

Потери энергии быстрыми тяжелыми структурными ионами при кратных столкновениях с двухатомными молекулами

В. И. Матвеев¹⁾, Е. С. Гусаревич, С. В. Рябченко, Д. Н. Макаров

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

Поступила в редакцию 17 июня 2008 г.

После переработки 7 июля 2008 г.

Проведены непертурбативные расчеты эффектов кратности столкновений и ориентации оси молекулы относительно направления движения снаряда в процессах потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами, с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительной разнице между потерями энергии при параллельной и перпендикулярной ориентациях мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен. Аналогичные выводы сделаны и для сечений обдирки водородоподобных ионов.

PACS: 34.50.Bw

1. Введение. Сочетание фундаментальности и прикладных возможностей физики высокозарядных ионов является стимулирующим фактором большинства современных исследований. Значительный интерес вызывает обязательное следствие эффектов действия сильных полей высокозарядных структурных ионов – происходящие с заметными сечениями одновременные многоэлектронные переходы в снаряде и мишени при быстрых ион-атомных и ион-молекулярных столкновениях (см., например, [1, 2] и приведенные там ссылки). Теория одновременных возбуждений или ионизации снаряда и мишени, основанная на борновском приближении, построена в работах, приведенных в обзорах [3, 4] (см. также работу [5]). При использовании ионов высоких зарядов теория возмущений неприменима [6] даже для релятивистских скоростей столкновения, такие непертурбативные эффекты наблюдались еще в экспериментах [7]. Непертурбативное описание, позволяющее провести учет одновременных многоэлектронных переходов в снаряде и мишени, предложено в работе [8]. В данной работе мы будем ограничиваться столкновениями быстрых высокозарядных структурных ионов со сложными мишенями – молекулами, при расчетах потерь энергии на которых эффекты одновременных возбуждений и ионизации электронов снаряда и мишени до настоящего времени не учитываются, хотя часто экспериментальные исследования (см., например, [1] и [2]) проводятся именно на молекулярных мишенях. К числу малоисследованных следует отнести эффекты ориентации молекулы-

мишени относительно направления движения снаряда. Для учета влияния на процессы потерь энергии ориентационных молекулярных эффектов развито (см., например, [9, 10]) в первом порядке теории возмущений обобщение теории Бете. К числу ориентационных эффектов следует отнести и эффекты кратности столкновений, очевидно, не допускающих описания в рамках первого борновского приближения. На практике обычно измеряют потери энергии при движении снаряда в среде, когда снаряд испытывает ряд столкновений с атомами мишени. Такие столкновения приводят к возбуждению и ионизации как атомов среды, так и снаряда. Мы можем избежать необходимости рассмотрения эволюции возбужденного состояния снаряда в среде, если сделаем предположение, что ион, возбужденный в результате столкновения с каким-либо атомом среды, успевает релаксировать до столкновения со следующим атомом. При этом средний равновесный заряд движущего в среде иона оказывается не зависящим от плотности среды [11]. Таким образом, в этом случае время между двумя последовательными столкновениями T (по порядку величины равно длине свободного пробега, деленной на скорость снаряда) считается большим по сравнению со временем жизни возбужденных состояний снаряда, а длина свободного пробега снаряда в среде предполагается много большей среднего расстояния между соседними атомами среды (или молекулами, если среда состоит из молекул). Однако даже в этом случае для среды, состоящей, например, из двухатомных молекул, ситуация (с необходимостью учета вклада возбужденных состояний снаряда) меняется, если предположить на-

¹⁾e-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

личие “выстроенности” молекул среды вдоль какого-либо направления. Нетрудно убедиться, что если направление движения снаряда близко по ориентации с осью молекулы, то в сечения возбуждения и ионизации снаряда заметную поправку может вносить учет двух последовательных столкновений иона с атомными остовами, входящими в состав одной молекулы. Действительно, t – время между двумя такими столкновениями, очевидно, намного меньше T – времени преодоления средней длины свободного пробега снаряда в среде. Причем, для движущихся с релятивистской скоростью снарядов t порядка 10^{-19} с. Очевидно, что это время намного меньше среднего времени жизни возбужденных состояний структурного иона (снаряда) относительно радиационных и оже-распадов. В этом случае при расчете сечений возбуждения и ионизации снаряда необходимо учитывать вклад двухступенчатых процессов, когда снаряд, возбужденный в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со вторым ядром молекулы, находясь в возбужденном состоянии. Далее, поскольку эффективный размер возбужденных состояний больше размера основного состояния, постольку сечения возбуждения и ионизации из возбужденного состояния оказываются больше сечений возбуждения и ионизации из основного состояния, и следует ожидать заметного вклада от учета последовательных столкновений. Можно легко оценить величину вклада эффекта кратности столкновений такого рода на сечения неупругих процессов в электронных оболочках снаряда и на соответствующие процессы потерь энергии. Действительно, эффективное торможение пропорционально [12, 13] квадрату переданного при столкновении импульса q^2 , пусть при последовательном столкновении с двумя центрами электроны снаряда получают импульс q_1 от первого центра и импульс q_2 от второго центра. Тогда $q^2 = (q_1 + q_2)^2$. При параллельной ориентации оси молекулы ион сталкивается с двумя атомами молекулы и $q_1 = q_2$, поэтому $q^2 = q_{||}^2 = (2q_1)^2$. При перпендикулярной ориентации оси молекулы движущийся по прямолинейной траектории ион сталкивается либо с одним атомом молекулы, либо с другим, тогда либо $q_1 \neq 0$ и $q_2 = 0$, либо $q_1 = 0$ и $q_2 \neq 0$, в этих случаях либо $q^2 = q_{\perp 1}^2 = (q_1)^2$, либо $q^2 = q_{\perp 2}^2 = (q_2)^2$, что после суммирования по всем траекториям приводит примерно к двухкратной разнице между значениями эффективного торможения, соответствующими параллельной и перпендикулярной ориентациям молекулы. Подчеркнем, что эффект кратности столкновений относится только к по-

терям энергии на возбуждение электронных оболочек снаряда, тогда как потери энергии на возбуждение электронов мишени не изменяются за счет кратности столкновения. Действительно, в этом случае при последовательном столкновении с каждым из двух атомов молекулы импульсы q_1 и q_2 передаются разным атомам, поэтому их не следует складывать для вычисления общих потерь: электроны первого атома получают импульс q_1 , а второго q_2 , поэтому потери энергии пропорциональны $q_1^2 + q_2^2$. Ясно, что аналогичные аргументы справедливы и для столкновений достаточно быстрых структурных ионов с молекулами, состоящими из более чем двух атомов, либо с более сложными мишенями (например, с нанотрубками), лишь бы распределения зарядов в мишени было бы выстроенным вдоль какого-либо направления. Именно подобные эффекты при столкновениях с двухатомными молекулами рассматриваются в настоящей работе на основе обобщения ранее развитой [12, 13] нами непертурбативной теории потерь энергии быстрыми тяжелыми структурными ионами при столкновениях с нейтральными сложными атомами, с учетом всевозможных, в том числе, многократных возбуждений и ионизации как снаряда, так и мишени.

2. Сечения неупругих процессов. В качестве мишеней в данной работе мы будем рассматривать двухатомные молекулы, состоящие из многоэлектронных атомов. В этом случае электронная плотность в молекуле мало отличается от электронной плотности изолированных атомов, поскольку при их объединении в молекулу наибольшее изменение претерпевает электронная плотность внешних – валентных электронов, число которых не велико по сравнению с общим числом атомных электронов. Электронная плотность же подавляющего количества остальных – остовных электронов – искажается слабо. При непертурбативных неупругих процессах, происходящих в электронных оболочках снаряда и сечения которых выражаются [8, 12, 13] через электронную плотность мишени, влияния “молекулярности” электронной структуры следует ожидать незначительным по сравнению с сечениями в двухатомной мишени, формально составленной из изолированных атомов, без искажения их электронных оболочек. Для иллюстрации и выделения эффекта кратности столкновений мы будем описывать сложную двухатомную молекулу, образованную из двух многоэлектронных атомов, двумя способами. 1. Будем считать молекулу состоящей из двух изолированных и невзаимодействующих между собой атомов, расположенных на равновесном для данной молекулы расстоянии. 2. В

качестве более реалистичной модели мы будем описывать распределение электронной плотности в молекуле на основе метода Томаса-Ферми.

А. Столкновение с изолированным атомом. Сначала выберем в качестве мишени изолированный многоэлектронный атом. Согласно [8, 12, 13], сечение перехода электронов снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала:

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

где \mathbf{v} – скорость снаряда, U – взаимодействие электронов снаряда с мишенью, описываемой как протяженный заряд, ось x направлена по \mathbf{v} , мишень неподвижна и расположена в начале системы координат, так что $\mathbf{R} = (\mathbf{b}, X)$ – координаты ядра снаряда. Если мишенью является изолированный атом, то в модели [14] Дирака-Хартри-Фока-Слейтера

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

где A_i и α_i – постоянные табулированные [14] для всех атомных элементов, Z_A – заряд ядра атома, N_P – полное число электронов в ионе (снаряд), \mathbf{r}_p ($p = 1, 2, \dots, N_P$) – координаты электронов структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда. Тогда эйкональная фаза равна [8]

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

где \mathbf{s}_p – проекция \mathbf{r}_p на плоскость параметра удара \mathbf{b} . Причем [12], формула (1) с эйкональной фазой (3) применима и в случае релятивистских столкновений и описывает сечение перехода электронов снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе электронов мишени с небольшой относительной погрешностью $\sim 1/N_A$, N_A – полное число электронов в мишени, для многоэлектронных мишеней $N_A \gg 1$.

Будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд Z_P которых много больше единицы (например, для иона железа Fe^{10+} , $Z_P = 10$), тогда характерный размер электронной шубы иона много меньше характерного размера нейтрального атома-мишени, и можно считать среднее поле атома однородным на размерах иона, что соответ-

ствует разложению эйкональной фазы (3) по малым r_p/b с использованием формулы

$$K_0(\alpha_i |\mathbf{b} - \mathbf{s}_p|) \approx K_0(\alpha_i b) + K_1(\alpha_i b) \frac{\alpha_i \mathbf{b} \mathbf{s}_p}{b}. \quad (4)$$

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

$$\sigma = \int \left| \langle k | \exp \left(-i \mathbf{q} \sum_{p=1}^{N_P} \mathbf{r}_p \right) | 0 \rangle \right|^2 d^2 \mathbf{b}, \quad (5)$$

где вектор \mathbf{q} имеет смысл [12] среднего (по положениям электронов мишени) импульса, передаваемого электронам иона при его столкновении с атомом при значении параметра удара \mathbf{b} , и равен

$$\mathbf{q} = \frac{2Z_A}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b) \frac{\mathbf{b}}{b}. \quad (6)$$

Б. Столкновения с двухатомной молекулой. Рассмотрим столкновение водородоподобного иона (снаряд) с двухатомной молекулой (мишень). Сечение перехода электрона снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе электронов молекулы (мишени) будем вычислять в приближении эйконала по формуле (1), но теперь U – взаимодействие электронов снаряда с мишенью – молекулой, описываемой как протяженный заряд. Потенциал, создаваемый двухатомной молекулой в точке наблюдения \mathbf{r} , может быть представлен в виде [15]

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Z_1}{r_1} \Phi(r_1) + \frac{Z_2}{r_2} \Phi(r_2), \quad (7)$$

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

$$\Phi(r) = \frac{1}{1 + a_1 r + a_2 r^{3/2} + a_3 r^2 + a_4 r^3}, \quad (8)$$

где a_1, a_2, a_3, a_4 – коэффициенты, значения которых для нескольких молекул при различных межатомных расстояниях приведены в работе [15]. В статье [15] производился расчет для молекулы азота N_2 до $L=1.5$, что не достаточно для реальной молекулы, в которой равновесное расстояние между ядрами равно 2.07 ат.ед. Поэтому нами был произведен расчет для $L = 2.07$ и получено: $a_1 = 3.1531, a_2 = -1.7086, a_3 = 2.2445, a_4 = 0.1008$. В пределах данного пункта будем считать, что прицельный параметр снаряда \mathbf{b} отсчитывается от первого ядра молекулы (при произвольной фиксированной ориентации

Сравнение сечений для случая параллельного и перпендикулярного расположений молекулы (для реакции $\text{Fe}^{25+} + \text{N}_2$)

E , МэВ/а.м.е.	$\sigma_{ }$, 10^{-3} а.е.	σ_{\perp} 10^{-3} а.е.	$(\sigma_{ } - \sigma_{\perp})/\sigma_{ }$ %	$\bar{\sigma}$ 10^{-3} а.е.
20	10.0934; 9.96888	6.01302; 5.93306	68	6.0322; 5.9520
50	4.75026; 4.69879	2.77067; 2.73485	72	2.7757; 2.7399
100	2.75241; 2.72533	1.58624; 1.55626	75	1.5904; 1.5603
300	1.29959; 1.28834	0.73913; 0.72702	77	0.7403; 0.7322
500	0.99376; 0.98552	0.56293; 0.55406	78	0.5644; 0.5525
1000	0.76766; 0.76155	0.43325; 0.42548	79	0.4342; 0.4260

оси молекулы по отношению к направлению движения иона), то есть $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1$. Введем радиус-векторы, задающие положение электрона иона-снаряда относительно первого и второго центров молекулы так: $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \mathbf{r}_p$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \mathbf{L} + \mathbf{r}_p$, где $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b}_1)$ – радиус-вектор ядра снаряда относительно первого центра мишени, \mathbf{L} – вектор оси молекулы, задающий положение второго центра молекулы относительно первого, так что $L = |\mathbf{L}|$ – расстояние между ядрами молекулы, \mathbf{r}_p – радиус-вектор электрона, принадлежащего налетающему иону, относительно ядра иона. Тогда потенциал U , входящий в (1), согласно (7) равен $U = -\varphi(\mathbf{r}_p)$. Далее будем предполагать, что налетающий ион имеет достаточно большой заряд, $Z_p \gg 1$, а так как $r_p \sim 1/Z_p$, то U можно разложить по малым r_p . Тогда эйкональная фаза равна

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U \frac{dX}{v} = -\frac{i}{v}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\mathbf{r}, \quad (9)$$

где \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 – импульсы, передаваемые электрону иона при столкновении с первым и вторым центрами двухатомной молекулы:

$$\mathbf{q}_j = \mathbf{b}_j \frac{Z_1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Phi(R_j)}{R_j} \left\{ \frac{1}{R_j^2} - \frac{\Phi(R_j)}{R_j} \times \left(a_1 + \frac{3}{2}a_2\sqrt{R_j} + 2a_3R_j + 3a_4R_j^2 \right) \right\} dX, \quad (10)$$

где $j = 1, 2$; $R_1 = \sqrt{X^2 + b_1^2}$; $R_2 = \sqrt{(X - L_{||})^2 + b_2^2}$; здесь $L_{||}$ – проекция оси молекулы \mathbf{L} на направление движения иона, и мы ввели параметр удара \mathbf{b}_2 относительно второго ядра молекулы, связанный с \mathbf{b}_1 соотношением $\mathbf{b}_1 = \mathbf{L}_{\perp} + \mathbf{b}_2$, где \mathbf{L}_{\perp} – проекция оси молекулы \mathbf{L} на плоскость параметра удара. В результате выражение (1) для сечения преобразуется к виду

$$\sigma = \int \left| \langle k | 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)\mathbf{r} \right\} | 0 \rangle \right|^2 d^2\mathbf{b}_1. \quad (11)$$

Отметим, что представление (8) справедливо и в случае, когда мы будем формально представлять многоэлектронную молекулу как два изолированных атома, расположенных на равновесном для данной молекулы расстоянии L . В этом случае экранирующая функция Φ в формуле (8), согласно (2), равна

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

Соответственно, для модели молекулы, составленной из изолированных атомов, согласно (6),

$$\mathbf{q}_j = \frac{2Z_A}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b) \frac{\mathbf{b}_j}{b_j}. \quad (12)$$

Вычисляемое по формуле (11) сечение σ является функцией от ориентации оси молекулы, то есть от вектора \mathbf{L} или $\sigma = \sigma(\mathbf{L})$. Для описания ориентации вектора \mathbf{L} используем сферическую систему координат с углами ϕ , θ и осью, направленной вдоль скорости движения снаряда, таким образом, θ – угол отклонения \mathbf{L} от направления \mathbf{v} . На практике обычно измеряют сечения при хаотичной ориентации молекул. Поэтому введем усредненную по направлениям оси молекулы величину $\bar{\sigma}$ в предположении равномерного распределения по ориентациям оси молекулы:

$$\bar{\sigma} = \int \sigma(\mathbf{L}) \frac{d\Omega}{4\pi} = \int_0^{\pi} \sigma(\theta) \frac{1}{2} \sin \theta d\theta, \quad (13)$$

где $\sigma(\theta)$ – среднее по углу ϕ значение $\sigma(\mathbf{L})$. Дополнительно введем обозначения $\sigma_{||}$ – сечение $\sigma(\theta = 0)$; σ_{\perp} – сечение $\sigma(\theta = \pi/2)$. Нами были проведены расчеты сечений потери электрона водородоподобным ионом Fe^{25+} при столкновениях с молекулой азота N_2 для различных случаев ориентации молекулы. В таблице столбец 1 – энергия иона в МэВ на атомную единицу массы, второй и третий столбцы – сечения $\sigma_{||}$ и σ_{\perp} в 10^{-3} атомных единиц, четвертый

столбец – их относительная разница $(\sigma_{\parallel} - \sigma_{\perp})/\sigma_{\perp}$ в процентах (σ_{\parallel} и σ_{\perp} в модели Томаса–Ферми), пятый столбец – среднее по всем ориентациям оси молекулы сечение $\bar{\sigma}$ в 10^{-3} атомных единиц. Для каждого из сечений приведены по два значения: первое для молекулы, состоящей из двух изолированных атомов; второе – для молекулы в модели Томаса–Ферми. Как видно из таблицы, сечения изменяются незначительно при изменении модели многоэлектронной молекулы. Сечение в “параллельном” случае примерно в 1.7–1.8 раз превосходит сечение при “перпендикулярном” расположении молекулы. Отметим, что по своему смыслу σ_{\perp} описывает случаи, когда ион сталкивается либо с одним атомом молекулы, либо с другим, поэтому σ_{\perp} представляет собой удвоенное значение сечения обдирки снаряда при столкновении с одним изолированным атомом. Среднее сечение $\bar{\sigma}$ незначительно отличается от σ_{\perp} . Таким образом, при хаотической ориентации мишени вклад кратности столкновений приводит к незначительному изменению сечения по сравнению с удвоенным сечением на одном изолированном атоме. Мы рассчитали также зависимость σ от угла ориентации оси молекулы θ , то есть $\sigma = \sigma(\theta)$. Эффект кратности столкновений в зависимости от ориентации оси молекулы удобно характеризовать относительным вкладом $\delta(\theta) = (\sigma(\theta) - \sigma_{\perp})/\sigma_{\perp}$. Результаты расчетов для столкновений ионов железа Fe^{25+} с молекулой азота N_2 приведены на рис.1, где пунк-

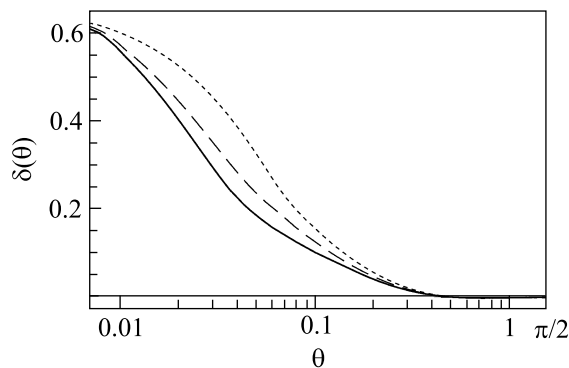


Рис.1. Относительный вклад кратных столкновений $\delta(\theta) = (\sigma(\theta) - \sigma_{\perp})/\sigma_{\perp}$ в сечение однократной обдирки водородоподобного иона Fe^{25+} при столкновении с молекулой азота в зависимости от угла (θ в радианах) ориентации оси молекулы: пунктир – значения $\delta(\theta)$ при энергии иона 20 МэВ/нуклон, штриховая кривая – значения $\delta(\theta)$ при энергии иона 100 МэВ/нуклон, сплошная линия – $\delta(\theta)$ при энергии иона 1000 МэВ/нуклон

тир – значения $\delta(\theta)$ в зависимости от угла ориентации молекулы θ при энергии иона 20 МэВ/нуклон,

штриховая кривая – значения $\delta(\theta)$ при энергии иона 100 МэВ/нуклон, сплошная линия – $\delta(\theta)$ при энергии иона 1000 МэВ/нуклон. Как и следовало ожидать, $\sigma(\theta)$ заметно возрастает в интервале углов θ , меньших 10^{-1} .

3. Эффективное торможение. Согласно [12, 13], мы можем записать потери энергии с учетом всевозможных, в том числе многоэлектронных, возбуждений и ионизации мишени и снаряда в виде

$$\kappa = \kappa^{(p)} + \kappa^{(t)}, \quad (14)$$

где $\kappa^{(p)}$ – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов структурного иона мишени при произвольной (то есть, полученной путем суммирования по полному набору всех конечных состояний электронов мишени) судьбе электронов мишени; аналогично, $\kappa^{(t)}$ – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов мишени структурным ионом при произвольной судьбе электронов снаряда. Согласно результатам предыдущего разд., все дальнейшие выкладки мы можем проводить для модели молекулы, составленной из двух изолированных атомов: ввиду наглядности аналитических вычислений и незначительного изменения результатов при использовании модели Томаса–Ферми для описания молекулы. Причем, достаточно вычислить только $\kappa^{(p)}$, поскольку, как указано выше, в $\kappa^{(t)}$ отсутствует вклад кратности столкновений.

А. Столкновение с изолированным атомом. Приведем несколько необходимых для дальнейшего изложения формул из статей [12, 13]. В качестве снаряда будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд Z_P которых много больше единицы, что соответствует возможности разложения потенциала U в формуле (1) по малым r_p/b . Область параметров удара, в которой справедливо такое разложение, мы будем называть далее областью больших параметров удара: $b_0 < b < +\infty$, где [12, 13] $b_0 \sim 1/Z_P$. Точное значение параметра обрезания b_0 для нас несущественно, поскольку (см. ниже формулы (16) и (17)) зависимость $\kappa^{(p)}$ от b_0 оказывается логарифмической и исчезает при вычислении $\kappa^{(p)}$ во всей области параметров удара.

Рассмотрим сначала $\kappa^{(p)}(b_0 < b < +\infty)$ – вклад области больших параметров удара в эффективное торможение $\kappa^{(p)}$, когда сечение возбуждения снаряда описывается формулой (5) и $\kappa^{(p)}(b_0 < b < +\infty)$ равно [12, 13]:

$$\kappa^{(p)}(b_0 < b < +\infty) = \frac{N_P}{2} \int_{b_0}^{+\infty} q^2 2\pi b db. \quad (15)$$

Подставляя сюда значение \mathbf{q} из (6) получим [12, 13]

$$\begin{aligned} \kappa^{(p)}(b_0 < b < +\infty) &= \\ &= \frac{4\pi Z_A^2 N_P}{v^2} \left(\sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln \frac{2}{\alpha_i b_0 \eta \sqrt{e}} + \right. \\ &+ \left. \sum_{i,j=1, (i \neq j)}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Таким образом, в плоскости параметра удара точка $b = 0$ является точкой неинтегрируемой особенностью в подынтегральном выражении (15) при приближении к которой на расстояние $b \sim 1/Z_p$ происходит нарушение применимости разложения (4), это приводит к логарифмической $\ln(1/b_0)$ зависимости $\kappa^{(p)}(b_0 < b < +\infty)$ в формуле (16) от параметра обрезания b_0 .

Рассмотрим теперь вычисление $\kappa^{(p)}$ в области малых параметров удара: $0 < b < b_0$. При столкновениях с малыми параметрами удара или большими переданными импульсами можно считать электроны структурного иона свободными при рассеянии на голем ядре атома заряда Z_A и воспользоваться подходом Линхарда-Соренсена [16]. Тогда, согласно численным расчетам [16], до $\gamma \leq 10$ и зарядов иона ≤ 92 , эффективное торможение можно представить в часто используемом виде:

$$\begin{aligned} \kappa^{(p)}(0 < b < b_0) &= \frac{4\pi Z_A^2 N_P}{v^2} \times \\ &\times \left(\ln(b_0 \gamma v \eta) - \frac{1}{2} \beta^2 + \Delta L_{Bloch}^{Z_A} + \Delta L_{Mott}^{Z_A} \right), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v/c$, $\eta = 1.781$, $\Delta L_{Bloch}^{Z_A}$ и $\Delta L_{Mott}^{Z_A}$ – поправки Блоха и Мотта (эффективно отличающиеся от нуля лишь при малых параметрах удара [16] (см., также [17])) и зависящие от заряда Z_A , в поле которого рассеиваются принадлежащие структурному иону электроны. Эффективное торможение $\kappa^{(p)}$ получаем, суммируя вклады (16) и (17) от двух областей параметра удара. В результате [12, 13]

$$\begin{aligned} \kappa^{(p)} &= \frac{4\pi Z_A^2 N_P}{v^2} \left[\ln 2\gamma v - \frac{1}{2} \beta^2 + \sum_{i=1}^3 A_i^2 \ln \frac{1}{\alpha_i \sqrt{e}} + \right. \\ &+ \sum_{i,j=1, (i \neq j)}^3 A_i A_j \frac{\alpha_j^2 \ln \alpha_j - \alpha_i^2 \ln \alpha_i}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} + \\ &\left. + \Delta L_{Bloch}^{Z_A} + \Delta L_{Mott}^{Z_A} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

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

Б. Столкновения с двухатомной молекулой.

Выберем в качестве мишени двухатомную молекулу, состоящую из двух многоэлектронных атомов. Как и в предыдущем разд., рассмотрим $\kappa^{(p)}$ – потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов снаряда. Область параметров удара, в которой справедливо представление (9) для эйкональной фазы, мы будем называть далее областью больших параметров удара и будем обозначать буквой C . Рассмотрим вклад области C в эффективное торможение, формальные выкладки при условии однородности поля на размерах снаряда совпадают со случаем столкновения с одноатомной мишенью. В результате, вклад в эффективное торможение $\kappa^{(p)}$ области C имеет вид

$$\kappa^{(p)}(C) = \frac{N_P}{2} \int_C \mathbf{q}^2 d^2 \mathbf{b}. \quad (19)$$

Подставляя сюда, согласно (9), $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$, представим $\kappa^{(p)}(C)$ в виде

$$\kappa^{(p)}(C) = \frac{N_P}{2} \int (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)^2 d^2 \mathbf{b}. \quad (20)$$

Для удобства перепишем (20) так:

$$\kappa^{(p)}(C) = \kappa_1^{(p)}(C_1) + \kappa_2^{(p)}(C_2) + \Delta \kappa^{(p)}, \quad (21)$$

где область C_1 , как и в формуле (15), представляет собой всю плоскость параметра удара \mathbf{b}_1 , отсчитываемого от первого центра молекулы с вырезанным кругом некоторого радиуса $b_0 \sim 1/Z_p$, описанным вокруг точки расположения первого центра молекулы в плоскости параметра удара.

$$\kappa_1^{(p)}(C_1) = \frac{N_P}{2} \int_{b_0}^{+\infty} q_1^2 2\pi b_1 db_1, \quad (22)$$

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

$$\kappa_2^{(p)}(C_2) = \frac{N_P}{2} \int_{b_0}^{+\infty} q_2^2 2\pi b_2 db_2 \quad (23)$$

имеет смысл потерь энергии при столкновении со вторым атомом молекулы. Для одинаковых атомов $\kappa_1^{(p)}(C_1) = \kappa_2^{(p)}(C_2)$ и вклад от области малых параметров удара, очевидно, также одинаков и выражается формулой (17). В результате $\kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)}$ равны удвоенным потерям (18) на одном изолированном атоме.

В формуле (21) слагаемое

$$\Delta\kappa^{(p)}(C_\Delta) = \frac{N_P}{2} \int 2(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)d^2\mathbf{b}, \quad (24)$$

очевидно, имеет смысл потерь энергии за счет кратности столкновений, поскольку $\Delta\kappa^{(p)}(C_\Delta) \rightarrow 0$ при формальном устремлении к бесконечности расстояния между атомами (за исключением, см. ниже, требующего отдельного рассмотрения случая $\mathbf{L}||\mathbf{v}$), входящими в состав молекулы, тогда как при таком предельном переходе $\kappa_1^{(p)}$ и $\kappa_2^{(p)}$ мало изменяются либо остаются неизменными (в модели молекулы, составленной из изолированных атомов). Выбор области интегрирования C_Δ в формуле (24) по параметру удара \mathbf{b} нуждается в дополнительных комментариях. Геометрически эта область представляет собой всю плоскость параметра удара с двумя вырезанными кругами некоторого радиуса $b_0 \sim 1/Z_p \ll 1$, описанными вокруг точек расположения проекций центров молекулы в плоскости параметра удара, обозначим первый круг a_1 второй – a_2 . Пусть ось молекулы расположена перпендикулярно к направлению движения иона, тогда центры кругов a_1 и a_2 расположены на расстоянии $L \sim 1 \gg b_0$ друг от друга и круги не перекрываются. Согласно (12), при приближении к центру круга a_1 импульс $q_1 \rightarrow \infty$, а импульс q_2 остается конечным, аналогично при приближении к центру круга a_2 импульс $q_2 \rightarrow \infty$, а импульс q_1 остается конечным, образуя интегрируемые особенности (в точках $b_1 = 0$ и $b_2 = 0$ плоскости параметра удара) в интеграле (24). Такое положение дел с особенностями в подынтегральном выражении в (24) сохраняется и при повороте оси молекулы \mathbf{L} , и лишь при $\mathbf{L}||\mathbf{v}$ центры кругов a_1 и a_2 совпадают друг с другом и особенности q_1 и q_2 сливаются, образуя неинтегрируемую особенность в интеграле (24). В вышеприведенном поведении подынтегрального выражения в (24) проще всего убедиться следующим образом. Интегрирование в (24) проводится по всей плоскости параметра удара и может быть выполнено аналитически, результат этого интегрирования обозначим $\Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp}$, где

$$\begin{aligned} \Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp} = & 8\pi \frac{Z^2 N_P}{v^2} \left(\sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \neq j)}}^3 \frac{A_i A_j}{\alpha_i^2 - \alpha_j^2} \alpha_i^2 K_0(\alpha_i L_\perp) + \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^3 A_i^2 (K_0(\alpha_i L_\perp) - \frac{\alpha_i L}{2} K_1(\alpha_i L_\perp)) \right). \quad (25) \end{aligned}$$

Таким образом, $\Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp}$ как функция от L_\perp принимает конечные значения при всех L_\perp , за исключением $L_\perp \rightarrow 0$, когда $\Delta\kappa^{(p)}$ ведет себя как $\ln(1/L_\perp)$,

как указано в обсуждении после формулы (16), такая расходимость связана с неприменимостью приближения однородного поля (11) (или разложения (4)), формально это связано с появлением неинтегрируемой особенности и условием удаленности от нее на расстоянии $> 1/Z_p$ и требует по крайней мере выполнения условия $L_\perp \geq 1/Z_p$, являющегося условием неслияния особенностей в точках $b_1 = 0$ и $b_2 = 0$ плоскости параметра удара. Поэтому формула (25) описывает $\Delta\kappa^{(p)}$ как функцию от L_\perp в области $1/Z_p \leq L_\perp \leq L$.

Для вычисления $\Delta\kappa^{(p)}$ для значений $0 \leq L_\perp \leq 1/Z_p$ сначала найдем $\Delta\kappa^{(p)} = \int (\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)d^2\mathbf{b}$ при $L_\perp = 0$, когда $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$, $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2$ и, очевидно, $\Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp=0} = 2\kappa_1^{(p)} = 2\kappa_2^{(p)} = \kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)}$ и равно удвоенным потерям (18) на одном изолированном атоме. Отметим, что телесный угол, в котором расположена ось молекулы, соответствующий $0 \leq L_\perp \leq 1/Z_p$ при $Z_p \gg 1$, имеет порядок величины $(1/Z_p)^2$ и мал. Поэтому мы можем аппроксимировать функцию $\Delta\kappa^{(p)}$ для всех возможных значений $0 \leq L_\perp \leq L$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta\kappa^{(p)} = & \left[1 - \exp\left(-\frac{L_\perp^2}{1/Z_p^2}\right) \right] \Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp} + \\ & + \exp\left(-\frac{L_\perp^2}{1/Z_p^2}\right) \Delta\kappa^{(p)}|_{L_\perp=0}. \quad (26) \end{aligned}$$

Вычисленное по этой формуле $\Delta\kappa^{(p)}$ зависит от ориентации оси молекулы из-за зависимости $L_\perp = L \sin \theta$, то есть $\Delta\kappa^{(p)} = \Delta\kappa^{(p)}(\theta)$.

Мы провели расчеты относительного вклада кратных столкновений $\nu(\theta) = \Delta\kappa^{(p)}/(\kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)})$. Результаты расчетов для столкновений ионов железа Fe^{25+} с молекулой азота N_2 приведены на рис.2, где пунктир – значения $\nu(\theta)$ при энергии иона 20 МэВ/нуклон, штриховая кривая – значения $\nu(\theta)$ при энергии иона 100 МэВ/нуклон, сплошная линия – $\nu(\theta)$ при энергии иона 1000 МэВ/нуклон. Как и следовало ожидать, $\nu(\theta)$ меняется от нуля до единицы при изменении $\nu(\theta)$ от 0 до $\pi/2$ и заметно больше нуля в интервале углов θ , меньших 10^{-1} . На практике обычно измеряют потери энергии при хаотичной ориентации молекул. Поэтому мы провели расчеты усредненной по направлениям оси молекулы величины $\bar{\nu}$ в предположении равномерного распределения по ориентациям оси молекулы:

$$\bar{\nu} = \int_0^\pi \nu(\theta) \frac{1}{2} \sin \theta d\theta.$$

Оказалось, относительная поправка из-за кратности столкновений при хаотической ориентации молекул

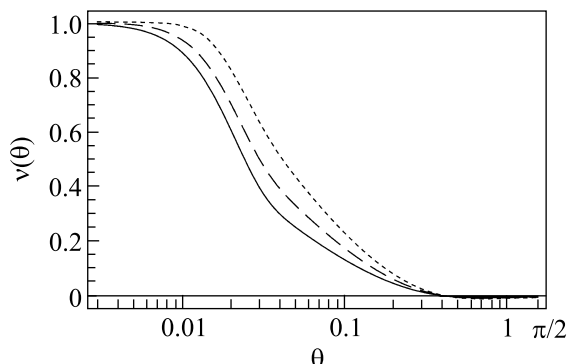


Рис.2. Относительный вклад кратных столкновений $\nu(\theta) = \Delta\kappa^{(p)}/(\kappa_1^{(p)} + \kappa_2^{(p)})$ в эффективное торможение водородоподобного иона Fe^{25+} при столкновении с молекулой азота в зависимости от угла (θ в радианах) ориентации оси молекулы: пунктир – значения $\nu(\theta)$ при энергии иона 20 МэВ/нуклон, штриховая кривая – значения $\nu(\theta)$ при энергии иона 100 МэВ/нуклон, сплошная линия – $\nu(\theta)$ при энергии иона 1000 МэВ/нуклон

очень мала, меньше или порядка одной десятой процента. Таким образом, эффект кратности столкновений может вносить заметный вклад лишь при наличии выстроенности молекул вдоль какого-либо направления.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантами: Президента РФ (грант # МК-6201.2008.2), Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 08-02-00711-а, частично # 08-02-98801-р-север-а) и Фонда ИНТАС (грант # INTAS-GSI 06-1000012-8530).

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. Д. Бейтс, в кн. *Атомные и молекулярные процессы*, под ред. Л. М. Бибермана, В. А. Фабриканта, М.: Мир, 1964.
4. V. P. Shevelko, D. Bohne, B. Franzke, and Th. Stokler, *Atomic Physics with Heavy Ions*, Eds. H. Beyer, V. P. Shevelko, Springer, 1999, p. 305.
5. V. P. Shevelko, I. Yu. Tolstikhina, and Th. Stohlker, *NIM B* **184**, 295 (2001).
6. J. Eichler and W. E. Meyrhof, *Relativistic atomic collisions*, N.-Y.: Academic Press Inc., 1995.
7. P. Rymuzaft, Th. Stohlker, C. L. Cockett et al., *J. Phys. B* **26**, L169 (1993).
8. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, С. В. Рябченко, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 455 (2005).
9. S. P. Apell, S. B. Trickey, and J. R. Sabin, *Phys. Rev. A* **70**, 4616 (1998).
10. H. H. Mikkelsen, J. Oddershede, J. R. Sabin et al., *NIM B* **100**, 451 (1995).
11. T. E. Pierce and M. Blann, *Phys. Rev.* **173**, 390 (1968).
12. В. И. Матвеев, Д. Б. Сидоров, *ЖЭТФ* **132**, 569 (2007).
13. В. И. Матвеев, Д. Б. Сидоров, *Письма в ЖЭТФ* **84**, 299 (2006).
14. F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, *Phys. Rev. A* **36**, 467 (1987).
15. E. K. U. Gross and R. M. Dreizler, *Phys. Rev. A* **20**, 1798 (1980).
16. J. Lindhard and A. Sorensen, *Phys. Rev. A* **53**, 2443 (1996).
17. V. A. Khodyrev, *J. Phys. B* **33**, 5045 (2000).