

# Процессы ионизации и перезарядки при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов

И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько<sup>1)</sup>

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 октября 2024 г.

После переработки 1 ноября 2024 г.

Принята к публикации 2 ноября 2024 г.

Выполнены расчеты сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов Nh ( $Z = 113$ ), Fl ( $Z = 114$ ), Mc ( $Z = 115$ ), Lv ( $Z = 116$ ), Ts ( $Z = 117$ ), и Og ( $Z = 118$ ) при энергиях протонов  $E > 0.01$  кэВ–10 МэВ. При  $E \approx 0.01$ –100 кэВ сечения вычислялись в адиабатическом приближении, а при больших энергиях  $E \approx 100$  кэВ – в борновском приближении с нормировкой сечений. Поскольку данные для рассматриваемых сечений сверхтяжелых элементов отсутствуют, в настоящей работе расчеты сечений выполнены также для атомов тяжелых элементов Xe ( $Z = 54$ ) и U ( $Z = 92$ ), которые сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами. По результатам работы выявлены отличительные свойства сечений перезарядки и ионизации с участием атомов сверхтяжелых элементов.

DOI: 10.31857/S0370274X24120057, EDN: QNXCXV

**1. Введение.** В последние годы значительно возрос интерес к исследованию атомов и ионов сверхтяжелых элементов (СТЭ) с зарядом ядра  $Z > 100$ , представляющих фундаментальный интерес в области атомной, ядерной физики, астрофизики и химии [1–4]. Экспериментальное получение атомов СТЭ представляет весьма трудоемкую задачу, поэтому теоретические исследования приобретают особое значение, так как они могут быть использованы для прогнозирования атомных, ядерных и химических свойств СТЭ и планирования будущих экспериментов с их участием.

В области атомной физики большинство теоретических исследований направлено на изучение спектроскопических свойств СТЭ, таких как потенциалы ионизации атомов и ионов, электронные средства к электрону, поляризуемости и сечения фотоионизации с учетом электронных корреляций, релятивистских и КЭД эффектов (см., например, [5–10]).

Расчеты столкновительных характеристик СТЭ (эффективных сечений и скоростей атомных процессов, ионных фракций, средних зарядовых состояний ионного пучка и др.) сильно ограничены (см., например, [11, 12]). В работе [11] вычислены сечения перезарядки, ионизации и средние заряды  $\langle q \rangle$  пучков тяжелых и сверхтяжелых ионов с зарядами ядра  $Z = 80$ –120 и энергией  $E \approx 250$  кэВ/н при столкновении с газом He при давлении 0.8 мбар. В недав-

ней работе [12] выполнены аналогичные расчеты сечений и средних зарядов  $\langle q \rangle$  для сверхтяжелых атомов и ионов с  $Z = 114$ –117 при столкновении с газом He при давлении 0.8 мбар и энергиях ионов  $E = 0.25$ –300 кэВ/н. Вычисленные в [11, 12] средние заряды  $\langle q \rangle$  находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными.

Информация об эффективных сечениях атомных процессов при взаимодействии элементарных частиц (электронов и протонов) с тяжелыми частицами (атомами, ионами, молекулами и т.д.) представляет несомненный интерес, так как она содержит базовые (эталонные) данные о столкновительных свойствах атомных систем. К таким элементарным процессам относятся прежде всего ионизация, возбуждение, перезарядка и рекомбинация.

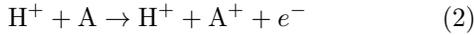
В настоящей работе исследованы свойства сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами Nh ( $Z = 113$ ), Fl ( $Z = 114$ ), Mc ( $Z = 115$ ), Lv ( $Z = 116$ ), Ts ( $Z = 117$ ), и Og ( $Z = 118$ ) при энергиях протонов  $E \approx 0.01$  кэВ–10 МэВ. Эти атомы имеют электронную конфигурацию  $6d^{10}7s^27p^m$  внешних оболочек с числом эквивалентных электронов  $m = 1$ –6 соответственно для атомов с зарядом ядра  $Z = 113$ –118.

Сечения перезарядки (EC)

$$\text{H}^+ + \text{A} \rightarrow \text{H}(n) + \text{A}^+ \quad (1)$$

вычислены с помощью программ ARSENY и CAPTURE, а сечения ионизации (ION)

<sup>1)</sup>e-mail: shevelkovp@lebedev.ru



– по программам ARSENY и RICODE-M. Здесь  $\text{A}$  – атом СТЭ,  $n$  – главное квантовое число. Подробное описание программ и области их применения приведены в [13, 14]. Кратко программы можно описать следующим образом.

Код CAPTURE [15] предназначен для расчета нормализованных вероятностей и сечений одноэлектронного захвата при относительно больших энергиях столкновения  $E \gtrsim 25$  кэВ/н в борновском приближении (приближении Бринкмана–Крамерса). RICODE-M [16] производит расчет сечений одноэлектронной ионизации (обдирки) в ион-атомных столкновениях при  $E \gtrsim 25$  кэВ/н в релятивистском борновском приближении с использованием релятивистского (магнитного) взаимодействия между сталкивающимися частицами и релятивистских волновых функций. Код ARSENY [17] вычисляет сечения перезарядки, возбуждения и ионизации при низких и средних энергиях  $0.01$  кэВ/н  $\lesssim E \lesssim 100$  кэВ/н в адиабатическом приближении, в котором вероятности процессов рассчитываются методом скрытых пересечений электронных (квазимолекулярных) потенциальных кривых, которые являются собственными значениями двух-центровой кулоновской задачи (переходы типа Ландау–Зинера). При близких столкновениях переходы обусловлены вращательной связью и не являются ландау-зинеровскими. В настоящей работе для расчета сечений (1) и (2) в качестве потенциалов ионизации атомов СТЭ использовались рекомендуемые значения из работы [10], а энергии связи электронов внутренних оболочек атомов – из [18].

**2. Сечения перезарядки протонов на атомах СТЭ.** Вычисленные сечения перезарядки (1) протонов на атомах СТЭ приведены на рис. 1. В адиабатической области  $0.03$  кэВ  $\lesssim E \lesssim 100$  кэВ использовался код ARSENY, а при больших энергиях  $E \gtrsim 100$  кэВ – код CAPTURE. В области пересечения сечений  $E \sim 60$ – $200$  кэВ они плавно соединялись методом сплайн-интерполяции. В адиабатической области свойства сечений перезарядки определяются захватом протоном электрона внешней  $7p^m$ -оболочки и максимальны для атомов Mc и Lv. В этой области энергий сечения зависят от потенциала ионизации  $I$  атома мишени: чем меньше значение  $I$ , тем больше сечение. Согласно [10], атомы имеют потенциалы ионизации:  $I(\text{Mc}) = 5.57$ ,  $I(\text{Lv}) = 6.8$ ,  $I(\text{Nh}) = 7.49$ ,  $I(\text{Ts}) = 7.6$ ,  $I(\text{Fl}) = 8.65$  и  $I(\text{Og}) = 8.9$  эВ, и сечения ЕС убывают от атома Mc к атому Og соответственно. Такую зависимость сечений от  $I$  можно кратко объяснить следующим образом.

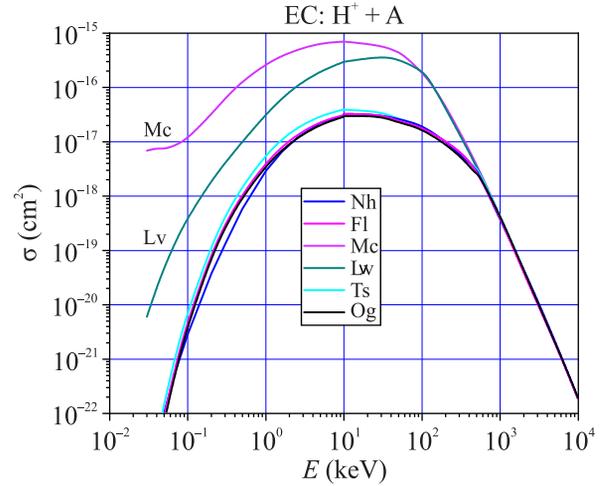


Рис. 1. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки (1) протонов на атомах СТЭ как функции энергии протонов – расчет по программам ARSENY и CAPTURE. Для Mc и Lv атомов основной вклад дает перезарядка в возбужденное состояние  $\text{H}^*(n=2)$  (см. текст)

В методе скрытых пересечений потенциальная энергия активного электрона как функция межъядерного расстояния рассчитывается как собственное значение трехчастичной кулоновской задачи – электрон в поле двух зарядов:  $Z_1 = n_0(I/\text{Ry})^{1/2}$  эффективного начального состояния электрона в атоме ( $n_0l = 7p$ ) и заряда  $Z_2 = 1$  конечного состояния в атоме водорода, где  $I$  – потенциал ионизации атома,  $1 \text{ Ry} = 13.6$  эВ. Положение терма энергии начального состояния электрона относительно потенциальных кривых конечных состояний на протоне зависит от эффективного заряда  $Z_1$  и находится между термами конечных состояний: с уменьшением  $Z_1$  энергия начального состояния увеличивается и терм удаляется от конечного терма с  $n = 1$  и приближается к терму с  $n = 2$ . Соответствующее изменение положений скрытых пересечений потенциальных кривых изменяет вклады сечений в конечные состояния на протоне с  $n = 1$  и  $n = 2$  в полное сечение перезарядки и приводит к описанной зависимости сечений от потенциала ионизации в адиабатической области: чем меньше значение  $I$ , тем больше сечение.

Сечения перезарядки протонов в адиабатической области энергий на атомах Mc и Lv с образованием атомов H в основном  $n = 1$  и возбужденном  $n = 2$  состояниях приведены на рис. 2. Видно, что основной вклад для этих атомов определяется перезарядкой протонов в возбужденное состояние  $\text{H}^*(n=2)$ , где сечения на три порядка больше сечений перезарядки в основное состояние. Для остальных атомов сечения близки друг к другу и определяются перезарядкой с

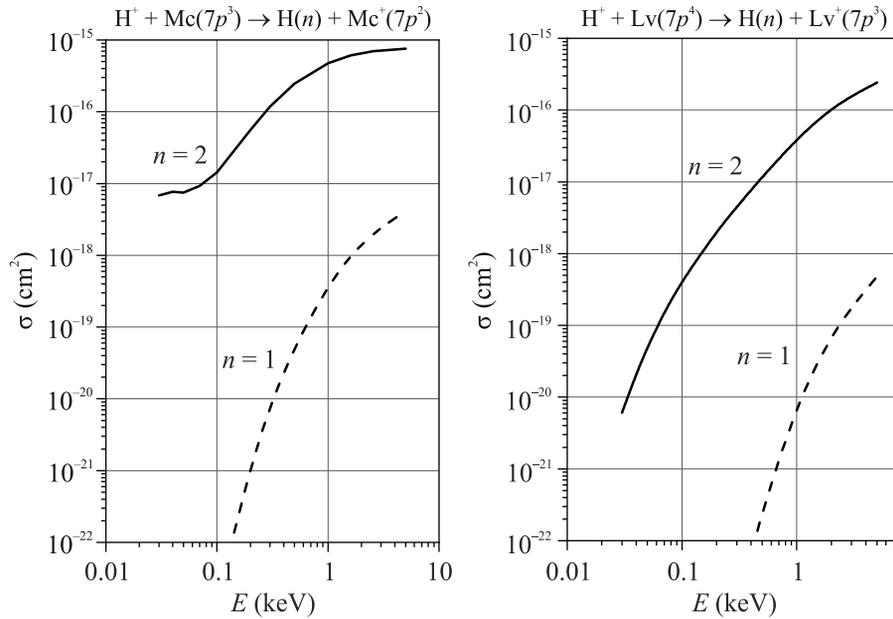


Рис. 2. Сечения перезарядки протонов на атомах Mc и Lv как функции энергии протонов с образованием атомов H в основном  $n = 1$  (пунктир) и возбужденном  $n = 2$  (сплошные кривые) состояниях – расчет по программе ARSENY

образованием атомов H только в основном состоянии  $n = 1$ .

При больших энергиях протонов  $E \gtrsim 300$  кэВ сечения перезарядки (результат расчетов по программе CAPTURE с  $n_{\max} \approx 300$ ) для всех атомов с точностью 10–15% одинаковы, так как определяются преимущественным захватом электронов внутренних оболочек атомов СТЭ, имеющих близкие значения энергий связи (см. [18]). Например, при  $E \gtrsim 1$  МэВ отношение сечений перезарядки  $\sigma(\text{Og})/\sigma(\text{Mc}) \approx 1.1$ .

На рисунке 3 приведены сечения перезарядки протонов на атомах тяжелых элементов Xe ( $Z = 54$ ) и U ( $Z = 92$ ). На рисунке 3а сечения для атомов Xe, полученные в настоящей работе (сплошная кривая), сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и расчетами методом Монте-Карло (СТМС) [19] (пунктирная кривая). При малых энергиях сечение имеет квази-резонансный характер с малым дефектом резонанса (разность потенциалов ионизации атомов Xe и H):  $\Delta\omega = |I(\text{Xe}) - I(\text{H})| \approx 1.5$  эВ, поэтому оно возрастает с уменьшением энергии при  $E \rightarrow 0.01$  эВ. Экспериментальные данные хорошо согласуются с результатами настоящей работы, а сечение, вычисленное методом СТМС, имеет максимум при  $E \approx 10$  кэВ и убывает при  $E \rightarrow 0.01$  кэВ.

Сечения ЕС для атомов Xe и U в более широкой области энергий протонов приведены на рис. 3б. При энергии  $E > 1$  кэВ СТМС-сечения и вычислен-

ные по программе CAPTURE близки друг к другу. Для атомов U дефект резонанса довольно большой,  $\Delta\omega \approx 7.4$  эВ, что приводит к убыванию сечения при  $E < 100$  кэВ. При  $E > 500$  кэВ отношения сечений  $\sigma(\text{Xe}, \text{СТМС})/\sigma(\text{Xe}, \text{CAPTURE}) \approx 1.3$ ,  $\sigma(\text{U}, \text{CAPTURE})/\sigma(\text{Xe}, \text{CAPTURE}) \approx 1.8$ , т.е. в этой области энергий сечение перезарядки протонов на атомах U примерно в 2 раза больше, чем на атомах Xe.

**3. Сечения ионизации атомов СТЭ протонами.** Сечения ионизации протонами атомов СТЭ, полученные с помощью программ ARSENY и RICODE-M, приведены на рис. 4. В адиабатической области  $0.03$  кэВ  $\lesssim E \lesssim 100$  кэВ сечения, вычисленные по программе ARSENY, зависят от потенциала ионизации атома-мишени  $I$  аналогично сечениям перезарядки – чем меньше  $I$ , тем больше сечение. В области потенциального рассеяния  $E > 1$  МэВ сечения ионизации атомов СТЭ в пределах 25% примерно одинаковы, что также связано с близкими значениями энергий связи внутренних электронов. Следует отметить, что вклад автоионизации (возбуждение внутренних электронов атома мишени в возбужденные автоионизационные состояния, сопровождающееся распадом состояний с испусканием электрона) в сечения ионизации атомов СТЭ не учитывался из-за отсутствия информации об энергиях автоионизационных состояний. По оценкам вклада автоионизационных переходов для тяжелых атомов (Xe, Bi, U) вклад в

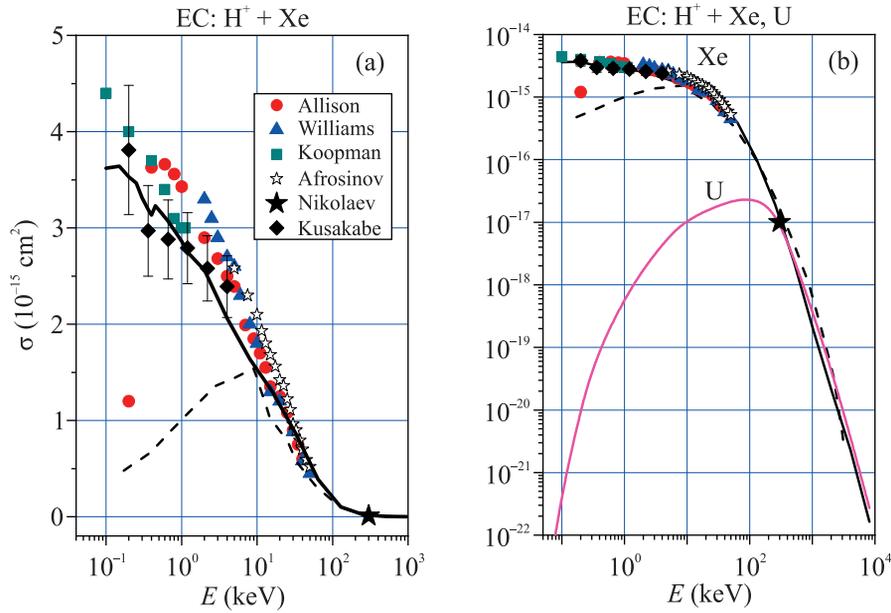


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки (1) протонов на атомах Xe ( $Z = 54$ ) и U ( $Z = 92$ ) как функции энергии протонов. (a) – Сечения EC на атомах Xe при  $E \approx 0.01\text{--}300$  кэВ: сплошная кривая – расчет по программам ARSENY и CAPTURE, пунктирная кривая – расчет [19] методом Монте-Карло (СТМС); эксперимент: Allison [20], Williams [21], Коопман [22], Афросимов [23], Николаев [24], Kusakabe [25]. (b) – Сечения EC на атомах Xe и U при  $E \approx 0.01$  кэВ–10 МэВ: сплошные кривые – расчет по программам ARSENY и CAPTURE, пунктирная кривая – расчет СТМС [19]

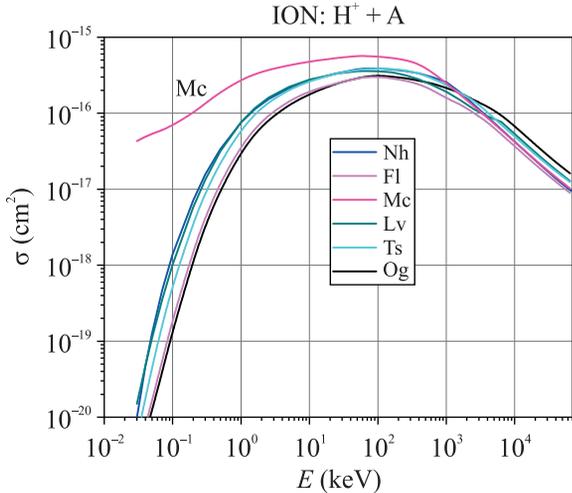


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечения ионизации протонами атомов СТЭ как функции энергии протонов – расчет по программам ARSENY и RICODE-M

ионизацию атомов СТЭ оценивается на уровне 1–2 %.

На рисунке 5 представлены сечения ионизации протонами атомов Xe и U. Настоящие расчеты показали, что вклад автоионизационных переходов в сечение ионизации этих атомов составляет 1–3 %, что является стандартным для сечений ионизации прото-

нами тяжелых атомов, для которых основной вклад вносит ионизация внешнего электрона и электронов внутренних оболочек (см., например, [13, 14]).

Сечения атомов ксенона (рис. 5а), вычисленные методом Монте-Карло и по программе RICODE-M с учетом ионизации электронов внутренних оболочек в области  $E \approx 1\text{--}50$  МэВ практически совпадают, но оба расчета завышают имеющиеся экспериментальные данные при  $E \approx 0.8\text{--}4$  МэВ примерно в 1.4 раза. В адиабатической области энергий сечения, полученные с помощью кода ARSENY, значительно превышают СТМС-сечения.

Полное сечение ионизации протонами атомов U, вычисленное по программе ARSENY, приведено на рис. 5b, а отношение сечений ионизации протонами и  $\alpha$ -частицами электронов внутренних  $2p_{1/2}$  и  $2p_{3/2}$  оболочек урана – на рис. 5с. Расчеты сечений по программе RICODE-M, учитывающей релятивистские эффекты, хорошо согласуются с экспериментом, в то время как нерелятивистское борновское приближение и полуклассическая модель [28] приводят к сильному отличию от экспериментальных данных и расчетам в релятивистском приближении.

**4. Заключение.** Исследованы свойства сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов с зарядом

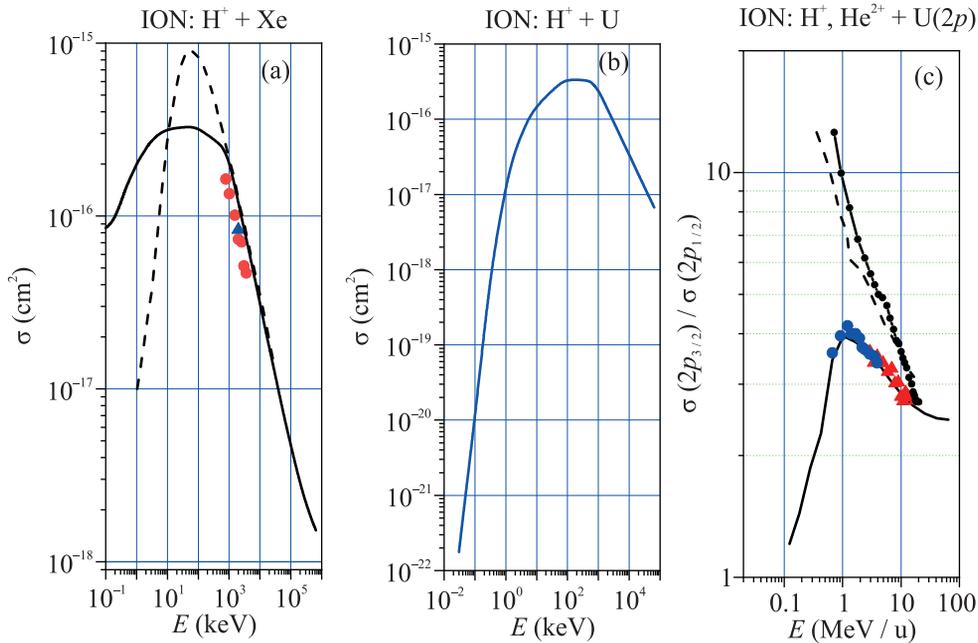


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сечения ионизации протонами атомов Xe и U как функции энергии протонов. (a) – Сечения ионизации протонами атомов Xe: пунктир – СТМС расчет [19], сплошная кривая – результат программ ARSENY и RICODE-M. Эксперимент: треугольник [26], кружки [27]. (b) – Сечения ионизации протонами атомов U, расчет по программам ARSENY и RICODE-M. (c) – Отношения сечений ионизации  $\sigma(2p_{3/2})/\sigma(2p_{1/2})$  протонами и  $\alpha$ -частицами внутренних  $2p_{3/2}$  и  $2p_{1/2}$  электронов атомов U: пунктирная кривая и кривая с кружками – расчет в борновском (PWBA) и полуклассическом (SCA) приближениях соответственно [28], сплошная кривая – результат программы RICODE-M. Эксперимент: отношения сечений протонами  $H^+$  (треугольники) и  $\alpha$ -частицами  $He^{2+}$  (кружки) [28]

ядра  $Z = 113–118$  в области энергий  $E \approx 0.01$  кэВ–10 МэВ с помощью имеющихся программ ARSENY, CAPTURE и RICODE-M. В адиабатической области сечения зависят от значений потенциалов ионизации атомов: чем больше потенциал, тем меньше сечения. При больших энергиях сечения перезарядки и ионизации атомов близки друг к другу в пределах 25 %.

Выполненные в настоящей работе расчеты обнаружили ряд характерных свойств, присущих атомам СТЭ: вклад в сечение перезарядки протонов на атомах Mc и Lv в адиабатической области энергий с образованием атомов H в возбужденном состоянии  $n = 2$ , а также примерное равенство сечений перезарядки и ионизации при больших энергиях для всех атомов с  $Z = 113–118$ .

Данные для сечений перезарядки и ионизации указанных атомов отсутствуют, поэтому в работе выполнены также расчеты сечений для тяжелых атомов Xe и U, которые сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами. Показано, что при малых энергиях удовлетворительные результаты дает использование адиабатического приближения, а при больших энергиях – необходимо учитывать релятивистские эффекты.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

**Конфликт интересов.** Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

- O. R. Smits, Ch. E. Düllmann, P. Indelicato, W. Nazarewicz, and P. Schwerdtfeger, *Nat. Rev. Phys.* **6**, 86 (2024).
- Y. Ts. Oganessian and S. N. Dmitriev, *Russ. Chem. Rev.* **85**, 901 (2016).
- Yu. Oganessian, *Radiochim. Acta* **99**, 429 (2011).
- B. Lommel, Ch. E. Düllmann, B. Kindler, and D. Renisch, *Eur. Phys. J. A* **59**, 14 (2023).
- V. Pershina, *J. Nucl. Phys.* **916**, 1 (2013).
- V. A. Dzuba, M. S. Safronova, and U. I. Safronova, *Phys. Rev. A* **90**, 012504 (2014).
- E. Eliav, A. Borschevsky, and U. Kaldor, *Nucl. Phys. News* **29**(1), 16 (2019).
- A. K. Razavi, R. K. Hosseini, D. A. Keating, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, *J. Phys. B* **53**, 205203 (2020).

9. I. M. Savelyev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, arXiv:2301.01740v1 [physics.atom-ph], Jan 2023.
10. O. R. Smits, P. Indelicato, W. Nazarewicz, M. Piibeleht, and P. Schwerdtfeger, *Phys. Rep.* **1035**, 1 (2023).
11. J. Khuyagbaatar, V. P. Shevelko, A. Borschevsky, Ch. E. Düllmann, I. Yu. Tolstikhina, and A. Yakushev, *Phys. Rev. A* **88**, 042703 (2013).
12. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, *Nucl. Instrum. Methods B* **554**, 165418 (2024).
13. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, *Phys.-Uspekhi* **61**, 247 (2018).
14. I. Tolstikhina, M. Imai, N. Winckler, and V. P. Shevelko, *Basic Atomic Interactions of Accelerated Heavy Ions in Matter*, Springer International Publishing AG, Cham, Switzerland (2018).
15. V. P. Shevelko, O. N. Rosmej, H. Tawara, and I. Yu. Tolstikhina, *J. Phys. B* **37**, 201 (2004).
16. I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, *JETP* **119**, 1 (2014).
17. A. A. Gusev, E. A. Solov'ev, and S. I. Vinitzky, *Comput. Phys. Commun.* **286**, 108662 (2023).
18. J. P. Desclaux, *At. Data Nucl. Data Tables* **12**, 311 (1973).
19. M. Al-Ajaleen and K. Tokesi, *Atoms* **12**, 28 (2024).
20. S. K. Allison, *Rev. Mod. Phys.* **30**, 1137 (1958).
21. J. F. Williams and D. N. F. Dunbar, *Phys. Rev.* **149**, 62 (1966).
22. D. W. Koopman, *Phys. Rev.* **154**, 79 (1967).
23. V. Afrosimov, Y. A. Mamaev, M. Panov, and N. Fedorenko, *Sov. Phys. JETP* **28**, 97 (1969).
24. V. S. Nikolaev, I. S. Dmitriev, Ya. A. Teplova, and Yu. A. Fainberg, *Moscow University Physics Bulletin* **49**, 80 (1994).
25. T. Kusakabe, H. A. Sakaue, and H. Tawara, *Plasma and Fusion Research: Regular Articles* **6**, 2401102 (2011).
26. W. S. Melo, A. C. F. Santos, M. M. Sant'Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, L187(2002).
27. E. G. Cavalcanti, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, H. Schmidt-Böcking, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 3087 (2003).
28. T. K. Li, D. L. Clark, and G. W. Greenlees, *Phys. Rev. A* **14**, 2016 (1976).