

## НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ БЫСТРЫХ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ С АТОМАМИ

*В. И. Матвеев\**, *Х. Ю. Рахимов*

*Отдел теплофизики Академии наук республики Узбекистан  
700135, Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 16 мая 1998 г.

На основе приближения эйконала получено общее выражение для сечений неупругих столкновений быстрых, в том числе релятивистских, многозарядных ионов с атомами, применимое в широкой области энергий столкновений, имеющее стандартный нерелятивистский предел и переходящее в ультрарелятивистском случае в известный результат точного решения уравнения Дирака. В качестве примера рассмотрены возбуждение и ионизация водородоподобного атома, однократные и двойные возбуждение и ионизация гелиеподобного атома, многократная (до восьми) ионизация атома неона и (до восемнадцати) атома аргона. Получены простые аналитические выражения для неупругих сечений, установлены рекуррентные соотношения между сечениями ионизации различной кратности. Проведено сравнение с экспериментом.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Значительный интерес, проявляемый к исследованиям неупругих процессов, сопровождающих столкновения атомов с многозарядными ионами, объясняется прежде всего тем, что эффективные напряженности полей, создаваемых многозарядными ионами на атомных размерах, могут на порядки превышать характерные внутриатомные поля. Получение таких значений напряженности поля другими методами в настоящее время крайне затруднительно. Таким образом, столкновительные эксперименты с участием многозарядных ионов представляют собой, по сути дела, уникальную возможность исследования поведения атомов и молекул в сверхсильных электромагнитных полях. С фундаментальной же точки зрения исследование поведения вещества в сверхсильных электромагнитных полях является одной из актуальных задач современной физики. Кроме того, ряд прикладных задач, связанных с измерениями энергетических спектров осколков деления ядер, синтезом сверхтяжелых элементов, интерпретацией данных об ультратяжелых космических лучах, накачкой активных сред мощных лазеров, ионной диагностикой и спектроскопией плазмы, процессами имплантации и распыления твердых тел при ионной бомбардировке, а также проектирование и использование ускорителей тяжелых ионов высоких энергий стимулировали интенсивное изучение столкновений с участием быстрых многозарядных ионов. Неупругие столкновения быстрых, в том числе релятивистских, многозарядных ионов с атомами являются в последнее время объектом интенсивных исследований (см., например, монографии [1, 2], недавние обзоры [3–5] и имеющиеся там ссылки). Сечения неупругих процессов в столкновениях такого рода довольно велики, и именно поэтому эти исследования интересны и в приклад-

\* E-mail: matveev@otf.gimli.com

ном плане. Сильное поле иона большого заряда не позволяет использовать, даже при релятивистских скоростях столкновений, теорию возмущений, что существенно усложняет расчеты, поскольку требует применения непertурбативных подходов. В качестве примера приведем работы [6–9], использующие приближение внезапных возмущений, работы [10–12] в приближении эйконала и его модификаций, расчеты [13] на основе численного решения временного уравнения Дирака, а также недавно найденное точное решение [14] уравнения Дирака в ультрарелятивистском пределе. Наиболее общей основой для рассмотрения сечений неупругих процессов при столкновениях быстрых многозарядных ионов с атомами является использование применимого при  $Z/v \leq 1$  ( $Z$  — заряд иона,  $v$  — скорость столкновения, атомные единицы) приближения Глаубера [15], основанного на близком к квазиклассике приближении эйконала [16, 17] и тесно связанного [4, 6, 12] с приближением внезапных возмущений. Применение же теории возмущений для описания столкновений многозарядных ионов с атомами, когда  $Z/v \sim 1$ , приводит, строго говоря, к нарушению области применимости борновского приближения и, вследствие его не унитарности, к значениям вероятности большим единицы [5]. Следует также подчеркнуть, что для ионов достаточно больших зарядов область применимости ( $Z/v \ll 1$ ) борновского приближения не достигается даже при сколь угодно больших энергиях столкновения.

Эйкональное приближение [18] для релятивистского потенциального рассеяния может быть, согласно [15], обобщено (см., например, [12]) на случай неупругого столкновения движущегося с релятивистской скоростью  $v$  иона с легким (нерелятивистским до и после столкновения) атомом. В этом случае общее выражение в приближении Глаубера для амплитуды неупругого столкновения, сопровождающегося переходом атома из состояния  $|\Psi_i\rangle$  в  $|\Psi_f\rangle$ , имеет вид [12] (ср. [15])

$$f_{if}(\mathbf{q}) = \frac{ik_i}{2\pi} \int e^{-iqb} \langle \Psi_f | \left[ 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int U dx \right\} \right] | \Psi_i \rangle d^2b, \quad (1)$$

где изменение импульса иона  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ . Рассеивающий потенциал  $U = U(x, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$  есть функция не только координат иона  $\mathbf{R} = (x, \mathbf{b})$ , но и мгновенных положений атомных электронов, совокупность координат которых обозначаем  $\{\mathbf{r}_a\}$ ,  $a = 1, 2, \dots, N$ , где  $N$  — число электронов.

В настоящей работе на основе приближения эйконала получено общее выражение для сечений неупругих столкновений быстрых, в том числе релятивистских, многозарядных ионов с атомами, применимое в широкой области энергий столкновения, имеющее стандартный нерелятивистский предел и переходящее в ультрарелятивистском случае в результат точного решения [14] уравнения Дирака. В качестве примера рассмотрены возбуждение и ионизация водородоподобного атома, однократные и двойные возбуждение и ионизация гелиеподобного атома, многократная (до восьми) ионизация атома неона и многократная (до восемнадцати) ионизация атома аргона. Получены простые аналитические выражения для неупругих сечений, установлены рекуррентные соотношения между сечениями ионизации различной кратности. Проведено сравнение с экспериментом.

## 2. ОБЩАЯ ЧАСТЬ

Для обобщения приближения эйконала на случай столкновения релятивистского иона с тяжелым (релятивистским) атомом следует учесть следующее: а) поведение атомных электронов описывается уравнением Дирака, б) по смыслу приближения Глаубера  $U = U(x, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}'_a\})$  является статическим кулоновским потенциалом, создаваемым ядром атома и атомными электронами, находящимися в фиксированных (и одновременных с точки зрения налетающего иона) положениях  $\mathbf{r}'_a = x'_a, y'_a, z'_a$ :

$$U(x, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}'_a\}) = \frac{Z_a Z}{\sqrt{x^2 + b^2}} - \sum_{a=1}^N \frac{Z}{\sqrt{(x - x'_a)^2 + (\mathbf{b} - \mathbf{s}'_a)^2}},$$

где  $Z_a$  — заряд атомного ядра, причем, для  $Z_a = N$ ,

$$\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U dx = \sum_{a=1}^N \chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}'_a), \quad \chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}'_a) = \frac{2Z}{v} \ln \frac{|\mathbf{b} - \mathbf{s}'_a|}{b},$$

ось  $x$  направлена по начальному импульсу иона  $\mathbf{k}_i$ , а двумерный вектор  $\mathbf{s}'_a = (y'_a, z'_a)$ . Пусть, для определенности, речь идет о мгновенных положениях электронов в момент времени  $t' = 0$  в системе покоя иона, соответствующие мгновенные положения атомных электронов  $\mathbf{r}'_a$  и их волновая функция  $\Psi'(\mathbf{r}'_a, t')$ . Тогда вместо (1) имеем

$$f_{if}(\mathbf{q}) = \frac{ik_i}{2\pi} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{b}} \langle \Psi'_f | \left[ 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int U dx \right\} \right] | \Psi'_i \rangle d^2b.$$

В системе покоя атома (при  $t' = 0$ )

$$x_a = \gamma x'_a, \quad s_a = s'_a, \quad t = -x_a \frac{v}{c^2},$$

$$\Psi(\mathbf{r}_a, t) = \psi(\mathbf{r}_a) \exp(-iEt) = \psi(\mathbf{r}_a) \exp\left(iE x_a \frac{v}{c^2}\right) = S_a^{-1} \Psi'(\mathbf{r}'_a, t' = 0),$$

$$d^3r_a = dx_a dy_a dz_a = \gamma dx'_a dy'_a dz'_a = \gamma d^3r'_a,$$

где  $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ , а  $S_a$  — матрица преобразования Лоренца для волновой функции, действующая на биспинорные индексы, относящиеся к атомному электрону с номером  $a$  (соответствующие матрицы Дирака  $\alpha_a$ ), причем  $S_a^{-2} = \gamma(1 - v\alpha_a/c)$  (см. [2]). Поэтому общее выражение в приближении Глаубера для амплитуды неупругого столкновения релятивистского иона с тяжелым (релятивистским) атомом при переходе атома из состояния  $|\psi_i\rangle$  с энергией  $E_i$  в состояние  $|\psi_f\rangle$  с энергией  $E_f$  имеет вид

$$f_{if}(\mathbf{q}) = \frac{ik_i}{2\pi} \int \langle \psi_f | \left[ 1 - \exp \left\{ -i \sum_{a=1}^N \chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}_a) \right\} \right] \times \\ \times \gamma^{-N} S^{-2} \exp \left[ i \sum_a \frac{v x_a}{c^2} (E_f - E_i) \right] | \psi_i \rangle \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{b}) d^2b, \quad (2)$$

где  $S^{-2} = \prod_{a=1}^N S_a^{-2}$ . Это и есть окончательное выражение, соответствующее обобщению формулы (1) на случай столкновения релятивистского иона с тяжелым (релятивистским) атомом, с теми же условиями применимости: время столкновения должно

быть много меньше характерного атомного времени. Если же нас не интересуют углы рассеяния иона, то в соответствующем выражении для сечения в малоугловом приближении (как в [15]) по ним можно провести интегрирование: для малых углов рассеяния имеем

$$d\Omega \approx d^2q/(k_i k_f) \approx d^2q/k^2.$$

Далее, представив  $|f_{if}|^2$  из (2) в виде двойного интеграла по  $d^2b$  и  $d^2b'$ , интегрируем по  $d^2q$  с помощью интегрального представления для  $\delta$ -функции, после чего последняя устраняется интегрированием по  $d^2b'$ . В результате находим сечение перехода атома из состояния  $|\psi_i\rangle$  в состояние  $|\psi_f\rangle$  при столкновении с релятивистским ионом

$$\sigma = \int d^2b \left| \langle \psi_f | \left[ 1 - \exp \left\{ -i \sum_{a=1}^N \chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}_a) \right\} \right] \right| \times \\ \times \gamma^{-N} S^{-2} \exp \left[ i \sum_a \frac{v x_a}{c^2} (E_f - E_i) \right] |\psi_i\rangle \Big|^2. \quad (3)$$

Соответственно, подынтегральное выражение интерпретируется как вероятность перехода атома из состояния  $|\psi_i\rangle$  в состояние  $|\psi_f\rangle$  при столкновении с параметром удара  $\mathbf{b}$ . В таком виде для одноэлектронного атома эта вероятность, очевидно, совпадает с точной вероятностью [14] для амплитуды перехода в ультрарелятивистском случае и имеет стандартный [15] нерелятивистский предел. Для дальнедействующих потенциалов интеграл по параметру удара в (3), вообще говоря, расходится при больших параметрах удара. Подобная расходимость, однако, не существенна [4, 8]: при больших параметрах удара поле иона мало и применимо борновское приближение, причем области применимости борновского приближения и приближения эйконала перекрываются, что позволяет провести корректную сшивку по параметру удара.

Полученные формулы носят общий характер и применимы к столкновениям атомов с ионами произвольных зарядов. Специфика же 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, рассмотрим процедуру сшивки на примере одноэлектронных переходов при столкновениях релятивистских ионов с нерелятивистскими (до и после столкновения<sup>1)</sup>) атомами, когда в (3)  $\psi_i$  и  $\psi_f$  — двухкомпонентные спиноры и можно считать  $S^{-2} = 1$ , кроме того,  $\exp[i \sum_a x_a (E_f - E_i)/c] = 1$ . В этом случае удается получить при сшивке простые аналитические выражения для сечений. Пусть атомный электрон переходит из связанного состояния  $|i\rangle$  в состояния одноэлектронного континуума  $|\mathbf{k}\rangle$  с импульсом электрона  $\mathbf{k}$ . Обозначим через  $b_0$  верхний предел интегрирования по параметру удара  $b$  в формуле (3). Для больших  $b \gg s$  и ортогональных состояний  $|\mathbf{k}\rangle$  и  $|i\rangle$  обобщенный неупругий формфактор

$$\langle f | 1 - \exp \left\{ -i \frac{2Z}{v} \ln \frac{|\mathbf{b} - \mathbf{s}|}{b} \right\} | i \rangle \approx \langle f | \exp\{i\mathbf{q}\mathbf{s}\} | i \rangle, \quad (4)$$

<sup>1)</sup> Строго говоря, атомные электроны, попадающие в континуум в результате ионизации движущимся с релятивистской скоростью ионом, могут приобрести релятивистские скорости, однако, как показано в [9], такие процессы происходят при малых параметрах удара, и соответствующим вкладом в полные сечения ионизации ударом многозарядного иона можно пренебречь.

$\mathbf{q} = 2Z\mathbf{b}/vb^2$  и стремится к  $i\mathbf{q}\langle f|s|i\rangle$  при малых  $\mathbf{q}$ . Следовательно, интеграл в (3) по  $d^2b$  зависит от  $b_0$  логарифмически, поэтому вклад в сечение от области  $b < b_0$  можно представить в виде

$$\sigma(b < b_0) = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_i \ln \frac{2\alpha_i}{q_0}, \quad q_0 = \frac{2Z}{vb_0}, \quad (5)$$

где величины  $\lambda$  и  $\alpha$  зависят лишь от атомных характеристик и не содержат зависимости от параметров столкновения — заряда налетающего иона и его скорости:

$$\lambda_i = \int \frac{d^3k}{3} |\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} | i \rangle|^2,$$

$$\alpha_i = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_i} \int_{q_0}^{\infty} \frac{dq}{q^3} \int d^3k |\langle \mathbf{k} | \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) | i \rangle|^2 \right\}.$$

В области больших  $b > b_0$  поле иона является слабым возмущением, и мы можем воспользоваться так называемой асимптотикой Бете:

$$\sigma_i(b > b_0) = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_i \left( \ln \frac{2v}{\eta b_0 \omega_i \sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (6)$$

где  $\eta = e^B = 1.781$  ( $B = 0.5772$  — постоянная Эйлера), а «средняя» частота ионизации  $\omega_i$  равна

$$\ln \omega_i = \frac{\int d^3k |\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} | i \rangle|^2 \ln \Omega_{ki}}{\int d^3k |\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} | i \rangle|^2} \quad (7)$$

( $\Omega_{ki} = \epsilon_k - \epsilon_i$  — частота перехода). Суммируя (5) и (6), получаем соответствующее полное сечение:

$$\sigma_i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_i \left( \ln \frac{2\alpha_i v^2}{\eta Z \omega_i \sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{\beta^2}{2} \right). \quad (8)$$

Обратим внимание, что зависимость от параметра обрезания  $b_0$  исчезает при сшивке.

Если же при столкновении меняются состояния более чем одного электрона, или если переходы дипольно запрещены, то интегрирование по параметру удара в (3) может быть распространено на всю плоскость параметра удара (так как подынтегральное выражение обеспечивает сходимости) и необходимость в сшивке с теорией возмущений отпадает.

### 3. СТОЛКНОВЕНИЯ С ВОДОРОДОПОДОБНЫМИ АТОМАМИ

Приведем выражение для сечения перехода водородоподобного атома (с зарядом ядра  $Z_a$ ) из основного состояния в состояния с главным квантовым числом равным  $n$  в результате столкновения с многозарядным ионом, полученные в приближении больших параметров удара (4) методом сшивки:

$$\sigma_n = \frac{2^{11}\pi}{3} \frac{Z^2}{v^2} \frac{n^7}{(n^2-1)^5} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^{2n} \frac{1}{Z_a^2} \left\{ \ln \left( \frac{\gamma_n v^2 Z_a}{Z \Omega_n \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}, \quad (9)$$

где  $\Omega_n = \epsilon_n - \epsilon_1$ , а первые несколько чисел  $\gamma_n$  равны

$$\begin{aligned} \gamma_2 &= 0.30, & \gamma_3 &= 0.44, & \gamma_4 &= 0.49, & \gamma_5 &= 0.53, & \gamma_6 &= 0.54, \\ \gamma_7 &= 0.55, & \gamma_8 &= 0.56, & \gamma_9 &= 0.57, & \gamma_{10} &= 0.57, & \gamma_{11} &= 0.57. \end{aligned}$$

Аналогично полное сечение ионизации

$$\sigma_i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.283 \frac{1}{Z_a^2} \left\{ \ln \left( \frac{1.508v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}. \quad (10)$$

Далее, суммируя (9) по всем  $n$ , получаем полное сечение возбуждения дискретных состояний атома водорода

$$\sigma_{ex} = \sum_{n=2}^{\infty} \sigma_n = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.717 \frac{1}{Z_a^2} \left\{ \ln \left( \frac{0.84v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\} \quad (11)$$

и полное неупругое сечение

$$\sigma_r = \sigma_{ex} + \sigma_i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \frac{1}{Z_a^2} \left\{ \ln \left( \frac{1.4v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}. \quad (12)$$

Полученные формулы (9) и (10) могут быть использованы для оценок сечений возбуждения и ионизации  $K$ -оболочек сложных нерелятивистских атомов ударом релятивистского иона, когда электроны  $K$ -оболочки описываются водородоподобными функциями с эффективным зарядом ядра  $Z_a$ . Для получения же оценок сечений ионизации или возбуждения  $L$ -оболочек можно использовать сечения ионизации или возбуждений водородоподобных атомов из  $2s$ - и  $2p$ -состояний.

Для водородоподобных атомов, первоначально находившихся в  $2s$ -состояниях, имеем

$$\sigma_i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.82 \left\{ \ln \left( \frac{17.1v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}, \quad (13)$$

$$\sigma_n = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \frac{2^{17}}{3} n^7 \frac{(n-2)^{2n-6}}{(n+2)^{2n+6}} (n^2-1) \left\{ \ln \left( \frac{\beta_n v^2 Z_a}{Z \Omega_n \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}, \quad (14)$$

где  $n \geq 3$ ,  $\Omega_n = \epsilon_n - \epsilon_2$ , а числа  $\beta_n$  равны

$$\begin{aligned} \beta_3 &= 0.18, & \beta_4 &= 0.28, & \beta_5 &= 0.34, & \beta_6 &= 0.39, \\ \beta_7 &= 0.41, & \beta_8 &= 0.42, & \beta_9 &= 0.44, & \beta_{10} &= 0.45, & \beta_{11} &= 0.46. \end{aligned}$$

Для атомов водорода, первоначально находившихся в состоянии  $2p$ , усредняя по проекциям момента в этом состоянии, имеем

$$\sigma_i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.53 \left\{ \ln \left( \frac{271v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}, \quad (15)$$

$$\sigma_n = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \frac{2^{15}}{3} n^{11} \frac{(n-2)^{2n-7}}{(n+2)^{2n+7}} \left( \frac{11}{3} - \frac{4}{n^2} \right) \left\{ \ln \left( \frac{\beta_n v^2 Z_a}{Z \Omega_n \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}, \quad (16)$$

где  $n \neq 2$ , а числа  $\beta_n$  равны

$$\begin{aligned} \beta_1 &= 0.27, & \beta_3 &= 0.13, & \beta_4 &= 0.30, & \beta_5 &= 0.46, & \beta_6 &= 0.58, \\ \beta_7 &= 0.67, & \beta_8 &= 0.73, & \beta_9 &= 0.79, & \beta_{10} &= 0.82, & \beta_{11} &= 0.85. \end{aligned}$$

Для иллюстрации характера получаемых методом шивки результатов на рис. 1 приведены сечения ионизации атома водорода, полученные в борновском приближении (кривая 1), методом шивки (формула (10)) (кривая 2), в приближении Глаубера [10] (кривая 3), в приближении внезапных возмущений [8] (кривая 4). Как видно из рис. 1, значения сечения, полученные с помощью формулы (10) в области ее применимости, довольно близки к приближению Глаубера, а с ростом скорости стремятся к борновскому приближению. Отметим также, что хотя полученные в данном разделе выражения для сечений не переходят при  $Z \sim v \ll 1$  непосредственно в борновское приближение  $\sigma_B$ , что является общим свойством приближения (3), их относительная разница стремится к нулю с ростом скорости, т.е.  $(\sigma_B - \sigma)/\sigma \rightarrow 0$  при  $v \rightarrow c$ . В области же  $Z \sim v \sim 1$  наши результаты, основанные на унитарном приближении (3), как и приближение Глаубера, дают значительно лучшее согласие с экспериментом по сравнению с борновским приближением, которое, как известно, не унитарно и в этой области значительно (примерно в 1.5 раза) завышает неупругие сечения. Причем в отличие от непосредственного применения приближения Глаубера в виде (2), требующего значительного численного счета даже в нерелятивистском случае [10, 11], наши формулы являются аналитическими.

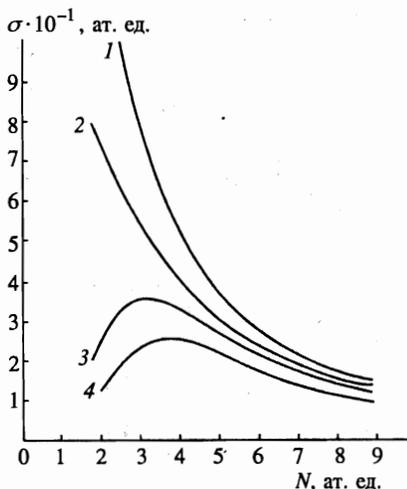


Рис. 1. Сечения ионизации атома водорода ионами  $C^{6+}$ , полученные в борновском приближении (1), методом шивки (формула (10)) (2), в приближении Глаубера [10] (3), в приближении внезапных возмущений [8] (4)

## 4. ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ ГЕЛИЕПОДОБНОГО АТОМА

Если при расчетах сечений неупругих столкновений быстрых заряженных частиц со сложными атомами используется теория возмущений, то одноэлектронное возбуждение или ионизация является эффектом первого порядка по взаимодействию налетающей частицы с атомными электронами. Двухэлектронный переход соответствует второму порядку теории возмущений, когда один раз учитывается взаимодействие налетающей частицы с атомными электронами и один раз — межэлектронное взаимодействие. Аналогичным образом [3, 19] рассчитываются и многоэлектронные переходы, т. е. взаимодействие налетающей частицы с атомными электронами всегда учитывается один раз, а все остальное соответствует учтенному необходимому числу раз межэлектронному взаимодействию. Однако ситуация очевидно меняется, когда взаимодействие атомных электронов с налетающей частицей много больше межэлектронного взаимодействия. В этом случае многоэлектронный переход следует рассматривать как результат прямого действия [3, 20] сильного поля налетающей частицы, именно такому механизму прямого возбуждения соответствуют (см. [4]) формулы (2) и (3). Приведем полные сечения одноэлектронных и двухэлектронных переходов из основного состояния нерелятивистского гелиеподобного атома при столкновениях с релятивистским многозарядным ионом, полученные в приближении больших параметров удара (4). Во всех случаях при получении приведенных ниже формул двухэлектронные состояния гелиеподобного атома описывались в виде симметризованных произведений водородоподобных одноэлектронных волновых функций, причем, чтобы избежать процедуры ортогонализации (обычно неоднозначно определенной, так как, строго говоря, следует ортогонализировать все состояния непрерывного и дискретного спектров), выбирались одноэлектронные водородоподобные волновые функции в поле ядра с одним и тем же эффективным зарядом ядра, равным  $Z_1$  для одноэлектронных переходов и  $Z_2$  для двухэлектронных переходов. В связи с этим обозначим произвольные двухэлектронные состояния  $|n_1, n_2\rangle$  гелиеподобного атома двумя наборами одноэлектронных водородоподобных квантовых чисел  $n_1$  и  $n_2$ . Тогда, согласно (3), сечение перехода из основного состояния  $|0, 0\rangle$  в состояние  $|n_1, n_2\rangle$  в приближении больших параметров удара (4) имеет вид

$$\sigma = \int d^2b |\langle n_1, n_2 | \exp \{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} | 0, 0 \rangle|^2. \quad (17)$$

В результате сечение выражено через интеграл по параметру удара от произведений хорошо известных [15] неупругих водородоподобных формфакторов. Сечения двухэлектронных переходов (когда обязательно менялись состояния двух электронов) были получены непосредственно из формулы (17) интегрированием по всей плоскости параметра удара. Сечения же неупругих процессов, в состав которых входят одноэлектронные переходы (например, однократные возбуждения или ионизация, полные неупругие сечения), получены после сшивки с теорией возмущений, поэтому соответствующие формулы содержат характерную логарифмическую зависимость от скорости многозарядного иона и релятивистского параметра  $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ .

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 вычесть вклад, соответствующий нахождению двух

электронов в состояниях двухэлектронного континуума, т. е. в состояниях двойной ионизации) равно

$$\sigma^{1+} = 16\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.283 \left\{ \frac{1}{Z_1^2} \left[ \ln \left( \frac{5.08v^2}{Z Z_1 \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right] - \frac{1}{Z_2^2} \ln 3.72 \right\}. \quad (18)$$

Полное сечение одноэлектронных возбуждений дискретного спектра, когда лишь один из атомных электронов претерпевает возбуждение в какое-либо из одноэлектронных состояний дискретного спектра, а другой остается в основном состоянии (точнее, невозбужденным), имеет вид

$$\sigma^{1*} = 16\pi \frac{Z^2}{v^2} \frac{0.375}{Z_1^2} \left\{ \ln \left( \frac{0.256v^2}{Z Z_1 \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\}. \quad (19)$$

Полное сечение двойной ионизации получаем, суммируя (17) по всем  $n_1$  и  $n_2$ , принадлежащим двухэлектронному континууму, оно описывается выражением

$$\sigma^{2+} = 16\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.283 \frac{1}{Z_2^2} \ln 3.72 = 9.36 \frac{Z^2}{Z_2^2 v^2}, \quad (20)$$

а полное сечение перехода гелиеподобного атома во все состояния двойного возбуждения дискретного спектра (в том числе во все возможные автоионизационные состояния) после соответствующего суммирования по  $n_1$  и  $n_2$  будет равно

$$\sigma^{2*} = 16\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.283 \frac{1}{Z_2^2} \ln 1.15 = 2.03 \frac{Z^2}{v^2 Z_2^2}. \quad (21)$$

Полные сечения связаны между собой очевидным общим соотношением:

$$\sigma_r = \sigma^{1+} + \sigma^{1*} + \sigma^{2+} + \sigma^{2*}, \quad (22)$$

где полное неупругое сечение  $\sigma_r$ , соответствующее возможности любого возбуждения гелиеподобного атома, равно

$$\sigma_r = 16\pi \frac{Z^2}{v^2} 0.717 \frac{1}{Z_a^2} \left\{ \ln \left( \frac{1.03v^2}{Z Z_a \sqrt{1-\beta^2}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \right\} \quad (23)$$

( $Z_a$  — эффективный заряд ядра гелиеподобного атома в основном ( $1s^2$ ) состоянии, равный заряду голого ядра атома минус  $5/16$ ).

В качестве еще одного примера двухэлектронных переходов в дискретные состояния приведем сечения возбуждения автоионизационных состояний с главным квантовым числом  $n = 2$  ( $L$ -оболочка) гелиеподобного атома. Поскольку в рассматриваемых нами столкновениях спины электронов не изменяются, возможно возбуждение следующих автоионизационных состояний:  $2s^2 \ ^1S$ ,  $2s2p \ ^1P$ ,  $2p^2 \ ^1S$  и  $2p^2 \ ^1D$ , соответствующие сечения которых равны

$$\sigma(2p^2 \ ^1D) = 2\sigma(2p^2 \ ^1S) = \frac{10}{3}\sigma(2s2p \ ^1P) = 30\sigma(2s^2 \ ^1S) = \pi \frac{Z^2}{v^2 Z_2^2} \frac{2^{31}}{3^{19}} \frac{1}{11}.$$

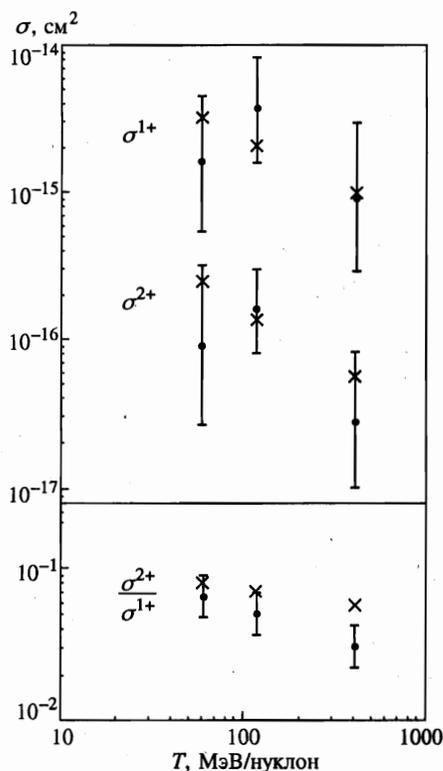


Рис. 2. Результаты экспериментов [23] и расчетов (по формулам (20) и (18)) для сечений двойной и однократной ионизации атома гелия при столкновениях с релятивистскими ионами урана  $U^{90+}$  при энергиях 60, 120 и 420 МэВ/нуклон, а также их отношения  $\sigma^{2+}/\sigma^{1+}$ : • — эксперимент, × — расчет

Таблица 1 иллюстрирует сравнение экспериментальных данных [21, 22] с нашими расчетами, а также с численными расчетами авторов работы [22] для суммарных сечений возбуждения в автоионизационные состояния ( $2s2p+2p^2$ ) атома гелия. В первом столбце приведены значения энергии налетающего иона, отнесенной к единице атомной массы, во втором столбце — заряд иона, в третьем столбце — результаты эксперимента, взятые из работ [21, 22], в четвертом — наши результаты ( $Z_2 = 1.97$ ), а в пятом — результаты численного расчета, приведенные в работе [22].

Таблица 1

Сумма сечений ( $\times 10^{19}$  см<sup>2</sup>) возбуждения автоионизационных  $2s2p$   $^1P$ - и  $2p^2$   $^1D$ -состояний атома гелия

Энергия, МэВ/нуклон	Заряд иона	Эксперимент, $10^{-19}$ см <sup>2</sup>	Теория, $10^{-19}$ см <sup>2</sup>	Расчет [22], $10^{-19}$ см <sup>2</sup>
1.84	6	$8.305 \pm 1.744$	18.45	25.6
1.5	6	$20.1 \pm 7.20$	22.61	31.8
1.5	9	$48.99 \pm 17.66$	50.79	111.6

На рис. 2 приведены результаты экспериментов [23] и расчетов (по формулам (20) и (18)) сечений двойной ( $Z_2 = 1.97$ ) и однократной ( $Z_1 = 1.37$ ) ионизации атома гелия при столкновениях с релятивистскими ионами урана  $U^{90+}$  при энергиях 60, 120 и

420 МэВ/нуклон, а также их отношения  $\sigma^{2+}/\sigma^{1+}$ . Правильность выбора значений эффективных зарядов  $Z_1 = 1.37$  и  $Z_2 = 1.97$  подтверждается также неплохим согласием наших результатов, приведенных в табл. 2, с экспериментальными данными [24, 20] по двойной и однократной ионизации атома гелия ударом быстрого нерелятивистского многозарядного иона. Заметим, что мы приводим результаты расчетов как для сечений прямой однократной ионизации ( $\sigma^{1+}$ ), так и сечений ( $\sigma^{1+} + \sigma^{2+}$ ), которые могут служить оценкой полных сечений формирования однозарядных ионов гелия в результате прямой ионизации и оже-распада всевозможных дважды возбужденных состояний атома гелия. Это связано с тем, что в легких атомах оже-распад является доминирующим каналом распада дважды возбужденных состояний дискретного спектра, за исключением относительно небольшого (по сравнению с общим числом всевозможных подобных состояний) числа состояний, оже-распад которых запрещен правилами отбора [25–27].

Таблица 2

Сечения ( $\times 10^{16}$  см<sup>2</sup>) двойной ионизации и однократной ионизации атома гелия

Энергия, МэВ/нукл.	Заряд иона	$\sigma^{2+}$ эксп.	$\sigma^{2+}$ теория	$\sigma^{1+}$ эксп.	$\sigma^{1+}$ теория	$\sigma^{1+} + \sigma^{2+}$ теория
0.64	8	1.32	1.687	7.9	10.231	10.597
1.00	8	1.06	1.08	6.7	8.11	8.344
1.44	8	0.45	0.75	5.9	6.518	6.68
1.4	15	2.91	2.712	17.9	17.798	18.385
1.4	18	4.50	3.905	22.4	23.322	24.168
1.4	20	5.41	4.821	26.0	27.146	28.191
1.4	36	16.0	15.621	57.2	58.206	61.59
1.4	37	16.8	16.501	59.5	60.02	63.594
1.4	44	23.0	23.335	72.1	71.779	76.833

## 5. ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

Хотя сильное поле многозарядного иона приводит к довольно высоким вероятностям электронных переходов, для расчетов сечений возбуждения или ионизации высокой кратности приближение больших параметров удара (4) может нарушаться, из-за того что соответствующие сечения могут оказаться сравнимыми с характерным атомным размером. Поэтому необходимо более общее рассмотрение формулы (3). Будем считать атомные электроны многоэлектронного (до столкновения) и нерелятивистского (после столкновения) атома различимыми и каждому электрону приписывать одноэлектронную водородоподобную волновую функцию. Тогда начальная волновая функция будет иметь вид

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_0}) = \prod_{i=1}^{N_0} \phi_i(\mathbf{r}_i),$$

а конечная

$$\Psi_f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_0}) = \prod_{i=1}^{N_0} \psi_i(\mathbf{r}_i).$$

Поэтому полная вероятность  $(N_0 - N)$ -кратной ионизации нерелятивистского  $N_0$ -электронного атома, соответствующая попаданию каких-либо  $N_0 - N$  электронов в состояние континуума, а остальных  $N$  электронов — в любое из состояний дискретного спектра, с учетом унитарности, согласно (3), будет иметь вид

$$W^{(N_0 - N)^+}(\mathbf{b}) = \frac{N_0!}{(N_0 - N)!N!} \prod_{i=1}^{N_0 - N} p_i(\mathbf{b}) \prod_{j=N_0 - N + 1}^{N_0} (1 - p_j(\mathbf{b})), \quad (24)$$

$\prod_{j=N_0 - N + 1}^{N_0} (\dots) = 1$  для  $N = 0$ , а обобщенный одноэлектронный неупругий формфактор

$$p_i(\mathbf{b}) = \int d^3 k_i |d^3 r_i \psi_{\mathbf{k}_i}^*(\mathbf{r}_i) \exp\{-i\chi_i(\mathbf{b}, \mathbf{r}_i)\} \phi_i(\mathbf{r}_i)|^2, \quad (25)$$

$\mathbf{k}_i$  — импульс  $i$ -го электрона в континууме. Вероятность зависит от вектора  $\mathbf{b}$ , однако после усреднения по проекции полного орбитального момента начального состояния атома вероятность будет функцией только от  $|\mathbf{b}|$ . Введем среднее по орбитальному моменту  $l$  и его проекции  $m$  значение одноэлектронного неупругого формфактора для каждого электрона оболочки (далее усредненное по всем оболочкам в составе атома):

$$p(b) = \frac{1}{n_0} \sum_{n=1}^{n_0} \frac{1}{M_n} \sum_{l,m} \int d^3 k | \int d^3 r \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \exp\{-i\chi(\mathbf{b}, \mathbf{r})\} \phi_{nlm}(\mathbf{r})|^2. \quad (26)$$

Здесь суммирование ведется по всем возможным значениям  $l$  и  $m$  для данной  $n$ -оболочки,  $M_n$  — число таких значений,  $n$  — главное квантовое число,  $n_0$  — число оболочек. Очевидно, что  $p(b) = p(|\mathbf{b}|)$  не зависит от углов вектора  $\mathbf{b}$ , таким образом,  $p(b)$  будет иметь смысл средней вероятности ионизации одного электрона. Тогда, заменяя в (24) каждый одноэлектронный формфактор на среднее (26), получим для вероятности ионизации  $N_0 - N$  электронов обычное для приближения независимых электронов выражение [3, 9]. Однако эффективный заряд  $Z^*$  ядра атома зависит от степени ионизации. Чтобы учесть это, сделаем в (26) замену

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}/Z^*, \quad \mathbf{b} = \mathbf{b}Z^*, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}Z^*,$$

соответствующую переходу к кулоновским единицам [15]. Тогда правую часть (26) можно вычислить, используя волновые функции атома водорода с зарядом равным единице, а вся зависимость от  $Z^*$  заключается в замене  $b = bZ^*$ . Поэтому, если везде ниже под  $p(b)$  мы будем понимать формфактор атома водорода, усредненный в соответствии с формулой (26), такая замена позволит вычислить сечение ионизации при более общих, чем в модели независимых электронов, предположениях. В дальнейшем будем рассматривать ионизацию высокой кратности  $N_0 \gg 1$ ,  $N_0 - N \gg 1$ . Рассмотрим сначала сечение полной ионизации атома (ионизации всех  $N_0$  электронов), тогда в (24)  $N = 0$  и  $W$  сводится к произведению  $N_0$  одноэлектронных формфакторов. Введем эффективный заряд ядра, соответствующий полной ионизации атома  $Z_{N_0}^*$ . Заменяя каждый

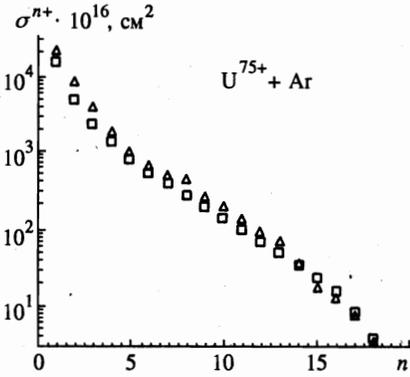


Рис. 3

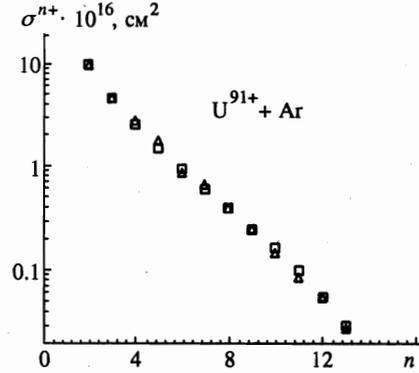


Рис. 4

Рис. 3. Сечение многократной ионизации атома аргона многозарядными ионами  $U^{75+}$  с энергией 15 МэВ/нуклон в зависимости от степени ионизации  $n$ :  $\square$  — эксперимент из работы [28],  $\Delta$  — наши результаты

Рис. 4. Результаты экспериментов [28, 29] и расчетов (по формулам (27)–(29)) для сечений многократной ионизации атомов неона при столкновениях с релятивистскими ионами урана  $U^{91+}$  при энергиях 120 МэВ/нуклон в зависимости от степени ионизации  $n$ :  $\square$  — эксперимент,  $\Delta$  — наши результаты

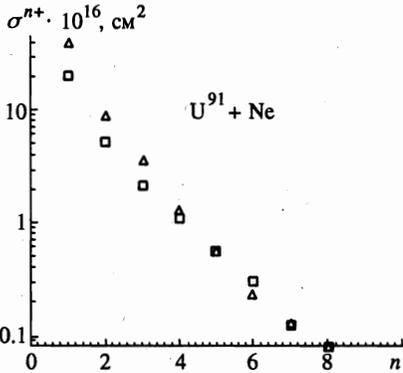


Рис. 5. Результаты экспериментов [28, 29] и расчетов (по формулам (27)–(29)) для сечений многократной ионизации атомов аргона при столкновениях с релятивистскими ионами урана  $U^{91+}$  при энергиях 120 МэВ/нуклон в зависимости от степени ионизации  $n$ :  $\square$  — эксперимент,  $\Delta$  — наши результаты

одноэлектронный формфактор на средний (26), получим вероятность полной ионизации

$$W^{N_0+} = [p(b)]^{N_0},$$

где  $b = b_{N_0}^*$ . Интеграл (3) по  $d^2b$  с этой вероятностью можно взять асимптотически ( $N_0 \gg 1$ ) методом Лапласа в предположении, что  $p(b)$  имеет один максимум расположенный на левой границе  $b = b_0 = 0$  интервала интегрирования. В существовании максимума легко убедиться из результатов расчетов [8, 14]. В результате сечение полной  $N_0$ -кратной ионизации оболочки будет иметь вид

$$\sigma^{N_0+} = \pi \frac{1}{(Z_{N_0}^*)^2} \left[ \frac{-2\pi}{p''(b_0)N_0} \right]^{1/2} [p(b_0)]^{N_0+1/2}. \tag{27}$$

Здесь и ниже  $b_0$ -точка максимума функции  $p(b)$ ,  $p''(b_0)$  — значение второй производной функции  $p(b)$  по  $b^2$  в этой точке. В случае  $(N_0 - 1)$ -кратной ионизации вероятность представляет собой разность двух членов, причем первый член содержит произведение  $N_0 - 1$  одноэлектронных формфакторов и соответствует  $N_0 - 1$  электрону в континууме (соответствующий эффективный заряд  $Z_{N_0-1}^*$ ), а второй член содержит произведение  $N_0$  одноэлектронных формфакторов и соответствует  $N_0$  электронам в континууме (соответствующий заряд ядра  $Z_{N_0}^*$ ). Интегрируя методом Лапласа каждый член в отдельности, получим сечение  $(N_0 - 1)$ -кратной ионизации

$$\sigma^{(N_0-1)+} = N_0 \sigma^{N_0+} \left[ \left( \frac{Z_{N_0}^*}{Z_{N_0-1}^*} \right)^2 \left( \frac{N_0}{N_0 - 1} \right)^{1/2} \frac{1}{p(b_0)} - 1 \right]. \quad (28)$$

В общем случае  $(N_0 - N)$ -кратной ионизации, действуя аналогично, получим

$$\begin{aligned} \sigma^{(N_0-N)+} &= \frac{N_0! \sigma^{N_0+}}{(N_0 - N)! N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \left( \frac{Z_{N_0}^*}{Z_{N_0-N+m}^*} \right)^2 \times \\ &\times \frac{N! \sqrt{N_0 / (N_0 - N + m)}}{(N - m)! m!} \{p(b_0)\}^{-N+m}, \end{aligned} \quad (29)$$

где  $Z_{N_0-N+m}^*$  — эффективный заряд при  $(N_0 - N + m)$ -кратной ионизации.

Полученные формулы (27), (28) и (29) позволяют в принципе вычислить сечения ионизации любой кратности (при условии  $N_0 \gg 1$ ,  $(N_0 - N) \gg 1$ ) или по известным из эксперимента каким-либо двум сечениям восстановить остальные. Проще всего считать известными  $\sigma^{N_0+}$  и  $\sigma^{(N_0-1)+}$ , используя которые, легко найти  $p(b_0)$  и подставить в выражение (29). В результате сечение произвольной  $(N_0 - N)$ -кратности ионизации окажется выраженным через  $\sigma^{N_0+}$  и  $\sigma^{(N_0-1)+}$ . Результат такого расчета для многократной (до восьми) ионизации неона и (до восемнадцати) атома аргона приведен на рис. 3–5. При расчете эффективный заряд принимался равным степени ионизации, т. е.  $Z_N^* = N$ . Как видно из рисунка, согласие расчетов с результатами экспериментов [28, 29] хорошее даже для ионизации малой кратности, формально лежащей вне границы  $(N_0 - N \gg 1)$  применимости формул (27), (28) и (29).

## Литература

1. Л. П. Пресняков, В. П. Шевелько, Р. К. Янев, *Элементарные процессы с участием многозарядных ионов*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
2. J. Eichler and W. E. Meyrhof, *Relativistic atomic collisions*, Academic Press Inc., New York, (1995).
3. J. H. McGuire, *Advances in atomic, molecular and optical physics*, (1992), p. 217.
4. В. И. Матвеев, ЭЧАЯ, **26**, 780 (1995).
5. J. Eichler, Phys. Rep. **193**, 167 (1990).
6. J. Eichler, Phys. Rev. **15**, 1856 (1977).
7. Г. Л. Юдин, ЖЭТФ **80**, 1026 (1981).
8. A. Salop and J. H. Eichler, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **12**, 257 (1979).
9. В. И. Матвеев, М. М. Мусаханов, ЖЭТФ **105**, 280 (1994).
10. J. H. McGuire, Phys. Rev. A **26**, 143 (1982).
11. D. S. F. Crothers and S. H. McCann, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16**, 3229 (1983).

12. В. И. Матвеев, С. Г. Толманов, ЖЭТФ **107**, 1780 (1995).
13. U. Becker, N. Grun, W. Scheid, and G. Soff, Phys. Rev. Lett. **56**, 2016 (1986).
14. A. J. Baltz, Phys. Rev. Lett. **78**, 1231 (1997).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1989).
16. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, Мир, Москва (1967).
17. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
18. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1981).
19. В. И. Матвеев, Э. С. Парилис, УФН **138**, 583 (1982).
20. J. H. McGuire, A. Mueller, B. Shuch et al., Phys. Rev. A **35**, 2479 (1987).
21. J. O. R. Pedersen and R. Hvelplund, Phys. Rev. Lett. **62**, 2373 (1989).
22. W. Fritsch and C. D. Lin, Phys. Rev. A **41**, 4776 (1990).
23. H. Berg, O. Jagutzki, R. Dörner et al., Phys. Rev. A **46**, 5539 (1992).
24. H. Knudsen, L. H. Andersen, P. Hvelplund et al., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 3445 (1984).
25. G. Wentzel, Z. Phys. **43**, 524 (1927).
26. Р. Х. Пропин, Опт. и спектр. **8**, 300 (1960).
27. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Наука, Москва (1960).
28. J. Ullrich, R. E. Olson, H. Berg et al., Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B **40/41**, 149 (1989).
29. H. E. Berg, GSI-93-12, Report, May, ISSN 0171-4546 (Doktorarbeit, Universitat Frankfurt), (1993), p. 1.