

01;02

## **Ионизация $K$ -оболочки квазирелятивистского водородоподобного атома при столкновении с релятивистским структурным высокозарядным ионом**

© *В.И. Матвеев, Е.С. Гусаревич, И.Н. Пашев*

Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Архангельск  
Архангельский государственный технический университет  
E-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

*Поступило в Редакцию 11 марта 2003 г.*

На основе релятивистского обобщения метода шивки и приближения эйконала рассчитаны дифференциальные и полные сечения ионизации тяжелых водородоподобных атомов при столкновениях со структурными высокозарядными ионами, движущимися с релятивистскими скоростями. Под структурными ионами в рамках данной работы понимаются частично ионизированные ионы тяжелых элементов, состоящие из ядра иона и некоторого числа связанных электронов, частично компенсирующих заряд ядра иона. Для описания тяжелого атома мишени применялись квазирелятивистские волновые функции. Показано, что учет релятивистских эффектов в тяжелой мишени может приводить к заметным изменениям соответствующих сечений по сравнению с нерелятивистским описанием мишени.

Часто при экспериментальных исследованиях процессов столкновений с участием тяжелых ионов высоких зарядов и энергий используются частично ионизированные ионы (см., например, [1–7] и приведенные там ссылки), содержащие частично заполненные электронные оболочки — электронную „шубу“ иона. Обычно при расчетах процессов возбуждения или ионизации атомов мишени такие ионы описываются как точечные заряды. Развитию же расчетных методик, описывающих частично ионизированные ионы как протяженные и имеющие электронную структуру заряды, посвящено сравнительно небольшое число работ. Сильное поле высокозарядного иона не позволяет использовать теорию возмущений. Поэтому, как правило, расчеты сечений ионизации

проводились (см., например, [8,9]) в рамках широко распространенного метода классических траекторий. Квантово-механическое рассмотрение на основе приближения внезапных возмущений было проведено в работах [10,11]. При этом удалось получить лишь зависимости вероятности ионизации в ограниченной области параметров удара. В работах [12,13] на основе приближения эйконала рассчитаны потери энергии при столкновениях релятивистских тяжелых структурных ионов с легкими (нерелятивистскими) атомами. В рамках того же подхода в работе [14] были проведены расчеты сечений однократной и двойной ионизации водородоподобных и гелиеподобных атомов. Полученные в [14] результаты могут быть использованы для расчетов сечений образования однократных и двойных  $K$ -вакансий лишь в легких атомах, тогда как для расчетов сечений подобных неупругих процессов в тяжелых атомах необходимо учитывать релятивистский характер движения атомных электронов как в связанных, так и в континуальных состояниях.

В настоящей работе на основе релятивистского обобщения [15,16] метода сшивки и приближения эйконала, а также их распространения [12,17] на случаи протяженных зарядов развит метод расчетов сечений ионизации тяжелых квазирелятивистских водородоподобных атомов частично ионизованными релятивистскими высокозарядными ионами, описываемыми как протяженные заряды. В качестве примера рассчитаны полные и дифференциальные сечения ионизации. Показано, что учет релятивистских эффектов приводит к изменениям полных и дифференциальных сечений по сравнению с нерелятивистским описанием мишени, причем эти изменения существенны только для больших зарядов ядра мишени. Необходимо отметить, что в данной работе не обсуждаются интенсивно исследуемые в настоящее время экспериментально и теоретически (см., например, [2,18]) процессы потери и возбуждения электронов, принадлежащих бомбардирующим ионам.

Согласно [15,16], дифференциальное сечение ионизации покоящегося в начале системы координат водородоподобного атома из основного состояния  $|0\rangle$  с энергией  $E_0$  в состоянии непрерывного спектра  $|\mathbf{k}\rangle$  с импульсом  $\mathbf{k}$  и энергией  $E_{\mathbf{k}}$  при столкновении с движущимся со скоростью  $\mathbf{v}$  релятивистским ионом с зарядом ядра  $Z$  в эйкональном приближении имеет вид (здесь и далее используются атомные единицы  $\hbar = e = m_e = 1$ , где  $\hbar$  — постоянная Планка, а  $e$  и  $m_e$  — заряд и масса

электрона соответственно)

$$d\sigma = \int d^2\mathbf{b} \left| \langle \mathbf{k} | \left[ 1 - \exp \left( -\frac{i}{v} \int U dX \right) \right] \right. \\ \left. \times \gamma^{-1} S^2 \cdot \exp \left\{ i \frac{xv}{c^2} (E_{\mathbf{k}} - E_0) \right\} | 0 \rangle \right|^2 d^3\mathbf{k}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{b}$  — вектор параметра удара,  $S^2 = \gamma(1 - \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta})$ ,  $\gamma = (1 - \boldsymbol{\beta}^2)^{-1/2}$ ,  $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$ ,  $\boldsymbol{\alpha}$  — матрицы Дирака,  $c$  — скорость света, ось  $x$  направлена по скорости иона. Рассеивающий потенциал  $U = U(X, \mathbf{b}; \mathbf{r})$  есть функция не только координат иона  $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$ , но и координат атомного электрона  $\mathbf{r} = (x, \mathbf{s})$ , где  $\mathbf{s}$  — проекция  $\mathbf{r}$  на плоскость параметра удара  $\mathbf{b}$ . Согласно [12,14], для ионов высоких зарядов эйкональную фазу в (1) можно представить в виде

$$-\frac{i}{v} \int U dX = i\mathbf{q}\mathbf{s},$$

где

$$\mathbf{q} = \frac{2Z^*}{vb} \left[ 1 + \frac{v}{1-v} \frac{b}{\lambda} K_1 \left( \frac{b}{\lambda} \right) \right] \frac{\mathbf{b}}{b}$$

имеет смысл импульса, передаваемого атомному электрону при столкновении со структурным ионом при значении параметра удара  $\mathbf{b}$ ,  $K_1(x)$  — функция Макдональда;  $Z^* = Z(1-v)$  — видимый заряд иона ( $v = N_i/Z$  — относительное число электронов в „шубе“ иона,  $N_i$  — полное число электронов на оболочках иона),  $\lambda$  — параметр экранирования (эффективный радиус иона), равный [19]  $\lambda = gv^{2/3}(1-v/7)^{-1}Z^{-1/3}$ ,  $g \approx 0.48$ . Формула (1) для расчетов сечений была выведена [15,16] на основе релятивистского обобщения приближения эйконала с учетом как релятивистского движения снаряда (налетающего иона), так и релятивистского описания движения электронов атома-мишени. Однако при расчетах (см., например, [14]) сечений ионизации ударом структурного тяжелого иона учитывался лишь релятивистский характер движения иона. В настоящей работе мы учитывали также и релятивистские эффекты мишени. При расчетах в качестве волновых функций начального  $|0\rangle$  и конечного  $|\mathbf{k}\rangle$  состояний будем, как в [20,21], использовать квазирелятивистские волновые функ-

ции Дарвина [22–24], а именно:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\equiv \Psi_{0,s}(\mathbf{r}) = N_0 \left(1 - \frac{i}{2c} \boldsymbol{\alpha} \nabla\right) \phi_0(\mathbf{r}) u_s, \\ |\mathbf{k}\rangle &\equiv \Psi_{\mathbf{k},s'}(\mathbf{r}) = N_1 \left(1 - \frac{i}{2c} \boldsymbol{\alpha} \nabla\right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{s'}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= (2\pi)^{-3/2} \exp\left(\frac{\pi\xi}{2}\right) \Gamma(1+i\xi) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) F(-i\xi, 1, -i(kr + \mathbf{k}\mathbf{r})), \\ \phi_0(\mathbf{r}) &= \sqrt{Z_a^3/\pi} \exp(-Z_a r). \end{aligned}$$

Здесь  $\phi_0$  и  $\phi_{\mathbf{k}}$  — нерелятивистские волновые функции основного состояния и непрерывного спектра водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z_a$ ,  $\xi = Z_a/k$ ,  $\Gamma(x)$  — гамма-функция,  $F(\alpha, \gamma, z)$  — вырожденная гипергеометрическая функция,  $u_s$  — биспинор покоящегося электрона с проекцией спина  $s$ ,  $N_1 = (1 + (k/2c)^2)^{-1/2}$  и  $N_0 = (1 + (Z_a/2c)^2)^{-1/2}$  — нормировочные множители (см., например, [20,21]). Кроме того, для квазирелятивистского атома мы, следуя [16,17], считаем  $\exp\{ixv(E_k - E_0)/c^2\} \approx 1$  и  $\gamma^{-1}S^2 \approx 1$ . Используя для расчетов сечений ионизации метод шивки [14–16], получим дифференциальное сечение эмиссии электрона с энергией  $\varepsilon_k$  в виде

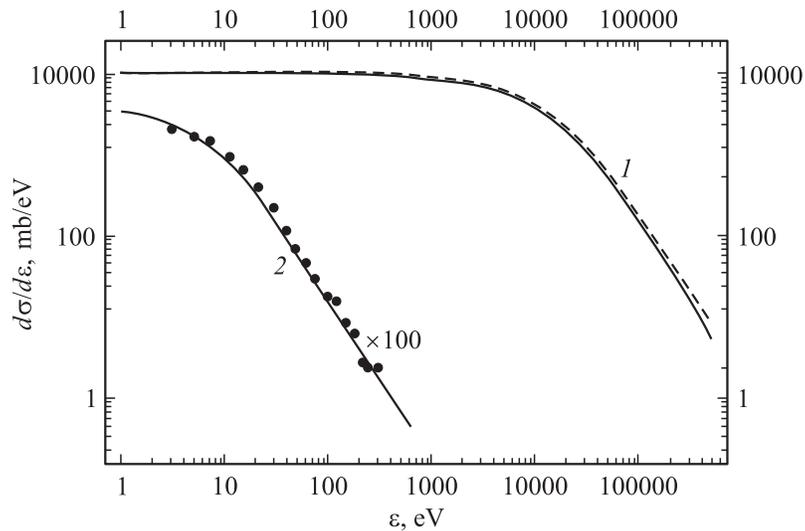
$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon_k} = 8\pi \frac{Z^{*2}}{v^2} \lambda_k k \left( \ln \frac{2Z_a \alpha_k v^2 \gamma}{\eta Z^* \omega_k} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (3)$$

где  $\eta = \exp B = 1.781$  ( $B = 0.5772$  — постоянная Эйлера),  $\omega_k = \varepsilon_k - \varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_k = k^2/2$ ,  $\varepsilon_0 = -Z_a^2/2$ , а величины  $\lambda_k$  и  $\alpha_k$  вычислялись по формулам (ср. [14,15])

$$\lambda_k = \frac{1}{3} (N_1 N_0)^2 \int |\langle \phi_{\mathbf{k}} | \mathbf{r} | \phi_0 \rangle|^2 d\Omega_{\mathbf{k}},$$

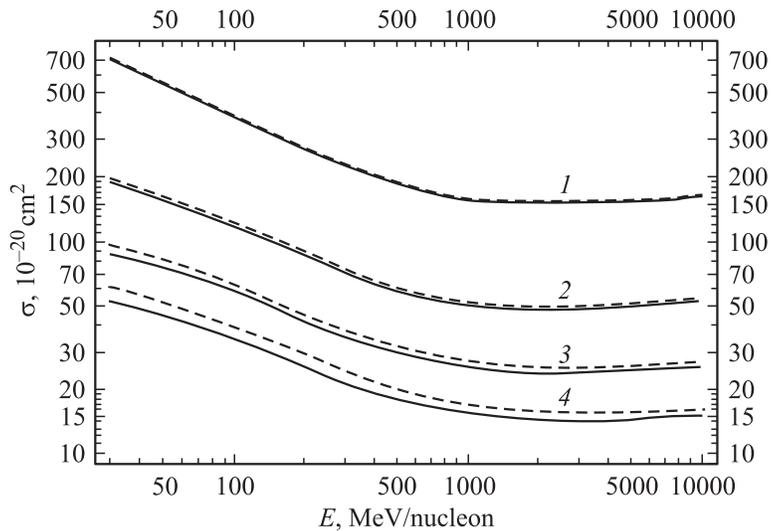
$$\begin{aligned} \alpha_k &= \lim_{b_0 \rightarrow \infty} \frac{Z^*}{v Z_a b_0} \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_k} \frac{v^2}{8\pi Z^{*2}} (N_1 N_0)^2 \int_0^{b_0} 2\pi b db \int d\Omega_{\mathbf{k}} |\langle \phi_{\mathbf{k}} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \phi_0 \rangle|^2 \right\}, \end{aligned}$$

здесь  $\Omega_{\mathbf{k}}$  — телесный угол вектора импульса  $\mathbf{k}$  вылетевшего электрона, и в формулах для  $\lambda_k$  и  $\alpha_k$  проводится интегрирование по



**Рис. 1.** Зависимость дифференциального сечения ионизации от энергии вылетающего электрона  $\varepsilon$ : 1 — столкновение структурного иона  $U^{50+}$  (снаряд) с энергией 10 000 MeV/nucleon с водородоподобным атомом (мишень)  $Mo^{41+}$ . Сплошная линия — квазирелятивистское описание мишени, пунктир — нерелятивистское; 2 — столкновение голого иона  $C^{6+}$  с энергией 2.5 MeV/nucleon и атома водорода, сплошная линия — расчет, точки — эксперимент [26] (расчетные и экспериментальные значения сечений умножены на 100).

всем значениям  $\Omega_k$ . Используя (3), мы рассчитали дифференциальное сечение (спектр) эмиссии электрона из водородоподобного атома молибдена  $Mo^{41+}$  при столкновении с релятивистским ионом урана  $U^{50+}$ . Результаты расчетов представлены на рис. 1. Для оценки вклада релятивистских эффектов в дифференциальное сечение ионизации тяжелых водородоподобных атомов удобно ввести относительную поправку  $\chi = [(d\sigma/d\varepsilon_k)_n - (d\sigma/d\varepsilon_k)_r] / (d\sigma/d\varepsilon_k)_n = 1 - (N_0 N_1)^2$ , где индексы  $n$  и  $r$  соответствуют нерелятивистскому и релятивистскому описаниям мишени. Таким образом, в квазирелятивистском приближении поправка  $\chi$  выражается простой формулой и зависит только от заряда  $Z_a$  ядра мишени и от энергии  $\varepsilon_k$  вылетевшего электрона и не зависит от



**Рис. 2.** Полные сечения ионизации водородоподобных атомов: 1 —  $\text{Mg}^{11+}$  ( $Z_a = 12$ ); 2 —  $\text{Ti}^{21+}$  ( $Z_a = 22$ ); 3 —  $\text{Ge}^{31+}$  ( $Z_a = 32$ ); 4 —  $\text{Mo}^{41+}$  ( $Z_a = 42$ ), в зависимости от энергии  $E$  налетающего иона  $\text{U}^{50+}$  (сплошная линия — квазирелятивистское описание мишени, пунктир — нерелятивистское).

энергии и заряда налетающего иона. С ростом энергии вылетевшего электрона поправка растет, например, для мишени  $\text{Mo}^{41+}$  при энергии электрона  $\varepsilon_k = 100 \text{ eV}$   $\chi = 2.31\%$ , а при энергии  $\varepsilon_k = 100 \text{ keV}$   $\chi = 11.1\%$ . В литературе отсутствуют экспериментальные данные по спектрам электронов при ионизации  $K$ -оболочек тяжелых водородоподобных атомов структурными тяжелыми релятивистскими ионами в необходимых для нас областях энергий и зарядов ионов. Поэтому для иллюстрации нашего метода в случае, когда релятивистские эффекты в мишени незначительны, мы сочли необходимым привести также на рис. 1 результаты расчетов по формуле (3) спектров электронов при ионизации атома водорода голыми ионами углерода в сравнении с экспериментальными данными [25].

Полное сечение  $\sigma$  ионизации водородоподобной тяжелой мишени получается интегрированием выражения (3) по всем энергиям вылетев-

Значения относительного вклада релятивистских эффектов  $\eta$  (%) в зависимости от энергии  $E$  (MeV/nucleon) релятивистского структурного иона  $U^{50+}$  при столкновениях с водородоподобными атомами: Mg<sup>11+</sup> ( $Z_a = 12$ ); Ti<sup>21+</sup> ( $Z_a = 22$ ); Ge<sup>31+</sup> ( $Z_a = 32$ ); Mo<sup>41+</sup> ( $Z_a = 42$ ).

$E, \text{ MeV/n}$	50	100	500	1000	5000	10000	50000	100000
$\eta, \% (Z_a = 12)$	1.5	1.4	1.1	1.0	0.9	0.9	0.8	0.7
$\eta, \% (Z_a = 22)$	4.6	3.9	3.0	2.8	2.5	2.4	2.2	2.1
$\eta, \% (Z_a = 32)$	8.2	6.9	5.4	5.0	4.6	4.4	4.1	4.0
$\eta, \% (Z_a = 42)$	12.0	10.1	8.1	7.6	7.0	6.8	6.4	6.2

шего электрона. В методе шивки [14,15] это эквивалентно вычислению следующих величин

$$\lambda_i = \int_0^{\infty} \lambda_k k^2 dk, \quad \omega_i = \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_i} \int_0^{\infty} k^2 \lambda_k \ln \omega_k dk \right\},$$

$$\alpha_i = \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_i} \int_0^{\infty} k^2 \lambda_k \ln \alpha_k dk \right\}, \quad (4)$$

через которые полное сечение ионизации выражается так

$$\sigma = 8\pi \frac{Z^{*2}}{v^2} \lambda_i \left( \ln \frac{2Z_a \alpha_i v^2 \gamma}{\eta Z^* \omega_i} - \frac{\beta^2}{2} \right). \quad (5)$$

Результаты расчетов по формуле (5) полного сечения ионизации водородоподобных атомов при столкновении с ионом  $U^{50+}$  в зависимости от энергии иона для нескольких значений заряда  $Z_a$  ядра мишени приведены на рис. 2. Из рис. 2 видно, что учет релятивистских эффектов в мишени приводит к уменьшению полного сечения ионизации по сравнению с результатами нерелятивистского описания мишени. Значения относительного вклада релятивистских эффектов  $\eta = [\sigma_n - \sigma_r]/\sigma_n$  приведены в таблице, где индексы  $n$  и  $r$  соответствуют нерелятивистскому и релятивистскому описаниям мишени. Причем в согласии с (4) и (5) значения  $\eta$  оказываются зависящими от характеристик не только мишени, но и налетающего иона.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (грант 01–02–17047) и Министерство образования Российской Федерации (грант Е02–3.2–512) за финансовую поддержку работы.

## Список литературы

- [1] Krause H.F., Vane C.R., Datz S. et al. // Phys. Rev. 2001. V. A63. P. 032711.
- [2] Ludziejewski T., Stohler Th., Ionescu D.C. et al. // Phys. Rev. 2000. V. A61. P. 052706.
- [3] Wells E., Ben-Itzhak I., Carnes K.D. et al. // Phys. Rev. 1999. V. A60. P. 3734.
- [4] Tschersich M., Drozdowski R., Busch M. et al. // J. Phys. 1999. V. B32. P. 5556.
- [5] Shah M.B., Gilbody H.B. // J. Phys. 1983. V. B16. P. L449.
- [6] McGuire J.H., Mueller A., Schuch B. et al. // Phys. Rev. 1987. V. A35. P. 2479.
- [7] Berg H., Ullrich J., Bernstein E. et al. // J. Phys. 1992. V. B25. P. 3655.
- [8] Purkait M., Dhara A., Sounda S. et al. // J. Phys. 2001. V. B34. P. 755.
- [9] Plescas C., Pons B., Riera A. // Phys. Rev. 2001. V. A63. P. 062722.
- [10] Юдин Г.Л. // ДАН. 1985. Т. 282. С. 874.
- [11] Юдин Г.Л. // ЖТФ. 1985. Т. 55. С. 9.
- [12] Матвеев В.И. // ЖЭТФ. 2002. Т. 121. С. 260.
- [13] Матвеев В.И. // ЖТФ. 2002. Т. 72. С. 10.
- [14] Матвеев В.И., Гусаревич Е.С. // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. С. 42.
- [15] Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю. // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 1646.
- [16] Matveev V.I., Matrasulov D.U., Rakhimov Kh.Y. // J. Phys. 1999. V. B32. P. 3849.
- [17] Matveev V.I., Matrasulov D.U. // J. Phys. 2000. V. B33. P. 2721.
- [18] Voitkiv A.B., Muller C., Grun N. // Phys. Rev. 2000. V. A66. P. 022716.
- [19] Brandt W., Kitagawa M. // Phys. Rev. 1982. V. B25. P. 5631.
- [20] Anholt R. // Phys. Rev. 1979. V. A19. P. 1004.
- [21] Davidovic D.M., Moiseivitch B.L., Norrington P.H. // J. Phys. B. 1978. V. 11. P. 847.
- [22] Darwin C.G. // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1928. V. 118. P. 654.
- [23] Eichler J., Meyrhoft W.E. Relativistic Atomic Collisions. New York: Academic Press Inc. 1995.
- [24] Берестецкий В.Б., Луфицкий Е.М., Путаевский Л.П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989.
- [25] Tribedi L.C., Richard P., Gulyás L. et al. // Physica Scripta. 1999. V. T80. P. 333.