

На правах рукописи

МАКАРОВ Дмитрий Николаевич

Торможение и потери энергии при столкновениях тяжёлых структурных ионов с молекулами

01.04.04. — Физическая электроника

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико–математических наук

Архангельск - 2009

Работа выполнена на кафедре теоретической физики
ГОУ ВПО «Поморский государственный университет имени М. В. Ломоносова»

Научный руководитель

доктор физико–математических наук,
профессор Матвеев Виктор Иванович

Официальные оппоненты

доктор физико–математических наук,
Артёмов Александр Сергеевич

кандидат физико–математических наук,
доцент Титов Александр Константинович

Ведущая организация

Институт общей физики
имени А. М. Прохорова
Российской академии наук

Защита состоится « 15 » декабря 2009 года в 15 часов

на заседании совета по защите кандидатских диссертаций

К 212.191.04 при Поморском государственном университете

имени М. В. Ломоносова по адресу: 163002, г. Архангельск, пр. Ломоносова, д. 4, ауд. 37

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Поморского
государственного университета имени М. В. Ломоносова

Автореферат разослан « » ноября 2009 года

Учёный секретарь совета

по защите кандидатских диссертаций К 212.191.04,
кандидат физико-математических наук

Е. С. Гусаревич

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Часто экспериментальные исследования неупругих процессов, сопровождающих столкновения быстрых высокозарядных ионов с различного рода мишенями, проводятся на молекулярных мишенях. В подобных случаях, в отличие от столкновений с атомарными мишенями, в процессы потерь энергии вносят вклад эффекты ориентации молекулы-мишени относительно направления движения снаряда. Для учета влияния на процессы потерь энергии ориентационных молекулярных эффектов развито в первом порядке теории возмущений обобщение теории Бете. Теория возмущений применима, если выполнено неравенство $Z/v \ll 1$, где Z — заряд иона, v — относительная скорость столкновения, здесь и везде ниже используются атомные единицы. При использовании же ионов высоких зарядов $Z \gg 1$ теория возмущений неприменима, поскольку даже при $v \gg 1$ часто оказывается, что $Z/v \geq 1$. Во многих экспериментах используются частично ободранные — структурные ионы высоких зарядов и энергий, состоящие из ядра заряда Z и некоторого количества N_P связанных электронов, так что “видимый” заряд иона равен $Z_P = Z - N_P$. Строго говоря, столкновения таких ионов с атомами и молекулами следует рассматривать как столкновение двух сложных систем, при котором происходит одновременное возбуждение электронных оболочек обеих сталкивающихся систем. Сравнительно недавно были проведены измерения сечений многократной ионизации (потеря до 15 электронов) быстрых ионов урана U^{q+} , $q = 4, 6, 10, 28$ (с энергиями 1.4, 3.5 и 6.5 МэВ/нуклон) при столкновениях с многоэлектронными нейтральными атомами и молекулами. Подобные измерения были проведены и для ионов Xe^{18+} (с энергиями 6 МэВ/нуклон) при столкновениях с атомами He, Ne, Ar, Kr, Xe и для ионов Xe^{18+} (с энергиями 2.0-9.3 МэВ/нуклон) — с молекулой N_2 , а также для ионов Xe^{11+} , Kr^{7+} при столкновениях с молекулой N_2 с энергией 3.4 МэВ/нуклон. Измерения показали, что при увеличении степени ионизации на единицу соответствующее сечение убывало менее чем в два раза, и была отмечена необходимость рассчитывать подобные процессы непertурбативными (не предполагающими малости возмущения) методами (причем вклад многоэлектронных процессов в полные сечения потерь электронов достигает 50 % и более. Аналогичный вы-

вод справедлив и для процессов ионизационных потерь энергии. Действительно, эффективное торможение можно оценить как произведение энергии ионизации на сечение ионизации. На двукратную ионизацию приходится примерно в два раза большая энергия, чем на однократную, и если сечение двукратной ионизации в два раза меньше, чем сечение однократной ионизации, то произведение энергии на соответствующее сечение не меняется, аналогично и для ионизации более высокой кратности. Другими словами, вклад многоэлектронных переходов в эффективное торможение оказывается сравнимым по порядку величины с вкладом одноэлектронных возбуждений и ионизации. Ясно, что такие процессы не описываются в рамках теории возмущений. Квантовомеханическое описание подобных непертурбативных эффектов, сопровождающих столкновения быстрых высокозарядных структурных ионов со сложными нейтральными атомами возможно на основе применимых при $v \gg 1$ и тесно связанных между собой приближений внезапных возмущений и эйконала, не требующих малости Z_P/v по сравнению с единицей.

Цель работы заключается в развитии непертурбативной теории многократной обдирки (ионизации) снарядов и потерь энергии при столкновениях быстрых тяжёлых структурных ионов с нейтральными молекулами, проведении на основе развитой теории расчётов неупругих процессов, активно исследуемых в настоящее время теоретически и экспериментально. Развитию эйконального метода в теории торможения быстрых ионов в связи с его обширностью применения.

Научная новизна работы, прежде всего, определяется тем, что большинство предлагаемых расчётов было выполнено на основе оригинальных схем, разработанных научным руководителем профессором Матвеевым В. И. и автором диссертации для описания элементарных процессов, интенсивно исследуемых в настоящее время на ускорителях тяжёлых ионов, а также тем, что ряд расчётов был выполнен впервые:

1. На основе приближения эйконала рассчитаны сечения многократной ионизации (степень ионизации от 1 до 4) быстрых тяжелых высокозарядных структурных ионов при столкновениях с двухатомными молекулами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени.

2. Проведены непертурбативные расчеты эффектов кратности столкновений и ориентации оси молекулы относительно направления движения снаряда в процессах потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Показано что эффект кратности столкновений приводит к значительной разнице между потерями энергии при параллельной и перпендикулярной ориентации мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен. Аналогичные выводы сделаны и для сечений многократной обдирки снарядов.
3. Развита непертурбативный метод расчетов потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях со сложными молекулами и наночастицами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Проведены расчеты вкладов эффектов кратности столкновений и ориентации мишени относительно направления движения снаряда в процессы потерь энергии. В качестве примеров рассмотрены потери энергии при столкновениях с молекулой XeF_4 и нанотрубкой C_{300} , показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительным изменениям эффективного торможения при изменении ориентации мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен.
4. С целью развития и унификации численных методов расчета потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными ионами на сложных мишенях, на основе приближения эйконала получены поправка Блоха и формула Бёте-Блоха, а также асимптотика Бёте для потерь энергии.

Достоверность и научная обоснованность полученных результатов и выводов обеспечивается надёжностью применяемых методов расчёта, тщательным тестированием применяемых алгоритмов и программ, а также сравнением с результатами расчётов других авторов и экспериментами.

Научная и практическая ценность работы. Проведено распространение новых непертурбативных методов теории атомных столкновений, специализированных для описания неупругих процессов при взаимодействии реляти-

вистских и ультрарелятивистских структурных ионов с изолированными атомами, на случаи столкновений с двух- и многоатомными молекулами. Основой такого распространения явилась единая методика расчётов, использующая релятивистские обобщения широко известных приближения эйконала и приближения внезапных возмущений, позволяющих получить для амплитуд неупругих процессов выражения, имеющие стандартный нерелятивистский предел, а в ультрарелятивистском случае, переходящие в известное точное решение.

Области возможного практического применения результатов: ускорители тяжёлых ионов, радиационные повреждения, ядерные реакторы. Кроме того, результаты таких исследований представляют интерес для многих конкретных областей атомной и ядерной физики, физической электроники.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Расчёты сечений многократной ионизации (степень ионизации от 1 до 4) быстрых тяжёлых высокозарядных структурных ионов при столкновениях с двухатомными молекулами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени.
2. Непертурбативные расчёты эффектов кратности столкновений и ориентации оси молекулы относительно направления движения снаряда в процессах потерь энергии быстрыми тяжёлыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Выводы о возможности значительного вклада эффекта кратности столкновений в процессы обдирки снаряда и потери энергии быстрыми тяжёлыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами.
3. Расчёты потерь энергии быстрыми тяжёлыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях со сложными молекулами и наночастицами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Расчёты вкладов эффектов кратности столкновений и ориентации мише-

ни относительно направления движения снаряда в процессы потерь энергии при столкновениях с молекулой XeF_4 и нанотрубкой C_{300} .

4. Метод получения формулы Бёте-Блоха в малоугловом эйкональном приближении для случая столкновений быстрых заряженных частиц с частицей зарядом Z .

Апробация работы и публикации. По материалам диссертации опубликовано 8 печатных работ из них 3 работы в рецензируемых журналах из списка ВАК. Результаты, вошедшие в диссертационную работу, докладывались на семинаре теоретического сектора отдела мощных лазеров Института общей физики РАН имени А. М. Прохорова, семинарах центра теоретической физики Поморского государственного университета (г. Архангельск), а также на Всероссийской научной конференции студентов–физиков и молодых учёных (ВНКСФ-14, ВНКСФ-15), международных конференциях «Ломоносов-XV» и Фундаментальная атомная спектроскопия (ФАС-XIX).

Список публикаций по материалам диссертации:

1. Матвеев В. И., Гусаревич Е. С., Макаров Д. Н. Эффективное торможение быстрых тяжелых структурных ионов при кратных столкновениях с молекулами и наночастицами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 2009. — Т. 136, № 5, С. 843-852.
2. Матвеев В. И., Гусаревич Е. С., Рябченко С. В., Макаров Д. Н. Потери энергии быстрыми тяжёлыми структурными ионами при кратных столкновениях с двухатомными молекулами // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 2008. — Т. 88, № 4. — С. 268–275.
3. Матвеев В. И., Гусаревич Е. С., Макаров Д. Н., Рябченко С. В. Потеря электронов быстрыми тяжёлыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами // *Вестник Поморского университета. Серия «Естественные и точные науки»*. — 2008. — Т. 3, — С. 64–75.
4. Макаров Д. Н., Рябченко С. В. Кратные столкновения снаряда с двухатомной молекулой // XIX- конференция и школа молодых учёных по фунда-

ментальной атомной спектроскопии (ФАС XIX). Сборник тезисов — Т. 1. — г. Архангельск - Соловки: 22 июня – 29 июня 2009. — С. 27–28.

5. *Макаров Д. Н.* Поправка Блоха и асимптотика Бёте для потерь энергии, как частный случай малоуглового эйконального приближения //XIX- конференция и школа молодых учёных по фундаментальной атомной спектроскопии (ФАС XIX). Сборник тезисов — Т. 1. — г. Архангельск - Соловки: 22 июня – 29 июня 2009. — С. 133–134.
6. *Макаров Д. Н., Рябченко С. В.* Сечения ионизации водородоподобного и гелиеподобного снаряда при столкновениях с двухатомной молекулой //15 - Всероссийская научна конференция студентов-физиков и молодых учёных (ВНКСФ–15). Сборник тезисов— Т. 1. — г. Кемерово-Томск: 26 марта - 2 апреля, 2009 г.
7. *Макаров Д. Н., Рябченко С. В.* Ионизация водородоподобного снаряда при столкновении с двухатомной молекулой //14 - Всероссийская научна конференция студентов-физиков и молодых учёных (ВНКСФ–14). Сборник тезисов— Т. 1. — г. Уфа: 27 марта - 3 апреля, 2009 г.
8. *Макаров Д. Н.* Эффекты кратности столкновений и молекулярной структуры на сечения ионизации водородоподобного снаряда при столкновениях с двухатомной молекулой //15- Международна конференци студентов, аспирантов и молодых учёных по фундаментальным наукам — «Ломоносов». Секция «Теоретическая физика». Сборник тезисов — Т. 1. — г. Москва: (6 – 12) апреля 2008 г. — С. 20.

Личный вклад автора. На основе непertурбативного метода описания столкновений структурных ионов с молекулами, разработанного научным руководителем диссертанта, Макаров Д. Н. получил выражения для расчётов сечений ионизации ионов при столкновениях с двухатомными молекулами. Автор выполнил численный расчёт неупругого сечения ионизации Fe^{25+} при столкновении с молекулой N_2 в двух моделях (Томаса-Ферми и модели изолированных атомов), автором были рассчитаны сечения ионизации U^{88+} различной кратности

при столкновении $U^{88+} + Au_2$, для кратности ионизации от 1 до 4. Автор выполнил численные расчёты потерь энергии иона в модели Томаса-Ферми для ряда двухатомных мишеней и различных пар атомов, входящих в состав нанотрубки C_{300} .

Также автор получил формулу Бёте-Блоха в рамках малоуглового эйконального приближения. Автором были проанализированы публикации по теме исследования, самостоятельно разработаны алгоритмы и программы, произведены численные расчёты.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и содержит 109 страниц, 13 рисунков и 1 таблицу. Список литературы включает 74 наименования.

Краткое содержание работы

В первой главе представлен обзор различных методов, применяемых для описания неупругих процессов при столкновениях быстрых ионов с атомами и молекулами [1–10]. Глава состоит из четырёх разделов. В разделе (1.1) дан обзор методов расчёта ионизационных потерь энергии и вывод поправки Блоха для ион-атомных столкновений, используя два общепринятых подхода [1–5]. Раздел (1.2) посвящён рассеянию мезоатома последовательно на двух центрах молекулы [8], приведено описание в борновском приближении. В разделе (1.3) описывается эйкональное приближение [10, 11, 12]. В разделе (1.4) изложена непертурбативная теория торможения быстрых высокозарядных структурных ионов с нейтральными атомами [13] с учетом всевозможных возбуждений как снаряда, так и мишени.

Во второй главе развита непертурбативная теория возбуждения и ионизации релятивистских структурных тяжёлых ионов при столкновениях с двухатомными молекулами. Глава состоит из четырёх разделов. В разделе (2.1) предлагается метод расчёта в эйкональном приближении сечений ионизации одноэлектронного тяжёлого снаряда при столкновении с двухатомной молекулой. В качестве примера рассмотрен случай $Fe^{25+} + N_2$, где потенциал действующий на электрон снаряда со стороны молекулы выбирался в методе нейтральных атомов (упрощённая

модель, основанная на том, что молекула состоит из изолированных не взаимодействующих атомов, которые находятся на равновесном расстоянии R , которое берётся из справочника для данной молекулы) [15]. Расчёт сечения ионизации проводился подходом в котором используется разложение по малому параметру s/b в эйкональной фазе (s - длина проекции радиус-вектора, определяющий электрон, на плоскость перпендикулярную вектору скорости, b - длина вектора параметра удара) - дипольный подход [7, 13, 16, 18]. На основании численных расчётов показано, что существует эффект кратности столкновения, когда снаряд, возбужденный в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со вторым ядром молекулы, находясь в возбужденном состоянии. Не трудно убедиться что, если направление движения снаряда близко по ориентации с осью молекулы, то в сечения возбуждения и ионизации снаряда заметную поправку может вносить учет двух последовательных столкновений иона с атомными остовами, входящими в состав одной молекулы. Действительно, если ввести $\delta_1(\theta) = \frac{\sigma(\theta) - \sigma(\pi/2)}{\sigma(\pi/2)}$ ($\sigma(\theta)$ - сечение ионизации как функция от угла между векторами скорости и вектором соединяющий два центра молекулы) то, как видно из (рис. 1) при расчёте, поправка $\delta_1(\theta)$ значительно изменяется при изменении ориентации оси молекулы. Также рассчитывались сечения многократной ионизации. В качестве примера были рассчитаны сечения одно, двух, трёх и четырёх кратной ионизации для реакции $Au_2 + U^{88+}$, в модели независимых электронов. Известно, что в этой модели вероятность $N_p - N$ кратной ионизации, для снаряда до и после столкновения соответственно с N_p, N электронами, равна [7, 16]:

$$P^{(N_p - N) +}(b) = \frac{N_p!}{(N_p - N)!N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \frac{N!}{(N - m)!m!} \{p(b)\}^{N_p - N + m}, \quad (1)$$

где $p(b)$ - вероятность однократной ионизации при данном b , а слагаемое содержащее $\{p(b)\}^{N_p - N + m}$ соответствует ионизации $(N_p - N + m)$ степени с эффективным зарядом $Z_{N_p - N + m}^*$ при $(N_p - N + m)$ -кратной ионизации.

Причем, для столкновений с молекулой $p(\mathbf{b})$ является функцией от направления ориентации оси молекулы, т.е. $p(\mathbf{b}) = p(\mathbf{b}, \mathbf{L})$, где \mathbf{L} - вектор ориентации

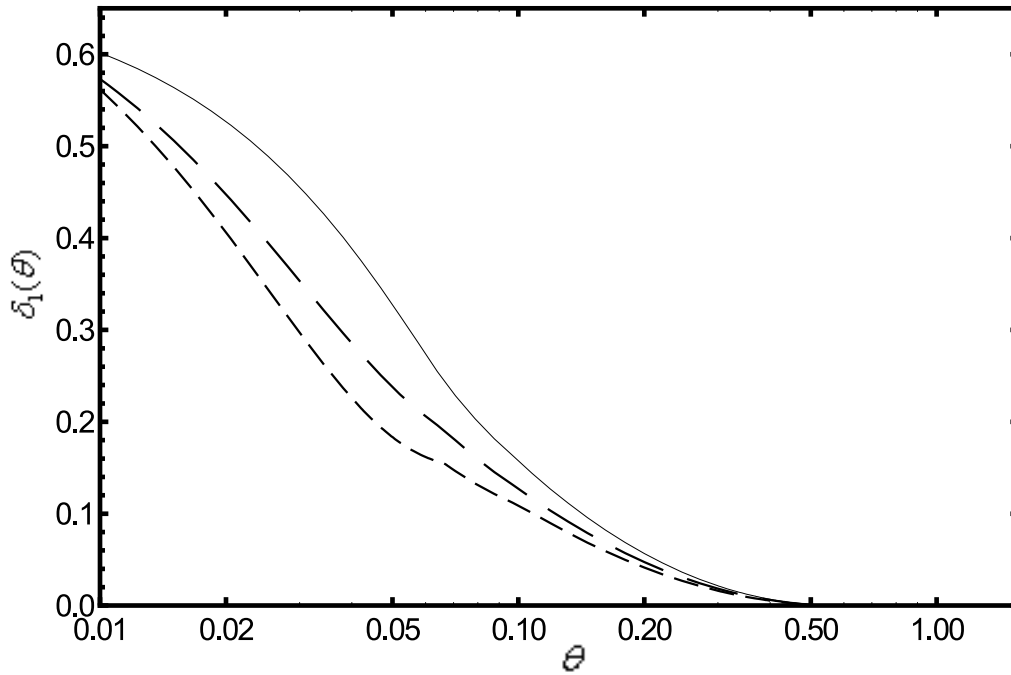


Рис. 1. Зависимость относительной поправки $\delta_1(\theta)$ от угла ориентации θ (в радианах) для столкновений $Fe^{25+} + N_2$ при трёх значениях энергии: мелкий пунктир - $E=1000\text{MeV/n}$, пунктир - $E=100\text{MeV/n}$, сплошная - $E=20\text{MeV/n}$.

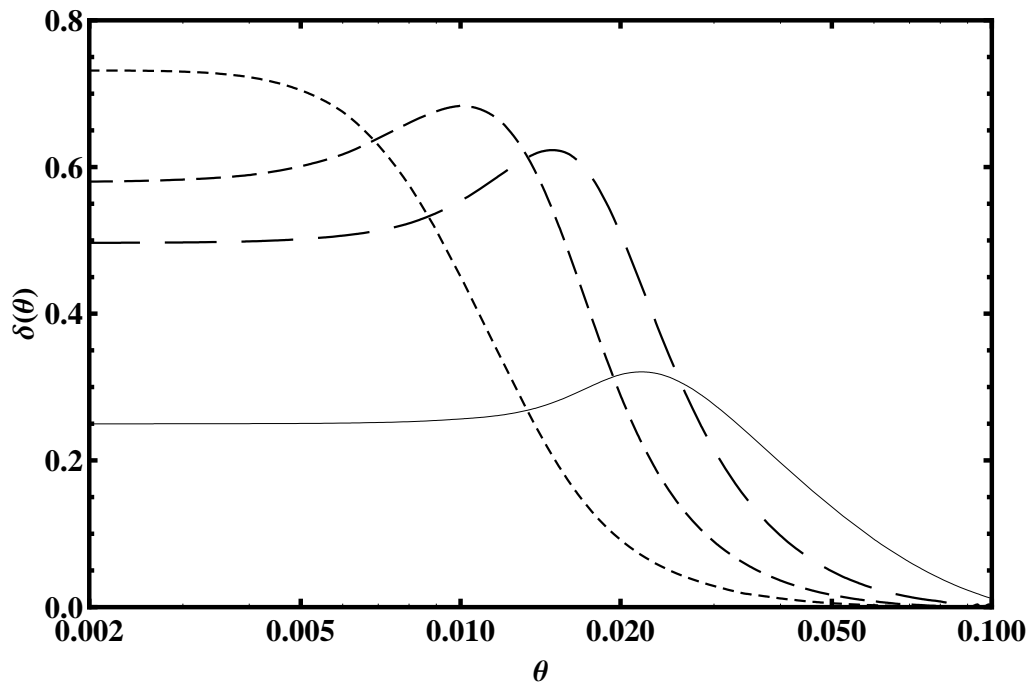


Рис. 2. Зависимость $\delta(\theta)$ от угла ориентации θ (в радианах) для реакции $U^{88+} + Au_2$ при $E=100\text{ MeV/n}$, где степень ионизации ($N_p - N$) равна: 4 - мелкий пунктир, 3 - средний пунктир, 2 - крупный пунктир, 1 - сплошная.

оси молекулы. При расчёте многократной ионизации в дипольном подходе, независимо от кратности ионизации, рассчитывались численно только двухмерные интегралы. Поправка $\delta(\theta) = \frac{\sigma^{N+}(\theta) - \sigma^{N+}(\pi/2)}{\sigma^{N+}(\pi/2)}$, которая является характеристикой кратных столкновений при N кратной ионизации представлена (на рис. 2). В разделе (2.2) рассмотрена ионизация Fe^{25+} при столкновении с молекулой N_2 в модели Томаса-Ферми [17], также показано, что погрешность применения метода нейтральных атомов по отношению к методу Томаса-Ферми при расчёте сечения ионизации в зависимости от угла ориентации молекулы составляет менее 2%. В разделе (2.3) обсуждаются полученные результаты и делаются выводы по применению вышеизложенного подхода. Далее, в разделе (2.4) проведено обобщение для расчёта рассмотренных выше процессов на случай релятивистских столкновений. Показано, что эйкональная фаза не зависит от релятивистского γ - фактора.

В третьей главе представлена непертурбативная теория торможения и потерь энергии иона на сложных молекулах [7, 13, 16, 18]. Показывается, что потери на молекуле состоят из суммы потерь на каждой комбинации пар атомов, входящих в состав молекулы. В качестве примеров рассмотрены потери энергии ионами железа при столкновениях с молекулой XeF_4 и нанотрубкой C_{300} , показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительным изменениям эффективного торможения при изменении ориентации мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен. В разделе (3.1) показывается, что согласно [13, 14, 18], потери энергии с учетом всевозможных, в том числе многоэлектронных, возбуждений и ионизации мишени и снаряда можно записать в виде

$$\kappa = \kappa^{(p)} + \kappa^{(t)}, \quad (2)$$

где $\kappa^{(p)}$ — потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов снаряда мишенью при произвольной (т.е. полученной путем суммирования по полному набору всех конечных состояний электронов мишени) судьбе электронов мишени; аналогично, $\kappa^{(t)}$ — потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов мишени снарядом при произвольной судьбе электронов снаряда. Причем, для наших целей достаточно вычислить только $\kappa^{(p)}$, поскольку в $\kappa^{(t)}$ отсутствует вклад кратности

столкновений. Тогда в модели нейтральных атомов [15] $\kappa^{(p)}$:

$$\kappa^{(p)} = \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)} + \Delta\kappa, \quad (3)$$

где

$$\kappa_m^{(p)} = \frac{4\pi Z_m^2 N_P}{v^2} \left[\ln(2a_{m,m}\gamma v) - \frac{1}{2}\beta^2 + \Delta L_{Bloch}^{Z_m} + \Delta L_{Mott}^{Z_m} \right], \quad (4)$$

имеет смысл потерь энергии при столкновении с m -м изолированным атомом молекулы. Соответственно, $\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}$ имеет смысл суммы потерь на всех N изолированных атомах молекулы. Здесь $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v/c$, c — скорость света, $\Delta L_{Bloch}^{Z_m}$ и $\Delta L_{Mott}^{Z_m}$ — поправки Блоха и Мотта, зависящие от заряда Z_m , в поле которого рассеиваются принадлежащие структурному иону электроны, N_P — число электронов в ионе, а постоянные $a_{m,m}$ такие, что

$$\ln a_{m,m} = \sum_{i,j=1, (i \neq j)}^3 A_{m,i} A_{m,j} \frac{\alpha_{m,j}^2 \ln \alpha_{m,j} - \alpha_{m,i}^2 \ln \alpha_{m,i}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{m,j}^2} - \sum_{i=1}^3 A_{m,i}^2 \ln(\alpha_{m,i} \sqrt{e}), \quad (5)$$

где $\alpha_{m,j}$ и $A_{m,j}$ — постоянные величины для атома с номером m [15]. В формуле (3) слагаемое

$$\Delta\kappa = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \Delta\kappa_{m,n}, \quad (6)$$

(ср. [18, 14]) имеет смысл потерь энергии за счет кратности столкновений, где

$$\begin{aligned} \Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn}) &= 8\pi N_P \frac{Z_m Z_n}{v^2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{A_{m,i} A_{n,j}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{n,j}^2} \times \\ &\times \left[\alpha_{m,i}^2 K_0(\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}) - \alpha_{n,j}^2 K_0(\alpha_{n,j} L_{\perp}^{mn}) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

где Z_m и Z_n — заряды ядер атомов с номерами m и n , L_{\perp}^{mn} — проекция вектора \mathbf{L} , соединяющего два атома с номерами m и n , на плоскость перпендикулярную вектору скорости. Мы рассматривали молекулы с различной пространственной структурой, поэтому ориентацию описывали углами Эйлера φ , θ , ψ как в [15]. Для этого мы ввели две системы координат: подвижную систему — $Oxyz$, жестко

связанную с молекулой (ось Oz будем называть осью молекулы), и неподвижную — $OXYZ$, ось OZ которой направлена вдоль скорости \mathbf{v} иона, тогда угол θ между осью Oz и направлением \mathbf{v} будем называть углом выстроенности оси молекулы. Вычисляемое по формуле (6) $\Delta\kappa$ зависит лишь от углов θ и ψ , т.е. $\Delta\kappa = \Delta\kappa(\theta, \psi)$, т.к. зависимость от φ , очевидно, исчезает в результате интегрирования по параметру удара.

Результаты расчетов удобно проиллюстрировать путем введения относительной величины эффективного торможения

$$\xi(\theta, \psi) = \frac{\kappa^{(p)}(\theta, \psi)}{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}} = \frac{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)} + \Delta\kappa(\theta, \psi)}{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}}. \quad (8)$$

Вычисляемая по этой формуле величина ξ , не зависит от заряда иона Z_P (за исключением вышеуказанного условия $Z_P \gg 1$) и от N_P — числа электронов в ионе. Таким образом, расчеты относительной величины эффективного торможения можно выполнять, задавая лишь параметры мишени и энергию движения иона.

Представим $\Delta\kappa$ в двух случаях: 1) зависимость $\Delta\kappa$ от угла выстроенности θ при фиксированном ψ , результат такого расчета будем обозначать $\Delta\kappa(\theta)$; 2) зависимость $\Delta\kappa$ от угла выстроенности θ после усреднения по углу ψ (в предположении равновероятности его значений), результат такого усреднения будем обозначать $\overline{\Delta\kappa}(\theta)$. Соответственно, для этих двух случаев рассчитывались относительные величины:

$$\xi(\theta) = 1 + \Delta\kappa(\theta) / \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}, \quad (9)$$

$$\bar{\xi}(\theta) = 1 + \overline{\Delta\kappa}(\theta) / \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}, \quad (10)$$

Приведём расчёт потери энергии для нанотрубки C_{300} диаметром 8 Å, обладающей киральностью (6, 6) (см. рис. 3).

Также были рассчитаны потери энергии для столкновений N - электронных снарядов с молекулой XeF_4 . В следующем разделе (3.2) показан способ расчёта

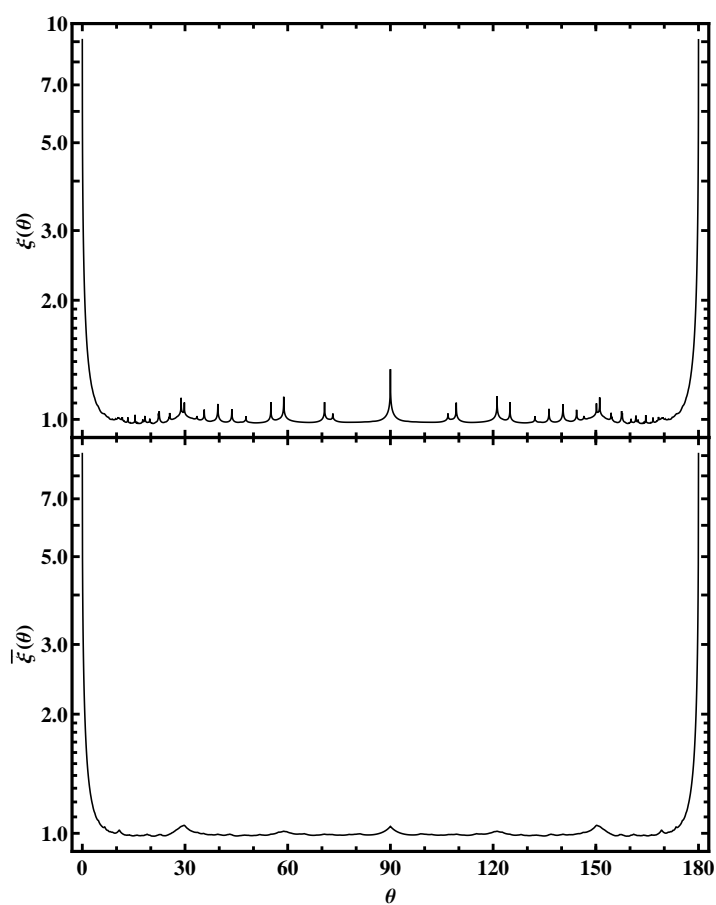


Рис. 3. Зависимости $\xi(\theta)$ при фиксированном значении угла $\psi = 0$ (верхняя часть рисунка) и $\bar{\xi}(\theta)$ (нижняя часть рисунка) от угла θ (в градусах) для нанотрубки C_{300} при энергии иона Fe^{5+} , равной 10000 МэВ/нуклон.

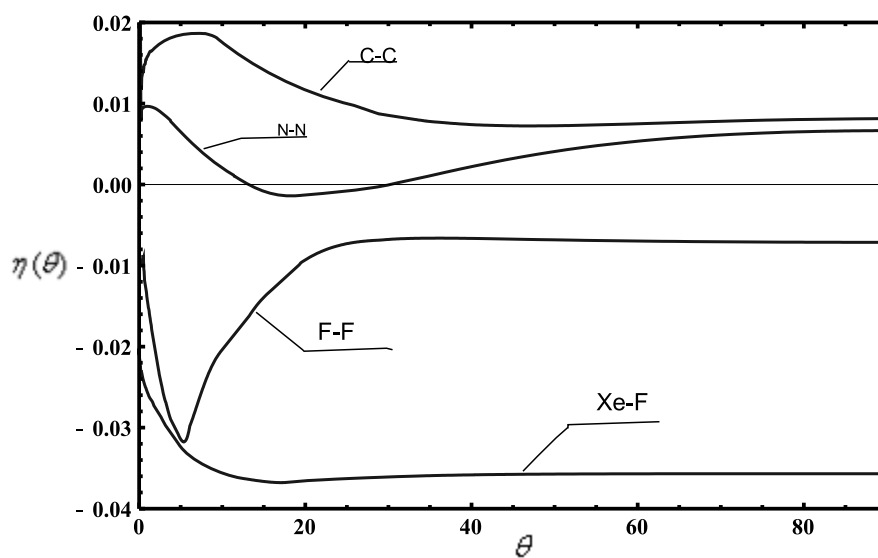


Рис. 4. Зависимость погрешности $\eta(\theta)$, для результатов расчётов эффективного торможения иона Fe^{10+} с энергией 1000МэВ/нуклон для двух моделей мишеней в зависимости от угла ориентации θ (в градусах)

потерь в методе Томаса - Ферми. В разделе (3.3) указываются условия применимости эйконального приближения для расчетов потерь энергии иона на молекулах, и приведены погрешности $\eta(\theta) = \frac{k_I^p(\theta) - k_{T-F}^p(\theta)}{k_I^p(\theta)}$ (здесь $k_I^p(\theta)$ - потери энергии в модели нейтральных атомов, $k_{T-F}^p(\theta)$ - потери энергии в модели Томаса - Ферми) расчётов в модели нейтральных атомов по отношению к модели Томаса - Ферми для пар атомов входящих в состав рассматриваемых молекул. Эти расчеты (см. рис. 4) проделаны нами на примере изолированных пар для оценок эффекта и в будущем могут быть использованы в качестве основы для разработки более точных моделей расчета процессов ионизации на многоатомных молекулах.

Четвёртая глава посвящена получению поправки Блоха [1, 2, 3] и формулы Бёте-Блоха [4] в малоугловом эйкональном приближении. Для этого нужно, в той области пространства где неприменима теория возмущения, использовать эйкональное приближение, а в области где взаимодействие между электроном и рассеивающей частицей Z можно рассматривать как возмущение, использовать теорию возмущения, которая как известно получается из метода эйконала [10, 11, 12]. Если записать потенциал взаимодействия иона с частицей Z в виде $U(\mathbf{R}; \mathbf{r}) = ZZ_{ion}/R - Z/|\mathbf{R} - \mathbf{r}|$, то потери энергии иона можно представить как [11]:

$$K = \frac{1}{k^2} \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) \int_{\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v}}^{q_0} |f_{n0}(\mathbf{q})|^2 d^2\mathbf{q}, \quad (11)$$

где

$$f_{fi}(q) = \frac{ik}{2\pi} \int \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) \langle f | \left(1 - \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) dX\right) \right) | i \rangle d^2\mathbf{b}. \quad (12)$$

$f_{fi}(q)$ - амплитуда перехода в малоугловом эйкональном приближении, $|i\rangle$ и $\langle f|$ - соответственно начальное и конечное состояние электрона [10, 11, 12]. Разбивая (11) на восемь выражений (две области при интегрировании по параметру удара \mathbf{b} и две области возникающие при замене пределов интегрирования по переданному импульсу \mathbf{q} : $\int_{q_n}^{q_0} = \int_0^{q_0} - \int_0^{q_n}$) и рассматривая первый интеграл из этого разбиения,

получим интегральное выражение:

$$K = \frac{1}{2} \left(\frac{Z}{v\pi} \right)^2 \int_Q \int_C \int_C \times \quad (13)$$

$$\times \langle i | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{b}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}') b^{-2iZ/v} b'^{2iZ/v} \frac{\mathbf{b}\mathbf{b}'}{b^2 b'^2} G(Z, Z_{ion}) | i \rangle d^2\mathbf{b} d^2\mathbf{b}' d^2\mathbf{q} ,$$

где область Q с радиусом $[0, q_0]$, а C с радиусом $[0, b_0]$, q_0 и b_0 - параметры обрезания интегралов по переданному импульсу и параметру удара, а $G(Z, Z_{ion}) = |\mathbf{b} + \mathbf{s}|^{\frac{2iZZ_{ion}}{v}} |\mathbf{b}' + \mathbf{s}|^{\frac{-2iZZ_{ion}}{v}}$ - функция отвечающая за вклад в потери при взаимодействии ядра иона с частицей Z . Если не учитывать это взаимодействие, то $G(Z, Z_{ion}) = 1$, что соответствует $Z_{ion} = 0$ (аналог приближения свободного электрона [1–3]).

После чего, выражение (13) можно привести к виду [2]

$$K = 4\pi \left(\frac{Z}{v} \right)^2 (L_{pert} + \Delta L_{Bloch}), \quad (14)$$

где:

$$\Delta L_{Bloch} = \psi(1) - \text{Re}[\psi(1 + iZ/v)] , \quad (15)$$

$$L_{pert} = \ln\left(\frac{b_0 q_0 \eta}{2}\right) . \quad (16)$$

Для получения формулы Бёте - Блоха в следующем разделе (4.2) рассматриваются вклады в потери энергии от других членов разбиения. Таких членов в отличие от теории [1–3] не два (соответствующих областям малых и больших параметров удара, вклад от которых в потери входит аддитивно), а более, которые представлены дополнительными членами (в связи с квантовым рассмотрением движения иона). Учет вклада всех слагаемых позволяет, в итоге, получить формулу Бёте - Блоха [4]:

$$K = 4\pi N_e \left(\frac{Z}{v} \right)^2 \left[\Delta L_{Bloch} + \ln\left(\frac{q_0 v}{I}\right) \right] , \quad (17)$$

где I - потенциал ионизации, который определяется также как и в работах [1, 4, 5, 11] $\ln(I) = 2 \sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_0) |d_{n0}|^2 \ln(\varepsilon_n - \varepsilon_0)$, $d_{n0} = \langle n|x|0 \rangle$, N_e - число электронов в ионе.

В заключении кратко сформулированы основные результаты, полученные в диссертации и выносимые автором на защиту.

Приложения. Диссертация содержит два приложения, в которых приведены некоторые технически громоздкие подробности вычислений.

Список литературы

- [1] *Bloch F.* Stopping power for fast charged particles and ions // *Annalen der Physik* — 1933. — Vol. 16. — P. 285.
- [2] *Lindhard J., Sorensen A.* Relativistic theory of stopping for heavy ions // *Physical Review A* — 1996. — Vol. 53. — P. 2443.
- [3] *Khodyrev V.A.* On the origin of the Bloch correction in stopping // *Physical Review B* — 2000. — Vol. 33. — P. 5045.
- [4] *Ahlen S. P.* Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionizing particles // *Reviews of Modern Physics* — 1980. — Vol. 52. — P. 121.
- [5] *Bethe H. A.* Theory of the passage of fast corpuscular rays through matter // *Ann. d. Phys.* — 1930. — Vol. 5. — P. 325.
- [6] *Eichler J.* Theory of Relativistic Ion-Atom Collisions // *Physics Reports* — 1990. — Vol. 193. — P. 165-277.
- [7] *Matveev V. I., Ryabchenko S. V., Matrasulov D. U., Rakhimov Kh. Yu., Fritzsche S., Stohlker Th.* Electron loss of fast heavy projectiles in collision with neutral targets // *Physical Review A* — 2009. — Vol. 79. — P. 042710.
- [8] *Герштейн С. С., Петров Ю. В., Пономарев Л. И.* Сечени рождени мезоатомов и реакции захвата // *Журнал экспериментальной и теоретической физики* — 1981. — Т. 80. — стр. 1690.
- [9] *Матвеев В. И., Рябченко С. В.* Кратные столкновения быстрого мезоатома с двухатомной молекулой // *Известия вузов. Физика.* — 2005. — Т. 48, № 5. — С. 30–33.

- [10] *Franco, V.* Diffraction Theory of Scattering by Hydrogen Atoms // *Physical Review Letters* — 1968. — Vol. 20. — P. 709-712.
- [11] *Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.* Квантовая механика // *М.Наука* — 1989. — Т. 3.
- [12] *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений: Пер. с англ. // *М. Мир* — 1967. — стр.—867
- [13] *Матвеев В. И., Сидоров Д. Б.* К теории торможения быстрых тяжёлых высокозарядных структурных ионов при столкновениях со сложными атомами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики* — 2007. — Т. 132. — стр. 569.
- [14] *Матвеев В. И., Гусаревич Е. С., Макаров Д. Н.* Эффективное торможение быстрых тяжёлых структурных ионов при кратных столкновениях с молекулами и наночастицами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 2009. — Т. 136, № 5, С. 843–852.
- [15] *F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, J. Parellada* Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ($Z=1-92$) // *Physical Review A.* — 1987. — Vol. 36. — Pp. 467–474.
- [16] *Матвеев В. И., Матрасулов Д. У., Рябченко С. В.* Многократная потеря электронов быстрыми тяжёлыми структурными ионами при столкновениях со сложными атомами // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 2006. — Т. 129, № 1. — С. 5–13.
- [17] *Gross E. K. U., Dreizler R. M.* Tomas-Fermi approach to diatomic systems // *Physical Review A.* — 1980. — Vol. 20. — Pp. 1798.
- [18] *Матвеев В. И., Гусаревич Е. С., Рябченко С. В., Макаров Д. Н.* Потери энергии быстрыми тяжёлыми структурными ионами при кратных столкновениях с двухатомными молекулами // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 2008. — Т. 88, № 4. — С. 268–275.

Подписано в печать

Бумага писчая. Формат 60 × 84 1/16. Тираж 100 экз. Объём 1,0 п.л. Заказ №.

Отпечатано в издательском центре ПГУ
163002, г. Архангельск, пр. Ломоносова, 6