02

Неупругие процессы при столкновении быстрых многозарядных ионов с молекулой водорода

© В.И. Матвеев, В.А. Паздзерский, Х.Ю. Рахимов

Отдел теплофизики АН Узбекистана,
700135 Ташкент, Узбекистан
e-mail: khamdam@hpd.silk.org

(Поступило в Редакцию 11 мая 1999 г. В окончательной редакции 30 июня 2000 г.)

На основе приближения эйконала рассмотрено столкновение быстрого (в том числе релятивистского) многозарядного иона с простейшей молекулой — молекулой водорода и получена аналитическая формула для сечения реакции, т. е. для суммарного сечения всех неупругих электронных процессов в области неприменимости борновского приближения. Проведено сравнение полученного сечения с соответствующими удвоенными неупругими сечениями для столкновений многозарядных ионов с атомами водорода, рассчитанными в непертурбативных и пертурбативных подходах.

Введение

Исследования элементарных процессов при взаимодействии атомных систем с быстрыми многозарядными ионами, которым в последние годы уделяется значительное внимание (см., например, работы [1,2], а также недавние обзоры [3–5] и имеющиеся там ссылки), интересны как с общефизической точки зрения, так и с точки зрения их возможного практического использования. При взаимодействии многозарядных ионов с атомными системами создаются эффективные электрические поля, напряженности которых могут существенно превышать характерную внутриатомную напряженность. Исследование же поведения атомов и молекул в таких сверхсильных полях является одной из актуальных задач современной физики. Условие применимости борновского приближения $Z/v \ll 1$ (Z — заряд иона, v — его скорость; здесь и далее используем атомную систему единиц) может нарушаться в случае столкновения атома или молекулы с ионом достаточно большого заряда даже для релятивистских скоростей. Это не позволяет использовать для расчета сечений различных элементарных процессов теорию возмущений. В таких случаях применяются различные непертурбативные методы — приближение внезапных возмущений [6–9], эйкональное приближение (приближение Глаубера) и различные его модификации [10–14], численные методы [15] и недавно найденное точное решение [16] уравнения Дирака в ультрарелятивистском пределе. Значительная часть непертурбативных расчетов обычно ограничивается столкновениями быстрых многозарядных ионов с атомами, столкновения же с молекулами из-за громоздкости аналитических выкладок и большого объема численного счета рассматриваются значительно реже [1–5], хотя с практической точки зрения значительный интерес представляют именно исследования столкновений быстрых ионов с молекулами.

Если столкновения быстрых протонов и ионов небольших зарядов с молекулами можно рассматривать в рамках обычной теории возмущений (см., например, [17–20]), то в случаях столкновений молекул с быстрыми тяжелыми многозарядными ионами, когда $Z \sim v$ и борновское приближение неприменимо, следует использовать непертурбативные методы. При этом [3], если при расчетах сечений электронных переходов при неупругих столкновениях быстрых заряженных частиц с многоэлектронными системами используется теория возмущений, одноэлектронные возбуждения или ионизация являются эффектом первого порядка по взаимодействию налетающей частицы с атомными электронами. Двухэлектронный переход соответствует уже второму порядку теории возмущений, когда один раз учитывается взаимодействие налетающей частицы с электронами и один раз межэлектронное взаимодействие. Однако ситуация, очевидно, меняется, когда взаимодействие электронов с налетающей частицей много больше межэлектронного взаимодействия, как это имеет место в случае столкновения атома или молекулы с многозарядным ионом. В этом случае многоэлектронный переход следует рассматривать как результат прямого действия [3,21] сильного поля налетающей частицы, и именно такому механизму прямого возбуждения соответствуют вышеперечисленные непертурбативные подходы.

В данной работе на основе приближения эйконала рассмотрено столкновение быстрого (в том числе релятивистского) многозарядного иона с простейшей молекулой — молекулой водорода и получена простая формула для сечения реакции, т. е. для суммарного сечения всех неупругих электронных процессов в области неприменимости борновского приближения. Проведено сравнение полученного сечения с соответствующими удвоенными сечениями для столкновений многозарядных ионов с атомами водорода, рассчитанными в непертурбативных и пертурбативных подходах.

Общий формализм

Общее выражение в приближении Глаубера для амплитуды неупругого столкновения быстрого (в том числе релятивистского) многозарядного иона с нерелятивистской до и после столкновения[1] системой частиц (атомом, молекулой), сопровождающегося переходом системы из состояния с волновой функцией $|\Psi_i\rangle$ в состояние с волновой функцией $|\Psi_f\rangle$, может быть записано в виде (ср. [12,13,22])

$$f_{if}(\mathbf{q}) = \frac{ik_i}{2\pi}\int e^{-i\mathbf{qb}}\langle\Psi_f| \times \left[1-\exp\left\{-\frac{i}{v}\int U dx\right\}\right]|\Psi_i\rangle d^2b, \quad (1)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ — изменение импульса иона, $\mathbf{b}$ — параметр удара, ось x направлена по начальному импульсу иона $\mathbf{k}_i$.

По смыслу приближения Глаубера рассеивающий потенциал U в (1) есть сумма электростатических кулоновских потенциалов, создаваемых неподвижными в течение времени столкновения электронами и ядрами молекулы. Рассеивающий потенциал U является функцией координат иона $\mathbf{R}_{\text{ion}} = (x, \mathbf{b})$ и мгновенных положений ядер и электронов молекулы, совокупность координат которых обозначаем $\{\mathbf{R}_A\}$ ($A = 1, 2, \dots, N$, где N — число ядер молекулы) и $\{\mathbf{r}_a\}$ ($a = 1, 2, \dots, n$, где n — число электронов). Таким образом, $U = U(x, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\}, \{\mathbf{R}_A\})$. Специфика столкновений ионов больших зарядов с атомами и молекулами состоит в том, что сечения неупругих процессов довольно велики и, как правило, существенно превышают атомные размеры, поэтому основной вклад в сечения вносит область больших параметров удара. Используя для больших параметров удара малоугловое приближение (как в [22]), в соответствующем выражении для сечения можно провести интегрирование по углам рассеяния иона. В результате для сечения рассматриваемого перехода находим

$$\sigma = \int d^2b\left|\langle\Psi_f|\left[1-\exp\left\{-\frac{i}{v}\int U dx\right\}\right]|\Psi_i\rangle\right|^2. \quad (2)$$

Очевидно, что выражение $|\langle\Psi_f|\exp\{-\frac{i}{v}\int U dx\}|\Psi_i\rangle|^2$ в (2) следует интерпретировать как вероятность перехода молекулы из состояния с волновой функцией $|\Psi_i\rangle$ в состояние с волновой функцией $|\Psi_f\rangle$ при ее столкновении с ионом, движущимся по прямолинейной траектории с параметром удара $\mathbf{b}$. Важно, что выражение для вероятности перехода удовлетворяет условию унитарности, т.е. сумма вероятностей переходов во все возможные конечные состояния (полный набор), очевидно, равна единице.

[1] Строго говоря, электроны либо ядра молекулы, попадающие в континуум в результате столкновения с движущимся с релятивистской скоростью ионом, могут приобрести релятивистские скорости, однако (ср. [4]) такие процессы происходят при малых параметрах удара и соответствующим вкладом в полные сечения можно пренебречь.

Обсудим вклад взаимодействия налетающего иона с ядрами молекулы в сечение. При столкновении с параметром удара b ($b \gg 1$) первое ядро приобретает импульс $q_1 \sim 2Z/(vb)$, второе же ядро, расположенное на расстоянии $\sim R$ от первого, получает импульс $q_2 \sim q_1 + 2ZR/(vb^2)$, их разность или относительный импульс $\delta q \sim 2ZR/(vb^2) \ll 1$ при $b \gg 1$. Поскольку при этом $\delta q^2/(2M) \ll \omega_0$ (M — масса ядра молекулы, ω_0 — собственная частота колебаний; в нашем случае молекулы водорода M — это масса протона, $\omega_0 \sim 0.02$) возбуждением колебаний ядер за счет взаимодействия налетающего иона с ядрами молекулы можно пренебречь (по сравнению с характерными сечениями электронных переходов). По аналогичным причинам можно пренебречь и возбуждением вращательных степеней свободы за счет того же взаимодействия. Действительно, угловой момент, передаваемый молекуле, $\sim \delta qR \sim 2Z/(vb^2)R^2 \ll 1$ (ср. с аналогичными оценками в [23]). Таким образом, в рассеивающем потенциале U мы можем оставить только взаимодействие налетающего иона с электронами и считать положения ядер молекулы фиксированными, т.е. $U = U(x, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$. Тогда

$$\frac{1}{v}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} U dx = \sum_{a=1}^{N}\chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}_a), \quad \chi_a(\mathbf{b}, \mathbf{s}_a) = \frac{2Z}{v}\ln\frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}_a|}{b},$$

где двумерный вектор $\mathbf{s}_a$ лежит в плоскости, перпендикулярной направлению движения иона, и имеет компоненты $\mathbf{s}_a = (y_a, z_a)$.

Для дальнодействующих потенциалов интеграл по параметру удара в (2), вообще говоря, расходится при больших параметрах удара.[2] Подобная расходимость однако оказывается несущественной [4,8,13]: при больших параметрах удара поле иона мало́ и применимо борновское приближение, причем области применимости борновского приближения и приближения эйконала перекрываются, что позволяет провести корректную сшивку соответствующих сечений по параметру удара. Обозначим через b_0 верхний предел интегрирования по параметру удара b в формуле (2). Для больших $b \gg s$ и ортогональных состояний $|\Psi_f\rangle$ и $|\Psi_i\rangle$ обобщенный неупругий формфактор (амплитуда неупругого перехода)

$$\langle\Psi_f|1-\exp\left\{-i\frac{2Z}{v}\ln\frac{|\mathbf{b}-\mathbf{s}|}{b}\right\}|\Psi_i\rangle \approx \langle\Psi_f|\exp\{i\mathbf{q}\,\mathbf{s}\}|\Psi_i\rangle\,\mathbf{q} = \frac{2Z\mathbf{b}}{vb^2} \quad (3)$$

стремится при малых $\mathbf{q}$ к $i\mathbf{q}\langle\Psi_f|\mathbf{s}|\Psi_i\rangle$ и, следовательно, интеграл (2) по d^2b зависит от b_0 логарифмически.

[2] Отметим, что (как и в случае столкновений ионов с атомами [13]), если при столкновении быстрого иона с молекулой меняются состояния более чем одного электрона либо если переходы дипольно запрещены, интегрирование по параметру удара в (2) может быть распространено на всю плоскость параметра удара (так как подынтегральное выражение обеспечивает сходимость интеграла) и необходимость в сшивке с теорией возмущений отпадает.

Поэтому вклад в сечение от области $b < b_0$ можно представить в виде (ср. [13])

$$\sigma(b < b_0) = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_{if} \ln \frac{2\alpha_{if}}{q_0}, \quad q_0 = 2Z/(vb_0), \qquad (4)$$

где величины λ_{if} и α_{if} зависят лишь от характеристик электронных состояний молекулы и не содержат зависимости от параметров столкновения — заряда налетающего иона и его скорости.

В области больших $b > b_0$ поле иона является слабым возмущением и для расчета соответствующего сечения мы воспользуемся борновским приближением. Мы вычислим σ в каждой из областей параметров удара и получим полное сечение, сложив вклады от каждой области. При этом точное значение b_0 для нас несущественно,[3] поскольку зависимость σ от b_0 оказывается логарифмической, что приводит к корректной сшивке вкладов от каждой из областей и выпадению в окончательном ответе зависимости сечения от параметра сшивки b_0.

Полное неупругое сечение

Процесс столкновения быстрого многозарядного иона с молекулой водорода рассмотрим в системе координат, в которой центр масс молекулы покоится в начале координат, а оси координат выбраны таким образом, чтобы вектор **b** ориентирован вдоль оси z, а скорость иона **v** по-прежнему направлена вдоль оси x. Пусть далее $\mathbf{R}_a = \mathbf{R}/2$ и $\mathbf{R}_b = -\mathbf{R}/2$ — радиус-векторы неподвижных протонов (ядер молекулы), $\mathbf{r}_{1,2}$ — радиус-векторы электронов. Тогда в приближении больших параметров удара амплитуда перехода системы из начального состояния с волновой функцией $|\Psi_0\rangle$ в конечное состояние с волновой функцией $|\Psi_k\rangle$ определяется выражением (см. (3))

$$A_{0k} = \langle \Psi_k | e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)} | \Psi_0 \rangle. \qquad (5)$$

Ниже мы будем рассматривать только неупругие процессы, связанные с изменением состояния электронной подсистемы молекулы водорода, не затрагивая возможные процессы, связанные с изменением ее ядерной подсистемы. Сечение всех неупругих процессов, происходящих при столкновении многозарядного иона с молекулой водорода, получим следующим образом. Найдем вначале вероятность того, что при столкновении с прицельным параметром b молекула не изменит своего состояния. Для этого в (5) следует вместо волновой функции $|\Psi_k\rangle$ взять волновую функцию основного состояния $|\Psi_0\rangle$. Выберем ее в виде

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N\Big(\varphi(r_{1a})\varphi(r_{2b}) + \varphi(r_{1b})\varphi(r_{2a})\Big), \qquad (6)$$

где $\varphi(r)$ — водородоподобные функции

$$\varphi(r) = \sqrt{\frac{Z_a^3}{\pi}}\, e^{-Z_a r}, \qquad (7)$$

r_{1a}, r_{1b}, r_{2a} и r_{2b} — расстояние первого и второго электрона до ядер a и b соответственно, N — нормировочный множитель.

При $Z_a = 1$ данная функция соответствует приближению Гайтлера–Лондона (с фиксированным расстоянием R между ядрами); $Z_a = 1.166$ соответствует вариационному расчету [24] основного состояния молекулы водорода с волновой функцией (6) при равновесном межъядерном расстоянии $R = 1.4$. Нормировочный множитель в (6) стандартным образом выражается через интеграл перекрытия $S(\rho)$

$$N = \Big[2\big(1 + S^2(Z_a R)\big)\Big]^{-1/2},$$

$$S(\rho) = e^{-\rho}\left(1 + \rho + \frac{\rho^2}{3}\right). \qquad (8)$$

Расчет амплитуды перехода приводит к следующему выражению:

$$A_{00} = 2N^2 \left\{A_1^2(q) + A_2^2(\mathbf{q})\right\}, \qquad (9)$$

где

$$A_1(q) = \frac{16 Z_a^4}{(q^2 + 4Z_a^2)^2},$$

$$A_2(\mathbf{q}) = 6Z_a^5 \int_{-1/2}^{1/2} dz \left(\frac{1}{4} - z^2\right) \frac{\cos\big(z(\mathbf{qR})\big) S(\beta R)}{\beta^5},$$

$$\beta^2 = Z_a^2 + q^2\left(\frac{1}{4} - z^2\right). \qquad (10)$$

Полученное выражение зависит от ориентации молекулы (через множитель $\cos(z(\mathbf{qR}))$ в $A_2(\mathbf{q})$). Для получения усредненной (по ориентациям молекулы) вероятности, что молекула водорода останется при ее столкновении с многозарядным ионом в основном состоянии, следует усреднить по углам квадрат модуля амплитуды A_{00}. При этом возникает интеграл от произведения четырех множителей вида $\cos\big(z_i(\mathbf{qR})\big)$ (с различными z_i). Получающееся при вычислении этого интеграла выражение слишком громоздко, и для получения более компактного выражения воспользуемся следующим приближением. Для больших прицельных параметров, когда $q \le 1$, с хорошей точностью можно заменить в (10)

$$\cos\big(z(\mathbf{qR})\big) \cong 1 - \frac{z^2(\mathbf{qR})^2}{2}$$

и уже после этой замены проводить усреднение по ориентациям молекулы.[4] После этого окончательное выражение для усредненной вероятности зависит от двух

[3] Хотя, как и при столкновениях с атомами [9], легко получить те же оценки для b_0.

[4] Мы провели численно расчеты сечения с учетом последующих членов разложения косинуса и обнаружили изменения $\le 1\%$.

интегралов $I_{1,2}(q)$, которые могут быть рассчитаны численно

$$I_1(q) = 3\int\limits_{-1/2}^{1/2} dz\left(\frac{1}{4}-z^2\right)\frac{S(\beta R)}{\beta^5},$$

$$I_2(q) = 3\,q^2R^2\int\limits_{-1/2}^{1/2} dz\,z^2\left(\frac{1}{4}-z^2\right)\frac{S(\beta R)}{\beta^5}.$$

Приведем окончательное выражение для усредненной вероятности

$$\overline{W_{00}(q)} = 4N^4\Big\{A_1^4(q) + 8Z_a^{10}A_1^2(q) \times\left[I_1^2(q) - \frac{1}{3}I_1(q)I_2(q) + \frac{1}{20}\,I_2^2(q)\right] + 16Z_a^{20}\Big[I_1^4(q) - \frac{2}{3}\,I_1^3(q)I_2(q) + \frac{3}{10}\,I_1^2(q)I_2^2(q) - \frac{1}{14}\,I_1(q)I_2^3(q) + \frac{1}{144}\,I_2^4(q)\Big]\Big\}. \tag{11}$$

Соответственно для вероятности реакции получим $W_r(q) = 1 - \overline{W_{00}(q)}$. Умножая $W_r(q)$ на $2\pi bdb$ и интегрируя по параметру удара от нуля до b_0, получим $\sigma_r(b < b_0)$ — сечение реакции от области прицельных параметров $0 < b < b_0$, вносящей доминирующий вклад в полное неупругое сечение. Однако непосредственное выполнение такой процедуры возможно лишь численно. Поэтому для получения аналитического выражения для сечения мы используем прием, описанный в [13], и запишем неупругое сечение в виде (4) с $\lambda_{if} = \lambda_r$ и $\alpha_{if} = \alpha_r$. В этом выражении параметр λ_r определяется асимптотикой вероятности $W_r(q)$ при малых q

$$W_r(q) = \lambda_r q^2, \qquad q \to 0 \tag{12}$$

и равен 2.098 для $Z_a = 1.0$ и 1.555 для $Z_a = 1.166$. Из (5) нетрудно видеть, что

$$\lambda_r = \sum_n |\langle\Psi_n|(z_{1a}+z_{2b})|\Psi_0\rangle^2 = \langle\Psi_0|(z_{1a}+z_{2b})^2|\Psi_0\rangle, \tag{13}$$

где $\sum\limits_n$ — суммирование идет по полному набору.

Значение α_r было получено численно по формуле (ср. [13])

$$\alpha_r = \lim_{b_0\to\infty}\frac{Z}{vb_0}\exp\left\{\frac{1}{\lambda_r}\,\frac{v^2}{8\pi Z^2}\int\limits_0^{b_0} 2\pi bdbW_r(q)\right\} \tag{14}$$

и равно 0.415 для $Z_a = 1.0$ и 0.482 для $Z_a = 1.166$. Таким образом, вклад в сечение от области параметров удара $b < b_0$ имеет вид

$$\sigma(b < b_0) = 8\pi\,\frac{Z^2}{v^2}\,\lambda_r\ln\frac{\alpha_r v b_0}{Z}, \tag{15}$$

где, как и в случае столкновений с атомами [13], α_r не зависит от параметров столкновения v и Z.

При больших прицельных параметрах $b > b_0$ поле иона мало́ и для расчета сечений можно пользоваться борновским приближением. В первом порядке теории возмущений для амплитуды перехода молекулы из начального состояния $|\Psi_0\rangle$ в конечное $|\Psi_k\rangle$ под действием переменного по времени поля движущегося многозарядного иона получим (см., например, [4,12,13])

$$A_{0k}^{(1)} = -\,i\,\frac{2Z}{v^2}\,\omega_{k0}\Big[i(z_{1a}+z_{2b})_{k0}\sqrt{1-\beta^2}\,K_1(\xi) + (x_{1a}+x_{2b})_{k0}(1-\beta^2)K_0(\xi)\Big], \tag{16}$$

где ω_{k0} — частота перехода, $K_0(x)$ и $K_1(x)$ — функции Макдональда, $\xi = \omega_{k0}b\sqrt{1-\beta^2}/v$, $\beta = v/c$, $(z_{1a})_{k0} = \langle\Psi_k|z_{1a}|\Psi_0\rangle$ и т.д. — дипольные матричные элементы перехода.

Суммируя далее $|A_{0k}^{(1)}|^2$ по всем конечным состояниям k и интегрируя по прицельному параметру b от b_0 до ∞, получим вклад в полное неупругое сечение от области больших параметров удара. В выражение для сечения помимо квадратов z- и x-компонент дипольного момента будут входить и перекрестные члены, содержащие их произведение. Однако при усреднении по ориентациям молекулы они исчезают и мы их в дальнейшем учитывать не будем. Учитывая, что для средних по ориентациям молекулы квадратов z и x компонент дипольного момента выполняется равенство

$$\overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2} = \overline{|(x_{1a}+x_{2b})_{k0}|^2},$$

для сечения реакции получим

$$\sigma_r(b > b_0) = 8\pi\,\frac{Z^2}{v^2}\sum_k\overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2} \times\Big[\xi_0K_0(\xi_0)K_1(\xi_0) - \frac{1}{2}\,\xi_0^2\beta^2\big(K_1^2(\xi_0) - K_0^2(\xi_0)\big)\Big], \tag{17}$$

где $\xi_0 = \omega_{k0}b_0\sqrt{1-\beta^2}/v$.

В пределе больших скоростей $\xi_0 \to 0$ с учетом асимптотик [25] функций Макдональда при $x \to 0$

$$K_0(x) \to -B + \ln\frac{2}{x}; \quad xK_1(x) \to 1; \quad xK_0(x) \to 0 \tag{18}$$

σ_r будет иметь вид так называемой асимптотики Бете

$$\sigma_r = 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\sum_k\overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2} \times\left(\ln\frac{2v}{\eta b_0\omega_{k0}\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{\beta^2}{2}\right). \tag{19}$$

Здесь $\eta = e^B = 1.781$ ($B = 0.5772$ — постоянная Эйлера). Определим среднюю частоту перехода $\bar{\omega}$ соотношением

$$\ln\bar{\omega} = \frac{\sum\limits_k \overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2}\ln\omega_{k0}}{\sum\limits_k \overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2}}, \qquad (20)$$

причем величина $\sum\limits_k \overline{|(z_{1a}+z_{2b})_{k0}|^2} = \lambda_r$, входящая в это выражение, была определена нами ранее (см. (13)). В принципе формула (20) позволяет вычислить значение $\bar{\omega}$, однако это требует знания волновых функций и энергий всех электронных состояний молекулы. Поэтому, учитывая слабую (логарифмическую) зависимость сечения от $\bar{\omega}$, мы оценили ее следующим образом. Поскольку речь идет о столкновениях с большими параметрами удара, постольку поле ядер молекулы можно заменить на кулоновское поле точечного заряда Z_a, а в этом случае значение $\bar{\omega}$ может быть вычислено точно (ср. [13]) и равно $0.465Z_a^2$, где 0.465 — значение средней частоты перехода в атоме водорода.

После этого окончательное выражение для вклада в сечения всех неупругих процессов от области $b > b_0$ получается в виде

$$\sigma_r(b > b_0) = 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\lambda_r\left(\ln\frac{2v}{\eta b_0\bar{\omega}\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{\beta^2}{2}\right). \quad (21)$$

Складывая сечения $\sigma_r(b < b_0)$ и $\sigma_r(b > b_0)$, получим полное неупругое сечение

$$\sigma_r = 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\lambda_r\left(\ln\frac{2v^2\alpha_r}{\eta Z\bar{w}\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{\beta^2}{2}\right). \qquad (22)$$

Заметим, что зависимость от параметра b_0 исчезла при сшивке. В нерелятивистском пределе полученное выражение для сечения удовлетворяет известному эмпирическому закону подобия [1,26]

$$\sigma = ZQ(E/Z), \qquad (23)$$

где E — энергия налетающего иона, отнесенная к единице атомной массы; Q — некоторая универсальная функция.

Обычно при измерениях или расчетах сечений (σ_{H_2}) неупругих процессов, сопровождающих столкновения быстрых заряженных частиц с молекулой водорода, проводят сравнение с соответствующими удвоенными сечениями ($2\sigma_H$) для столкновений тех же частиц с атомом водорода [27]. Причем экспериментально и теоретически (при расчетах в борновском приближении) отмечают отклонение от этого правила [17]. Подобное сравнение при расчетах непертурбативными методами еще не проводилось, хотя обычно широко (см., например, [26,27] используют оценку $\sigma_H \approx \frac{1}{2}\sigma_{H_2}$ для сечений столкновений атомов водорода с быстрыми многозарядными ионами и в области неприменимости теории возмущений.

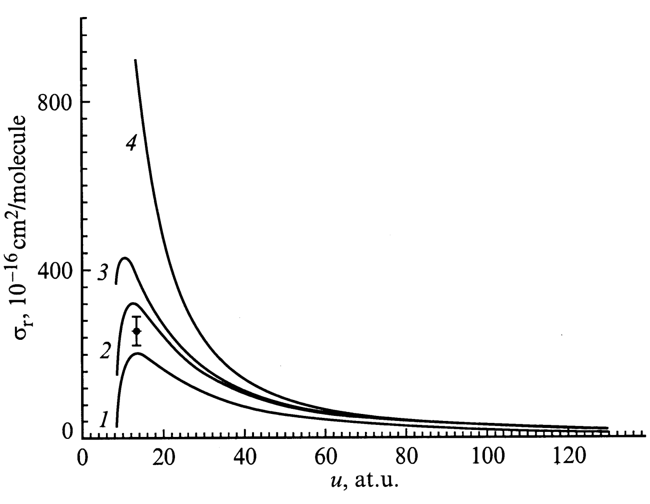
На рисунке приведены результаты расчетов полного неупругого сечения, проведенных по формуле (22) настоящей работы, для $Z_a = 1.166$ и 1, а также удвоенные сечения реакции для столновений быстрых многозарядных ионов с атомами водорода, рассчитанные в эйкональном [13]

$$\sigma_{re} = 2\times 8\pi\frac{Z^2}{v^2}\left(\ln\frac{1.4v^2}{Z\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{\beta^2}{2}\right) \qquad (24)$$

и борновском приближениях (асимптотика Бете) [22]

$$\sigma_{rB} = 2\times 4\pi\frac{Z^2}{v^2}\left(\ln\frac{v^2}{0.16(1-\beta^2)} - \beta^2\right) \qquad (25)$$

для $Z = 59$ и $E > 1$ MeV/nucleon. Здесь же приведено экспериментальное значение для σ_{loss}, полученное в [26] для столкновения иона Pb^{59+} при $E = 4.65$ MeV/nucleon ($v = 13.6$) с молекулярным водородом. В таблице



Сечение реакции, полученное в данной работе (22), для $Z_a = 1.166$ (*1*) и 1 (*2*); удвоенное сечение реакции для атома водорода, рассчитанное в приближении эйконала (24) (*3*) и удвоенное сечение реакции для атома водорода, рассчитанное в борновском приближении (25) (*4*). Экспериментальное значение сечения σ_{loss} из [26].

Сечения реакции для столкновения ионов Pb^{Z+} с энергией $E = 4.65$ MeV/nucleon с молекулярным водородом (в единицах 10^{-16} cm²/molecule).

Z	σ_{loss}	σ_{r1}	σ_{r2}	σ_{re}	σ_{rB}
52	220^{+24}_{-30}	178	274	330	722
53	220^{+24}_{-33}	182	280	338	750
54	220^{+24}_{-33}	186	287	347	779
55	230^{+25}_{-35}	189	293	356	808
57	250^{+28}_{-38}	196	306	373	868
59	260^{+30}_{-39}	203	318	391	930

Примечание. σ_{loss} — экспериментальные данные [26], σ_{r1} и σ_{r2} — расчет по формуле (22) с $Z_a = 1.166$ и 1 соответственно, σ_{re} — расчет по формуле (24), σ_{rB} — расчет по формуле (25).

приведены полученные в [26] экспериментальные данные по $\sigma_{\rm loss}$ в столкновениях ионов Pb^{Z+} разной кратности с молекулярным водородом при $E = 4.65\,\mathrm{MeV/nucleon}$. Здесь же приводятся результаты расчетов неупругих сечений по формулам (22), (24) и (25).

Приведенные на рисунке и в таблице результаты наших расчетов иллюстрируют соответствующие погрешности $\sigma_{\mathrm{H}_2} = 2\sigma_{\mathrm{H}}$ и позволяют сделать следующие выводы. Корректный учет сильного поля иона приводит к значительной разнице между сечениями, вычисленными в борновском приближении и в приближении эйконала, как в случае столкновений многозарядных ионов с атомами, так и в случае столкновений с молекулами. Эффекты учета молекулярной структуры электронных состояний могут приводить к существенным (более 30%) отклонениям от распространенного правила оценок, согласно которому сечение столкновения с двухатомной молекулой приблизительно равно сумме соответствующих сечений для изолированных атомов, причем нарушение этого правила возрастает с уменьшением относительной скорости столкновения.

Список литературы

[1] *Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К.* Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986. 200 с.
[2] *Eichler J., Meyrhof W.E.* Relativistic Atomic Collisions. New York: Academic Press Inc., 1995. 275 p.
[3] *McGuire J.H.* // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 29. P. 217–323.
[4] *Матвеев В.И.* // ЭЧАЯ. 1995. Т. 26. Вып. 3. С. 780–820.
[5] *Eichler J.* // Phys. Rep. 1990. Vol. 193. N 4&5. P. 167–277.
[6] *Eichler J.* // Phys. Rev. 1977. Vol. 15. N 5. P. 1856–1862.
[7] *Юдин Г.Л* // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. Вып. 3. С. 1026–1037.
[8] *Salop A., Eichler J.* // J. Phys. 1979. Vol. 12B. N 2. P. 257–264.
[9] *Матвеев В.И., Мусаханов М.М.* // ЖЭТФ. 1994. Т. 105. Вып. 2. С. 280–287.
[10] *McGuire J.H.* // Phys. Rev. 1982. Vol. 26A. N 1. P. 143–147.
[11] *Grothers D.S.F., McCann S.H.* // J. Phys. 1983. Vol. 16B. N 17. P. 3229–3242.
[12] *Матвеев В.И., Толманов С.Г.* // ЖЭТФ. 1995. Т. 107. Вып. 6. С. 1780–1791.
[13] *Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю.* // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. Вып. 5 (11). С. 1646–1660.
[14] *Khabibullaev P.K., Matveev V.I. and Matrasulov D.U.* // J. Phys. 1998. Vol. 31B. N 14. P. L607–L611.
[15] *Becker U., Grün N., Scheid W., Soff G.* // Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 52. N 19. P. 2016–2019.
[16] *Baltz A.J.* // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. N 7. P. 1231–1234.
[17] *Nagy L., Vegh L.* // Phys. Rev. 1992. Vol. 46A. N 1. P. 284–289.
[18] *Nagy L., Vegh L.* // Phys. Rev. 1992. Vol. 46A. N 1. P. 290–295.
[19] *Inokuti M.* // Rev. Mod. Phys. 1971. Vol. 43. N 3. P. 297–347.
[20] *Nagy L., Vegh L.* // Phys. Rev. 1994. Vol. 50A. N 5. P. 3984–3991.
[21] *McGuire J.H., Mueller A., Shuch B.* et al.// Phys. Rev. 1987. Vol. 35A. N 6. P. 2479–2483.
[22] *Ландау Л.Д., Лифщиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989. 667 с.
[23] *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975. 336 с.
[24] *Wang S.C.* // Phys. Rev. 1928. Vol. 28. P. 279–286.
[25] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 831 с.
[26] *Schlachter A.S., Berkner K.H., Graham W.G.* et al. // Phys. Rev. 1981. Vol. 24A. N 2. P. 1110–1111.
[27] *Rudd M.E., Kim Y.-K., Madison D.H., Gallagher J.V.* // Rev. Mod. Phys. 1985. Vol. 57. N 4. P. 965–994.