угла э**х**екции  $\theta_b$ .  $E_0 = 1$  кэВ. 1- настоящий расчет; 2- полуэмпирические оценки<sup>[2]</sup>(Ким,1983); 3- эксперимент<sup>[4]</sup>(Горуганту и Бонхам,1986); 4- расчет<sup>[13]</sup>(Белл, Кингстон,1975)

На рис. 7 и 8 полученная нами зависимость ДДС от угла эжекции при энергиях налетающего электрона 1000 и 2000 эВ и электрона эжекции 2, 10, 20 и 40 эВ сравнивается с экспериментальными данными<sup>[4]</sup>, а также теоретическими<sup>[13]</sup> и полуэмпирическими оценками<sup>[2]</sup>. Как видно, при больших энергиях эжекции E<sub>b</sub>>20 эВ все сравниваемые результаты оказываются весьма близкими (рис. 7-8, E<sub>b</sub>=40 эВ). Для энергий эжекции E<sub>b</sub>>20 эВ лучшее приближение эксперимента<sup>[4]</sup> дают наши расчеты. При энергиях эжекции Е\_≤20 зВ теоретические оценки[13], сосчитанные в ПБП, несколько расходятся с экспериментом (рис. 7, E = 2, 10, 20 эВ, рис. 8, E = 2, 10 эВ). Причина расхождения наших результатов и оценок<sup>19</sup>э], по-видимому, состоит в следующем. В настоящей работе в расчеты включено до 15 парциальных воль поляризованных орбиталей в разложении волновой функции континуума (см. формулу (8)). В то же время в работе<sup>[13]</sup> учтены только 7 парциальных волн, три первые (1=0,1 и 2) из которых являются поляризованными орбиталями, а остальные- хартри-фоковскими функциями. В работе [17] было показано, что при энергиях эжекции E<sub>b</sub>>20 эВ ТДС асимметричной Не(е,2е)Не<sup>+</sup>реакции слабо чувствительно к искажениям парциальных волн с увеличением 1. Следовательно, при E<sub>ь</sub>>20 эВ некоторое незначительное расхождение наших результатов и оценок [13], по-видимому, обусловлено отличием числа учитываемых в расчетах парциальных волн (рис. 7, 8, Е = 40 эВ). При Е ≤20 эВ, как упоминалось выше, искажения волн играют важную роль до достаточно больших значений 1. В этом случае увеличение числа поляризованных орбиталей. учитываемых в расчетах, вероятно, приводит к некоторому улучшению точности наших результатов по отношению к экспериненту[4] (рис. 7 и 8, Е\_= 2, 10, 20).

Табл. 1,2 и 3 демонстрируют роль знака коэффициента анизотропии  $\beta_2$  и мультипольных слагаемых в поведении ДДС как функции от угла эжекции  $\theta_b$  при разных кинематических условиях. При энергиях падающего электрона 200 эВ и электрона эжекции  $E_b=2$  зВ ДДС имеет минимум в области угла эжекции  $\theta_b=90^\circ$ , однако при  $E_b=2000$  зВ и  $E_b=200$  зВ вместо ми: :мума появляется максимум (табл. 1). Для энергии  $E_b=200$  зВ в окрестности  $\theta_b=90^\circ$  в ДДС (см. формулу (20)) доминирует мультипольное слагаемое  $\beta_2 P_2$  (Сов90°), оно имеет отрицательное значение (табл. 2, 200 зВ). Для энергии  $E_o=2000$  зВ мультипольное слагаемое  $\beta_2 P_2$  (Сов90°), оно имеет отрицательное слагаемое значение, что приводит к поднятию кривой ДДС (табл. 2, 2000 зВ). Таким образом, различие в поведении ДДС как функции от







Рис.9.ОДС как функция от энергии эдекции Е, Ео=2000 эВ

угла  $\theta_{\rm b}$  (табл.1) обусловлено анизотропностью углового распределения электронов эжекции (различием знака коэффициента  $\beta_2(E_{\rm o},E_{\rm b}))$  при энергиях падающего электрона 200 и 2000 эВ для  $E_{\rm b}=2$  эВ (табл. 3).

Рис. 9 иллюстрирует поведение ОДС, отнесенного к сечению Мотта<sup>[1]</sup> (см. формулу (19)). как функции от энергии эжекции  $E_b$  при энергии налетающего электрона  $E_c=2000$  эВ. Здесь наши результаты сравниваются как с экспериментальными данными<sup>[4,7]</sup>, так и с оценками<sup>[1,2]</sup>. Полученные нами оценки неплохо согласуются с экспериментальными данными<sup>[7]</sup> и оценками<sup>[1]</sup>. При малых энергиях  $E_b<20$  эВ наши и другие оценки дают несколько заниженные значения ОДС по сравнению с экспериментом<sup>[3]</sup>. Однако при  $E_b>20$  эВ наши расчеты дают хорошее приближение к эксперименту<sup>[7]</sup> (рис.9). Таким образом, рис.9 подтверждает, что расчеты, проведенные в ПБП, достаточно хорошо описывают энергетическое распределение выбитого электрона в  $He(e.2e)He^+$ - реакции в широком интервале энергии эжекции.

## Заключение

В работе в первом борновском приближении (ПБП) рассматривается угловое и энергетическое распределения электронов эжекции в реакции Не(е,2е)Не<sup>+</sup>. Основной целью ставилось исследовать вопрос о применимости ПБП к описанию характеристик электрона элекции в свете недавних экспериментальных данных [3,4] и выявить кинематические условия, при которых это приближение справедливо. Проводился комплексный анализ имеющихся экспериментальных ланных. теоретических и полуэмпирических оценок по ДДС и ОДС. Кроме того. исследовались поведение коэффициента угловой анизотропии и роль мультипольных слагаемых ДДС в угловом распределении электрона эжекции при различных кинематических условиях. Волновая функция электрона в континууме описывалась решением уравнения Шредингера в потенциале, содержащем статическую, обменную и поляризационную компоненты. В качестве начального состояния гелия использовалась шестипараметрическая функция Хиллерааса.

Наши расчеты по угловым коэффициентам (рис.1-6), угловому (рис.7 и 8) и энергетическому (рис.9) распределениям показывают, что ПБП применимо к описанию характеристик электрона эжекции в He(e.2e)He<sup>+</sup>-реакции при энергиях падающего электрона  $E_0 \ge 500$  эВ для любых энергий эжекции. При энергиях налетающего электрона 200 и 300 эВ ПБП может качественно описывать спектр эжекции в (e,2e)-процессе. При энергиях  $E_0 \ge 500$  эВ для описания характеристик электрона эжекции нужно учитывать в расчете более десяти парциальных волн 1>10.

Кроме того, из наших расчетов мы видим, что при энергиях падающего электрона 200 и 2000 эВ ,  $E_b = 2$  эВ и в окрестности  $\theta_b = 90^\circ$  различия в угловых распределениях испускаемых электронов обуславливаются анизотропностью ( $\beta_2$  имеют разные энаки) и доминированием мультипольных слагаемых  $\beta_2 P_2$  (Сов $\theta_b$ ) в ДДС в обоих случаях (табл.1-3).

Авторы благодарят проф. В.В.Балашова за стимулирующие обсуждения и полезные советы, также С.Данзана и Л.Г.Заставенко за интерес к работе.

Литература

- 1. Rudd M.E.: Phys. Rev. A44, 1991 ,1644
- 2. Kim Y.K.: Phys. Rev. A28, 1983,656
- 3. Muller-Fielder R., Jung K.and Ehrhardt H.: J.Phys. B19,1211(1986)
- 4. Goraganthu R.R. and Bonham R.A.: Phys. Rev. A34, 103(1986)
- Mohr C.B.O.and Nicall F.h.: Proc. R.Soc. London, Ser.A144,596(1934)
- 6. Goodrich M.: Phys. Rev., 52,259(1937)
- Opal C.B., Beaty E.C. and Peterson W.K.:At. data Nucl.data Tables 4,209 (1972)
- Oda N., Nishimura F. and Tahira S.: J.Phys. Sos.
   Jpn,33,462 (1972), Oda N.: Radiat. Res., 64, 1975, 80
   Tahira S. and Oda N.: ibid.,35, 1973, 582
- 9. Rudd M.E. and Dubois R.D.: Phys. Rev. A16, 26(1977)
- 10. Shyn T.W., Sharp W.E. and Kim Y.K.: Phys. Rev. A19, 557(1979)
- Manson S.T., Toburen L.H., Madison D.H. and Stolterfoht N.: Phys. Rev. A12, 60(1976)
- Avaldi L., Camilloni R., Fainelli E. and Stefani G.: Nuov. Cim. 9D, 97(1987)
- 13. Bell K.L. and Kingston A.E.: J. Phys. B8, 2666(1975)
- 14. Балашов В.В., Липовецкий В.С., Сенашенко В.С.: Вестник МГУ, 1, 1973, 116
- 15. Мищенко Т.В., Сенашенко В.С., Страхова С.И.: Оптика и Спектроскопия, 43, 1977.34
- 16. Lhagva O.: Z. Phys. D23, 1992, 321
- Амирханов И.В., Лхагва О., Москаленко И.В. и Хэнмэдэх Л.: Оптика и Спектроскопия, 69, 1990, 1212
- Балашов В.В., Липовецкий В.С., Сенашенко В.С.: ЖЭТФ, 63, 1972, 1622
- Балашов В.В. и др. Теоретический практикум. Под. ред Балашова В.В., Москва: Энергоиздат, 1984

- 20. Lhagva O., Badamdamdin R., Strakhova S.I. and Hehnmedeh L.: J. Phys. B24, 1991,4249
- 21. Lhagva O., Bada damdin R., Strakhova S.I. and Hehnmedeh L.: preprint JINF E4-91-303. Dubna, 1991: Z.Phys. D.-in press.
- Лхагва О., Страхова С.И., Бадамдамдин Р., Хэнмэдэх Л.: Сообщение ОИЯИ Р4-91-129, Дубна. 1991.
- McDowell M.R.C., Mopran L.A. and Myerscough V. P.: J. Phys. B6, 1973 ,1435

Рукопись поступила в издательский отдел 1 июня 1993 года.