

УДК 539.1

*В.И. МАТВЕЕВ, Е.С. ГУСАРЕВИЧ*

### ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА И ГЕЛИЯ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С РЕЛЯТИВИСТСКИМИ СТРУКТУРНЫМИ ТЯЖЁЛЫМИ ИОНАМИ

На основе приближения эйконала рассчитаны сечения однократной и двойной ионизации при столкновениях движущихся с релятивистскими скоростями структурных высокозарядных тяжёлых ионов с атомами водорода и гелия. Под структурными ионами в рамках данной работы понимаются ионы, содержащие частично заполненные электронные оболочки. Показано, что учет протяженности заряда иона может приводить к заметным изменениям соответствующих сечений по сравнению с ионизацией точечными ионами тех же зарядов и энергий.

Во многих экспериментах, проводимых на ускорителях тяжелых ионов, используются частично "ободранные" ионы высоких зарядов и энергий (см., напр., [1–7] и приведенные там ссылки). Расчетные методики, как правило, описывают такие экранированные ионы, как точечные заряды. Теоретическим же исследованиям процессов возбуждения или ионизации атомов мишени частично "ободранными" ионами, описываемыми как протяженные и имеющими электронную структуру заряды, посвящено сравнительно небольшое число работ. Тогда как представляется необходимым рассматривать налетающий ион не как точечную частицу, а как протяженную структурную частицу размером порядка размера электронных оболочек, на которых расположены электроны иона. Сильное поле многозарядного иона не позволяет использовать теорию возмущений. Поэтому, как правило, расчеты сечений ионизации проводились (см., напр., [8]) в рамках широко распространенного метода классических траекторий, не имеющего, однако, достаточного обоснования [9] из первых принципов и находящего подтверждение своей применимости лишь в сравнении с экспериментом. Квантово-механическое непertурбативное рассмотрение на основе приближения внезапных возмущений было проведено в работах [10, 11]. При этом удалось получить лишь зависимости вероятности ионизации в ограниченной области параметров удара. Тогда как для расчета полного сечения ионизации пришлось вводить полуэмпирическую процедуру «перенормировки» борновского приближения.

В настоящей работе на основе приближения эйконала и метода шивки, предложенного в работах [12–14], развит непertурбативный метод расчетов сечений ионизации и возбуждения атомов мишени частично "ободранными" релятивистскими высокозарядными ионами, описываемыми как протяженные заряды. В качестве примера рассчитаны сечения однократной ионизации атома водорода и двойной ионизации атома гелия. Показано, что учет протяженности заряда иона может приводить к заметным изменениям соответствующих сечений по сравнению с ионизацией точечными ионами тех же зарядов и энергий. Необходимо отметить, что в данной работе не обсуждаются интенсивно исследуемые в настоящее время экспериментально и теоретически (см., напр., [15, 16]) процессы потери и возбуждения электронов, принадлежащих бомбардирующим ионам.

Согласно [12, 13], сечение перехода покоящегося в начале системы координат нерелятивистского (до и после столкновения)  $N$ -электронного атома из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|n\rangle$  при столкновении с движущимся со скоростью  $v$  релятивистским ионом в малоугловом эйкональном приближении имеет вид (здесь и везде ниже используются атомные единицы)

$$\sigma_n = \int d^2b \left| \left\langle n \left| 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dX U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\}) \right\} \right| 0 \right\rangle \right|^2. \quad (1)$$

Рассеивающий кулоновский потенциал  $U = U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$  есть функция не только координат иона  $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$ , но и положений атомных электронов, совокупность координат которых обозначаем  $\{\mathbf{r}_a\}$ ;  $a = 1, \dots, N$ . Кулоновское взаимодействие частично экранированного иона, со-

держашего  $N_i$  электронов на своих оболочках и находящегося в точке  $\mathbf{R}$ , с атомными электронами, расположенными в точках  $\mathbf{r}_a$ , следуя [11, 17–19], выразим в виде формулы

$$U(\mathbf{R}; \{r_a\}) = -\sum_a \left\{ \frac{Z(1-\nu)}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|} + \frac{Z\nu}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|\right) \right\},$$

где  $\lambda$  – параметр экранирования, равный

$$\lambda = g \frac{\nu^{2/3}}{1-\nu/7} \frac{1}{Z^{1/3}}; \quad g = 0,3(3\pi^2/50)\Gamma(1/3) \approx 0,48.$$

Здесь мы ввели относительное число электронов иона  $\nu = N_i/Z$ . Специфика столкновений ионов больших зарядов с атомами состоит в том, что сечения неупругих процессов, как правило, довольно велики и существенно превышают атомные размеры. Имея в виду это обстоятельство, будем считать, что  $r_a/R \ll 1$ , тогда интеграл в (1) можно переписать так:

$$-\frac{i}{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX = i\mathbf{q} \sum_a \mathbf{r}_a, \quad \mathbf{q} = \frac{2Z^*}{\nu b} \left[ 1 + \frac{\nu}{1-\nu} \frac{b}{\lambda} K_1\left(\frac{b}{\lambda}\right) \right] \frac{\mathbf{b}}{b}. \quad (2)$$

Очевидно, вектор  $\mathbf{q}$  имеет смысл импульса, передаваемого атомным электронам при столкновении с ионом при значении параметра удара  $\mathbf{b}$ ;  $Z^* = Z(1-\nu)$  – видимый заряд иона;  $K_1(x)$  – функция Макдональда.

Рассмотрим сначала столкновение релятивистского структурного многозарядного иона с атомом водорода. Следуя [12, 13], для расчетов сечений неупругих процессов воспользуемся методом шивки, позволяющим получить формулы для сечений в аналитическом виде. Для этого разобьем весь интервал  $0 < b < \infty$  возможных значений параметра удара  $b$  на две области:

$$\text{А) } 0 < b < b_0, \quad \text{В) } b_0 < b < \infty, \quad \text{где } b_0 \nu \gamma, \quad \gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}, \quad \beta = \nu/c, \quad (3)$$

соответствующие малым и большим параметрам удара ( $c$  – скорость света). В области (А) малых параметров удара сильное поле высокозарядного иона не может быть учтено по теории возмущений, и мы будем вычислять сечение по формуле (1); в области (В) больших прицельных параметров поле, создаваемое ионом, можно считать слабым, описывать ион как точечный заряд  $Z^*$  и для расчёта  $\sigma_n$  применять теорию возмущений. Вычислив  $\sigma_n$  в каждой из областей (3) и сложив их, получим результирующее сечение. При этом знание точного значения границы между областями для нас несущественно, поскольку зависимость  $\sigma_n$  в каждой области от параметра  $b_0$  оказывается логарифмической, что приводит к корректной шивке вкладов смежных областей и выпадению в окончательном ответе зависимости  $\sigma_n$  от параметра шивки  $b_0$ . В результате сечение ионизации атома водорода можно представить как (ср. с [13])

$$\sigma_i = 8\pi \frac{Z^{*2}}{\nu^2} \lambda_i \left( \ln \frac{2\alpha_i \nu^2 \gamma}{\eta Z^* \omega_i} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (4)$$

где  $\eta = \exp B = 1,781$  ( $B = 0,5772$  – постоянная Эйлера);  $\omega_i = 0,711$  – так называемая [13] «средняя» энергия ионизации, а  $\lambda_i = 0,283$ ;  $\Omega_k = \epsilon_k - \epsilon_0$ ,  $\epsilon_k = k^2/2$  – энергия атомного электрона в континууме с импульсом  $\mathbf{k}$ ;  $\epsilon_0$  – энергия основного состояния атома водорода, а коэффициенты  $\alpha_i$  рассчитываются по формуле

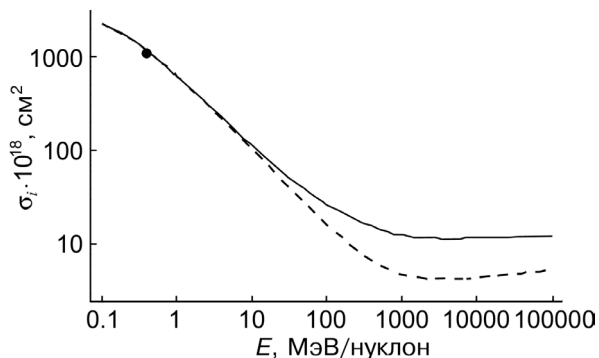
$$\alpha_i = \lim_{b_0 \rightarrow \infty} \frac{Z^*}{\nu b_0} \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_i} \frac{\nu^2}{8\pi Z^{*2}} \int_0^{b_0} 2\pi b db \int d^3k \left| \langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 0 \rangle \right|^2 \right\}. \quad (5)$$

Полученная формула (4) по внешнему виду не отличается от соответствующей формулы [13] для сечения ионизации точечным зарядом  $Z^*$ . Однако, в отличие от случая точечного заряда, когда  $\alpha_i = 3,264$  является [13] не зависящим от заряда и скорости иона числом, в случае протяженного заряда в силу определения переданного импульса по формуле (2)  $\alpha_i$  оказывается

функцией, зависящей от скорости иона  $v$  и  $v - \nu$  – относительного числа электронов в "шубе" иона. На рис.1 приведены сечения ионизации атома водорода частично "ободранными" ионами урана  $U^{6+}$  (с числом электронов на оболочках иона  $N_i = 86$ , соответствующим видимому заряду иона  $Z^* = 6$ ), рассчитанные по формуле (4).

Рассмотрим теперь двойную ионизацию атома гелия. Согласно [12, 13], для расчетов соответствующего сечения нет необходимости применять метод шивки. Поэтому сечение

Рис.1. Зависимость сечения ионизации атома водорода частично "ободранными" ионами урана  $U^{6+}$  от энергии иона. Сплошная линия – расчетное сечение для протяженного иона, пунктир – сечение ионизации точечным ионом для тех же значений энергии (на нуклон) и заряда, точка – эксперимент [5] (для столкновений  $C^{6+} + H$ )



двойной ионизации может быть получено непосредственно из формулы (1), в которой интегрирование по  $d^2b$  может быть распространено на всю плоскость параметра удара и, очевидно, будет иметь вид

$$\sigma^{2+} = \iiint |\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \exp(iq\{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2\}) | 0,0 \rangle|^2 d^3k_1 d^3k_2 d^2b, \quad (6)$$

где  $|0,0\rangle$  – волновая функция основного состояния атома гелия;  $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$  – волновая функция атома гелия с двумя электронами в континууме с соответствующими импульсами  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ , при интегрировании по которым в (6) необходимо следить, чтобы конечные состояния не учитывались дважды. При расчетах волновые функции представлялись в виде симметризованных произведений водородоподобных одноэлектронных волновых функций с одним и тем же значением эффективного заряда ядра атома гелия  $Z_2 = 1,97$  (согласно [13], такое значение эффективного заряда приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными для двойной ионизации атома гелия ударом голого релятивистского иона). Результаты расчетов представлены на рис.2, где приведено сечение двойной ионизации атома гелия частично

"ободранными" ионами железа  $Fe^{15+}$  в зависимости от энергии иона.

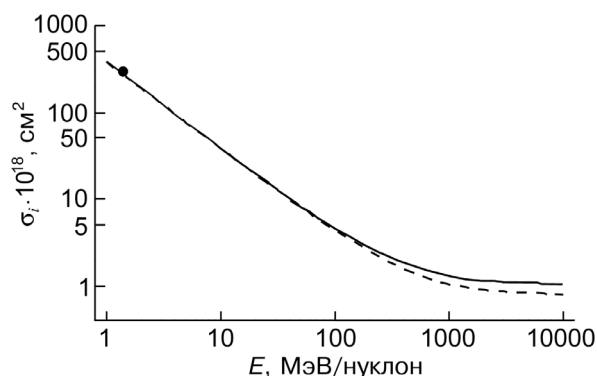


Рис.2. Зависимость сечения двойной ионизации атома гелия частично ободранными ионами железа  $Fe^{15+}$  от энергии иона. Сплошная линия – расчетное сечение для протяженного иона, пунктир – сечение двойной ионизации точечным ионом для тех же значений энергии и заряда, точка – эксперимент [6] (для столкновений  $Fe^{15+} + He$ )

Сечение однократной ионизации, соответствующее попаданию одного из электронов в любое состояние континуума, а другого – в любое из состояний дискретного спектра (либо в любое из состояний полного набора дискретного и непрерывного спектра, но в таком случае необходимо отнять вклад, соответствующий нахождению двух электронов в состояниях двухэлектронного континуума, т.е. в состояниях двойной ионизации) равно (ср. с [13])

$$\sigma^{1+} = 16\pi \frac{(Z^*)^2}{Z_1^2 v^2} \lambda_i \left( \ln \frac{2\alpha_i v^2 \gamma}{\eta Z_1 Z^* \omega_i} - \frac{\beta^2}{2} \right) - 2\sigma^{2+}, \quad (7)$$

где [13]  $Z_1 = 1,37$  – эффективный заряд ядра атома гелия для одноэлектронных переходов. Мы провели расчеты по формуле (7) сечения однократной ионизации атома гелия при

столкновениях с ионами железа  $Fe^{15+}$  в зависимости от энергии иона, результаты качественно повторяют ранее приведенное поведение сечения ионизации атома водорода.

Как видно из рисунков, с ростом энергии налетающего иона эффекты протяженности иона могут приводить к значительному росту сечений однократной и двойной ионизации по сравнению с соответствующими сечениями, рассчитанными для точечного иона. Рисунки показывают следующее общее поведение сечений: эффекты протяженности заряда становятся существенными, если сечения неупругих процессов меньше или сравнимы с эффективным поперечным размером иона  $\sim \pi \lambda^2$ . Рис.1 и 2 построены в логарифмическом масштабе, позволяющем охватить широкий диапазон по энергии ионов, но плохо отражающем детали. Поэтому для количественной иллюстрации эффекта учета протяженности заряда иона введем относительные поправки  $\chi_H = (\sigma_i - \sigma_{i(\text{Point})}) / \sigma_{i(\text{Point})}$ , где  $\sigma_{i(\text{Point})}$  – сечение ионизации атома водорода точечным ионом того же заряда  $Z^*$ , что и видимый заряд налетающего протяженного иона и при той же относительной скорости, аналогично введена и относительная поправка для однократной и двойной ионизации атома гелия  $\chi^{1+}_{He} = (\sigma^{1+} - \sigma^{1+(\text{Point})}) / \sigma^{1+(\text{Point})}$  и  $\chi^{2+}_{He} = (\sigma^{2+} - \sigma^{2+(\text{Point})}) / \sigma^{2+(\text{Point})}$ . В таблице приведены значения  $\chi_H$  для столкновений  $U^{6+}+H$ , а также  $\chi^{1+}_{He}$  и  $\chi^{2+}_{He}$  для столкновений  $Fe^{15+}+H$ .

Относительные поправки для сечений  $\sigma_i$ ,  $\sigma^{1+}$  и  $\sigma^{2+}$

$\chi$	Энергия иона, $10^3$ МэВ/нуклон								
	0,01	0,05	0,1	0,5	1	5	10	50	100
$\chi_H$	0,0774	0,3850	0,6304	1,3689	1,6067	1,6913	1,6214	1,4389	1,3682
$\chi^{1+}_{He}$	0,0000	0,0007	0,0025	0,014	0,019	0,022	0,021	0,018	0,017
$\chi^{2+}_{He}$	0,0004	0,017	0,0473	0,1855	0,2406	0,2933	0,2974	0,2990	0,2991

Как видно из таблицы, поправки к сечению ионизации в результате учета протяженности заряда иона могут оказаться значительными.

Авторы благодарят Министерство образования Российской Федерации (грант Е00-3.1-390) и Российский фонд фундаментальных исследований (грант 01-02-17047) за финансовую поддержку работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Krause H.F., Vane C.R., Datz S., et al. // Phys. Rev.– 2001.– V.A63.– P.032711.
2. Ludziejewski T., Stohlker Th., Ionescu D.C., et al. // Phys. Rev.– 2000.– V.A61.– P.052706.
3. Wells E., Ben-Itzhak I., Carnes K.D., et al. // Phys. Rev. A.– 1999.– V.60.– P.3734.
4. Tschersich M., Drozdowski R., Busch M., et al. // J. Phys.– 1999.– V.B32.– P.5556.
5. Shah M.B., Gilbody H.B. // J. Phys.– 1983.– V.B16.– P.L449.
6. McGuire J.H., Mueller A., Schuch B., et al. // Phys. Rev.– 1987.– V.A35.– P.2479.
7. Berg H., Ullrich J., Bernstein E., et al. // J. Phys.– 1992.– V.B25.– P.3655.
8. Purkait M., Dhara A., Sounda S., Mandal C.R. // J. Phys.– 2001.– V.B34.– P.755.
9. Illescas C., Pons B., Riera A. // Phys. Rev.– 2001.– V.A63.– P.062722.
10. Юдин Г.Л. // ДАН.– 1985.– Т.282.– С.874.
11. Юдин Г.Л. // ЖТФ.– 1985.– Т.55.– С.9.
12. Матвеев В.И., Толманов С.Г. // ЖЭТФ.– 1995.– Т.107.– С.1780.
13. Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю. // ЖЭТФ.– 1998.– Т.114.– С.1646.
14. Matveev V.I., Matrasulov D.U. // J. Phys.– 2000.– V.B33.– P.2721.
15. Ludziejewski T., Stohlker Th., Ionescu D.C., et al. // Phys. Rev.– 2000.– V.A61.– P.052706.
16. Voitkiv A.B., Muller C., Grun N. // Phys. Rev.– 2000.– V.A62.– P.062701.
17. Maynard G., Gardes D., Chabot M., et al. // Nucl. Instr. Meth.– 1998.– V.B146.– P.88.
18. Maynard G., Chabot M., Gardes D. // Nucl. Instr. Meth.– 2000.– V.B164/165.– P.139.
19. Brandt W., Kitagawa M. // Phys. Rev.– 1982.– V.B52.– P.5631.