

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



С 3454

Б - 865

4083/2-78

P5 - 11566

18/IX-78

Б.Бочев, Т.Куцарова, В.П.Овсянников

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ
ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

I. Решение прямых задач

1978

P5 - 11566

Б.Бочев,* Т.Куцарова,* В.П.Овсянников

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ
ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

I. Решение прямых задач



* Институт ядерных исследований и ядерной
энергетики, БАН, София.

Бочев Б., Купарова Т., Овсянников В.П. P5 - 11566

Математические модели многократной ионизации электронным ударом в ионной ловушке. I. Решение прямых задач

Рассмотрены возможные модели глубокой ионизации в ионной ловушке, от наиболее простой модели последовательной одноэлектронной ионизации до модели, учитывающей процессы многоэлектронной ионизации. Показано, что возможны все ионизационные переходы из нулевого зарядового состояния во все последующие. Модель учитывает нелинейный фактор ионизации. Целью работы является рассмотрение математических моделей, описывающих процесс многократной ионизации в ионной ловушке электронно-лучевого источника многозарядных ионов, для последующего решения обратных задач ионизации и определения фундаментальных атомных величин. На основе предложенных моделей ставятся обратные задачи ионизации.

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Bochev B.Sh., Kuzarova T.Ch., Ovsyannikov V.P. P5 - 11566

Mathematical Models for Multionization by Electron Impact in the Ion Trap

The mathematical models for ion multi-ionization by electron impact in an ion trap are presented. The analytical expressions for the dependence of the yield of ions with a given charge on the ionization factor and cross sections have been obtained. The spectrum charge evolution for the ionization cross sections and a "back" task of determining the ionization cross sections from experimental results can be explained using the equations obtained.

The investigation has been performed at the Laboratory of High Energies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальное и теоретическое изучение процессов глубокой ионизации позволяет получить ценную информацию о неупругих столкновениях заряженных частиц, квантовых характеристиках атомных уровней, некоторых вопросах атомного ядра, физики плазмы и астрофизики^{1,2/}, ускорительной и электронно-лучевой техники.

Решение этих проблем в значительной степени определяется экспериментально измеренными сечениями глубокой ионизации $\{\sigma_{ij}\}$ практически всех элементов периодической системы.

Для таких целей весьма перспективным является метод ионизации в электронной ловушке^{3/}, реализованный в установках типа ИЭЛ^{4/}, "Крион"^{5,6,7/} и разрабатываемый в вариантах SILFEC^{8/} KRYEBIS^{9/} и пр. Суть метода заключается в том, что в электронный пучок вводится определенное количество ионов низкой зарядности, которые в дальнейшем удерживаются полем объемного заряда электронного пучка. Увеличение зарядности ионов происходит в результате ионизации электронным ударом в течение времени их удержания. Количество ионов соответствующих зарядностей определяется величиной фактора ионизации $j\tau$ /произведение плотности электронного пучка j и времени взаимодействия τ , в общем случае не адекватного времени удержания в ионной ловушке/ и сечением ионизации $\{\sigma_{ij}\}$.

Экспериментально измеренные картины эволюции спектров зарядностей в зависимости от $j\tau$ содержат информацию о динамике процессов в ловушке и о сечениях ионизации.

Определение сечений $\{\sigma_{ij}\}$ из экспериментальных данных производится решением обратной задачи на основе соответствующей модели ионизации, которая в общем случае основывается на представлении о конкретном механизме ионизационного перехода, закономерностях поведения системы заряженных частиц /многозарядные ионы, ионизирующие электроны, электроны ионизации и пр./ и возможных механизмах рекомбинации /см., например, ^{10-12/} /.

В настоящей работе рассматриваются некоторые математические модели последовательной, а также многоэлектронной ионизации при весьма общих предположениях. На основе предложенных моделей ставится обратная задача определения сечений ионизации на основе экспериментально измеренных картин эволюции спектров.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Пусть заряд иона $i=0,1,\dots,n$ в процессе ионизации изменяется только на единицу и рекомбинация не наступает. Обозначим $N_i(t)$ количество ионов i -го заряда, где $t \equiv j_e r$ - фактор ионизации, $\sigma_i \equiv \sigma_{i,i+1}$ - сечение перехода иона с зарядом i в ион с зарядом $i+1$. Пусть при значении аргумента $t=0$ есть только нейтральные атомы:

$$N_i(0) = N \delta_{i0} \quad (i=0,1,\dots,n), \quad /1/$$

где $\delta_{ik} = 1$ для $i=k$, $\delta_{ik} = 0$ для $i \neq k$ и количество атомов N сохраняется в течение всего процесса ионизации.

Очевидно, каждое состояние иона с зарядом $i \neq 0$ и $i \neq n$ образовывается из состояния иона с зарядом $i-1$ и переходит в состояние с зарядом $i+1$, следовательно, имеет место следующая система дифференциальных уравнений:

$$\frac{dN_0(t)}{dt} = -a_0 N_0(t),$$

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = a_0 N_0(t) - a_1 N_1(t),$$

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = a_{i-1} N_{i-1}(t) - a_i N_i(t),$$

$$\frac{dN_n(t)}{dt} = a_{n-1} N_{n-1}(t) - a_n N_n(t)$$

$$(t \in 0, +\infty, \quad n=0,1,2,\dots), \quad /2/$$

$$N_i(0) = N \delta_{i0} \quad (i=0,1,\dots,n). \quad /3/$$

Здесь $a_i = \alpha \sigma_i$, α - коэффициент нормализации, зависящий от единиц измерения $j_e r$. Очевидно, $a_n = 0$, т.к. ион полностью ионизован.

Задача Коши /1/-/2/ при разных предположениях о $\{a_i\}$ подробно рассмотрена в ^{13,14/}. Здесь приведем только окончательные результаты для некоторых случаев.

а/ Пусть все a_i разные:

$$a_i \neq a_k \quad (i=0,1,\dots,n; \quad k=i+1,\dots,n). \quad /4/$$

Решение задачи Коши /1/-/2/ с условием /4/ дается выражением

$$N_i(t_j) = N \sum_{\alpha=0}^i \frac{\prod_{\ell=0}^i a_\ell}{a_i \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq \alpha}}^i (a_\ell - a_\alpha)} e^{-a_\alpha t_j} \quad /5/$$

$$(t_j \in 0, +\infty, \quad i=1,2,\dots,\bar{j}, \quad i=0,1,2,\dots,n),$$

где \bar{j} - количество экспериментальных точек.

б/ Пусть все a_i равны между собой:

$$a_0 = a_1 = a_i = \dots = a_{n-1} = a. \quad /6/$$

В этом случае задача Коши имеет следующее решение:

$$N_i(t_j) = N \frac{1}{i!} (at_i)^i e^{-at_j} \quad /7/$$

$$(t_j \in 0, +\infty, j=1, 2, \dots, \bar{j}, i=0, 1, \dots, n).$$

в/ Для реального эксперимента начальные условия /3/ не всегда выполняются в результате того, что при $t=0$, вообще говоря, могут присутствовать ионы с зарядностью $i > 0$. Начальные условия такого процесса имеют вид

$$N_i(t=0) = N_i(0) \neq 0 \quad (i=0, 1, \dots, n). \quad /8/$$

Для получения решения задачи Коши /2/-/8/ с условием /4/ можно воспользоваться соотношением /5/. Так как в течение процесса ионизации общее количество частиц сохраняется, так же как и количество ионов каждого потока, искомое решение является суммой решений /6/ с весовыми факторами начальных условий /8/:

$$N_i(t_j) = \sum_{m=0}^i N_i(0) \frac{\prod_{\ell=m}^i a_\ell}{a_m \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq a}}^i (a_\ell - a)} e^{-a_\alpha t_j} \quad /9/$$

$$(t_j \in 0, +\infty, j=1, 2, \dots, \bar{j}, i=0, 1, \dots, n).$$

г/ Аналогично при использовании соотношения /7/ решение для случая /6/ с начальными условиями /8/ будет иметь вид:

$$N_i(t_j) = \sum_{m=0}^i N_m(0) \frac{(at_j)^m}{m!} e^{-at_j} \quad /10/$$

$$(t_j \in 0, +\infty, j=1, 2, \dots, \bar{j}, i=0, 1, \dots, n).$$

3. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Пусть n - максимальный заряд иона. Ион данной зарядности i имеет возможность изменить заряд до значений $q=i+1, i+2, \dots, i+n-1$. Пусть $a_{i\ell} \neq 0 (i=0, 1, 2, \dots, n-1; \ell=1, 2, \dots, n)$ - сечение перехода иона с зарядом i в ион с зарядом ℓ . Тогда, очевидно, что вследствие независимости процессов отрыва электронов общее сечение ионизации a_{ii} иона с зарядом i является суммой парциальных сечений $a_{i\ell}$:

$$a_{ii} = \sum_{\ell=i+1}^n a_{i\ell} \quad (i=0, 1, 2, \dots, n). \quad /11/$$

Ионы с зарядом i в количестве $N_i(t)$ образуются из ионов с зарядами $0, 1, \dots, i-1$ и переходят в ионы с зарядами $i+1, i+2, \dots, n$ всеми возможными способами. Этот процесс описывается следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dN_0(t)}{dt} = -a_{00}N_0(t),$$

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = a_{01}N_0(t) - a_{11}N_1(t),$$

$$\frac{dN_2(t)}{dt} = a_{01}N_0(t) + a_{12}N_1(t) - a_{22}N_2(t),$$

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = \sum_{\ell=0}^{i-1} a_{\ell i} N_\ell(t) - a_{ii} N_i(t),$$

$$\frac{dN_n(t)}{dt} = \sum_{\ell=0}^{n-1} a_{\ell n} N_\ell(t) - a_{nn} N_n(t)$$

$$(t \in 0, +\infty), n=0, 1, 2, \dots). \quad /12/$$

Так как n - максимальный заряд иона, по-видимому, $a_{nn} = 0$.

а/ Систему /12/ рассматриваем с начальными условиями

$$N_i(t=0) = N_i(0) \neq 0 \quad (i=0,1,\dots,n), \quad /13/$$

т.е. имеет место общий случай, когда при $t=0$ присутствуют ионы всех возможных зарядностей.

Решение задачи Коши /12/-/13/ ищем в виде

$$\begin{aligned} N_0(t) &= A_{00}^0 e^{-a_{00}t}, \\ N_1(t) &= A_{00}^1 e^{-a_{00}t} + A_{01}^1 e^{-a_{01}t} + A_{11}^1 e^{-a_{11}t}, \\ N_i(t) &= \sum_{\ell=0}^i \sum_{m=0}^{\ell} A_{m\ell}^i e^{-a_{m\ell}t}, \end{aligned} \quad /14/$$

$$(t \in 0, +\infty, \quad i=0,1,2,\dots,n).$$

Коэффициенты равенств /14/ определяются следующими рекуррентными соотношениями:

$$\begin{aligned} A_{00}^0 &= N_0(0), \\ A_{m\ell}^i &= \sum_{j=\ell}^{i-1} \frac{a_{ji}}{a_{ii} - a_{m\ell}} A_{m\ell}^j \delta_{m\ell}, \end{aligned} \quad /15/$$

$$A_{ii}^i = N_i(0) - \sum_{\ell=1}^i \sum_{s=1}^{\ell} A_{s\ell}^i$$

$$(i=1,2,\dots,n; \quad m \leq i-1; \quad \ell \leq i-1).$$

б/ Для частного случая начальных условий /13/

$$N_i(t=0) = N \delta_{oi} \quad (i=0,1,\dots,n) \quad /16/$$

/при $t=0$ присутствуют только нейтральные ионы и $N=1$ /, решение задачи Коши /12/, /16/ для первых четырех членов имеет следующий вид:

$$N_0(t) = e^{-a_{00}t},$$

$$N_1(t) = \frac{a_{01}}{a_{11} - a_{00}} e^{-a_{00}t} + \frac{a_{01}}{a_{00} - a_{11}} e^{-a_{11}t},$$

$$\begin{aligned} N_2(t) &= \left\{ \frac{a_{02}}{a_{22} - a_{00}} + \frac{a_{01}a_{12}}{(a_{11} - a_{00})(a_{22} - a_{00})} \right\} e^{-a_{00}t} + \\ &+ \frac{a_{01}a_{12}}{(a_{00} - a_{11})(a_{22} - a_{11})} e^{-a_{11}t} + \\ &+ \left\{ \frac{a_{02}}{a_{00} - a_{22}} + \frac{a_{01}a_{12}}{(a_{00} - a_{22})(a_{11} - a_{22})} \right\} e^{-a_{22}t}. \end{aligned}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные математические модели описывают все случаи ионизации, представляющие реальный интерес, при условии, что рекомбинация не наступает и количество ионов в течение процесса сохраняется. Это условие /при составлении программы для ЭВМ/ снимается введением соответствующих весовых множителей. С другой стороны, представление модели можно обобщить для случая, когда имеют место рекомбинация и эффект нелинейности фактора ионизации.

Можно заметить, что каждая последующая модель содержит предыдущую как некоторый частный случай.

Описанные математические модели можно эффективно использовать при помощи современных ЭВМ для решения обратных задач нахождения сечений ионизации на основе эксперимента.

Авторы благодарят Е.Д.Донца за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Арцимович Л.А. Управляемые термоядерные реакции, "Наука", М., 1961.
2. Freeman F.F., Jones V.V. *Solan. Phys.*, 1970, 15, p.286.
3. Донец Е.Д., Пикин А.И. ОИЯИ, P7-7999, Дубна, 1974.
4. Донец Е.Д., Илющенко В.И., Альперт В.А. ОИЯИ, P7-4124, Дубна, 1968.
5. Донец Е.Д., Пикин А.И. ЖТФ, 1975, 45, с.2373.
6. Донец Е.Д., Овсянников В.П. ОИЯИ, P7-9799, Дубна, 1976.
7. Донец Е.Д., Овсянников В.П. ОИЯИ, P7-10438, Дубна, 1977.
8. Arianer J. e.a. *Nucl. Instr. and Meth.*, 1975, 124, p.157.
9. Arianer J. *Orsay Internal Report*. "CRYEBIS PROJECT", 1975.
10. Донец Е.Д., Пикин А.И. ЖЭТФ, 1976, 70, с.2025.
11. Илющенко В.И., Кочкин В.И. ОИЯИ, 7-7226, Дубна, 1973.
12. Леманн Д. и др. ОИЯИ, 9-10744, Дубна, 1977.
13. Сегре Э. Экспериментальная ядерная физика, т.3, ИЛ, М., 1961.
14. Бочев Б., Александров Л., Куцарова Т. ОИЯИ, P5-7881, Дубна, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 мая 1978 года.