
Захват электрона водородоподобными многозарядными ионами

О.Ю. Андреев¹, Л.Н. Лабзовский^{1,2}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет

² Петербургский институт ядерной физики

План доклада

- Мотивация
- Модель
- Метод контура линии (МКЛ)
- Энергии
- Вероятности переходов
- Сечение захвата одного электрона
- Заключение

Мотивация

Развитие методов КЭД

- большое количество экспериментальных данных
- исследование уровней энергии многозарядных ионов
 - энергии
 - вероятности переходов
 - сечение электронной рекомбинации

Модель

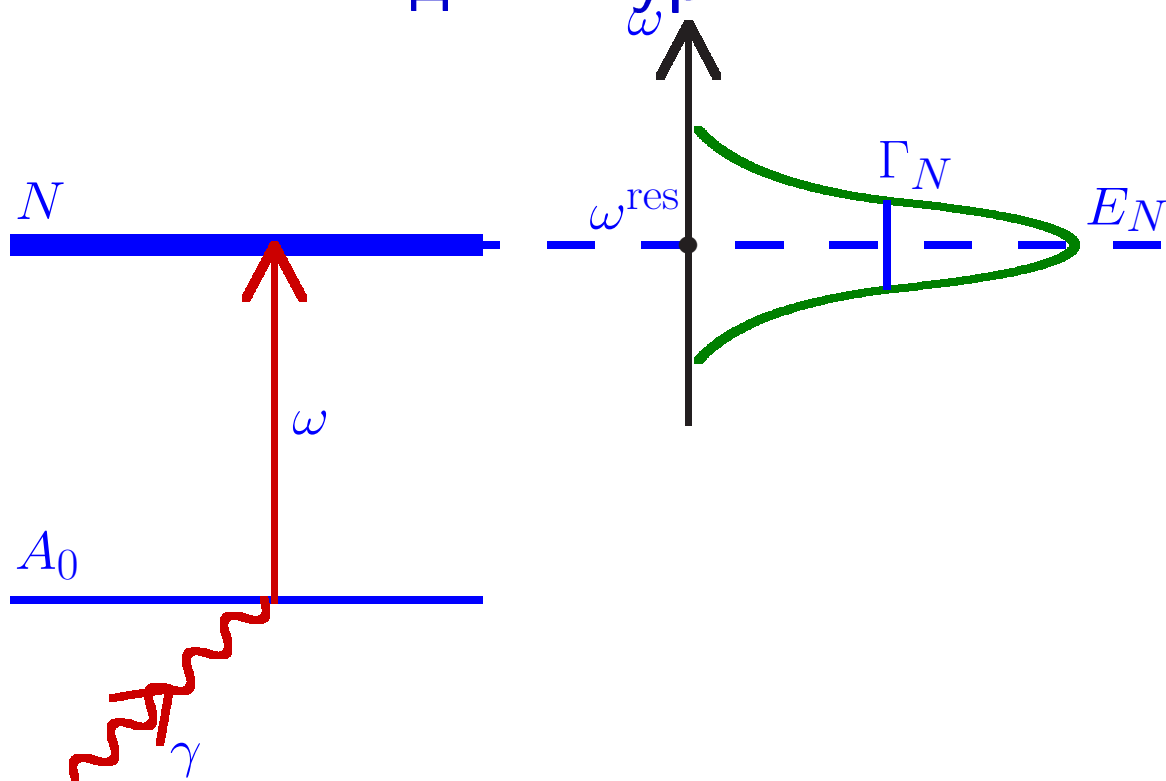
Многозрядные ионы

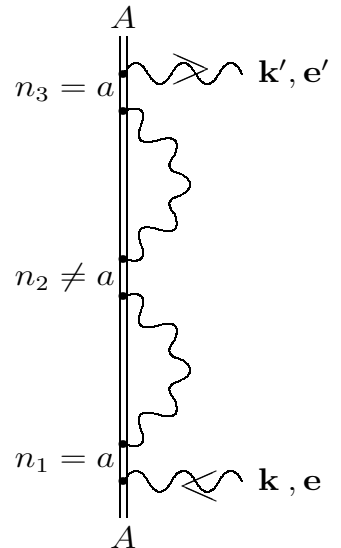
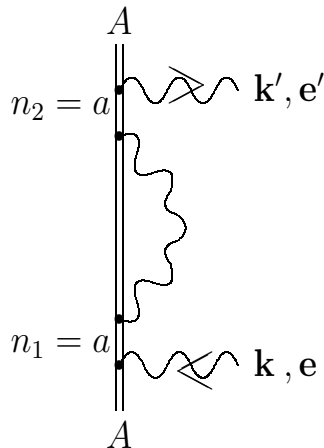
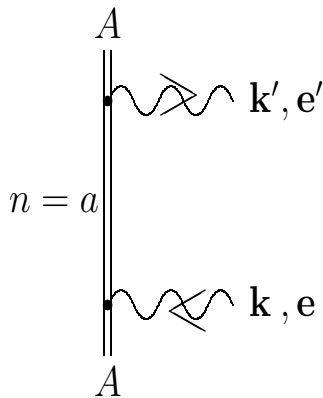
Картина Фарри

- ядро рассматривается как классическая частица с зарядом Z
 - точечное ядро $V(r) = \frac{eZ}{r}$
 - однородно заряженная сфера
 - **Ферми распределение для плотности заряда ядра:**

$$\rho(r) = \frac{N}{1 + \exp[(r-c)/a]}$$
- полный учет взаимодействия электронов с внешним полем ядра
- КЭД описание межэлектронного взаимодействия

Метод контура линии





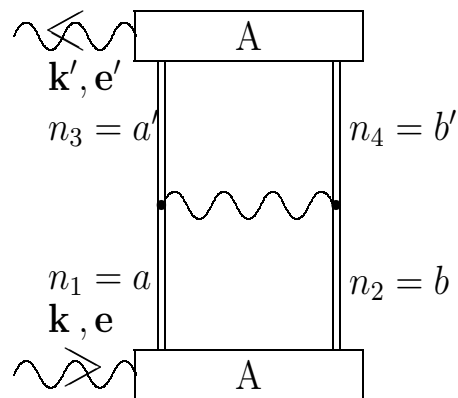
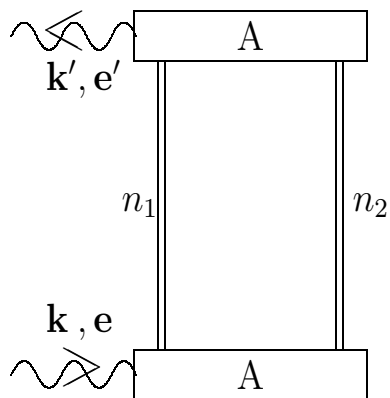
F. Low, Phys. Rev. 88, 53 (1952).

Л.Н. Лабзовский, ЖЭТФ 85, 869 (1983).

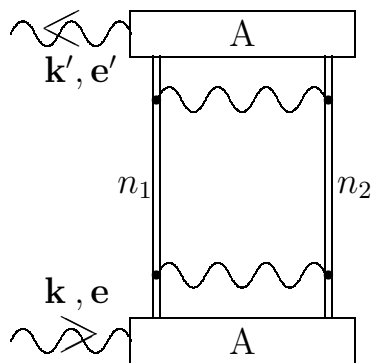
Вероятность поглощения

$$dW_{A_0 \rightarrow N}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{NA_0} d\omega}{[\omega + E_{A_0} - V_N^{(0)} - \operatorname{Re}\{\Delta V_N(\omega)\}]^2 + [\operatorname{Im}\{\Delta V_N(\omega)\}]^2}$$

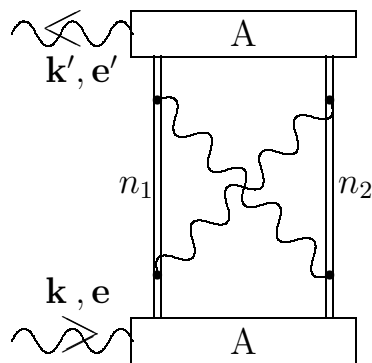
- условие резонанса $\omega^{\text{res}} + E_{A_0} - V_N^{(0)} - \operatorname{Re}\{\Delta V_N(\omega^{\text{res}})\} = 0$
- интерполирование контура линии контуром Лоренца
- энергия уровня: $E_N = \omega^{\text{res}} + E_{A_0} = V_N^{(0)} + \operatorname{Re}\{\Delta V_N(\omega^{\text{res}})\}$
- ширина уровня: $\Gamma_N = -2 \operatorname{Im}\{\Delta V_N(\omega^{\text{res}})\}$



Поправки нулевого и первого порядков



(a)



(b)

Поправки второго порядка “box” и “cross”

Энергия

Надо рассмотреть процесс рассеяния

$$A_0 \xrightarrow{\omega} N \xrightarrow{\omega'} A_0$$

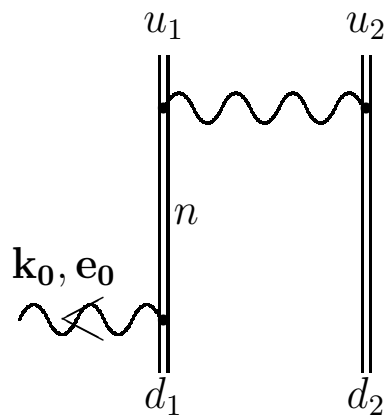
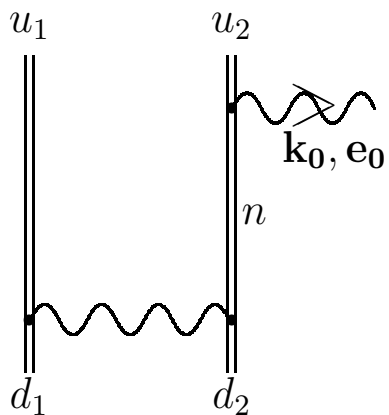
Амплитуда процесса рассеяния

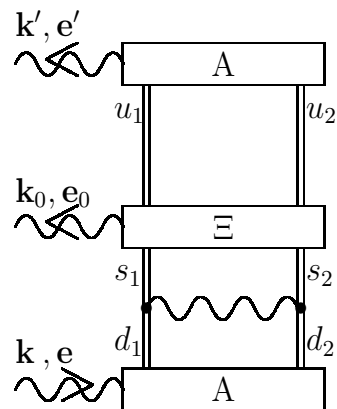
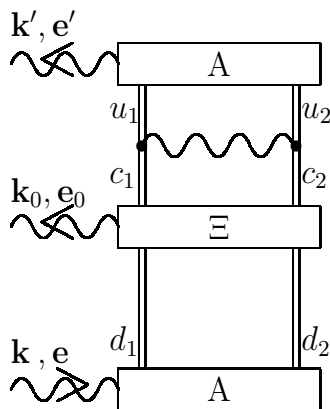
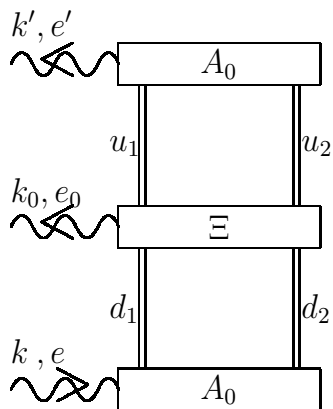
$$U = T^+ \frac{1}{\omega + E_{A_0} - V(\omega)} T$$

$$T_{n_1 n_2 A_0} = (-e) \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) \Phi_{A_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\Phi_{A_0} = \gamma^\mu A_\mu(r_1) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\Psi_{A_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \det\{\psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{1s}(\mathbf{r}_2)\}$$





Поправки нулевого и первого порядков

Вероятности переходов

Переход из начального состояния (I) в конечное состояние (F)

$$I \xrightarrow{\omega_0} F$$

Надо рассмотреть процесс рассеяния

$$A_0 \xrightarrow{\omega} I \xrightarrow{\omega_0} F \xrightarrow{\omega'} A_0$$

$$U = T^+ \frac{1}{\omega' + E_{A_0} - V(\omega')} \Xi(\omega_0) \frac{1}{\omega + E_{A_0} - V(\omega)} T$$

$$U_{I \rightarrow F} = \Xi(\omega_0) \Phi_F \Phi_I$$

Расчет вероятностей переходов

Вероятность перехода для распада: $I \xrightarrow{\omega_0} F$

$$w_{IF} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} 2\pi |U|^2 \delta(E_F + \omega_0 - E_I)$$

$$W_{IF} = \frac{1}{2J_I + 1} \sum_{M_I M_F} w_{IF}$$

- интегрирование по направлениям фотона
- усреднение по проекциям начального состояния и суммирование по проекциям конечного состояния

Диагонализация матрицы V

Матрица V рассматривается как блочная матрица.

Матрица V_{11} определяется на множестве g , которое содержит конфигурации смешиваемые с ссылочным состоянием $n_g \in g$

$$V = V^{(0)} + \Delta V$$

- $j-j$ схема применяется
- V^0 — диагональная матрица: сумма дираковских энергий

$$V = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{11}^{(0)} + \Delta V_{11} & \Delta V_{12} \\ \Delta V_{21} & V_{22}^{(0)} + \Delta V_{22} \end{bmatrix}$$

$$V_{11}^{\text{diag}} = B^+ V_{11} B, \quad B^+ B = I$$

Собственный вектор

Амплитуда $I \rightarrow F$

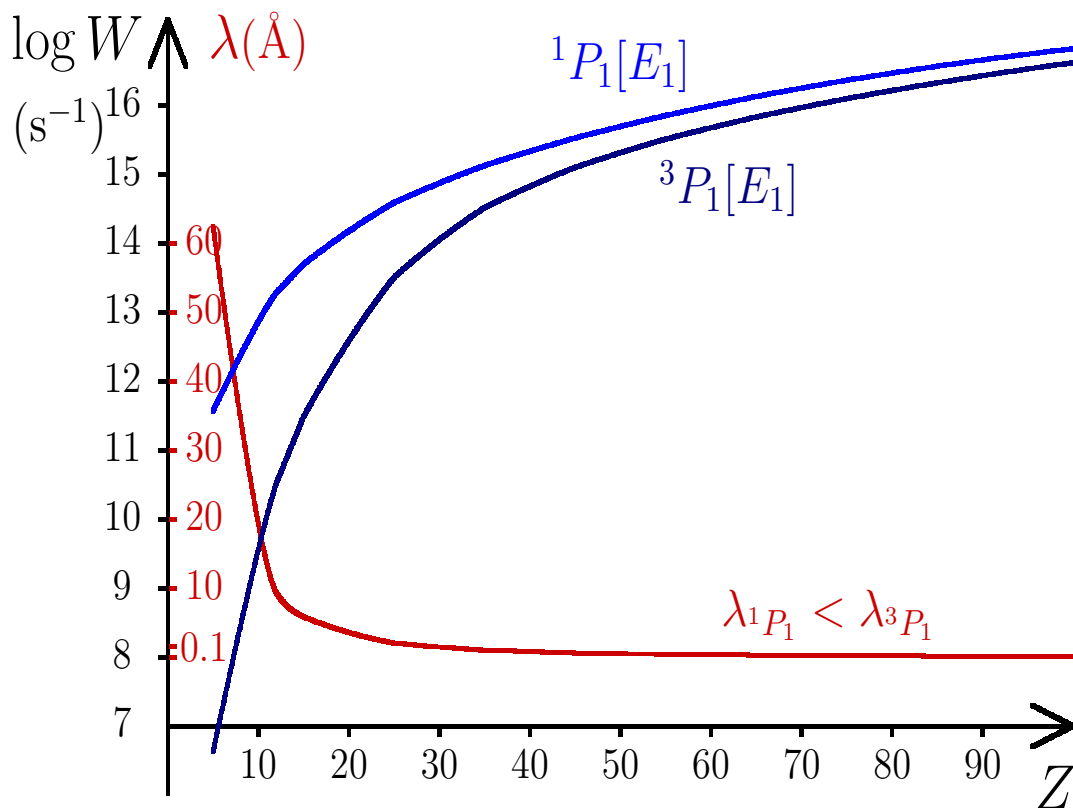
$$U^{\text{trans}} = \Xi_{FI} = \langle \Phi_F | \Xi | \Phi_I \rangle$$

Собственный вектор Φ_{n_g} , отвечающий ссылочному состоянию $n_g \in g$ (начальное или конечное состояние)

$$\begin{aligned} \Phi_{n_g} = & \sum_{k_g \in g} B_{k_g n_g} \Psi_{k_g} \\ & + \sum_{k \notin g, l_g \in g} [\Delta V_{21}]_{k l_g} \frac{B_{l_g n_g}}{E_{n_g}^{(0)} - E_k^{(0)}} \Psi_k . \end{aligned}$$

Вершина

$$\begin{aligned}\Xi_{u_1 u_2 d_1 d_2}^{(0)} &= eA_{u_1 d_1}^* \delta_{u_2 d_2} + eA_{u_2 d_2}^* \delta_{u_1 d_1} \\ \Xi_{u_1 u_2 d_1 d_2}^{(1)} &= \frac{1}{2} e^3 A_{u_1 n}^* \frac{\partial}{\partial x} I_{n u_2 d_1 d_2}(|x|) \Big|_{x=\varepsilon_{u_2} - \varepsilon_{d_2}} \\ &\quad + \dots\end{aligned}$$



$W(\text{s}^{-1})$ – вероятность перехода

$\lambda(\text{\AA})$ – длина волны

Z – заряд ядра

Электронная рекомбинация

$$e^{-}(\epsilon_{e^{-}}) + U^{91+}(1s) \rightarrow \dots \rightarrow U^{90+}(1s\ 1s) + n\gamma(\omega).$$

Диэлектронная рекомбинация (DR)

$$e^{-}(\epsilon_{e^{-}}) + U^{91+}(1s) \rightarrow U^{90+}(d) \rightarrow U^{90+}(r) + \gamma(\omega) \rightarrow \dots.$$

Радиационная рекомбинация (RR)

$$e^{-}(\epsilon_{e^{-}}) + U^{91+}(1s) \rightarrow U^{90+}(r) + \gamma(\omega) \rightarrow \dots.$$

$r = (1s\ 2s), (1s\ 2p)$ – однократное возбуждение.

$d = (2s\ 2s), (2s\ 2p), (2p\ 2p)$ – двухкратное возбуждение.

Вводится вспомогательная функция

$$\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r}) = \psi_e(\mathbf{r}) \theta(R - |\mathbf{r}|), \quad \text{где } R - \text{фиксировано.}$$

Нормировочная константа

для вспомогательной функции

$$N_R = \left[\int d^3\mathbf{r} |\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})|^2 \right]^{1/2}, \quad N_R \sim \sqrt{R}.$$

Вводится нормированная функция $\psi_{e_R}(\mathbf{r})$

$$\psi_{e_R}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})}{N_R}, \quad \psi_{e_R}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{R}}.$$

$$U = \lim_{R \rightarrow \infty} N_R U_R.$$

Собственная функция уравнения Дирака, отвечающая непрерывному спектру имеет вид

$$\psi_{\epsilon jlm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} g_{\epsilon jl}(r) \Omega_{jlm}(\mathbf{n}) \\ i f_{\epsilon jl}(r) \Omega_{j,2j-l,m}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}$$

$$g_{\epsilon jl}(r) \approx C_g \sqrt{\frac{\epsilon + m}{\pi p}} \cos(pr + \phi_g(r)), \quad R \rightarrow \infty$$

$$f_{\epsilon jl}(r) \approx C_f \sqrt{\frac{\epsilon - m}{\pi p}} \sin(pr + \phi_f(r))$$

$$\Delta p R = \pi$$

$$\Delta \epsilon = \frac{p}{\epsilon} \Delta p = \frac{p\pi}{\epsilon R}$$

$$(N_R)^2 = \frac{\epsilon R}{p\pi} = \frac{1}{\Delta \epsilon}$$

Сечение рассеяния

$$d\sigma_{\text{if}} = \frac{dw_{\text{if}}}{j}, \quad j = \frac{p}{\epsilon}$$

ϵ , p – энергия и импульс налетающего электрона.

Мы интегрируем по направлению испущенного фотона (ν_k) (следовательно, мы можем усреднить по направлениям импульса налетающего электрона (ν_p)), усредняем по поляризациям налетающего электрона (μ) и проекциям полного момента связанного электрона (j_b, m_b):

$$\frac{1}{8\pi(2j_b + 1)} \int d^2\nu_p \sum_{\mu m_b}$$

Полное сечение рассеяния

$$\sigma_{\text{if}} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^2} \left[\frac{\pi^2}{(2j_b + 1)p^2} \right] \int d^2\nu |U_{JM\epsilon j l n_b j_b l_b, \mathbf{k}\lambda, r}|^2,$$

где $JM\epsilon j l n_b j_b l_b$ – двухэлектронная конфигурация (падающего и связанного электрона) в j – j связи:

$$\begin{aligned} \Psi_{JM\epsilon j l n_b j_b l_b}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m m_b} C_{JM}^{jjb}(m, m_b) \\ &\times [\psi_{\epsilon j l m}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_b j_b l_b m_b}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_b j_b l_b m_b}(\mathbf{r}_1) \psi_{\epsilon j l m}(\mathbf{r}_2)] \end{aligned}$$

$\mathbf{k}, \lambda$ – импульс и поляризация испущенного фотона,

r – однократно возбуждённая конфигурация:

$$r = (1s, 2s) \text{ или } (1s, 2p)$$

Сечение рассеяния электронной рекомбинации с одноэлектронным U (в kb) как функция энергии налетающего электрона (в keV)

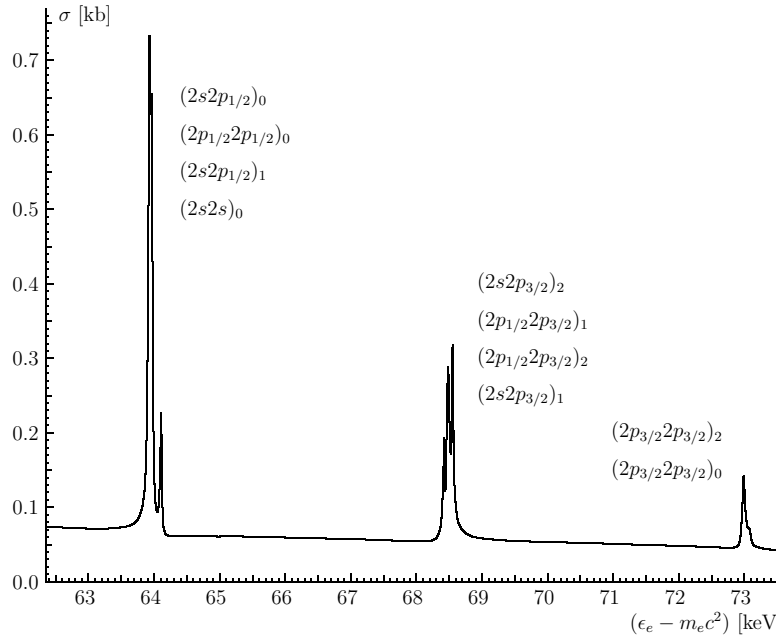


Таблица I. Энергия двукратно возбуждённых конфигураций

(как $\Delta E = E - \epsilon_{1s} - m_e c^2$, $\epsilon_{1s} = 379184.13$) (в eV) для U

Configuration	ΔE	Configuration	ΔE
$(2s2p_{1/2})_0$	(63922.05(30), -15.61(2))	$(2s2p_{3/2})_2$	(68425.08(30), -13.07(2))
	(63923(3), -16.6) ^a		(68425(3), -11.0) ^a
$(2p_{1/2}2p_{1/2})_0$	(63936.24(25), -17.12(2))	$(2p_{1/2}2p_{3/2})_1$	(68461.33(25), -28.57(3))
	(63936(4), -18.0) ^a		(68462(3), -27.1) ^a
$(2s2p_{1/2})_1$	(63962.19(30), -15.60(2))	$(2p_{1/2}2p_{3/2})_2$	(68477.58(25), -28.58(3))
	(63963(3), -16.4) ^a		(68477(5), -27.2) ^a
$(2s2s)_0$	(64105.30(35), -14.05(2))	$(2s2p_{3/2})_1$	(68549.76(30), -13.09(2))
	(64105(4), -14.9) ^a		(68550(3), -11.0) ^a
$(2p_{3/2}2p_{3/2})_2$	(72987.47(25), -26.06(3))	$(2p_{3/2}2p_{3/2})_0$	(73082.74(25), -25.99(3))
	(72988(3), -21.8) ^a		(73084(4), -21.8) ^a

O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky, Phys. Rev. A 80, 042514 (2009).

^a D. Bernhardt, C. Brandau, Z. Harman, *et al.*, Phys. Rev A 83, 020701(R) (2011).

Таблица II. Силы осцилляторов для групп резонансов
для U

Resonance group	Resonance strength		
	this work	Bernhardt, <i>et al.</i> (2011)	
		theory	experiment
$K L_{1/2}L_{1/2}$	61(3)	62(8)	58.7(11)
$K L_{1/2}L_{3/2}$	32(2)	36(5)	33.1(11)
$K L_{3/2}L_{3/2}$	8.5(10)	8.7(11)	9.1(14)

O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky, Phys. Rev. A 83, 064501 (2011).

^a D. Bernhardt, C. Brandau, Z. Harman, *et al.*, Phys. Rev A 83, 020701(R) (2011).

Сечение рассеяния электронной рекомбинации с одноэлектронным Gd (в kb) как функция энергии налетающего электрона (в keV)

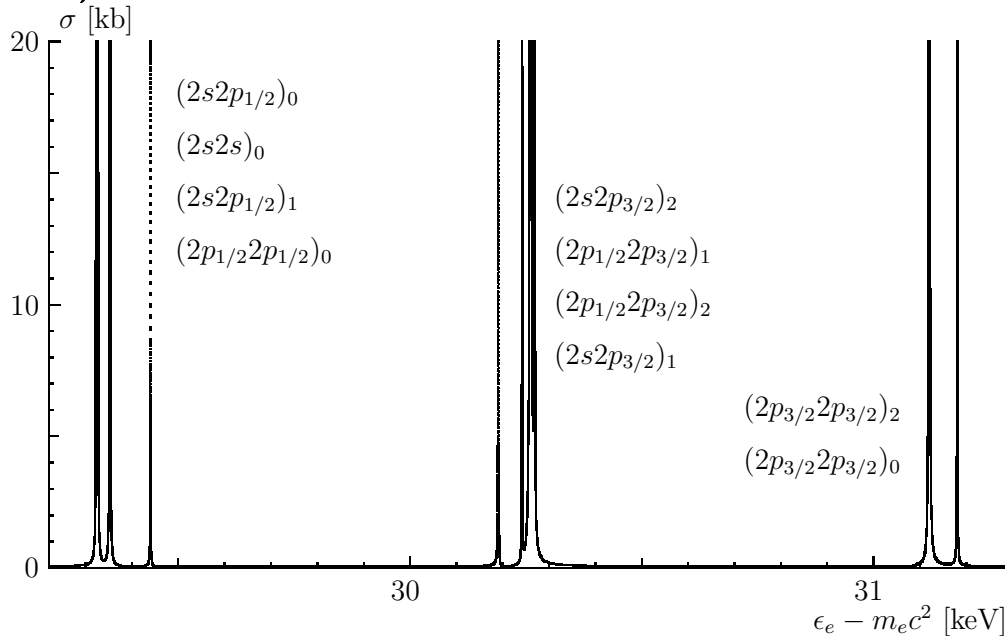


Таблица III. Энергия двукратно возбуждённых конфигураций (как $\Delta E = E - \epsilon_{1s} - m_e c^2$, $\epsilon_{1s} = 451933.40$)
(в eV) для Gd

Configuration	ΔE	Configuration	ΔE
$(2s2p_{1/2})_0$	(29322.92, -0.13)	$(2s2p_{3/2})_2$	(30190.44, -0.12)
$(2s2s)_0$	(29325.91, -0.07)	$(2p_{1/2}2p_{3/2})_1$	(30241.71, -0.25)
$(2s2p_{1/2})_1$	(29352.37, -0.13)	$(2p_{1/2}2p_{3/2})_2$	(30259.75, -0.25)
$(2p_{1/2}2p_{1/2})_0$	(29439.68, -0.18)	$(2s2p_{3/2})_1$	(30268.43, -0.11)
$(2p_{3/2}2p_{3/2})_2$	(31120.16, -0.24)	$(2p_{3/2}2p_{3/2})_0$	(31180.81, -0.23)

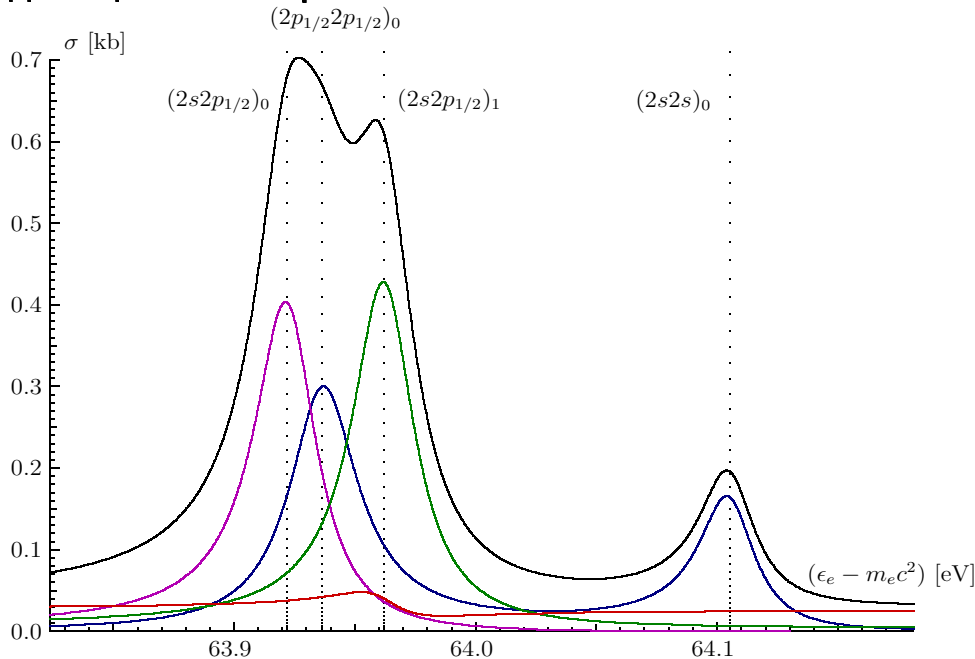
O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky, Phys. Rev. A 83, 064501 (2011).

Таблица IV. Силы осцилляторов для групп резонансов для Gd

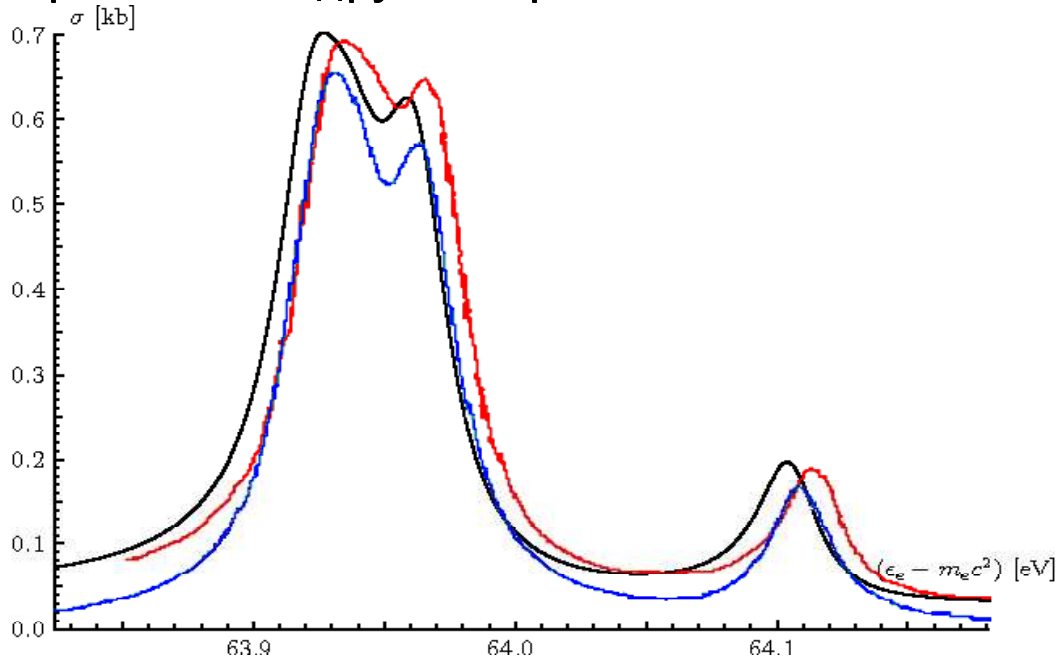
Resonance group	Resonance strength
$K L_{1/2}L_{1/2}$	1148(11)
$K L_{1/2}L_{3/2}$	1978(20)
$K L_{3/2}L_{3/2}$	663(6)
Resonances	Resonance strength
$\{(2s2p_{1/2})_0 + (2s2s)_0\}$	669(19)
$(2s2p_{1/2})_1$	408(15)
$(2p_{1/2}2p_{1/2})_0$	54(2)
$(2s2p_{3/2})_2$	113(4)
$\{(2p_{1/2}2p_{3/2})_1 + (2p_{1/2}2p_{3/2})_2 + (2s2p_{3/2})_1\}$	1855(20)
$(2p_{3/2}2p_{3/2})_2$	582(9)
$(2p_{3/2}2p_{3/2})_0$	74(4)

O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky, Phys. Rev. A 83, 064501 (2011).

Сечение рассеяния электронной рекомбинации с одноэлектронным U (в kb) как функция энергии налетающего электрона (в keV). Цветные кривые показывают вклады различных угловых моментов падающего электрона.



Сравнение с другими расчётами: uranium



V. V. Karasiov et al., Phys. Lett. A 161, 453 (1992)

S. Zakowicz et al., J. Phys. B 37, 131 (2004)

Заключение

- Разработан КЭД метод для расчётов сечений электронной рекомбинации с многозарядными ионами.
- Представлены численные расчёты сечений захвата одного электрона.