Письма в ЖЭТФ, том 82, вып. 7, с. 455 – 459

Потеря электронов быстрыми тяжелыми структурными ионами при столкновениях с атомами

В. И. Матвеев[*1)], *Д. У. Матрасулов*[+], *С. В. Рябченко*[°]

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

[+] *Отдел Теплофизики Академии наук Республики Узбекистан, 700135 Ташкент, Узбекистан*

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

Поступила в редакцию 3 августа 2005 г.

После переработки 22 августа 2005 г.

Развита непертурбативная теория многократной ионизации быстрых тяжелых структурных ионов при столкновениях с нейтральными сложными атомами, рассчитаны сечения многократной потери электронов структурными ионами урана U^{10+} (потеря до 82 электронов) и U^{28+} (потеря до 64 электронов) при столкновениях с атомами аргона, проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

PACS: 34.10.+x, 34.90.+q

Частично ободранные ионы высоких зарядов и энергий используются во многих экспериментах, проводимых на ускорителях тяжелых ионов (см., например, [1 – 3] и приведенные там ссылки). Такие ионы состоят из ядра и некоторого количества связанных электронов. 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. 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 и была отмечена необходимость рассчитывать подобные процессы непертурбативными методами. В работе [2] были проведены расчеты сечений многократной обдирки снаряда методом классических траекторий. Кватовомеханическое непертурбативное рассмотрение ионизации снаряда высокой кратности до настоящего времени не проводилось. Связано это, прежде всего, с большим количеством электронов, участвующих в неупругом столкновении, например для столкновения иона U^{10+} с атомом аргона, общее число электронов порядка 100. Тем самым необходимо рассчитывать численно значительное количество многомерных интегралов, что представляется крайне затруднительным даже для современных вычислительных возможностей. В такой ситуации представляется естественным развитие теории, существенным образом использующей многочастичность задачи. В настоящей работе развита непертурбативная теория многократной ионизации при столкновениях быстрых тяжелых структурных ионов с нейтральными сложными атомами, проведены расчеты и сравнение с экспериментом.

Нам удобно считать, что снаряд покоится в начале системы координат, а мишень движется с постоянной скоростью $\mathbf{v}$ по прямолинейной траектории, координаты ядра атома-мишени $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, где $\mathbf{b}$ – параметр удара, t – время. Для упрощения записи формул будем считать, что снаряд и мишень имеют по одному электрону (обобщение на случай многоэлектронных сталкивающихся систем будет проведено ниже). Пусть $\mathbf{r}_p$ – координаты электрона структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда 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)

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

где Z_p – заряд ядра снаряда, Z_a – заряд ядра мишени (межъядерное взаимодействие, как не вызывающее электронных переходов, опущено). Состояния электрона изолированной мишени будем описывать пол-

[1)] e-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

ным набором волновых функций $\varphi_n(\mathbf{r}_a)$, состояния электрона изолированного снаряда – полным набором волновых функций $\psi_k(\mathbf{r}_a)$. Тогда начальное состояние сталкивающихся систем $\Phi_{00} = \psi_0(\mathbf{r}_p)\varphi_0(\mathbf{r}_a)$, конечное состояние $\Phi_{kn} = \psi_k(\mathbf{r}_p)\varphi_n(\mathbf{r}_a)$. Далее мы, как и в работах [4, 5], будем считать относительную скорость столкновения v большой и поэтому возмущение (1) 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 ~ 1 как для электронов 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 $v \gg 1$. В приближении внезапных возмущений 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 [6, 7]

$$A_{0\to k}^{0\to n} = \langle\Phi_{kn}|\exp\left(-i\int_{-\infty}^{+\infty} V(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_p,t)dt\right)|\Phi_{00}\rangle. \quad (2)$$

Соответствующая вероятность $w_{0\to k}^{0\to n} = |A_{0\to k}^{0\to n}|^2$. Нас будут интересовать переходы, при которых одновременно изменяются как состояние мишени, так и состояния снаряда, причем будет интересовать вероятность каких-либо конкретных переходов в снаряде при произвольном (не фиксированном) конечном состоянии мишени. Поэтому суммируем по всем конечным (полный набор) состояниям мишени и, с учетом условия полноты системы функций $\varphi_n(\mathbf{r}_a)$, получим

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

где через $U_a(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_p,t)$ обозначена часть потенциала $V(\mathbf{r}_a,\mathbf{r}_p,t)$, описываемая вторым и третьим слагаемыми в формуле (1) и равная потенциалу, действующему со стороны мишени на электрон бомбардирующего иона. Таким образом, нами получена вероятность $W_{0\to\mathbf{k}}(\mathbf{b})$ перехода электрона снаряда из состояния ψ_0 в состояние ψ_k в зависимости от прицельного параметра $\mathbf{b}$ при произвольной судьбе мишени (просуммированная по всем конечным состояниям атома-мишени). Соответствующее сечение возбуждения получается интегрированием вероятности $W_{0\to\mathbf{k}}(\mathbf{b})$ по всей плоскости параметра удара $\mathbf{b}$.

Рассмотрим неупругие процессы при столкновениях многоэлектронных структурных ионов со сложными многоэлектронными атомами. Обозначим через N_a полное число электронов в атоме, N_p – полное число электронов в ионе. Потенциал, действующий со стороны атома (мишени) на электроны бомбардирующего иона $U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)$, есть функция не только относительных координат ядер снаряда и мишени $\mathbf{R} = (vt,\mathbf{b})$, но и положений всех электронов мишени, совокупность координат которых обозначаем $\{\mathbf{r}_a\}$, и положений всех электронов снаряда, совокупность координат которых обозначаем $\{\mathbf{r}_p\}$. Соответствующее естественное обобщение формулы (3) 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

$$W_{0\to n}(\mathbf{b}) = \langle\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})|\times$$
$$\times\left|\langle\Psi_n|\exp\left(-i\int_{-\infty}^{+\infty} U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)dt\right)|\Psi_0\rangle\right|^2\times$$
$$\times\,|\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})\rangle. \quad (4)$$

Непосредственное использование этой формулы затруднено в случае, когда снаряд и мишень являются существенно многоэлектронными, то есть $N_a \gg 1$ и $N_p \gg 1$. Однако это же обстоятельство позволяет воспользоваться следующим упрощением. За время столкновения положение 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 $U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t)$ по начальному – основному состоянию электронов мишени. Будем считать, что состояния электронов мишени описываются [8] как одноэлектронные орбитали в среднем самосогласованном поле в модели Дирака–Хартри–Фока–Слейтера. Тогда может быть предложена [8] простая аналитическая форма записи для экранирующей функции для нейтральных атомов с атомными номерами $Z_a = 1 - 92$. Поэтому потенциал, действующий со стороны мишени на электроны снаряда, может быть представлен в виде

$$U_a(\{\mathbf{r}_a\},\{\mathbf{r}_p\},t) = -\sum_{p=1}^{p=N_p}\frac{Z_a}{|\mathbf{R}(t)-\mathbf{r}_p|}\times$$
$$\times\sum_{i=1}^{i=3}A_i e^{-\alpha_i|\mathbf{R}(t)-\mathbf{r}_p|}, \qquad (5)$$

где A_i и α_i – постоянные табулированные [8] для всех атомных элементов. Таким образом, потенциал U_a в формуле (4) не зависит от координат электронов мишени $\{\mathbf{r}_a\}$ и, так как $\langle\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})|\varphi_0(\{\mathbf{r}_a\})\rangle = 1$, то вероятность (4) 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

$$W_{0\to n}(\mathbf{b}) =$$
$$= |\langle\Psi_n(\{\mathbf{r}_p\})|\exp\left(-i\sum_{p=1}^{p=N_p}\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p)\right)|\Psi_0(\{\mathbf{r}_p\})\rangle|^2, \quad (6)$$

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

$$\chi(\mathbf{b},\mathbf{r}_p) = -\frac{Z_a}{v}\sum_{i=1}^{i=3}A_iK_0(\alpha_i|\mathbf{b}-\mathbf{s}_p|), \qquad (7)$$

где $\mathbf{s}_p$ – проекция $\mathbf{r}_p$ на плоскость параметра удара $\mathbf{b}$. Другими словами (ср, [9]), (6) 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. В таком же виде искомая вероятность, следуя методике, изложенной в работе [9], для возбуждения атомов движущимися с релятивистскими скоростями протяженными зарядами, может быть получена и в приближении эйконала, применяемого к описанной задаче. Таким образом, формула (6) применима и в случае столкновений движущихся 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 [10] столкновений высокозарядных тяжелых ионов со сложными атомами, успешно примененной [11, 12] для расчетов сечений многократной (до 18-кратности) ионизации атомов Ar и Ne высокозарядными ионами урана большой энергии. Будем считать, в системе покоя снаряда, электроны снаряда нерелятивистскими до и после столкновения, различимыми и каждому электрону приписывать одноэлектронную водородоподобную волновую функцию. Тогда начальная волновая функция – $\Psi_0(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_{N_p}) = \prod_{i=1}^{N_p}\phi_i(\mathbf{r}_i)$, 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 (6), будет иметь вид (ср. [11, 12])

$$W^{(N_p-N)+}(\mathbf{b}) = \frac{N_p!}{(N_p-N)!N!}\times$$
$$\times\prod_{i=1}^{N_p-N}p_i(\mathbf{b})\prod_{j=N_p-N+1}^{N_p}(1-p_j(\mathbf{b})), \qquad (8)$$

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

$$p_i(\mathbf{b}) = \int d^3k_i\times$$
$$\times\,|\int d^3r_i\psi^*_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_i)\exp\{-i\chi_i(\mathbf{b},\mathbf{r}_i)\}\phi_i(\mathbf{r}_i)\,|^2, \qquad (9)$$

$\mathbf{k}_i$ – импульс i-го электрона в континууме. Введем как в [11, 12] $p(b)$ – среднее по оболочкам снаряда значение обобщенного одноэлектронного неупругого формфактора, имеющее смысл средней вероятности ионизации одного электрона. Тогда, заменяя в (8) каждый одноэлектронный формфактор на среднее $p(b)$, получим для вероятности полной ионизации снаряда $W^{N_p+} = [p(b)]^{N_p}$, где $b\equiv bZ^*_{N_p}$, $Z^*_{N_p}$ – эффективный заряд ядра снаряда, соответствующий полной ионизации снаряда, и в общем случае вероятность ионизации N_p-N электронов

$$W^{(N_p-N)+}(b) = \frac{N_p!}{(N_p-N)!N!}\times$$
$$\times\sum_{m=0}^{N}(-1)^m\frac{N!}{(N-m)!m!}\{p(b)\}^{N_p-N+m}, \qquad (10)$$

где слагаемое, содержащее $\{p(b)\}^{N_p-N+m}$, соответствует ионизации (N_p-N+m) степени и в нем $b\equiv bZ^*_{N_p-N+m}$; здесь $Z^*_{N_p-N+m}$ – эффективный заряд при (N_p-N+m)-кратной ионизации. Для получения сечения ионизации N_p-N электронов необходимо вероятность (10) проинтегрировать по всей плоскости параметра удара

$$\sigma^{(N_p-N)+} = 2\pi\int_0^\infty W^{(N_p-N)+}(b)bdb. \qquad (11)$$

Для выполнения интегрирования необходимо знать функцию $p(b)$. 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 [10–12]. Интеграл по параметру удара в формуле (11) с вероятностью (10) можно взять асимптотически методом Лапласа в предположении, что $p(b)$ имеет максимум, расположенный внутри либо на левой границе $b = 0$ интервала интегрирования: 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 [13] для применения метода Лапласа предположения. Сначала запишем $[p(b)]^N = \exp[N\ln(p(b)] = \exp[Nf(b)]$. Тогда для $N \gg 1$, согласно [13],

$$\int_{b_0}^{b_1} e^{-Nf(b)} g(b)db \sim \frac{G}{\mu}\Gamma(\frac{\lambda}{\mu})e^{-Nf(b_0)}\left[\frac{1}{FN}\right]^{\lambda/\mu}, \tag{12}$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция, а G, μ, λ, F – числа, определяемые поведением функций $f(b)$ и $g(b)$ вблизи точки максимума b_0: $f(b) - f(b_0) \sim F(b-b_0)^\mu$, $g(b) \sim G(b-b_0)^{\lambda-1}$. Причем, согласно (11), функция $g(b)$ появляется при интегрировании по всей плоскости параметра удара и при $b_0 \neq 0$ равна $g(b) = b$, что соответствует $G = b_0$ и $\lambda = 1$; в случае $b_0 = 0$ интегрирование в формуле (11) следует проводить по db^2, соответственно, $g(b) = 1/2$, $G = 1/2$ и $\lambda = 1$. В результате сечение полной N_p-кратной ионизации снаряда

$$\sigma^{N_p+} = 2\pi\frac{G}{(Z^*_{N_p})^2}\frac{1}{\mu}\Gamma(\frac{\lambda}{\mu})\left[\frac{1}{FN_p}\right]^{\lambda/\mu}[p(b_0)]^{N_p}. \tag{13}$$

В случае (N_p-1)-кратной ионизации вероятность – разность двух членов, интегрируя методом Лапласа каждый член в отдельности, получим сечение (N_p-1)-кратной ионизации

$$\sigma^{(N_p-1)+} = N_p\sigma^{N_p+} \times \times\left[\left(\frac{Z^*_{N_0}}{Z^*_{N_p-1}}\right)^2\left(\frac{N_p}{N_p-1}\right)^{\lambda/\mu}\frac{1}{p(b_0)} - 1\right]. \tag{14}$$

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

$$\sigma^{(N_p-N)+} = \frac{N_p!\sigma^{N_p+}}{(N_p-N)!\,N!}\times \times\sum_{m=0}^{N}(-1)^m\left(\frac{Z^*_{N_p}}{Z^*_{N_p-N+m}}\right)^2\frac{N!}{(N-m)!\,m!}\times \times\left(\frac{N_p}{(N_p-N+m)}\right)^{\lambda/\mu}\{p(b_0)\}^{-N+m}, \tag{15}$$

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

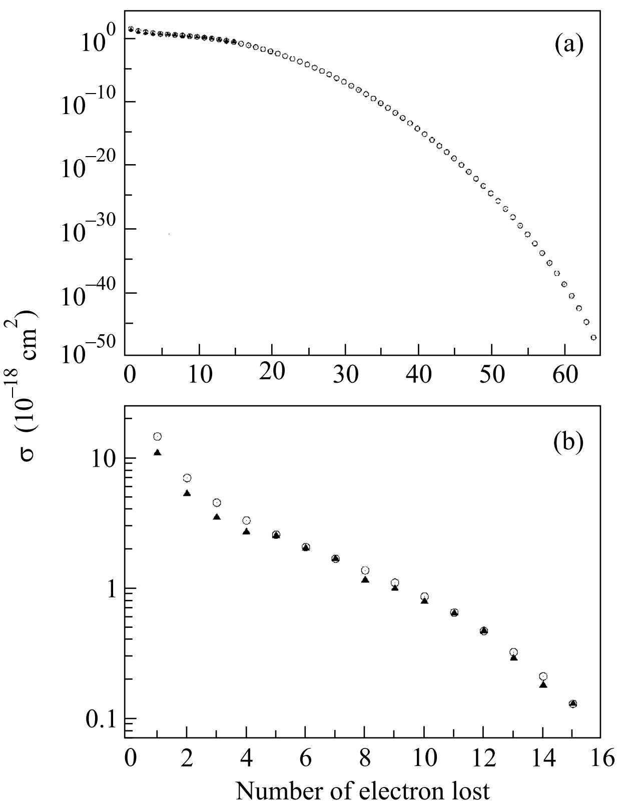

Рис.1. Сечение (10^{-18} см^2) многократной потери электронов ионом U^{28+}, движущимся с энергией 6.5 МэВ/u, при столкновениях с атомом Ar в зависимости от числа удаленных электронов; треугольники – экспериментальные данные [2], кружки – результаты нашего расчета. (a) Сечение в полной области возможных значений числа удаленных электронов: от минимального значения 1 до максимального 64; (b) сечение в узкой области значений числа удаленных электронов от 1 до 15, для которой проведены измерения [2]

Полученные формулы (13), (14) и (15) 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. Следует отметить, что выбор пары сечений, считающихся известными из эксперимента, может быть произвольным и опре-

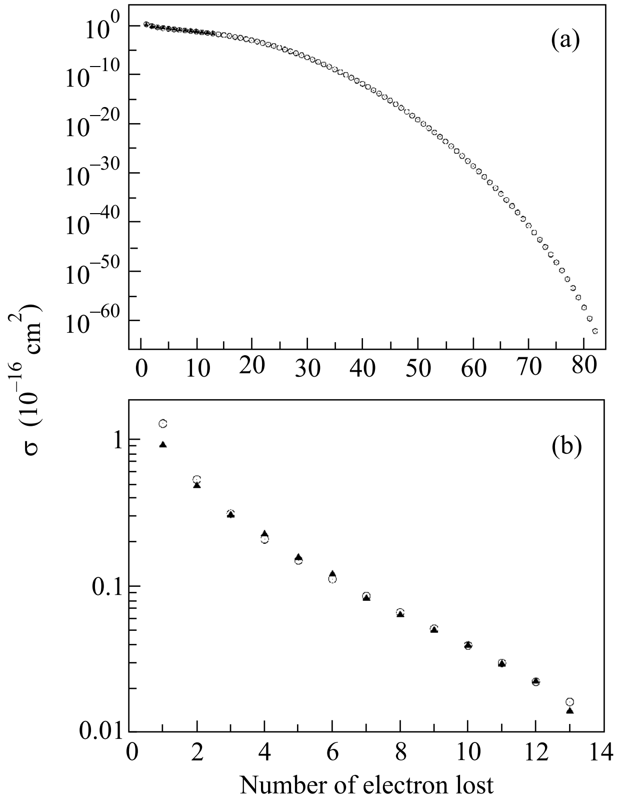

Рис.2. Сечение (10^{-16} см^2) многократной потери электронов ионом U^{10+}, движущимся с энергией 1.4 МэВ/u, при столкновениях с атомом Ar в зависимости от числа удаленных электронов; треугольники – экспериментальные данные [1], кружки – результаты нашего расчета. (a) Сечение в полной области возможных значений числа удаленных электронов: от минимального значения 1 до максимального 82; (b) Сечение в узкой области значений числа удаленных электронов от 1 до 13, для которой проведены измерения [1]

деляется лишь условиями $N_p - N \gg 1$ применимости формул (13)–(15). Результат именно такого расчета для многократной ионизации ионов урана при столкновениях с атомами аргона приведен на рис.1 и 2 совместно с экспериментальными данными [1, 2], при расчете эффективный заряд принимался равным степени ионизации, то есть $Z_N^* = Q + N$, Q – начальный заряд (заряд структурного иона до столкновения) снаряда. Величина λ/μ считалась подбираемым параметром и для столкновений $U^{28+} + Ar$, мы выбрали $\lambda/\mu = 1.1$ и считали известными σ^{12+} и σ^{15+}; для $U^{10+} + Ar$ $\lambda/\mu = 1.5$ и считали известными σ^{10+} и σ^{12+}.

Каждый рисунок состоит из двух частей (a) и (b): часть (a) представляет сечения в зависимости от числа удаленных электронов в широком интервале (полной области) от минимального значения – удаления одного электрона до максимально возможного значения числа удаленных электронов (например, в случае U^{10+} максимально возможное число удаленных электронов равно 82); часть (b) представлена для удобства сравнения расчета с экспериментом и содержит значения сечений, для которых имеются экспериментальные данные: поскольку широкий диапазон изменения величин, представленных в части (a), не позволяет корректно отобразить соответствующую относительно узкую область. Как видно из рисунков, согласие результатов расчета с экспериментами [1, 2] неплохое даже для ионизации малой кратности, формально лежащей вне границы ($N_p - N \gg 1$) применимости формул (13)–(15). Для проведения расчетов ионизации малой кратности, строго говоря, следует использовать формулу (6).

Авторы благодарят фонд ИНТАС (грант # INTAS-GSI 03-54-4294) и программу Университеты России (грант # 01.01.478) за финансовую поддержку работы.

---

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. A. B. Voitkiv, N. Grun, and W. Scheid, J. Phys. B **33**, 3431 (2000).
5. A. B. Voitkiv, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A **59**, 2794 (1999).
6. J. Eichler, Phys. Rev. A **15**, 1856 (1977).
7. A. M. Дыхне, Г. Л. Юдин, УФН **125**, 377 (1978).
8. F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, Phys. Rev. A **36**, 467 (1987).
9. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, ЖЭТФ **123**, 42 (2003).
10. В. И. Матвеев, ЭЧАЯ **26**, 780 (1995).
11. В. И. Матвеев, Х. Ю. Рахимов, ЖЭТФ **114**, 1646 (1998).
12. V. I. Matveev, Kh. Yu. Rakhimov., and D. U. Matrasulov, J. Phys. B **32**, 3849 (1999).
13. Ф. Олвер, *Введение в асимптотические методы и специальные функции*, М.: Наука, 1978.