

# ВЕСТНИК

ПОМОРСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

3/2008

Серия  
"Гуманитарные науки"

3/2008

СЕРИЯ  
«Естественные  
науки»



ВЕСТНИК  
ПОМОРСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

## СОДЕРЖАНИЕ

### ФИЗИОЛОГИЯ

Дуравлёва Е.А., Тумакова Г.Н.	Влияние некоторых перинатальных факторов риска на метаболический и микронутриентный статус новорождённых .....	5
Мешков Н.А., Мешкова Г.Н.	Особенности психофизиологической адаптации детей разного возраста к образовательной нагрузке .....	12
Попова Е.В.	Особенности принятия решения у школьников 7–18 лет в условиях детерминированной среды .....	19
Чернозёмова А.В., Хлопина И.А., Шацова Е.Н.	Динамика функционального состояния миокарда у больных после коронарного шунтирования .....	25

### ОЭКОЛОГИЯ

Коробов В.Б., Трубицина О.П.	Геоэкологические проблемы строительства и эксплуатации Мезенской ПЭС в Белом море .....	29
Трубицина О.П.	Анализ геоэкологического состояния атмосферного воздуха и осадков севера Русской равнины по данным мониторинга ....	35

### ФИЗИКА

Есеев М.К., Матвеев В.И., Абикулова Н.В.	Парциальные спектры переизлучения при взаимодействии атомов с ультракороткими импульсами электромагнитного поля...	43
Котов Л.Н., Антонец И.В., Голубев Е.А., Петрунёв С.Н.	Статическая проводимость и СВЧ отражающие свойства тонких Fe, Ni, Ti плёнок .....	50

<b>Котов Л.Н., Асадуллин Ф.Ф., Ефимец Ю.Ю., Власов В.С., Турков В.К., Петраков А.П., Петрунёв С.Н., Калинин Ю.Е., Ситников А.В.</b>	Наноструктура, электрические и СВЧ магнитные свойства двух серий композитных плёнок $(Co_{1-x}Fe_xZr_{1-y}(Al_2O_3)_y)_n$	58
<b>Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Макаров Д.Н., Рябченко С.В.</b>	Потери энергии быстрыми тяжёлыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами	64
<b>Лымарев В.И.</b>	О создании университетской кафедры географии Арктики .....	77
<b>Лымарев В.И.</b>	Ценный энциклопедический словарь-справочник о природе Архангельского Севера .....	82

# CONTENTS

## PHYSIOLOGY

<b>Zhuravleva E.A., Chumakova G.N.</b>	Influence of Some Perinatal Risk Factors on the Metabolic and Micronutrient Status of the Newborns	5
<b>Meshkov N.A., Meshkova G.N.</b>	Peculiarities of Psychophysiological Adaptation to the Educational Load in Children of Different Ages .....	12
<b>Popova E.V.</b>	Peculiarities of Decision Making in Schoolchildren aged 7–18 under the Conditions of Deterministic Circumstances	19
<b>Chernikova A.V., Khlodova A., Shatunov N.</b>	Dynamics of Myocardium Functional State in Patients after Coronary shunting .....	25

## GEOECOLOGY

<b>Korobov V.B., Trubitsina O.P.</b>	Geographical-Environmental Problems of the Mezen TPS Construction and Exploitation in the White Sea .....	29
<b>Trubitsina O.P.</b>	Analysis of the Atmospheric Air and Precipitation Geoecological Condition in the North of the Russian Plain According to Monitoring	35

## PHYSICS

<b>Escev M.K., Matveyev V.I., Abdullina N.V.</b>	Partial Spectrums of Reemission in Interaction of Atoms with Ultrashort Electromagnetic Pulses	43
<b>Kotov L.N., Antonets I.V., Golubev E.A., Petrunyov S.N.</b>	Static Conductivity and Microwave Reflection Properties of Fe, Ni, Ti Thin Films .....	50
<b>Kotov L.N., Asadullin F.F., Efimets Yu. Yu., Vlasov V.S., Turkov V.K., Petrakov A.P., Petrunyov S.N., Kalinin Yu. Ye., Sitnikov A.V.</b>	Nanostructure, Electric and Microwave Magnetic Properties of the Two Series of Composite Films $(Co_{45}Fe_{45}Zr_{10-x})(Al_2O_3)_{1-x}$ .....	58

<b>Matveev V.I., Gusarevich E.S., Makarov D.N., Ryabchenko S.V.</b>	<b>Energy Losses of Fast Heavy Structured Ions in Collisions with Two-Atomic Molecules .....</b>	<b>64</b>
---	--	-----------

## **SCIENTIFIC LIFE**

<b>Lymarev V.I.</b>	<b>On the Creation of the University Chair in Arctic Geography .....</b>	<b>77</b>
---------------------	--	-----------

## **REVIEWS AND BIBLIOGRAPHY**

<b>Lymarev V.I.</b>	<b>Valuable Encyclopaedic Dictionary on the Nature of the Arkhangelsk North .....</b>	<b>82</b>
---------------------	---	-----------

УДК 539.1

**МАТВЕЕВ Виктор Иванович**, доктор физико-математических наук, профессор, директор центра теоретической физики, заведующий кафедрой теоретической физики, заместитель декана физического факультета по научной работе Поморского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Автор 190 научных публикаций, в т.ч. двух монографий и двух монографических обзоров

**ГУСАРЕВИЧ Евгений Степанович**, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Поморского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Автор 36 научных публикаций

**МАКАРОВ Дмитрий Николаевич**, аспирант кафедры теоретической физики Поморского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Автор двух научных публикаций

**РЯБЧЕНКО Сергей Васильевич**, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Архангельского государственного технического университета. Автор 12 научных публикаций

## ***ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ БЫСТРЫМИ ТЯЖЁЛЫМИ СТРУКТУРНЫМИ ИОНАМИ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ДВУХАТОМНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ\****

Развит непertурбативный метод расчётов потерь энергии быстрыми тяжёлыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами с учётом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Проведены расчёты вклада кратности столкновений и эффектов выстроенности (ориентации оси молекулы относительно направления движения снаряда) в процессы потерь энергии снаряда. В качестве примера рассчитаны эффективное торможение и сечения обдирки ионов  $Fe^{25+}$  при столкновениях с молекулой азота  $N_2$ .

*Потери энергии, тяжёлые структурные ионы, двухатомные молекулы, непertурбативный метод расчётов, сечения обдирки, эффективное торможение, кратные столкновения*

**Введение.** Сочетание фундаментальности и прикладных возможностей физики высокозарядных ионов является стимулирующим фактором большинства современных исследований, проводимых на ускорителях тяжёлых ионов. Значительный интерес вызывает обязательное

следствие эффектов действия сильных полей высокозарядных ионов – происходящие с заметными сечениями одновременные переходы в снаряде и мишени при ион-атомных и ион-молекулярных столкновениях. Подобные многоэлектронные процессы стали объектом интенсивных

\* Работа выполнена при финансовой поддержке грантов президента РФ (МК-6201.2008.2), Российского фонда фундаментальных исследований (08-02-00711-а, частично – 08-02-98801-р-север-а) и фонда ИНТАС (INTAS-GSI 06-1000012-8530).

экспериментальных и теоретических исследований (см., например, [1–7] и приведённые там ссылки). Везде мы будем называть движущийся структурный ион *снарядом*, а покоящийся атом или молекулу – *мишенью*. Теория одновременного возбуждения, или ионизации снаряда и мишени, основанная на борновском приближении, последовательно построена в работах, приведённых в обзорах [8, 9] (см. также работу [10]). Однако, когда используются ионы высоких зарядов, то теория возмущений не применима [11] даже для релятивистских скоростей столкновения, такие непертурбативные эффекты наблюдались ещё в экспериментах [7]. Непертурбативное описание предложено в работе [12]. В данной работе мы будем ограничиваться следующими представляющими значительный прикладной интерес процессами – столкновениями быстрых структурных ионов со сложными мишенями – молекулами, при расчётах потерь энергии на которых эффекты возбуждения и ионизации электронов снаряда до настоящего времени, как правило, не учитывались.

Часто экспериментальные исследования (см., например, [1] и [2]) проводятся на молекулярных мишенях, однако эффекты электронных переходов в оболочках снарядов при таких столкновениях до настоящего времени не получили адекватного теоретического описания. К числу малоисследованных явлений следует отнести эффекты, связанные с ориентацией мишени относительно направления движения снаряда. Для учёта ориентационных молекулярных эффектов развито (см., например, [13, 14]) в первом порядке теории возмущений обобщение теории Бете, тогда как непертурбативное рассмотрение до настоящего времени не проводилось. Причём к числу ориентационных эффектов следует отнести не только эффекты анизотропии электронной плотности в молекулах, но и эффекты кратности столкновений, очевидно не допускающих описание в рамках первого борновского приближения.

На практике обычно измеряют потери энергии при движении снаряда в среде, когда снаряд испытывает ряд столкновений с атомами мишени. Такие столкновения приводят к воз-

буждению и ионизации как атомов среды, так и снаряда. Поскольку с любым атомом среды происходит не более одного столкновения, потери энергии иона на ионизацию и возбуждение атомов мишени являются безвозвратными. К безвозвратным потерям приводят и столкновения с ионизацией снаряда. Однако потери, связанные с возбуждением иона-снаряда, в общем случае, не являются таковыми. Действительно, возбуждённый ион-снаряд может сохранить своё возбуждённое состояние вплоть до столкновения со следующим атомом мишени, что, естественно, зависит от плотности среды и скорости снаряда. Мы можем избежать необходимости рассмотрения эволюции возбуждённого состояния снаряда в среде, описываемой сложными кинетическими уравнениями радиационно-столкновительных переходов вдоль траектории движения частицы-снаряда, если сделаем предположение, что ион, возбуждённый в результате столкновения с каким-либо атомом среды, успевает релаксировать до столкновения со следующим атомом. Очевидно, что в этом случае потери энергии на возбуждение электронных оболочек снаряда, как и потери на ионизацию снаряда, окажутся безвозвратными. При этом средний равновесный заряд движущегося в среде иона оказывается независимым от плотности среды [15]. Таким образом, в этом случае время между двумя последовательными столкновениями  $T$  (по порядку величины равное длине свободного пробега, делённой на скорость снаряда) считается большим по сравнению со временем жизни возбуждённых состояний снаряда, а длина свободного пробега снаряда в среде предполагается много большей среднего расстояния между соседними атомами среды (или молекулами, если среда состоит из молекул). Однако даже в этом случае для среды, состоящей, например, из двухатомных молекул, ситуация (с необходимостью учёта вклада возбуждённых состояний снаряда) меняется, если предположить наличие «выстроенности» молекул среды вдоль какого-либо направления.

Не трудно убедиться, что если направление движения снаряда близко по ориентации к оси

молекулы, то в сечения возбуждения и ионизации снаряда заметную поправку может вносить учёт двух последовательных столкновений иона с атомными остовами, входящими в состав одной молекулы. Действительно,  $t$  – время между двумя такими столкновениями, очевидно, намного меньше  $T$  – времени преодоления средней длины свободного пробега снаряда в среде. Причём для движущихся с релятивистской скоростью снарядов  $t$  порядка  $10^{-19}$  с. Очевидно, что это время намного меньше среднего времени жизни возбуждённых состояний структурного иона (снаряда) относительно радиационных и оже-распадов. В этом случае при расчёте сечения возбуждения и ионизации снаряда необходимо учитывать вклад двухступенчатых процессов, когда снаряд, возбуждённый в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со вторым ядром молекулы, находясь в возбуждённом состоянии. Далее, поскольку эффективный размер возбуждённых состояний больше размера основного состояния, сечения возбуждения и ионизации из возбуждённого состояния оказываются больше сечений возбуждения и ионизации из основного состояния и следует ожидать заметный вклад от учёта последовательных столкновений.

Можно легко оценить величину вклада эффекта кратности столкновений в сечения неупругих процессов, происходящих в электронных оболочках снаряда, и в соответствующие процессы потерь энергии. Действительно, сечения, либо эффективное торможение, пропорциональны квадрату переданного при столкновении импульса  $q^2$ , пусть при последовательном столкновении с двумя центрами электроны снаряда получают импульс  $q_1$  от первого центра и импульс  $q_2$  от второго центра. Тогда  $q^2 = (q_1 + q_2)^2$ . При параллельной ориентации оси молекулы ион сталкивается с двумя атомами молекулы и  $q_1 = q_2$ , поэтому  $q^2 = q_{||}^2 = (2q_1)^2$ . При перпендикулярной ориентации оси молекулы движущийся по прямой траектории ион сталкивается либо с

одним атомом молекулы, либо с другим, тогда либо  $q_1 \neq 0$  и  $q_2 = 0$ , либо  $q_1 = 0$  и  $q_2 \neq 0$ , в этих случаях либо  $q^2 = q_{\perp}^2 = (q_1)^2$  либо  $q^2 = q_{\perp}^2 = (q_2)^2$  что после суммирования по всем траекториям приводит примерно к двукратной разнице между сечениями, соответствующими параллельной и перпендикулярной ориентациям молекулы. Ясно, что аналогичные аргументы справедливы и для столкновений структурных ионов с молекулами, состоящими более чем из двух атомов, а также при столкновениях с более сложными мишенями (например, нанотрубками), лишь бы распределение зарядов в мишени было бы выстроенным вдоль какого-либо направления. Именно подобные эффекты, наблюдаемые при столкновениях тяжёлых ионов с двухатомными молекулами, рассматриваются в настоящей работе на основе обобщения ранее нами развитой [16, 17] непертурбативной теории потерь энергии быстрыми тяжёлыми структурными ионами при столкновениях с нейтральными сложными атомами с учётом всевозможных, в том числе многократных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени.

**Сечения неупругих процессов.** В качестве мишеней в данной работе мы будем рассматривать двухатомные молекулы, состоящие из многоэлектронных атомов. В этом случае электронная плотность в молекуле мало отличается от электронной плотности изолированных атомов, поскольку при их объединении в молекулу наибольшее изменение претерпевает электронная плотность внешних – валентных – электронов, число которых невелико по сравнению с общим числом атомных электронов. Электронная же плотность подавляющего количества остальных – остовных электронов – искажается слабо. При непертурбативных неупругих процессах, происходящих в электронных оболочках снаряда, сечения которых выражаются через электронную плотность мишени, влияние «молекулярности» электронной структуры следует ожидать незначительным по сравнению с сечениями в двухатомной мишени, составленной из изолированных атомов, без



учёта искажения их электронных оболочек. Для иллюстрации и выделения эффекта кратности столкновений мы будем описывать сложную двухатомную молекулу, образованную из двух многоэлектронных атомов, двумя способами: первый: будем считать молекулу состоящей из двух изолированных и невзаимодействующих между собой атомов, расположенных на равновесном для данной молекулы расстоянии; второй: в качестве более реалистичной модели мы будем описывать распределение электронной плотности в молекуле на основе метода Томаса-Ферми.

*Столкновения с изолированными атомами.* Сначала выберем в качестве мишени изолированный многоэлектронный атом. Согласно [12, 16, 17], сечение перехода электронов снаряда из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  при произвольной судьбе электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала:

$$\sigma = \int |\langle k | 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int U dX \right\} | 0 \rangle|^2 d^2 \mathbf{b}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{b}$  – прицельный параметр снаряда по отношению к неподвижной мишени,  $v$  – скорость снаряда,  $U$  – энергия взаимодействия электронов снаряда с мишенью, описываемой как протяжённый заряд [16, 17]. Если мишенью является изолированный атом, то в модели Дирака-Хартри-Фока-Слейтера [18]

$$U = - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_A}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_p|} \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i |\mathbf{R} + \mathbf{r}_p|), \quad (2)$$

где  $A_i$  и  $\alpha_i$  – постоянные, табулированные [18] для всех атомных элементов,  $Z_A$  – заряд ядра атома (мишень),  $N_p$  – полное число электронов в ионе (снаряд),  $\mathbf{r}_p$  ( $p = 1, 2, \dots, N_p$ ) – координаты электронов структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда,  $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$  – координаты ядра снаряда. Другими словами, атом-мишень описывается как протяжённый объект с пространственно неоднородной плотностью заряда, соответствующей точечному ядру заряда  $Z_A$ , окружённому электронной «шубой» с плотностью заряда  $-\rho_A(\mathbf{r})$ , где

плотность  $\rho_A(\mathbf{r})$  в модели Дирака-Хартри-Фока-Слейтера [18] представляется в виде

$$\rho_A(\mathbf{r}) = \frac{Z_A}{4\pi|\mathbf{r}|} \sum_{i=1}^3 A_i \alpha_i^2 \exp(-\alpha_i |\mathbf{r}|) \quad (3)$$

Тогда эйкональная фаза равна [15–17]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U \frac{dX}{v} = -\frac{2Z_A}{v} \sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^3 A_i K_0(\alpha_i |\mathbf{b} + \mathbf{s}_p|), \quad (4)$$

где  $\mathbf{s}_p$  – проекция  $\mathbf{r}$  на плоскость параметра удара  $\mathbf{b}$ . Согласно [16], формула (1) с эйкональной фазой (4) применима и в случае столкновений движущихся с релятивистскими скоростями снаряда и мишени, лишь бы в системе покоя снаряда его электроны были бы нерелятивистскими до и после столкновения (аналогичное требование и к электронам мишени в системе покоя мишени), и описывает сечение перехода электронов снаряда из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  при произвольной судьбе электронов мишени с небольшой относительной погрешностью  $\sim 1/N_A$  ( $N_A$  – полное число электронов в атоме) для многоэлектронных ( $N_A \gg 1$ ) мишеней.

Будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд  $Z_p$  которых много больше единицы (например, для иона железа  $Fe^{10+}$ ,  $Z_p = 10$ ), тогда характерный размер электронной шубы иона много меньше характерного размера нейтрального атома-мишени и можно считать среднее поле атома однородным на размерах иона, что соответствует разложению эйкональной фазы (4) по малым  $r_p/b$  с использованием формулы

$$K_0(\alpha_i |\mathbf{b} + \mathbf{s}_p|) \approx K_0(\alpha_i b) - K_1(\alpha_i b) \frac{\alpha_i \mathbf{b} \mathbf{s}_p}{b}, \quad (5)$$

слагаемое  $K_0(\alpha_i b)$ , как невызывающее электронных переходов, может быть опущено, в результате формула (1) при ортогональных  $|0\rangle$  и  $|k\rangle$  примет вид

$$\sigma = \int |\langle k | \exp \left\{ i \mathbf{q} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{r}_p \right\} | 0 \rangle|^2 d^2 \mathbf{b}, \quad (6)$$

где вектор  $\mathbf{q}$  имеет смысл среднего (по положениям электронов мишени) импульса, передаваемого электронам иона при его столкновении с атомом при значении параметра удара  $\mathbf{b}$ , и равен

$$\mathbf{q} = -\frac{2Z_A}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b) \frac{\mathbf{b}}{b} \quad (7)$$

Причём предельные значения  $\mathbf{q}$  имеют прозрачный физический смысл: при  $b \rightarrow 0$  переданный импульс  $\mathbf{q} \rightarrow -2Z_A \mathbf{b}/(vb^2)$ , что соответствует рассеянию на голем ядре атома; а при  $b \rightarrow \infty$  импульс  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ , поскольку поле нейтрального атома исчезает (экспоненциально убывает) на больших расстояниях.

*Столкновения с двухатомной молекулой.* Рассмотрим столкновение водородоподобного иона (снаряд) с двухатомной молекулой (мишень). Сечение перехода электрона снаряда из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  при произвольной судьбе электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала по формуле (1), но теперь  $U$  – энергия взаимодействия электронов иона с молекулой, описываемой как протяжённый заряд. В пределах данного пункта будем считать, что прицельный параметр снаряда  $\mathbf{b}$  отсчитывается от первого ядра молекулы (при произвольной фиксированной ориентации оси молекулы по отношению к направлению движения иона), т.е.  $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1$ . Потенциал, создаваемый двухатомной молекулой в точке наблюдения  $\mathbf{r}$ , может быть представлен в виде [19]:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Z_1}{r_1} \Phi(r_1) + \frac{Z_2}{r_2} \Phi(r_2), \quad (8)$$

здесь  $Z_1$  и  $Z_2$  – заряды первого и второго ядер молекулы соответственно;  $r_1$  и  $r_2$  – расстояния до точки наблюдения  $\mathbf{r}$  от первого и второго центров молекулы,  $\Phi(r)$  – экранирующая функция, полученная в результате аппроксимации численных расчётов в модели Томаса-Ферми:

$$\Phi(r) = \frac{1}{1 + a_1 r + a_2 r^{3/2} + a_3 r^2 + a_4 r^3}, \quad (9)$$

где  $a_1, a_2, a_3, a_4$  – коэффициенты, которые могут быть рассчитаны для конкретной молекулы и заданного межатомного расстояния в молекуле (для нескольких молекул при различных межатомных расстояниях коэффициенты приведены в работе [19]).

Отметим, что представление (9) справедливо и в случае, когда мы будем представлять многоэлектронную молекулу как два изолированных (невзаимодействующих между собой) атома, расположенных на равновесном для данной молекулы расстоянии. В этом случае экранирующая функция  $\Phi$  в формуле (9) соответствует распределению заряда (3) в нейтральном атоме и, согласно (2), равна

$$\Phi(r) = \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i r)$$

В нашем случае радиус-векторы, задающие положение электрона иона относительно первого и второго центра молекулы, определяются как

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \mathbf{r}_p, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \mathbf{L} + \mathbf{r}_p, \quad (10)$$

где  $\mathbf{R}$  – радиус-вектор ядра снаряда относительно первого центра мишени,  $\mathbf{L}$  – вектор оси молекулы, задающий положение второго центра молекулы относительно первого,  $\mathbf{r}_p$  – радиус-вектор электрона иона относительно ядра иона. Тогда энергия взаимодействия  $U$ , входящая в (1), принимает вид

$$U = -\frac{Z_1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_p|} \Phi(|\mathbf{R} + \mathbf{r}_p|) - \frac{Z_2}{|\mathbf{R} - \mathbf{L} + \mathbf{r}_p|} \Phi(|\mathbf{R} - \mathbf{L} + \mathbf{r}_p|). \quad (11)$$

Далее будем предполагать, что налетающий ион имеет достаточно большой заряд  $Z_p \gg 1$ , а так как  $r_p \sim 1/Z_p$ , то выражение для  $U$  можно разложить по малым  $r_p$ . Тогда эйкональная фаза равна:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U \frac{dX}{v} = -(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \mathbf{r}_p, \quad (12)$$

где  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$  – импульсы, передаваемые элект-

Сравнение сечений для случая параллельного и перпендикулярного расположения молекулы  
(для реакции  $Fe^{25+} + N_2$ )

$E$ , MeV/amu	$\sigma_{\parallel}$ , $10^{-3}$ а.е.	$\sigma_{\perp}$ , $10^{-3}$ а.е.	$(\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp})/\sigma_{\parallel}$ %	$\bar{\sigma}$ $10^{-3}$ а.е.
20	10,0934; 9,96888	6,01302; 5,93306	40	6,0322; 5,9520
50	4,75026; 4,69879	2,77067; 2,73485	42	2,7757; 2,7399
100	2,75241; 2,72533	1,58624; 1,55626	42	1,5904; 1,5603
300	1,29959; 1,28834	0,73913; 0,72702	43	0,7403; 0,7322
500	0,99376; 0,98552	0,56293; 0,55406	43	0,5644; 0,5525
1000	0,76766; 0,76155	0,43325; 0,42548	44	0,4342; 0,4260

трону иона при столкновении с первым и вторым центрами двухатомной молекулы:

$$q_1 = -b_1 \frac{Z_1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Phi(R)}{R} \left\{ \frac{1}{R^2} + \frac{\Phi(R)}{R} \left( a_1 + \frac{3}{2} a_2 \sqrt{R} + 2a_3 R + 3a_4 R^2 \right) \right\} dX, \quad (13)$$

где  $\mathbf{R} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{X}$  и  $R = \sqrt{X^2 + b_1^2}$

$$q_2 = -b_2 \frac{Z_2}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Phi(R_2)}{R_2} \left\{ \frac{1}{R_2^2} + \frac{\Phi(R_2)}{R_2} \left( a_1 + \frac{3}{2} a_2 \sqrt{R_2} + 2a_3 R_2 + 3a_4 R_2^2 \right) \right\} dX, \quad (14)$$

где  $R_2 = \sqrt{(X - L_{\parallel})^2 + b_2^2}$  Здесь  $L_{\parallel}$

проекция оси молекулы  $\mathbf{L}$  на направление движения иона, и мы ввели параметр удара  $b_2$  относительно второго ядра молекулы, связанный с  $b_1$  соотношением  $\mathbf{b}_1 = \mathbf{L}_{\perp} + \mathbf{b}_2$ , где  $\mathbf{L}_{\perp}$  проекция оси молекулы  $\mathbf{L}$  на плоскость параметра удара.

Соответственно, для модели молекулы, составленной из изолированных атомов, согласно (7), получим:

$$q_1 = -\frac{2Z_A}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b_1) \frac{\mathbf{b}_1}{b_1} \quad (15)$$

$$q_2 = -\frac{2Z_A}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b_2) \frac{\mathbf{b}_2}{b_2} \quad (16)$$

В результате выражение (1) для сечения преобразуется к виду

$$\sigma = \int \langle |k| |1 - \exp\{i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \mathbf{r}_p\} | 0 \rangle^2 d^2 \mathbf{b}_1. \quad (17)$$

Вычисляемое по формуле (17) сечение  $\sigma$  является функцией от ориентации оси молекулы, т.е.  $\sigma = \sigma(\mathbf{L})$ . На практике обычно измеряют сечения при хаотичной ориентации молекул. Поэтому введём усреднённую по направлениям оси молекулы величину  $\bar{\sigma}$  в предположении равномерного распределения ориентаций оси молекулы:

$$\bar{\sigma} = \int \sigma(\mathbf{L}) \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sigma(\theta) \sin \theta d\theta$$

Введём дополнительные обозначения:  $\sigma_{\parallel}$  и  $\sigma_{\perp}$  – сечения  $\sigma(\mathbf{L})$  в случаях параллельного и перпендикулярного расположения оси молекулы по отношению к направлению движения иона. Нами были проведены расчёты сечений потери электрона водородоподобным ионом  $Fe^{25+}$  при столкновениях с молекулой азота  $N_2$  для различных случаев ориентации молекулы. В таблице: столбец 1 – энергия иона в МэВ на атомную единицу массы, столбцы 2 и 3 – сечения  $\sigma_{\parallel}$  и  $\sigma_{\perp}$  в  $10^{-3}$  атомных единиц, столбец 4 – относительная разница между  $\sigma_{\parallel}$  и  $\sigma_{\perp}$  в процентах, столбец 5 – среднее по всем ориентациям оси молекулы сечение  $\bar{\sigma}$  в  $10^{-3}$  атомных единиц. Для каждого из сечений приведены по два значения: первое – для молекулы, состоящей из двух изолированных атомов; второе – для молекулы в модели Томаса-Ферми.

Как видно из таблицы, сечения изменяются незначительно при изменении модели много-

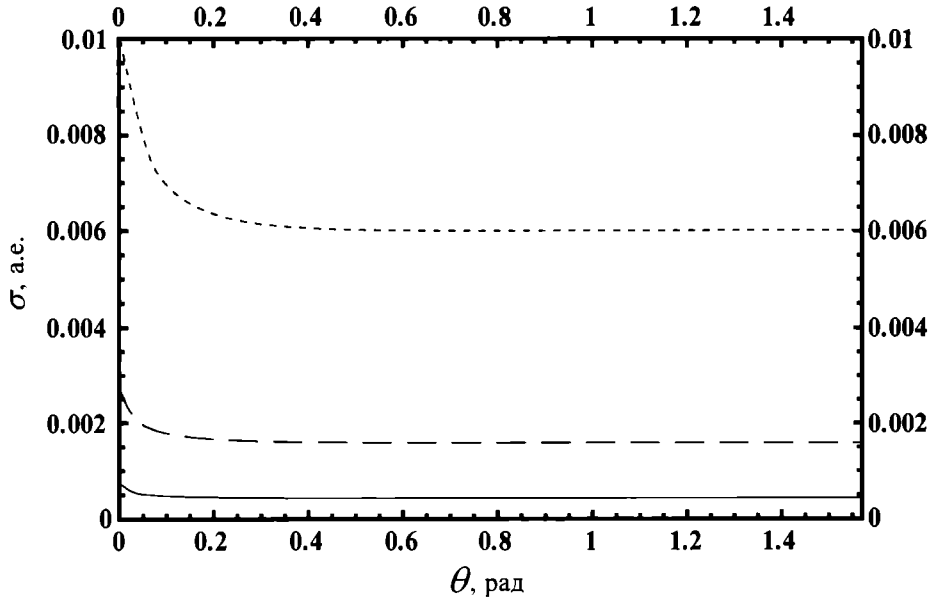


Рис. 1. Сечение (в атомных единицах) однократной обдирки водородоподобного иона  $Fe^{25+}$  в зависимости от угла  $\theta$  (в радианах) ориентации оси молекулы: короткий пунктир – значения сечения однократной обдирки  $\sigma(\theta)$  при энергии иона 20 МэВ/нуклон; длинный пунктир – при энергии 100 МэВ/нуклон; сплошная линия – при энергии 1 000 МэВ/нуклон.

электронной молекулы. Сечение в «параллельном» случае примерно в 1,5 превосходит сечение при «перпендикулярном» расположении молекулы. Среднее сечение  $\bar{\sigma}$  незначительно отличается от  $\sigma_{\perp}$ . Таким образом, при хаотической ориентации мишени вклад кратности столкновений приводит к незначительному изменению сечения по сравнению с удвоенным сечением на одном изолированном атоме.

Мы рассчитали также зависимость сечения от ориентации оси молекулы. В качестве характеристики ориентации мы выбрали  $\theta$  – угол отклонения оси молекулы относительно направления движения снаряда, т.о.  $\sigma = \sigma(\theta)$ . Результаты расчётов для столкновений ионов железа  $Fe^{25+}$  с молекулой азота  $N_2$  приведены на рис. 1.

Как и следовало ожидать,  $\sigma(\theta)$  заметно возрастает в интервале углов  $\theta$  меньших  $10^{-1}$  радиан.

**Эффективное торможение.** Столкновения с изолированными атомами. Согласно

[16, 17], мы можем записать потери энергии с учётом всевозможных, в том числе многоэлектронных возбуждений и ионизации мишени и снаряда, в виде

$$\kappa = \kappa^{(p)} + \kappa^{(r)}, \quad (18)$$

допускающем следующую наглядную интерпретацию:  $\kappa^{(p)}$  – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов структурного иона мишенью при произвольной (т.е. полученной путём суммирования по полному набору всех конечных состояний электронов мишени) судьбе электронов мишени. Как показано в работе [16], для многоэлектронных мишеней это позволяет вычислять  $\kappa^{(p)}$  как потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов структурного иона мишенью, описываемой как протяжённый заряд; аналогично,  $\kappa^{(r)}$  – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов мишени структурным ионом при произвольной судьбе электронов иона, описываемого как протяжённый заряд.

В соответствии с предметом данной работы – исследованием эффектов кратности стол-

кновений, мы вычислим только  $\kappa^{(p)}$  и приведём несколько необходимых для дальнейшего изложения формул из статей [16, 17]. В качестве снаряда будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд  $Z_p$  которых много больше единицы, что соответствует возможности разложения энергии взаимодействия  $U$  в формуле (1) по малым  $r_p/b$ . Область параметров удара, в которой справедливо такое разложение, мы будем называть далее областью больших параметров удара:  $b_0 < b < \infty$ . Точное значение параметра обрезания  $b_0$  для нас несущественно, поскольку (см. ниже формулы (22), (23) и (24)) зависимость  $\kappa^{(p)}$  от  $b_0$  оказывается логарифмической и исчезает при вычислении  $\kappa^{(p)}$  во всей области параметров удара.

Рассмотрим сначала вклад области больших параметров удара в эффективное торможение  $\kappa^{(p)}$ , когда сечение возбуждения снаряда описывается формулой (6). В этом случае получим

$$\kappa^{(p)} = \int d^2\mathbf{b} \sum_k (\varepsilon_k - \varepsilon_0) |f_{0k}|^2 \quad (19)$$

где неупругий формфактор  $f_{0k} = \langle k | f | 0 \rangle$ ,

$f = \exp(i\mathbf{q} \sum_{p=1}^{N_p} \mathbf{r}_p)$ . Следуя [20], не трудно получить, что

$$\sum_k (\varepsilon_k - \varepsilon_0) |f_{0k}|^2 = \langle 0 | \sum_{p=1}^{N_p} (\nabla_p f)(\nabla_p f^+) | 0 \rangle = \frac{N_p}{2} q^2, \quad (20)$$

где  $\nabla_p = \partial/\partial \mathbf{r}_p$ . В результате вклад в эффективное торможение  $\kappa^{(p)}$  области параметров удара  $b_0 < b < \infty$ , в которой справедливо разложение (28), имеет вид:

$$\kappa^{(p)}(b_0 < b < \infty) = \frac{N_p}{2} \int_{b_0}^{\infty} q^2 2\pi b db \quad (21)$$

Подставляя сюда значение  $\mathbf{q}$  из (7), получим

$$\kappa^{(p)}(b_0 < b < \infty) =$$

$$= 4\pi \frac{Z_A^2 N_p}{v^2} \left( \sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln \frac{2}{\alpha_i b_0 \eta \sqrt{e}} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} \right) \quad (22)$$

Рассмотрим теперь вычисление  $\kappa^{(p)}$  в области малых параметров удара:  $0 < b < b_0$ . При столкновениях с малыми параметрами удара или большими переданными импульсами можно считать [21] электроны структурного иона свободными и покоящимися до рассеяния на голом ядре атома заряда  $Z_A$  и воспользоваться подходом Линдхарда-Соренсена [22]. Тогда, согласно численным расчётам [22], до  $\gamma \leq 10$  и зарядов  $Z_A \leq 92$ , эффективное торможение можно представить в часто используемом виде:

$$\kappa^{(p)}(0 < b < b_0) = 4\pi \frac{Z_A^2 N_p}{v^2} \left( \ln(b_0 \gamma v \eta) - \frac{\beta^2}{2} + \Delta L_{Bloch}^{Z_A} + \Delta L_{Mott}^{Z_A} \right) \quad (23)$$

где  $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ ,  $\beta = v/c$ ,  $c$  – скорость света,  $\eta = 1,781$ ,  $\Delta L_{Bloch}^{Z_A}$  и  $\Delta L_{Mott}^{Z_A}$  – поправки Блоха [23] и Мотта [24], эффективно отличающиеся от нуля лишь при малых параметрах удара [22] (см. также [25]) и зависящие от заряда  $Z_A$ , в поле которого рассеиваются принадлежащие структурному иону электроны.

Эффективное торможение  $\kappa^{(p)}$  получаем, суммируя вклады (22) и (23) от двух областей параметра удара:

$$\kappa^{(p)} = \kappa^{(p)}(0 < b < b_0) + \kappa^{(p)}(b_0 < b < \infty). \quad (24)$$

Необходимо отметить, что при таком суммировании зависимость от параметра  $b_0$  исчезает, именно поэтому конкретное значение  $b_0$  несущественно для излагаемого метода сшивки. В результате

$$\kappa^{(p)} = 4\pi \frac{Z_A^2 N_p}{v^2} \left[ \ln 2\gamma v - \frac{\beta^2}{2} - \sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln \alpha_i \sqrt{e} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} + \Delta L_{Bloch}^{Z_A} + \Delta L_{Mott}^{Z_A} \right]. \quad (25)$$

Этой же схемой шивки мы воспользуемся ниже, сначала в модели мишени – молекулы, составленной из двух изолированных атомов, а затем в методе Томаса-Ферми.

*Столкновения с двухатомной молекулой.* Выберем в качестве мишени двухатомную молекулу, состоящую из двух многоэлектронных атомов. Как и в предыдущем пункте, рассмотрим  $\kappa^{(p)}$  – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов снаряда. Далее будем предполагать, что налетающий ион имеет достаточно большой заряд ядра  $Z_p$ , а так как  $r_p \sim 1/Z_p$ , то выражение (11) для  $U$  можно опять разложить по малым  $r_p$ , как это делалось в предыдущем пункте. Область параметров удара, в которой справедливо такое разложение (областью больших параметров удара), мы далее будем обозначать буквой  $C$ .

Рассмотрим вклад области  $C$  в эффективное торможение. При этом формальные вклады при условии однородности поля на размерах снаряда совпадают со случаем столкновения с одноатомной мишенью. В результате вклад в эффективное торможение  $\kappa^{(p)}$  области больших параметров удара  $C$  примет вид

$$\kappa^{(p)}(C) = \frac{N_p}{2} \int_C q^2 d^2\mathbf{b}. \quad (26)$$

Подставляя сюда, согласно (12),  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$ , представим  $\kappa^{(p)}(C)$  в виде

$$\kappa^{(p)}(C) = \frac{N_p}{2} \int_C (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)^2 d^2\mathbf{b} \quad (27)$$

Таким образом, при последовательном столкновении с двумя центрами электроны снаряда получают импульс  $\mathbf{q}_1$  от первого центра и импульс  $\mathbf{q}_2$  – от второго и, хотя импульсы передаются последовательно друг за другом, в условиях применимости приближения эйконала, формально, электроны иона воспринимают их как одновременные. Причём за время столкновения электроны снаряда не меняют (точнее, пренебрежимо мало меняют) своё положение относительно ядра снаряда.

Для удобства перепишем (28) в виде

$$\kappa^{(p)}(C) = \kappa_1^{(p)}(C_1) + \kappa_2^{(p)}(C_2) + \Delta\kappa^{(p)}, \quad (28)$$

где область  $C_1$  представляет собой всю плоскость параметра удара  $\mathbf{b}_1$ , отсчитываемого от первого центра молекулы, с вырезанным кругом некоторого радиуса  $b_0$ , описанным вокруг точки расположения первого центра молекулы в плоскости параметра удара. Тогда

$$\kappa_1^{(p)}(C_1) = \frac{N_p}{2} \int_{b_0}^{\infty} q_1^2 2\pi b_1 db_1, \quad (29)$$

очевидно, имеет смысл потерь энергии при столкновении с первым атомом молекулы. Аналогично, область  $C_2$  представляет собой всю плоскость параметра удара  $\mathbf{b}_2$ , отсчитываемого от второго центра молекулы, с вырезанным кругом некоторого радиуса  $b_0$ , описанным вокруг точки расположения второго центра молекулы в плоскости параметра удара. Следовательно,

$$\kappa_2^{(p)}(C_2) = \frac{N_p}{2} \int_{b_0}^{\infty} q_2^2 2\pi b_2 db_2 \quad (30)$$

имеет смысл потерь энергии при столкновении со вторым атомом молекулы. Для одинаковых атомов  $\kappa_1^{(p)}(C_1) = \kappa_2^{(p)}(C_2)$ , а вклад от области малых параметров удара, очевидно, также одинаков и выражается формулой (23). В результате

$$\kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)} = 2 \frac{4\pi Z_A^2 N_p}{v^2} \left[ \ln 2\gamma v - \frac{\beta^2}{2} - \sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln \alpha_i \sqrt{e} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} + \Delta L_{Bl}^Z + \Delta L_{Mou}^Z \right]. \quad (31)$$

В формуле (28) слагаемое

$$\Delta\kappa^{(p)}(C_\Delta) = \frac{N_p}{2} \int 2(\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2) d^2\mathbf{b}, \quad (32)$$

очевидно, имеет смысл потерь энергии за счёт кратности столкновений, поскольку  $\Delta\kappa^{(p)}(C_\Delta) \rightarrow 0$  при формальном устремле-

нии к бесконечности расстояния между атомами, входящими в состав молекулы, тогда как при таком предельном переходе  $\kappa_1^{(p)}$  и  $\kappa_2^{(p)}$  остаются неизменными. Выбор области интегрирования  $C_\Delta$  в формуле (32) по параметру удара  $\mathbf{b}$  нуждается в дополнительных комментариях. Интегрирование в (32) проводится по всей плоскости параметра удара и может быть выполнено аналитически, результат этого интегрирования обозначим  $\Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp>0}$ , где

$$\Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp>0} = 8\pi \frac{Z_A^2}{v^2} N_p \left[ \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 \frac{A_i A_j}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} \alpha_i^2 K_0(\alpha_i L_\perp) + \sum_{i=1}^3 A_i^2 \left\{ K_0(\alpha_i L_\perp) - \frac{\alpha_i L_\perp}{2} K_1(\alpha_i L_\perp) \right\} \right]. \quad (33)$$

Таким образом,  $\Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp>0}$  как функция от  $L_\perp$  принимает конечные значения при всех  $L_\perp$  за исключением  $L_\perp \rightarrow 0$ , когда  $\Delta\kappa^{(p)}$  ведёт себя как  $\ln 1/L_\perp$ . Не трудно видеть, что такая расходимость связана с неприменимостью приближения однородного поля (17), которое справедливо лишь для параметров удара  $b \geq 1/Z_p$ , что требует, как не трудно убедиться, выполнения условия  $L_\perp \geq 1/Z_p$ . Поэтому формула (33) описывает  $\Delta\kappa^{(p)}$  как функцию от  $L_\perp$  в области  $1/Z_p \leq L_\perp \leq R_0$ , где  $R_0$  – равновесное межатомное расстояние в молекуле.

Для вычисления  $\Delta\kappa^{(p)}$  для значений  $0 \leq L_\perp \leq 1/Z_p$  сначала найдем

$$\Delta\kappa^{(p)} = \int (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2) d^2 \mathbf{b}$$

при  $L_\perp = 0$ , когда  $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$ ,  $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2$  и, очевидно,

$$\Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp=0} = 2\kappa_1^{(p)} = 2\kappa_2^{(p)} = \kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)}$$

и выражается формулой (31). Отметим, что телесный угол, в котором расположена ось молекулы, соответствующий  $0 \leq L_\perp \leq 1/Z_p$ , при

$Z_p \gg 1$  имеет порядок величины  $(1/Z_p)^2$  и исключительно мал. Поэтому мы можем аппроксимировать функцию  $\Delta\kappa^{(p)}$  для всех возможных значений  $0 \leq L_\perp \leq R_0$  следующим образом:

$$\Delta\kappa^{(p)} = \left[ 1 - \exp\left(-\frac{L_\perp^2}{1/Z_p^2}\right) \right] \Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp>0} + \exp\left(-\frac{L_\perp^2}{1/Z_p^2}\right) \Delta\kappa^{(p)}\Big|_{L_\perp=0}. \quad (34)$$

Мы провели расчёты относительного вклада кратных столкновений

$$v = \Delta\kappa^{(p)} / (\kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)}),$$

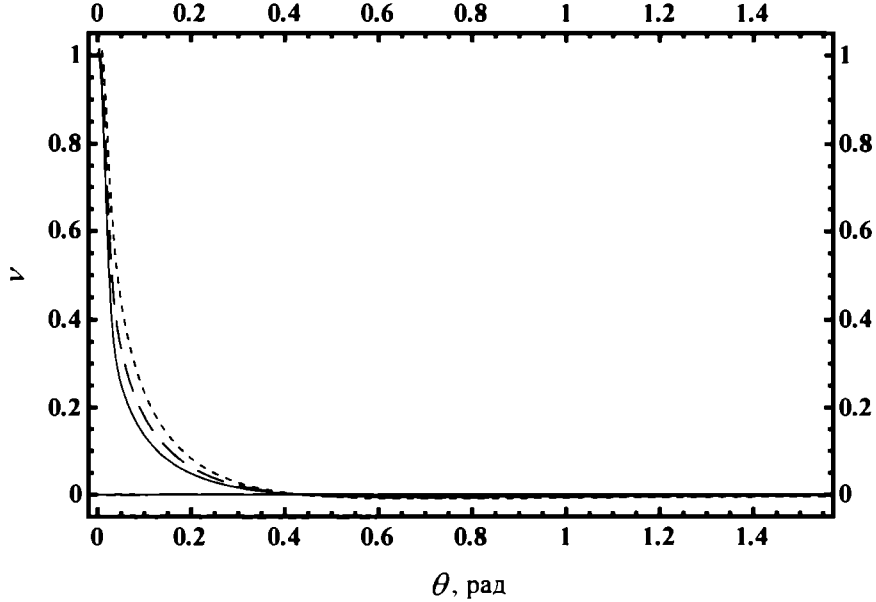
т.е.  $\Delta\kappa^{(p)}$ , отнесённого к удвоенным потерям на одном изолированном атоме, в зависимости от ориентации оси молекулы. В качестве величины, характеризующей ориентацию молекулы, мы выбрали  $\theta$  – угол отклонения оси молекулы относительно направления движения снаряда, т.о.  $v = v(\theta)$ . Результаты расчётов для столкновений ионов железа  $Fe^{25+}$  с молекулой азота  $N_2$  приведены на рис. 2. Как и следовало ожидать,  $v(\theta)$  меняется от нуля до единицы и заметно больше нуля в интервале углов  $\theta$ , меньших  $10^{-1}$ .

На практике обычно измеряют потери энергии при хаотичной ориентации молекул. Поэтому мы провели расчёты усреднённой по направлениям оси молекулы величины  $\bar{v}$  в предположении равновероятного распределения ориентаций оси молекулы:

$$\bar{v} = \int v(\theta) \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{1}{2} \int_0^\pi v(\theta) \sin \theta d\theta$$

Оказалось, что относительная поправка, определяющая вклад кратных столкновений, при случайной ориентации молекул очень мала – меньше или порядка одной десятой процента. Таким образом, эффект кратности столкновений может вносить заметный вклад лишь при наличии выстроенности молекул вдоль какого-либо направления.

**Расчёт коэффициентов экранирующей функции.** В статье [19] производился расчёт для молекулы азота до  $R_0 = 1,5$ , что недоста-



**Рис. 2.** Относительный вклад  $\nu$  кратных столкновений в зависимости от угла  $\theta$  (в радианах) ориентации оси молекулы: короткий пунктир – значения  $\nu(\theta)$  при энергии иона 20 МэВ/нуклон; длинный пунктир –  $\nu(\theta)$  при энергии 100 МэВ/нуклон; сплошная линия – при 1 000 МэВ/нуклон.

точно для реальной молекулы. Поэтому нами был произведён расчёт при  $R_0 = 2,07$ . Основная идея заключается в следующем: согласно модели Томаса-Ферми для получения точного потенциала в этой модели необходимо решить дифференциальное уравнение второго порядка с двумя неизвестными:

$$\Delta V(\xi, \eta) = \alpha [V(\xi, \eta)]^{3/2}, \quad \alpha = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \quad (35)$$

где  $\xi, \eta$  – эллиптические координаты точки, в которой находим потенциал. Лапласиан берётся в эллиптических координатах. Если выбрать  $V$  в виде (8) с  $\Phi(r)$  из (9), то расстояния от точки наблюдения до первого и второго центров молекулы равны

$$|\mathbf{r}_1| = R_0(\eta + \xi)/2, \quad |\mathbf{r}_2| = R_0(\xi - \eta)/2,$$

где  $R_0$  – расстояние между центрами. Дифференциальное уравнение данного типа (35) может быть решено численно. Нам же нужно представление в аналитическом виде, поэтому будем искать приближённое решение уравнения в виде (8) с  $\Phi(r)$  из (9), где коэффициенты  $a_1, a_2, a_3, a_4$  находятся путём минимизации интеграла

$$F = \int (\Delta V(\xi, \eta) - \alpha [V(\xi, \eta)]^{3/2}) d^3 \mathbf{r} \quad (36)$$

Численный алгоритм минимизации позволяет найти необходимые коэффициенты:

$$\begin{aligned} a_1 &= 3,1531, \\ a_2 &= -1,7086, \\ a_3 &= 2,24449, \\ a_4 &= 0,1008, \end{aligned}$$

соответствующие равновесному расстоянию  $R_0 = 2,07$  для молекулы  $N_2$ .



## Список литературы

1. *DuBois R.D.* Electron loss from 1.4-MeV/u  $U^{4,6,10+}$  ions colliding with *Ne*,  $N_2$ , and *Ar* targets / R.D. DuBois, A.C.F. Santos, Th. Stohlker et al. // *Physical Review A*. 2004. V. 70, № 3. Pp. 032712.
2. *Watson R.L.* Target *Z* dependence and additivity of cross sections for electron loss by 6-MeV/amu  $Xe^{18+}$  projectiles / R.L. Watson, Yong Peng, V. Horvat et al. // *Physical Review A*. 2003. V. 67, № 2. Pp. 022706.
3. *Krause H.F.* Electron capture and ionization of 33-TeV Pb ions in gas targets / H.F. Krause, C.R. Vane, S. Datz et al. // *Physical Review A*. 2001. V. 63, № 3. Pp. 032711.
4. *Ludziejewski T.* Simultaneous excitation and ionization of He-like uranium ions in relativistic collisions with gaseous targets / T. Ludziejewski, Th. Stohlker, D.C. Ionescu et al. // *Physical Review A*. 2000. V. 61, № 5. Pp. 052706.
5. *Wells E.* Effect of the projectile charge on the ionization and excitation of hydrogen molecules by fast ion impact / E. Wells, I. Ben-Itzhak, K.D. Carnes et al. // *Physical Review A*. 1999. V. 60, № 5. Pp. 3734–3739.
6. *Tschersich, M.* Coulomb excitation of helium atoms in collisions with highly charged ions / M. Tschersich, R. Drozdowski, M. Busch et al. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 1999. V. 32, № 23. Pp. 5539–5556.
7. *Rymuza P.* Deviation from first-order perturbation theory observed at intermediate relativistic velocities for the ionization of highly-charged heavy projectiles / P. Rymuza, Th. Stohlker, C.L. Cocke et al. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 1993. V. 26, № 7. Pp. L169–L175.
8. *Беймс Д.В.* Атомные и молекулярные процессы / под ред. Л.М. Бибермана, В.А. Фабриканта. М., 1964.
9. *Shevelko V.P.* // *Atomic Physics with Heavy Ions*. Springer, 1999. P. 305.
10. *Shevelko V.P.* Stripping of fast heavy low-charged ions in gaseous targets / V.P. Shevelko, I.Yu. Tolstikhina, Th. Stohlker // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2001. V. 184, № 3. Pp. 295–308.
11. *Eichler J.* *Relativistic Atomic Collisions* / J. Eichler, W. E. Meyerhof. N.Y., 1995.
12. *Матвеев В.И., Матрасулов Д.У., Рябченко С.В.* Потеря электронов быстрыми тяжелыми структурными ионами при столкновениях с атомами // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2005. Т. 82, № 7. С. 455–459.
13. *Apell S.P.* Geometrical basis for molecular stopping anisotropy / S.P. Apell, S.B. Trickey, J.R. Sabin // *Physical Review A*. 1998. V. 58, № 6. Pp. 4616–4621.
14. *Mikkelsen H.H.* A Bethe theory for the directional dependence of stopping by molecules / H.H. Mikkelsen, J. Oddershede, J.R. Sabin et al. // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1995. V. 100, № 4. Pp. 451–457.
15. *Pierce T.E.* Stopping Powers and Ranges of 5-90-MeV  $S^{32}$ ,  $Cl^{35}$ ,  $Br^{79}$ , and  $I^{127}$  Ions in  $H_2$ , *He*,  $N_2$ , *Ar*, and *Kr*: A Semiempirical Stopping Power Theory for Heavy Ions in Gases and Solids / T.E. Pierce, M. Blann // *Physical Review*. 1968. V. 173, № 2. Pp. 390–405.
16. *Матвеев В.И., Сидоров Д.Б.* К теории торможения быстрых тяжелых высокозарядных структурных ионов при столкновениях со сложными атомами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2007. Т. 132, № 3. С. 569–578.
17. *Матвеев В.И., Сидоров Д.Б.* Эффективное торможение быстрых тяжелых высокозарядных структурных ионов при столкновениях со сложными атомами // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2006. Т. 84, № 5. С. 299–304.
18. *Salvat F.* Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ( $Z = 1 - 92$ ) / F. Salvat, J.D. Martinez, R. Mayol et al. // *Physical Review A*. 1987. V. 36, № 2. Pp. 467–474.
19. *Gross E.K.U.* Thomas-Fermi approach to diatomic systems. I. Solution of the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac-Weizsacker equations / E.K.U. Gross, R.M. Dreizler // *Physical Review A*. 1979. V. 20, № 5. Pp. 1798–1807.
20. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* *Квантовая механика*. М., 1989.
21. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* *Квантовая электродинамика*. М., 1989.
22. *Lindhard J.* Relativistic theory of stopping for heavy ions / J. Lindhard, A.H. Sorensen // *Physical Review A*. 1996. V. 53, № 4. Pp. 2443–2456.
23. *Bloch F.* Zur Bremsung rasch bewegter Teilchen beim Durchgang durch Materie // *Annalen der Physik*. 1933. V. 16, № 5. Pp. 285–320.
24. *Mott N.F.* The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*. 1929. V. 124. Pp. 425–442.
25. *Матвеев В.И.* Ионизационные потери релятивистских структурных тяжелых ионов при столкновениях с атомами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2002. Т. 121, № 2. С. 260–266.

*Matveev Victor, Gusarevich Eugeny, Makarov Dmitry, Ryabchenko Sergey*

## **ENERGY LOSSES OF FAST HEAVY STRUCTURED IONS IN COLLISIONS WITH TWO-ATOMIC MOLECULES**

The authors have developed a nonperturbative method of calculating energy losses of fast heavy structured ions in their collisions with two-atomic molecules taking into account all possible excitations and ionizations of both projectile and target. The contribution of multiplicity of collisions and alignment effects (orientation of the molecular axis towards the projectile direction) to the processes of the projectile energy losses are calculated. The one-electron loss and cross sections of the  $\text{Fe}^{25+}$  ions in collisions with a nitrogen molecule  $\text{N}_2$  are calculated by way of example.

Рецензент – *Воробьев В.А.*, доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики Поморского государственного университета имени М.В. Ломоносова