ЖЭТФ, 2006, том 129, вып. 1, стр. 5–13

МНОГОКРАТНАЯ ПОТЕРЯ ЭЛЕКТРОНОВ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ СТРУКТУРНЫМИ ИОНАМИ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ СО СЛОЖНЫМИ АТОМАМИ

В. И. Матвеев [a*], **Д. У. Матрасулов** [b], **С. В. Рябченко** [c]

[a] *Поморский государственный университет им. М. В. Ломоносова 163002, Архангельск, Россия*

[b] *Отдел теплофизики Академии наук Республики Узбекистан 700135, Ташкент, Узбекистан*

[c] *Архангельский государственный технический университет 163002, Архангельск, Россия*

Поступила в редакцию 16 июня 2005 г.

Развита непертурбативная теория многократной ионизации быстрых тяжелых структурных ионов при столкновениях с нейтральными сложными атомами; рассчитаны сечения многократной ионизации (потеря до 15 электронов) ионов урана U^{10+} и U^{28+} при столкновениях с атомами аргона и молекулой азота; проведено сравнение с экспериментальными данными.

PACS: 34.10.+x, 34.90.+q

1. ВВЕДЕНИЕ

Частично ободранные ионы высоких зарядов и энергий используются во многих экспериментах, проводимых на ускорителях тяжелых ионов (см., например, [1–7] и приведенные там ссылки). Такие ионы состоят из ядра и некоторого количества связанных электронов, частично компенсирующих заряд ядра и образующих электронную шубу иона. Строго говоря, столкновения таких структурных ионов с атомами следует рассматривать как столкновение двух сложных систем, при котором происходит одновременное возбуждение электронных оболочек обеих сталкивающихся систем. Везде ниже мы будем называть движущийся структурный ион снарядом, а покоящийся атом — мишенью. Теория одновременного возбуждения или ионизации снаряда и мишени, основанная на борновском приближении, последовательно построена в работах, приведенных в обзорах [8, 9] (см. также работу [10]). Распространение теории на случай релятивистских скоростей столкновений проведено в работах [11, 12]. Однако, когда используются ионы высоких зарядов, даже для релятивистских скоростей столкновения теория возмущений неприменима [13], такие непертурбативные эффекты наблюдались еще в экспериментах [7]. Поэтому, как правило, расчеты сечений ионизации проводились (см., например, [2, 3]) в рамках широко распространенного метода классических траекторий. Квантовомеханическое непертурбативное рассмотрение на основе приближения внезапных возмущений в нерялятивистском случае было проведено в работе [14]. Релятивистские столкновения рассматривались в статье [15]. Рассмотрение в ультрарелятивистском случае проведено в работе [16]. В последнее время активизировался интерес к процессам многократной ионизации — обдирки снаряда при столкновениях тяжелых ионов с нейтральными атомами. Например, в работах [1, 2] проведены измерения сечений многократной ионизации (потеря до 15 электронов) быстрых ионов урана при столкновениях с многоэлектронными нейтральными атомами. Измерения показали, что при увеличении степени ионизации на единицу соответствующее сечение убывало менее чем в два раза, и была отмечена необходимость рассчитывать подобные процессы непертурбативными методами. В работе [2] были проведе-

*E-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

ны расчеты сечений многократной обдирки снаряда методом классических траекторий. Квантовомеханическое непертурбативное рассмотрение ионизации снаряда высокой кратности до настоящего времени не проводилось.

В настоящей работе развита непертурбативная теория многократных возбуждений и ионизации быстрых тяжелых структурных ионов при столкновениях с нейтральными сложными атомами, проведены расчеты и сравнение с экспериментом.

2. ОБЩАЯ ЧАСТЬ

Будем считать, что снаряд и мишень движутся с постоянными скоростями по прямолинейным траекториям. Для упрощения записи формул будем считать, что снаряд и мишень имеют по одному электрону (обобщение на случай многоэлектронных сталкивающихся систем будет проведено ниже). Пусть координаты ядра структурного иона-снаряда

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{b}_p + \mathbf{v}_p t,$$

где $\mathbf{b}_p$ — параметр удара снаряда относительно начала системы координат, $\mathbf{v}_p$ — скорость снаряда, t — время. Обозначим как $\mathbf{r}_p$ координаты электрона структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда. Аналогично введем координаты ядра атома-мишени

$$\mathbf{R}_a = \mathbf{b}_a + \mathbf{v}_a t$$

и координаты электрона атома-мишени относительно ядра-мишени, $\mathbf{r}_a$. Потенциал взаимодействия снаряда и мишени имеет вид (здесь и везде ниже используются атомные единицы)

$$V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t) = \frac{Z_p Z_a}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a|} - \frac{Z_p}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a - \mathbf{r}_a|} - \\ - \frac{Z_a}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_p|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_a|}, \quad (1)$$

где Z_p — заряд ядра-снаряда, Z_a — заряд ядра-мишени, слагаемое

$$\frac{Z_p Z_a}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a|}$$

соответствует взаимодействию ядер снаряда и мишени, слагаемое

$$-\frac{Z_p}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a - \mathbf{r}_a|}$$

— взаимодействию электрона мишени с ядром снаряда, слагаемое

$$-\frac{Z_a}{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_p - \mathbf{r}_p|}$$

— взаимодействию электрона снаряда с ядром мишени, а слагаемое

$$\frac{1}{|\mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_a|}$$

— взаимодействию между электронами снаряда и мишени.

Межъядерное взаимодействие, как не вызывающее электронных переходов, будем опускать. Тогда получим

$$V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t) = -\frac{Z_p}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}_a|} - \frac{Z_a}{|\mathbf{R}(t) + \mathbf{r}_p|} + \\ + \frac{1}{|\mathbf{R}(t) + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_a|}, \quad (2)$$

где мы ввели межъядерное расстояние

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}_p - \mathbf{R}_a = \mathbf{b} + \mathbf{v}t,$$

относительный параметр удара

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_p - \mathbf{b}_a$$

и относительную скорость

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_a.$$

Состояния электрона изолированной мишени будем описывать полным набором волновых функций $\varphi_n(\mathbf{r}_a)$, состояния электрона изолированного снаряда — полным набором волновых функций $\psi_k(\mathbf{r}_a)$. Тогда для начального состояния сталкивающихся систем имеем

$$\Phi_{00} = \psi_0(\mathbf{r}_p)\varphi_0(\mathbf{r}_a),$$

а для конечного состояния имеем

$$\Phi_{kn} = \psi_k(\mathbf{r}_p)\varphi_n(\mathbf{r}_a).$$

Общей основой [17, 18] для рассмотрения сечений неупругих процессов при столкновениях быстрых тяжелых ионов высоких зарядов с атомами является использование применимого при $Z/v \le 1$ (Z — заряд иона, v — скорость столкновения) приближения внезапных возмущений [19], тесно связанного [17, 18, 20] с приближением Глаубера [21], основанного на близком к квазиклассике приближении эйконала [22, 23]. Для столкновений же ульрарелятивистских ионов с атомами теория внезапных возмущений принимает форму точного решения уравнения Дирака в ультрарелятивистском случае [24] (см. также [25]). Приближение внезапных возмущений является основой расчетных методик, когда возмущение не является достаточно малым для применения теории возмущений, однако время действия возмущения значительно меньше характерных периодов времени невозмущенной системы, что позволяет решать задачу, не ограничивая величину возмущения. 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 неунитарности, к значениям вероятности, большим единицы [13, 26]. Следует также подчеркнуть, что для ионов достаточно больших зарядов область применимости ($Z/v \ll 1$) борновского приближения не достигается [26] даже при сколь угодно больших энергиях столкновения. Таким образом, мы, как и в работах [14, 27], будем считать относительную скорость столкновения v большой и поэтому возмущение (2) — действующим внезапно. Приведем соответствующие условия: время столкновения снаряда и мишени $\tau_c \sim a/v$, где $a \sim 1$ — характерный размер сталкивающихся систем, характерное время обращения электронов на орбите τ_s следует считать порядка 1 для электронов как снаряда, так и мишени, поскольку цель нашего рассмотрения — столкновения многоэлектронных систем, у которых подавляющее число электронов находится на верхних оболочках с большими квантовыми числами. Таким образом, для применимости представлений о внезапности возмущения, $\tau_c \ll \tau_s$, в интересующем нас случае достаточно выполнения неравенства $v \gg 1$.

Эволюция начального состояния в приближении внезапных возмущений равна [25]

$$\Phi_{00}(t) = \exp\left(-i\int\limits_{-\infty}^{t} V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)\, dt\right)\Phi_{00}. \tag{3}$$

Соответственно, эволюция конечного состояния равна

$$\Phi_{kn}(t) = \exp\left(i\int\limits_{t}^{\infty} V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)\, dt\right)\Phi_{kn}\ . \tag{4}$$

Амплитуда перехода электрона атома-мишени из состояния $\varphi_0(\mathbf{r}_a)$ в состояние $\varphi_n(\mathbf{r}_a)$ и электрона снаряда из состояния $\psi_0(\mathbf{r}_p)$ в состояние $\psi_k(\mathbf{r}_p)$ в результате столкновения равна проекции состояния (3) на состояние (4):

$$A_{0\to k}^{0\to n} = \langle\Phi_{kn}(t)|\Phi_{00}(t)\rangle = \\ = \langle\Phi_{kn}|\exp\left(-i\int\limits_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)\, dt\right)|\Phi_{00}\rangle. \tag{5}$$

Соответствующая вероятность равна

$$w_{0\to k}^{0\to n} = |A_{0\to k}^{0\to n}|^2. \tag{6}$$

Мы будем рассматривать переходы, при которых одновременно изменяются как состояние мишени, так и состояния снаряда, причем нас будет интересовать вероятность каких-либо конкретных переходов в снаряде при произвольном (не фиксированном) конечном состоянии мишени. Поэтому, суммируя по всем конечным (полный набор) состояниям мишени и, с учетом условия полноты

$$\sum_n \langle\varphi_n(\mathbf{r}'_a)|\varphi_n(\mathbf{r}_a)\rangle = \delta(\mathbf{r}'_a - \mathbf{r}_a),$$

получим

$$\sum_n w_{0\to k}^{0\to n} = \int d^3r_a|\varphi_0(\mathbf{r}_a)|^2 \left|\int d^3\mathbf{r}_p\psi_k^*(\mathbf{r}_p)\ \times \right. \\ \left. \times\ \exp\left(-i\int\limits_{-\infty}^{+\infty} U_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)\, dt\right)\psi_0(\mathbf{r}_p)\right|^2, \tag{7}$$

где через $U_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)$ обозначена часть потенциала $V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t)$, равная потенциалу, действующему со стороны мишени на электрон бомбардирующего иона

$$U_a(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_p, t) = -\frac{Z_a}{|\mathbf{R}(t) + \mathbf{r}_p|} + \frac{1}{|\mathbf{R}(t) + \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_a|}. \tag{8}$$

Таким образом, нами получена вероятность перехода электрона снаряда из состояния ψ_0 в состояние ψ_k

$$W_{0\to\mathbf{k}}(\mathbf{b}) = \sum_n w_{0\to k}^{0\to n} \tag{9}$$

в зависимости от прицельного параметра $\mathbf{b}$ при произвольной судьбе мишени (просуммированная по всем конечным состояниям атома-мишени). Выражение (7) имеет простой смысл: оно представляет собой вероятность возбуждения снаряда атомом-мишенью, при фиксированных положениях электрона атома-мишени, усредненную по всем положениям атомного электрона. Соответствующее сечение возбуждения получается интегрированием вероятности (9) по всей плоскости параметров удара:

$$\sigma = \int d^2b\, W_{0\to k}(\mathbf{b}). \tag{10}$$

3. ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО СНАРЯДА

Рассмотрим неупругие процессы при столкновениях многоэлектронных структурных ионов со сложными многоэлектронными атомами. Обозначим N_a полное число электронов в атоме и N_p полное число электронов в ионе. Потенциал, действующий со стороны атома (мишени) на электроны бомбардирующего иона (снаряда), согласно (8), равен

$$U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t) = -Z_a \sum_{p=1}^{p=N_p} \frac{1}{|\mathbf{R}(t)+\mathbf{r}_p|} + \\ + \sum_{p=1,a=1}^{p=N_p,a=N_a} \frac{1}{|\mathbf{R}(t)+\mathbf{r}_p-\mathbf{r}_a|}. \qquad (11)$$

Другими словами, потенциал $U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)$ есть функция не только относительных координат ядер снаряда и мишени $\mathbf{R}=(vt,\mathbf{b})$, но и положений всех электронов мишени, совокупность координат которых обозначим $\{\mathbf{r}_a\}$, и положений всех электронов снаряда, совокупность координат которых обозначим $\{\mathbf{r}_p\}$. Соответствующее естественное обобщение формулы (7) на случай перехода электронов снаряда из основного состояния $|\Psi_0(\{\mathbf{r}_p\})\rangle$ в произвольное возбужденное состояние $|\Psi_n(\{\mathbf{r}_p\})\rangle$ при произвольной судьбе атома-мишени имеет вид

$$W_{0\to n}(\mathbf{b}) = \langle\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})| \left| \langle\Psi_n(\{\mathbf{r}_p\})| \times \right. \\ \left. \times \exp\left(-i\int_{-\infty}^{+\infty} U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)\,dt\right)|\Psi_0(\{\mathbf{r}_p\})\rangle\right|^2 \times \\ \times |\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})\rangle. \qquad (12)$$

Непосредственное использование этой формулы затруднено в случае, когда снаряд и мишень являются существенно многоэлектронными, т. е. $N_a \gg 1$ и $N_p \gg 1$. Однако это же обстоятельство позволяет воспользоваться следующим упрощением. За время столкновения положения электронов мишени относительно ядра мишени не успевает измениться. При большом числе электронов мишени и снаряда естественно считать, что потенциал, действующий со стороны атома (мишени) на электроны бомбардирующего иона (снаряда), представляет собой среднее от потенциала (11) по начальному (основному) состоянию электронов мишени. Будем считать, что состояния электронов мишени описываются [28] как одноэлектронные орбитали в среднем самосогласованном поле в модели Дирака–Хартри–Фока–Слейтера. Тогда может быть предложена [28] простая аналитическая форма записи экранирующей функции для нейтральных атомов с атомными номерами $Z_a = 1$–92. Электронная плотность представляется в виде

$$\rho_a(\mathbf{r}) = \frac{Z_a}{4\pi|\mathbf{r}|}\sum_{i=1}^{i=3} A_i\alpha_i^2 \exp(-\alpha_i|\mathbf{r}|), \qquad (13)$$

где A_i и α_i — постоянные, табулированные [28] для всех атомных элементов. Соответствующая экранирующая функция имеет вид

$$\phi_a(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{i=3} A_i \exp(-\alpha_i|\mathbf{r}|), \qquad (14)$$

поэтому потенциал, действующий со стороны мишени на электроны снаряда, представим в виде (далее удобно считать, что ион покоится в начале системы координат, а атом движется, что соответствует замене $\mathbf{R}(t)$ на $-\mathbf{R}(t)$)

$$U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t) = -\sum_{p=1}^{p=N_p}\frac{Z_a}{|\mathbf{R}(t)-\mathbf{r}_p|} \times \\ \times \sum_{i=1}^{i=3} A_i \exp(-\alpha_i|\mathbf{R}(t)-\mathbf{r}_p|). \qquad (15)$$

Тогда получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)\,dt = \sum_{p=1}^{p=N_p}\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p), \qquad (16)$$

где функция $\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p)$ имеет смысл эйкональной фазы и равна

$$\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p) = -\frac{Z_a}{v}\sum_{i=1}^{i=3} A_i K_0(\alpha_i|\mathbf{b}-\mathbf{s}_p|) \qquad (17)$$

($\mathbf{s}_p$ — проекция $\mathbf{r}_p$ на плоскость параметра удара $\mathbf{b}$). Таким образом, потенциал U_a в формуле (12) не зависит от координат электронов мишени $\{\mathbf{r}_a\}$ и, поскольку

$$\langle\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})|\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})\rangle = 1,$$

вероятность (12) перехода электронов снаряда из основного состояния $|\Psi_0(\{\mathbf{r}_p\})\rangle$ в произвольное возбужденное состояние $|\Psi_n(\{\mathbf{r}_p\})\rangle$ при произвольной судьбе атома-мишени принимает простой вид:

$$W_{0\to n}(\mathbf{b}) = |\langle\Psi_n(\{\mathbf{r}_p\})| \times \\ \times \exp\left(-i\sum_{p=1}^{p=N_p}\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p)\right)|\Psi_0(\{\mathbf{r}_p\})\rangle|^2. \qquad (18)$$

Другими словами, выражение (18) представляет собой вероятность возбуждения покоящегося в начале системы координат структурного иона-снаряда движущимся со скоростью $-\mathbf{v}$ нейтральным атомом-мишенью, описываемым как протяженный объект с пространственно-неоднородной плотностью заряда, соответствующей точечному ядру заряда Z_a, окруженному «шубой» с плотностью заряда $-\rho_a(\mathbf{r})$, где $\rho_a(\mathbf{r})$ определяется формулой (13). В таком же виде искомая вероятность, следуя методике, изложенной в работе [15] для возбуждения атомов движущимися с релятивистскими скоростями протяженными зарядами, может быть получена и в приближении эйконала, применяемом к описанной задаче. Таким образом, формула (18) применима и в случае столкновений между движущимися с релятивистскими скоростями снарядом и мишенью, лишь бы в системе покоя снаряда электроны снаряда были бы нерелятивистскими до и после столкновения (аналогичное требование и к электронам мишени в системе покоя мишени).

Дальнейшее рассмотрение будем проводить, следуя схеме описания [18] столкновений высокозарядных тяжелых ионов со сложными атомами, успешно примененной [29, 30] для расчетов сечений [31, 32] многократной (до 18 кратности) ионизации атомов Ar и Ne высокозарядными ионами урана большой энергии. Будем считать, что в системе покоя снаряда электроны снаряда являются нерелятивистскими до и после столкновения и различимыми, и каждому электрону будем приписывать одноэлектронную водородоподобную волновую функцию. Тогда начальная волновая функция имеет вид

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

а конечная —

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

Поэтому полная вероятность $(N_p - N)$-кратной ионизации нерелятивистского N_p-электронного структурного иона, соответствующая попаданию каких-либо $N_p - N$ электронов в состояние континуума, а остальных N электронов — в любое из состояний дискретного спектра, с учетом унитарности вероятности (18) будет иметь вид

$$W^{(N_p-N)+}(\mathbf{b}) = \frac{N_p!}{(N_p-N)!N!} \prod_{i=1}^{N_p-N} p_i(\mathbf{b}) \times \prod_{j=N_p-N+1}^{N_p} (1 - p_j(\mathbf{b})), \quad (19)$$

причем при $N = 0$

$$\prod_{j=N_p-N+1}^{N_p} (\ldots) = 1,$$

а обобщенный одноэлектронный неупругий формфактор равен

$$p_i(\mathbf{b}) = \int d^3k_i \times \left| \int d^3r_i \psi^*_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_i) \exp\{-i\chi_i(\mathbf{b}, \mathbf{r}_i)\} \phi_i(\mathbf{r}_i) \right|^2, \quad (20)$$

где $\mathbf{k}_i$ — импульс i-го электрона в континууме. Вероятность (19) зависит от вектора $\mathbf{b}$, однако после усреднения по проекции полного орбитального момента начального состояния снаряда 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 структурного иона-снаряда:

$$p(b) = \frac{1}{n_0} \sum_{n=1}^{n_0} \frac{1}{M_n} \sum_{l,m} \int d^3k \times \left| \int d^3r \psi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp\{-i\chi(\mathbf{b}, \mathbf{r})\} \phi_{nlm}(\mathbf{r}) \right|^2, \quad (21)$$

где 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 при достаточно большом числе электронов на оболочках снаряда можно считать, что

$$p(b) = p(|\mathbf{b}|),$$

т. е. не зависит от углов вектора $\mathbf{b}$, таким образом, $p(b)$ будет иметь смысл средней вероятности ионизации одного электрона. Тогда, заменяя в выражении (19) каждый одноэлектронный формфактор на среднее (21), получим для вероятности ионизации $N_p - N$ электронов обычное для приближения независимых электронов выражение [33, 34]

$$W^{(N_p-N)+}(b) = \frac{N_p!}{(N_p-N)!N!} p^{N_p-N}(b)(1 - p(b))^N. \quad (22)$$

Однако эффективный заряд Z^* ядра снаряда зависит от степени ионизации. Чтобы учесть это, сделаем в выражении (21) замену

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

соответствующую переходу к кулоновским единицам [21]. Тогда правую часть выражения (21) можно вычислить, используя волновые функции атома водорода с зарядом равным единице, а вся зависимость от Z^* заключается в замене $b \to bZ^*$. Поэтому, если везде ниже под $p(b)$ мы будем понимать формфактор атома водорода, усредненный в соответствии с формулой (21), то такая замена позволит вычислить сечение ионизации при более общих (ср. [29, 30]), чем в модели независимых электронов, предположениях.

Рассмотрим сначала сечение полной ионизации снаряда (ионизации всех N_p электронов), тогда в выражении (19) $N = 0$ и W сводится к произведению N_p штук одноэлектронных формфакторов. Введем эффективный заряд ядра, соответствующий полной ионизации снаряда $Z^*_{N_p}$. Заменяя каждый одноэлектронный формфактор на средний (21), получим вероятность полной ионизации

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

где

$$b \to bZ^*_{N_p},$$

и в общем случае ионизации $N_p - N$ электронов

$$W^{(N_p-N)+}(b) = \frac{N_p!}{(N_p-N)!N!} \times \\ \times \sum_{m=0}^{N} (-1)^m \frac{N!}{(N-m)!m!} \{p(b)\}^{N_p-N+m}, \quad (23)$$

где слагаемое, содержащее $\{p(b)\}^{N_p-N+m}$, соответствует ионизации степени $(N_p - N + m)$, и в нем

$$b \to bZ^*_{N_p-N+m}$$

(здесь $Z^*_{N_p-N+m}$ — эффективный заряд при $(N_p - N + m)$-кратной ионизации). Для получения соответствующего сечения необходимо вероятность (23) подставить в формулу (10) и проинтегрировать по всей плоскости параметра удара. Для выполнения интегрирования необходимо знать функцию $p(b)$, определяемую согласно (21). Вычисление этой функции при большом числе электронов на оболочках иона (мы будем рассматривать, например, многократную ионизацию снаряда U^{10+} при столкновении с нейтральным атомом аргона или ксенона) представляется крайне затруднительным. Однако именно то обстоятельство, что мы в дальнейшем будем рассматривать ионизацию высокой кратности ($N_p \gg 1$, $N_p - N \gg 1$), позволяет упростить задачу. Для этого воспользуемся методикой, предложенной в работах [18, 29, 30]. Интеграл (10) по d^2b с этой вероятностью можно взять асимптотически методом Лапласа в предположении, что $p(b)$ имеет один максимум, расположенный внутри либо на левой границе ($b = b_0 = 0$) интервала интегрирования. Существование хотя бы одного максимума следует из положительной определенности вероятности и очевидного обращения ее в нуль при стремлении параметра удара к бесконечности. Кроме того, при столкновении с нейтральным атомом разумно считать вероятность ионизации максимальной при близком к нулю или равном нулю параметре удара. Поэтому относительно свойств функции $p(b)$ мы сделаем стандартные [35] для применения метода Лапласа предположения. Сначала запишем

$$[p(b)]^N = \exp[N \ln(p(b)] = \exp[Nf(b)].$$

Тогда для $N \gg 1$, согласно [35], имеем

$$\int_{b_0}^{b_1} \exp(-Nf(b))g(b)\,db \approx \frac{G}{\mu}\Gamma\left(\frac{\lambda}{\mu}\right) \times \\ \times \exp(-Nf(b_0)) \left[\frac{1}{FN}\right]^{\lambda/\mu}, \quad (24)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, а G, μ, λ, F — числа, определяемые поведением функций $f(b)$ и $g(b)$ вблизи точки максимума b_0:

$$f(b) - f(b_0) \approx F(b - b_0)^\mu,$$

$$g(b) \approx G(b - b_0)^{\lambda-1}.$$

В результате сечение полной N_p-кратной ионизации снаряда равно

$$\sigma^{N_p+} = 2\pi \frac{G}{(Z^*_{N_p})^2} \frac{1}{\mu}\Gamma\left(\frac{\lambda}{\mu}\right) \times \\ \times \left[\frac{1}{FN_p}\right]^{\lambda/\mu} [p(b_0)]^{N_p}. \quad (25)$$

В случае $(N_p - 1)$-кратной ионизации вероятность равна разности двух членов, причем первый член содержит произведение $N_p - 1$ штук одноэлектронных формфакторов и соответствует $N_p - 1$ электрону в континууме (соответствующий эффективный заряд $Z^*_{N_p-1}$), а второй член содержит произведение N_p штук одноэлектронных формфакторов и соответствует N_p электронам в континууме (соответствующий заряд ядра $Z^*_{N_p}$). Интегрируя методом Лапласа каждый член в отдельности, получим сечение (N_p-1)-кратной ионизации

$$\sigma^{(N_p-1)+} = N_p \sigma^{N_p+} \times \\ \times \left[\left(\frac{Z^*_{N_0}}{Z^*_{N_p-1}} \right)^2 \left(\frac{N_p}{N_p-1} \right)^{\lambda/\mu} \frac{1}{p(b_0)} - 1 \right]. \quad (26)$$

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

$$\sigma^{(N_p-N)+} = \frac{N_p!\sigma^{N_p+}}{(N_p-N)!\,N!} \times \\ \times \sum_{m=0}^{N} (-1)^m \left(\frac{Z^*_{N_p}}{Z^*_{N_p-N+m}} \right)^2 \times \\ \times \frac{N!}{(N-m)!\,m!} \left(\frac{N_p}{(N_p-N+m)} \right)^{\lambda/\mu} \times \\ \times \{p(b_0)\}^{-N+m}, \quad (27)$$

где $Z^*_{N_p-N+m}$ — эффективный заряд при (N_p-N+m)-кратной ионизации.

Полученные формулы (25), (26) и (27) позволяют в принципе вычислить сечения ионизации любой кратности (при условии $N_p \gg 1$, $N_p - N \gg 1$) или по известным из эксперимента каким-либо двум сечениям восстановить остальные. Проще всего считать известными σ^{N_p+} и $\sigma^{(N_p-1)+}$, используя которые, легко найти $p(b_0)$:

$$\frac{1}{p(b_0)} = \left(\frac{Z^*_{N_0-1}}{Z^*_{N_p}} \right)^2 \left(\frac{N_p-1}{N_p} \right)^{\lambda/\mu} \times \\ \times \left(\frac{\sigma^{(N_p-1)+}}{N_p \sigma^{N_p+}} + 1 \right), \quad (28)$$

а затем подставить в (27). В результате сечение произвольной (N_p-N)-кратности ионизации окажется выраженным через σ^{N_p+} и $\sigma^{(N_p-1)+}$. Результат такого расчета для многократной ионизации ионов урана при столкновениях с атомами аргона и молекулой азота приведен на рис. 1–3 совместно с экспериментальными результатами, взятыми из работ [1, 2]. При расчете эффективный заряд принимался равным степени ионизации, т. е.

$$Z^*_N = Q + N,$$

где Q — начальный заряд (заряд структурного иона до столкновения) снаряда. Величина λ/μ считалась варьируемым параметром, и для столкновений U^{28+} + Ar и U^{10+} + Ar выбиралось значение $\lambda/\mu = 1.5$; а для столкновений $U^{28+} + N_2$ выбиралось значение $\lambda/\mu = 2.5$.

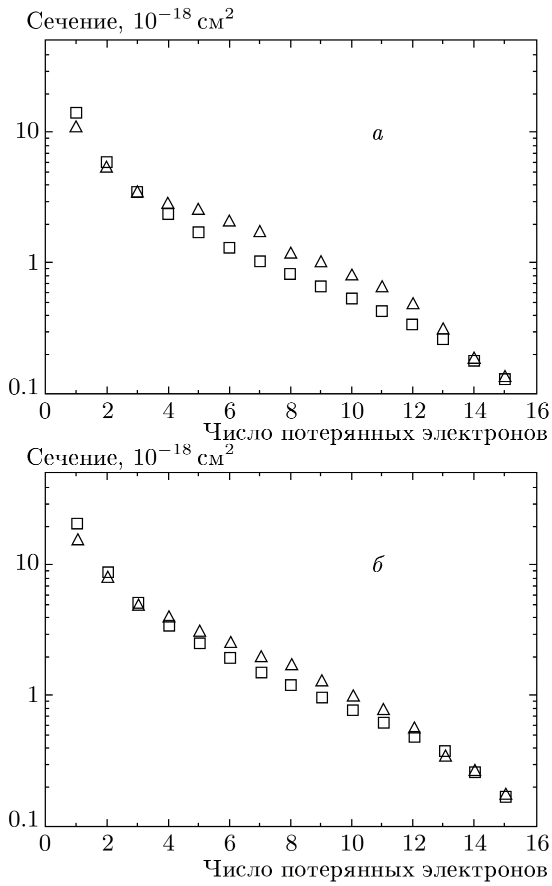

Рис. 1. Сечения многократной потери электронов ионом U^{28+}, движущимся с энергиями 6.5 (*а*) и 3.5 МэВ/нуклон (*б*), при столкновениях с атомом Ar в зависимости от числа удаленных электронов. Треугольники — экспериментальные данные [2], квадраты — результаты нашего расчета

Как видно на рисунках, согласие результатов расчета с экспериментами [1, 2] неплохое даже для ионизации малой кратности, формально лежащей вне границы ($N_p - N \gg 1$) применимости формул (25)–(28). Для проведения расчетов ионизации малой кратности, строго говоря, следует использовать формулу (18). Мы провели по этой формуле расчеты сечений ионизации водородоподобного иона Pb^{81+}, движущегося с энергией 160 ГэВ/нуклон, с несколькими многоэлектронными мишенями. Выбор объектов определялся возможностью сравнить наши расчеты с непертурбативными расчетами однократной ионизации на основе эйконального

Экспериментальные и теоретические значения сечения ионизации (в кб) водородоподобного иона Pb^{81+} для нескольких мишеней при энергии снаряда 160 ГэВ/нуклон

Мишень	Заряд ядра мишени	Эксперимент	Непертурбативный расчет [16]	Наш расчет
Sn	50	15–21	12.3	15.7
Xe	54	14.4–16.8	14.0	17.8
Au	79	42–53	27.4	35.0

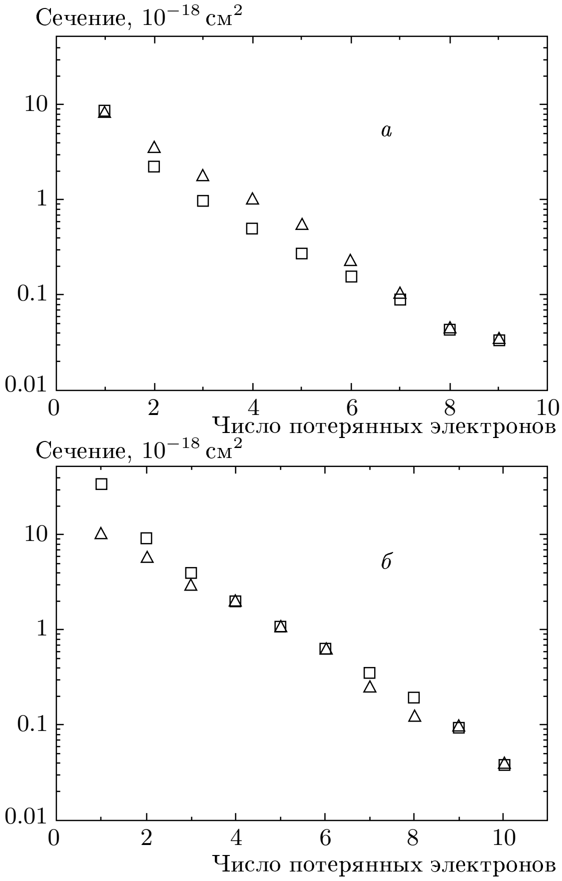

Рис. 2. Сечения многократной потери электронов ионом U^{28+}, движущимся с энергиями 6.5 (*а*) и 3.5 МэВ/нуклон (*б*), при столкновениях с молекулой N_2 в зависимости от числа удаленных электронов. Треугольники — экспериментальные данные [2], квадраты — результаты нашего расчета

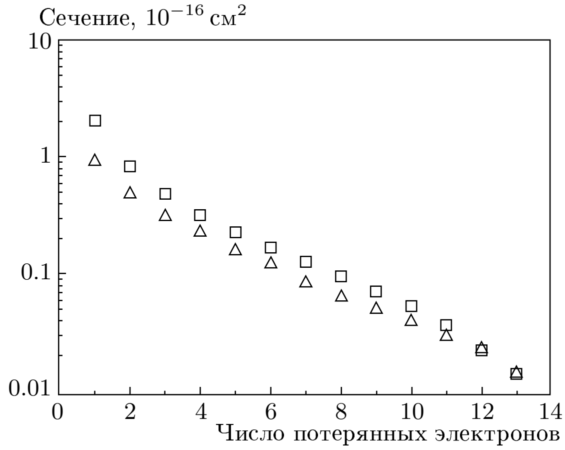

Рис. 3. Сечение многократной потери электронов ионом U^{10+}, движущимся с энергией 1.4 МэВ/нуклон, при столкновениях с атомом Ar в зависимости от числа удаленных электронов. Треугольники — экспериментальные данные [1], квадраты — результаты нашего расчета

приближения для уравнения Дирака авторов работы [16] и с результатами экспериментов [36, 37]. Соответствующие результаты приведены в таблице. Как следует из таблицы, наши результаты даже лучше согласуются с экспериментальными данными, чем соответствующие результаты громоздких непертурбативных численных расчетов [16], хотя электрон иона Pb^{81+} в основном состоянии, строго говоря, следует считать квазирелятивистским.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИНТАС (грант № INTAS-GSI 03-54-4294) и РФФИ (грант № 04-02-16177).

ЛИТЕРАТУРА

1. R. D. DuBois, A. C. F. Santos, Th. Stohlker et al., Phys. Rev. A **70**, 032712 (2004).

2. R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat et al., J. Phys. B **37**, 4539 (2004).

3. R. L. Watson, Yong Peng, V. Horvat et al., Phys. Rev. A **67**, 022706 (2003).

4. H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz et al., Phys. Rev. A **63**, 032711 (2001).
5. T. Ludziejewski, Th. Stohlker, D. C. Ionescu et al., Phys. Rev. A **61**, 052706 (2000).
6. E. Wells, I. Ben-Itzhak, K. D. Carnes et al., Phys. Rev. A **60**, 3734 (1999).
7. P. Rymuzaft, Th. Stohlker, C. L. Cocket et al., Phys. B **26**, L169 (1993).
8. Д. Бейтс, в кн. *Атомные и молекулярные процессы*, под ред. Л. М. Бибермана, В. А. Фабриканта, Мир, Москва (1964).
9. V. P. Shevelko, D. Bohne, B. Franzke, and Th. Stokler, in *Atomic Physics with Heavy Ions*, ed. by H. Beyer, V. P. Shevelko, Springer, (1999).
10. V. P. Shevelko, I. Yu. Tolstikhina, and Th. Stohlker, Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B **184**, 295 (2001).
11. A. B. Voitkiv, N. Grun, and W. Scheid, Phys. Rev. A **61**, 052704 (2000).
12. A. B. Voitkiv and B. Najjari, J. Phys. B **37**, 3339 (2004).
13. J. Eichler and W. E. Meyrhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Academic Press Inc., New York (1995).
14. A. B. Voitkiv, N. Grun, and W. Scheid, J. Phys. B **33**, 3431 (2000).
15. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, ЖЭТФ **123**, 42 (2003).
16. A. B. Voitkiv, C. Mueller, and N. Grun, Phys. Rev. A **62**, 062701 (2000).
17. J. Eichler, Phys. Rev. A **15**, 1856 (1997).
18. В. И. Матвеев, ЭЧАЯ **26**, 780 (1995).
19. А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин, УФН **125**, 377 (1978).
20. В. И. Матвеев, С. Г. Толманов, ЖЭТФ **107**, 1780 (1995).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (*нерелятивистская теория*), Наука, Москва (1989).
22. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, Мир, Москва (1967).
23. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
24. A. J. Baltz, Phys. Rev. Lett. **78**, 1231 (1997).
25. В. И. Матвеев, ТМФ **142**, 57 (2005).
26. J. Eichler, Phys. Rep. **193**, 167 (1990).
27. A. B. Voitkiv, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A **59**, 2794 (1999).
28. F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, Phys. Rev. A **36**, 467 (1987).
29. В. И. Матвеев, Х. Ю. Рахимов, ЖЭТФ **114**, 1646 (1998).
30. V. I. Matveev, Kh. Yu. Rakhimov, and D. U. Matrasulov, J. Phys. B **32**, 3849 (1999).
31. H. Berg, R. Dorner, C. Kelbch et al., J. Phys. B **21**, 3929 (1998).
32. J. Ullrich, R. E. Olson, H. Berg et al., Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B **40/41**, 149 (1989).
33. J. H. McGuire, Adv. Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 217 (1992).
34. В. И. Матвеев, М. М. Мусаханов, ЖЭТФ **105**, 280 (1994).
35. Ф. Олвер, *Введение в асимптотические методы и специальные функции*, Наука, Москва (1978).
36. H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 1190 (1998).
37. H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz et al., Phys. Rev. A **63**, 032711 (2001).