

01;02;12

## Перезарядка при столкновении тяжелых малозарядных ионов

© В.П. Шевелько

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,  
117924 Москва, Россия  
e-mail: shev@sci.lebedev.ru

(Поступило в Редакцию 15 июня 2000 г. В окончательной редакции 20 ноября 2000 г.)

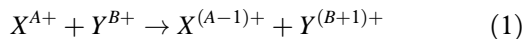
Методом многоканальной нормировки в представлении параметра удара вычислены вероятности и эффективные сечения одноэлектронной перезарядки, возникающей при столкновениях между тяжелыми одно- и четырехзарядными ионами Xe, Cs, Ba, Pb, Bi и U в области относительных энергий  $E > 0.1 \text{ keV/u}$ . Вычисленные сечения довольно велики и достигают максимума  $\sigma_m \approx 10^{-15} \text{ cm}^2$  при относительных энергиях  $E_m \approx 10-30 \text{ keV/u}$ . С уменьшением энергии столкновений  $E < 10 \text{ keV/u}$  сечения резко убывают с ростом дефекта резонанса реакции, а при больших энергиях  $E > 1 \text{ MeV/u}$  процессы перезарядки происходят в основном в результате захвата электронов внутренних оболочек ионных мишеней. Результаты расчетов сечений перезарядки малозарядных ионов Xe, Cs, Ba, Pb, Bi и U сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами.

### Введение

Процессы перезарядки и ионизации, возникающие при столкновениях тяжелых малозарядных ионов типа  $\text{Bi}^+$ ,  $\text{U}^{4+}$  и т.д. с атомами и ионами, представляют интерес для проблем ионного термоядерного синтеза, образования ионных пучков с большим временем жизни в ускорительных машинах и других задачах [1–3]. Процессы с изменением зарядового состояния ионов при столкновении с атомами и молекулами остаточного газа при энергиях  $E = 1-100 \text{ MeV/u}$  определяют времена жизни ионных пучков в ускорителях, а ион-ионные процессы, происходящие внутри пучка при относительных энергиях  $E = 1-10 \text{ keV/u}$ , существенно влияют на качество пучка, т.е. на потери ионов в результате кулоновского ион-ионного взаимодействия. Имеющиеся экспериментальные и теоретические данные по эффективным сечениям перезарядки и ионизации, возникающих при столкновении между тяжелыми малозарядными ионами, весьма ограничены [1,3], поэтому соответствующие систематические расчеты приобретают самостоятельный интерес.

В случае тяжелых атомов и ионов с зарядом  $q < 10$  и числом электронов порядка 50–100 наиболее естественным методом расчета сечений ион-ионных столкновений представляется статистический метод Томаса–Ферми [4] или метод классических траекторий Монте-Карло [5], однако, насколько известно, подобные расчеты для таких систем не проводились. Расчеты, выполненные другими методами, практически отсутствуют, за исключением нескольких реакций [3].

В настоящей работе рассмотрены процессы одноэлектронной перезарядки при столкновении тяжелых малозарядных ионов

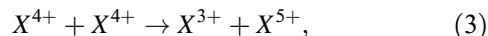
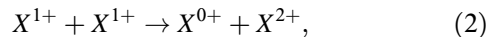


в области относительных энергий  $E \geq 1 \text{ keV/u}$ . Известно, что перезарядка — сложный процесс с перераспределением частиц, в результате которого изменяется

состав атомов и ионов до и после столкновения, поэтому изучение таких реакций с теоретической точки зрения является более сложной задачей, чем исследование электронно-атомных столкновений. Так, если характеристики электронно-атомных столкновений в настоящее время могут быть вычислены с точностью порядка 10–30%, то в случае ион-атомных столкновений, в особенности связанных с перераспределением частиц, расчет сечений с точностью до фактора 2 часто является весьма трудоемкой задачей. Это связано с рядом принципиальных трудностей, возникающих при описании таких процессов с неортогональностью волновых функций начального и конечного состояний полной системы, использованием потенциалов взаимодействия до и после столкновения (так называемое post-prior расхождение), наличием кулоновского взаимодействия между образующимися ионами в конечном канале и отсутствием такового в начальном канале при столкновении ионов с нейтральными атомами и т.д. (см., например, [1]).

В настоящей работе предложен метод многоканальной нормировки в представлении параметра удара для расчета вероятностей и эффективных сечений одноэлектронной перезарядки (1). Метод основан на использовании соотношения между квазиклассической и квантовомеханической амплитудами перезарядки, полученного в работах [6,7], и дает удовлетворительное описание процессов перезарядки при столкновении легких атомов и ионов [7,8], поэтому представляется перспективным использование метода для процессов перезарядки, возникающей при столкновениях между тяжелыми ионами.

В работе представлены первые предварительные расчеты сечений перезарядки одно- и четырехзарядных ионов в области относительных энергий  $E \gtrsim 1 \text{ keV/u}$  для реакций



где  $X = \text{Xe}, \text{Cs}, \text{Ba}, \text{Pb}, \text{Bi}$  и  $\text{U}$ .

Малозарядные ионы именно этих атомов представляют в настоящее время интерес для проблем ионного термоядерного синтеза [2]. Используется система атомных единиц  $e = m_e = \hbar = 1$  до тех пор, пока единицы величин не указаны особо.

## Соотношение между квазиклассической и квантово-механической амплитудами перезарядки

В работах [6–8] рассмотрены процессы перезарядки между  $nlm$ -компонентами мишени и образующегося иона

$$X^q + A(n_0 l_0 m_0) \rightarrow X^{(q-1)+}(n_1 l_1 m_1) + A^+, \quad (4)$$

где  $n, l$  и  $m$  — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа, и в приближении Бринкмана–Крамерса (модификация первого порядка теории возмущений [1,9]) получено соотношение между квазиклассической  $a(\rho, v)$  и квантово-механической  $f(\mathbf{k}, v)$  амплитудами перезарядки в виде

$$a(\rho, v) = \frac{1}{v(2\pi)^2} \int_P f(\mathbf{k}, v) e^{i\mathbf{k}\rho} d^2\mathbf{k}, \quad (5)$$

где  $v$  — относительная скорость сталкивающихся частиц,  $\rho$  — прицельный параметр.

Интегрирование в (5) проводится по плоскости  $P$ , описываемой уравнением

$$\mathbf{k}\mathbf{v} - \omega - \frac{v^2}{2} = 0, \quad (6)$$

где  $\omega$  — дефект резонанса, т.е. разность между энергиями связи оптического (захватываемого) электрона в начальном 0 и конечном 1 состояниях

$$\omega = I_0 - I_1. \quad (7)$$

Дефект резонанса  $\omega$  может быть как положительной, так и отрицательной величиной. Вектор  $\mathbf{k}$  в уравнениях (5), (6) связан с обычным вектором передачи импульса  $\mathbf{Q}$  соотношением

$$\mathbf{k} = \mathbf{Q} + \frac{\mathbf{v}}{v} \left( \frac{\omega}{v} + \frac{v}{2} \right). \quad (8)$$

Соотношение (5) получено в предположении прямолинейной траектории налетающего иона и с учетом фактора трансляции захватываемого электрона  $\exp(i\mathbf{v}\mathbf{r})$ . Согласно (5), радиальная часть амплитуды перезарядки для перехода  $n_0 l_0 m_0 - n_1 l_1 m_1$  имеет вид

$$\begin{aligned} a(\rho, v) = & \frac{4}{v} \int_0^\infty k dk C_{l_0 m_0} C_{l_1 m_1} P_{l_0}^{m_0}(\cos \Theta_0) P_{l_1}^{m_1}(\cos \Theta_1) \\ & \times J_{\Delta m}(k\rho) F_{n_0 l_0} \left( \sqrt{k^2 + (\omega/v - v/2)^2} \right) \\ & \times F_{n_1 l_1} \left( \sqrt{k^2 + (\omega/v + v/2)^2} \right), \quad (9) \end{aligned}$$

$$C_{lm} = \left( \frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2}, \quad \Delta m = |m_0 - m_1|, \quad (10)$$

$$\cos \Theta_1 = \frac{\frac{v}{2} + \frac{\omega}{v}}{\sqrt{k^2 + \left(\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right)^2}},$$

$$\cos \Theta_0 = \frac{\frac{v}{2} - \frac{\omega}{v}}{\sqrt{k^2 + \left(\frac{\omega}{v} - \frac{v}{2}\right)^2}}, \quad (11)$$

где  $P_l^m$  — полином Лежандра,  $J_m(x)$  — функция Бесселя.

Функции  $F$  начального и конечного состояний определяются радиальными интегралами

$$F_{n_0 l_0}(y) = \int_0^\infty P_{n_0 l_0}(r) j_{l_0}(ry) r dr, \quad (12)$$

$$F_{n_1 l_1}(x) = \int_0^\infty P_{n_1 l_1}(r) j_{l_1}(rx) V(r) r dr, \quad x^2 - y^2 = 2\omega, \quad (13)$$

где  $j_l(x)$  — сферическая функция Бесселя,  $V(r)$  — взаимодействие образующегося иона  $X^{(q-1)+}$  с оптическим электроном, радиальные функции  $P(r)$  которого имеют нормировку

$$\int_0^\infty P_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (14)$$

Сечение перезарядки в представлении параметра удара имеет вид

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^\infty W(\rho, v) \rho d\rho, \quad (15)$$

где  $W(\rho, v) = |a(\rho, v)|^2$  — вероятность перезарядки.

## Водородоподобное приближение

В случае перезарядки ядер на водородоподобных системах

$$Z_1 + Z_0(n_0 l_0 m_0) \rightarrow Z_1(n_1 l_1 m_1) + Z_0 \quad (16)$$

выражения для вероятностей и сечений можно получить в замкнутом аналитическом виде, используя Н-подобные волновые функции для оптического электрона в начальном и конечном состояниях

$$P_{nl}^z(r) = Z^{1/2} P_{nl}^H(Zr), \quad (17)$$

где  $P_{nl}^H(r)$  — радиальная волновая функция атома водорода, и кулоновский потенциал взаимодействия в виде  $V(r) = -Z_1/r$ .

Для перезарядки из основного  $1s_0$ -состояния

$$Z_1 + Z_0(1s_0) \rightarrow Z_1(nlm) + Z_0 \quad (18)$$

в конечные состояния  $1s \leq nl \leq 3d$  амплитуды перезарядки  $a(\rho, \nu)$  имеют вид

$$\begin{aligned}
 a(1s_0 - 1s_0) &= \frac{2\rho^2(Z_0Z_1)^{5/2}}{\nu D^2} K_2(\rho D), \\
 a(1s_0 - 2s_0) &= \frac{\rho^2(Z_0Z_1)^{5/2}}{\sqrt{2}\nu D^2} \left( K_2(\rho D) - \frac{\rho Z_1^2 K_3(\rho D)}{12D} \right), \\
 a(1s_0 - 2p_0) &= \frac{\sqrt{2}\rho^3(Z_0Z_1)^{5/2}Z_1}{12\nu D^3} \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right) K_3(\rho D), \\
 a(1s_0 - 2p_{\pm 1}) &= \frac{\rho^3(Z_0Z_1)^{5/2}Z_1}{12\nu D^2} K_2(\rho D), \\
 a(1s_0 - 3s_0) &= \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{(Z_0Z_1)^{5/2}\rho^2}{\nu D^2} \\
 &\times \left( K_2(\rho D) - \frac{8Z_1^2\rho}{3^4D} K_3(\rho D) + \frac{Z_1^4\rho^2}{3^6D^2} K_4(\rho D) \right), \\
 a(1s_0 - 3p_{\pm 1}) &= \frac{2^2}{3^4} \frac{(Z_0Z_1)^{5/2}Z_1\rho^3}{\nu D^2} \\
 &\times \left( K_2(\rho D) - \frac{Z_1^2\rho}{36D} K_3(\rho D) \right), \quad (19) \\
 a(1s_0 - 3d_0) &= \frac{2^3(Z_0Z_1)^{5/2}Z_1^2\rho^3}{3^5\sqrt{6}\nu D^3} \\
 &\times \left( \left[ 2 \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + D^2 \right] \frac{\rho}{2^3D} K_4(\rho D) - K_3(\rho D) \right), \\
 a(1s_0 - 3d_{\pm 1}) &= \frac{(Z_0Z_1^2)^{5/2}Z_1^2\rho^4}{3^5\nu D^3} \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right) K_3(\rho D), \\
 a(1s_0 - 3d_{\pm 2}) &= \frac{(Z_0Z_1^2)^{5/2}Z_1^2\rho^4}{2 \cdot 3^5\nu D^2} K_2(\rho D), \\
 D^2 &= \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + \frac{Z_1^2}{n_1^2}, \quad \omega = \frac{Z_0^2}{2n_0^2} - \frac{Z_1^2}{2n_1^2}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

где  $K_n(r)$  — функции Макдональда с асимптотиками

$$K_n(r) \cong \begin{cases} (n-1)!2^{n-1}r^{-n}, & n \neq 0, r \rightarrow 0, \\ \ln \frac{2}{r} = \ln \frac{2}{r} - 0.577, & n = 0, r \rightarrow 0, \gamma = 1.78, \\ \sqrt{\frac{\pi}{2r}} e^{-r}, & r \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (21)$$

Формула (19) для вероятности резонансной перезарядки (дефект резонанса  $\omega = 0$ ) совпадает с формулой, полученной в работе [9] для перезарядки протонов на атомах водорода в основном состоянии, а также с формулой, полученной в [10] методом сильной связи двух уровней (с точностью до фактора  $\sqrt{\pi}/2$ ). Приведенные выше аналитические формулы для амплитуд вероятностей могут быть использованы для расчета распределения вероятностей и сечений перезарядки по квантовым числам  $l$  и  $m$ , а также для оценки вероятностей многоэлектронного захвата при столкновении многозарядных ионов с атомными и ионными мишенями.

Для переходов  $n_0 - n_1$

$$Z_1 + Z_0(n_0) \rightarrow Z_1(n_1) + Z_0, \quad (22)$$

т.е. усредненных по квантовым числам  $lm$ , суммирование вероятностей перезарядки даже в водородоподобном приближении не представляется возможным. Однако в этом случае можно воспользоваться свойствами квантовой амплитуды перехода  $n_0 - n_1$ , радиальная часть которой имеет вид [8]

$$\begin{aligned}
 |f_{n_0 n_1}(k, \nu)|^2 &= \frac{1}{n_0^2} \sum_{l_0 m_0 l_1 m_1} |f_{n_0 l_0 m_0, n_1 l_1 m_1}(k, \nu)|^2 \\
 &= \frac{2^6(Z_0Z_1)^5}{n_0^5 n_1^3 \left[ k^2 + \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + \frac{Z_1^2}{n_1^2} \right]^6}, \quad (23)
 \end{aligned}$$

где величина  $k$  определена в (8).

Используя соотношение (5) с амплитудой  $f_{n_0 n_1}(k, \nu)$  и тот факт, что для реакции (22) дефект резонанса слабо зависит от квантовых чисел  $lm$ , для вероятности перезарядки, усредненной по  $lm$ , получаем<sup>1</sup>

$$\begin{aligned}
 |a_{n_0 n_1}(\rho, \nu)|^2 &= \frac{4(Z_0Z_1)^5 \rho^4}{n_0^5 n_1^3 \nu^2 \left[ \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + \frac{Z_1^2}{n_1^2} \right]^2} \\
 &\times K_2^2 \left( \rho \sqrt{\left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + \frac{Z_1^2}{n_1^2}} \right). \quad (24)
 \end{aligned}$$

Сечение перезарядки перехода  $n_0 - n_1$ , вычисленное с квантовой (23) или квазиклассической (24) амплитудами, имеет одинаковый вид и совпадает с результатом, полученным в [12],

$$\begin{aligned}
 \sigma(n_0 - n_1) &= \frac{8\pi a_0^2}{\nu^2} \int_{\left| \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right|}^{\infty} |f_{n_0 n_1}(k, \nu)|^2 k dk \\
 &= 2\pi \int_0^{\infty} |a_{n_0 n_1}(\rho, \nu)|^2 \rho d\rho \\
 &= \pi a_0^2 \frac{2^8(Z_0Z_1)^5}{5n_0^5 n_1^3 \nu^2} \left[ \left( \frac{\omega}{\nu} + \frac{\nu}{2} \right)^2 + \frac{Z_1^2}{n_1^2} \right]^{-5}, \\
 \omega &= I_0 - I_1 = \frac{Z_0^2}{2n_0^2} - \frac{Z_1^2}{2n_1^2}. \quad (25)
 \end{aligned}$$

Формула (25) носит название приближения Бринкмана–Крамерса и используется для оценки сечений перезарядки при больших энергиях столкновения  $E > 25 \text{ keV/u}$  ( $\nu > 1 \text{ at.u.}$ ).

<sup>1</sup> Такая процедура получения усредненных по магнитным и орбитальным квантовым числам амплитуд часто применяется в теории атомных столкновений. Например, в работе [11] она использовалась для вычисления вероятностей переходов между высоковозбужденными атомными уровнями.

## Нормировка вероятностей перезарядки в представлении параметра удара

Расчет вероятностей и сечений перезарядки по формулам (9)–(15) часто приводит к завышению результатов на порядок по сравнению с экспериментальными данными, особенно при малых скоростях относительного движения  $v < \sqrt{2|\omega|}$ . Это связано с тем обстоятельством, что соотношение (5) получено в первом порядке теории возмущений, оно может приводить к нарушению сохранения потока налетающих и рассеянных частиц, т.е. к нарушению унитарности матрицы рассеяния и, как следствие, к большим (более единицы) значениям вероятности перехода. Этот недостаток обычно устраняется использованием более точных методов расчета, например метода сильной связи атомных состояний или методов нормировки вероятностей перезарядки в представлении параметра удара (см., например, [1,10]).

В настоящей работе используется метод многоканальной нормировки вероятностей перезарядки для перехода 0–1 в виде

$$W_{01}^N(\rho, v) = \frac{W_{01}(\rho, v)}{1 + \sum_j W_{0j}(\rho, v)}, \quad (26)$$

где суммирование в знаменателе проводится по всем возможным конечным каналам перезарядки  $j$  образующегося иона  $X^{(q-1)+}$ , включая перезарядку в рассматриваемое состояние 1.

Формула (26) имеет простой физический смысл: если вероятности  $W_{01}$  малы, то нормированная вероятность также мала:  $W_{01}^N \approx W_{01}$ . Если же ненормированные вероятности  $W_{01}$  велики, т.е.  $W_{01} \gg 1$ , нормированные вероятности остаются всегда меньше единицы:  $W_{01}^N \leq 1$ . Вообще говоря, в сумму в знаменателе (26) следует добавить вероятности возможных каналов ионизации, возникающей при столкновении тяжелых частиц, однако в области малых энергий, где существенна нормировка, вклад ионизации обычно мал по сравнению с каналом перезарядки (см., например, [1]), поэтому в настоящей работе он не учитывался.

Расчет полных сечений перезарядки многоэлектронных систем по формулам (9)–(15), (26) даже в небольшом интервале энергий весьма затруднителен, что связано с необходимостью расчета волновых функций и матричных элементов большого числа возбужденных состояний  $nl$  иона  $X^{(q-1)+}(nl)$ , вклад которых в полное сечение может быть одного порядка величины, а также с необходимостью учета захвата электронов внутренних оболочек мишени [13]. Кроме того, для большинства случаев значения атомных энергий возбужденных уровней тяжелых ионов вообще неизвестны. Вместе с тем для ряда приложений необходимо иметь количественные оценки полных сечений перезарядки, не прибегая к численным расчетам уровней энергии и радиальных волновых функций. Указанная цель может быть достигнута с помощью предложенного метода многоканальной нормировки и использования водородоподобных волновых функций для захватываемого электрона.

Целесообразность использования  $H$ -подобных функций связана с двумя основными причинами. Во-первых, известно [1], что в полное сечение перезарядки большой вклад вносит захват в высоковозбужденные (водородоподобные) состояния образующего иона, а при больших энергиях столкновения сечения перезарядки определяются главным образом захватом внутренних электронов мишени, которые находятся вблизи неэкранированного ядра и поэтому также носят водородоподобный характер. Во-вторых, с водородоподобными функциями численные расчеты полных сечений перезарядки, т.е. усредненных по квантовым числам  $m$  и  $l$ , существенно упрощаются, что связано со спецификой матричных элементов перезарядки, являющихся фурье-компонентами волновых функций оптического электрона [12]. В настоящей работе задача о нормировке вероятностей и сечений перезарядки в представлении параметра удара с  $H$ -подобными волновыми функциями осуществлена с помощью компьютерного кода CAPTURE, описанного в следующем разделе.

## Численные расчеты вероятностей и сечений перезарядки

Численные расчеты вероятностей и сечений перезарядки проводились с помощью программы CAPTURE по формулам (9)–(15), (26) с использованием водородоподобных функций (17) с эффективным зарядом

$$Z^* = n\sqrt{2l_{nl}}, \quad (27)$$

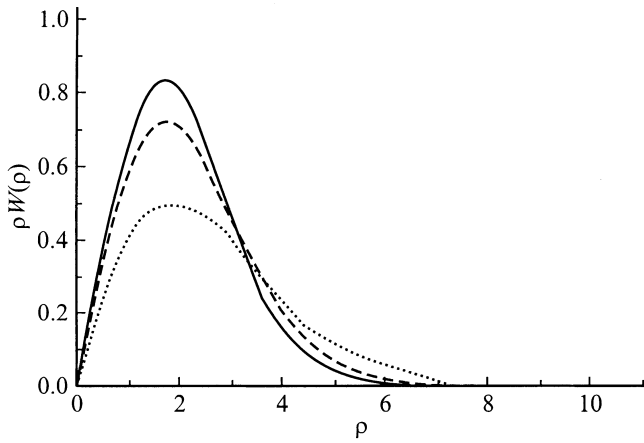
где  $l_{nl}$  — энергия связи электрона в начальном или конечном состояниях,  $n$  — главное квантовое число.

Вообще говоря, возможно и использование  $H$ -подобных волновых функций с целочисленным зарядом  $Z$  (как правило, это спектроскопический символ атома или иона) и эффективным квантовым числом  $n^*$

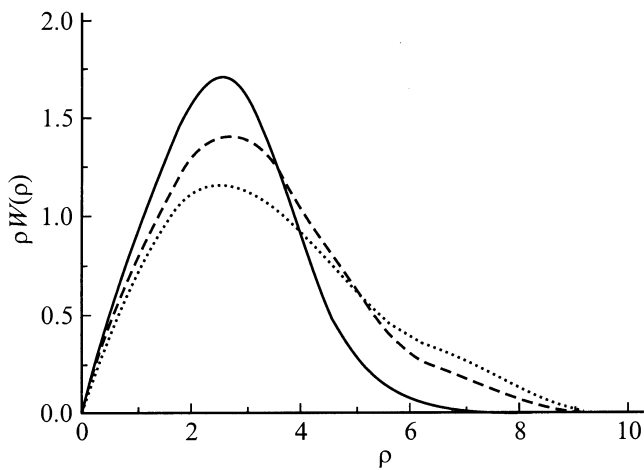
$$n^* = (2l_{nl}/Z^2)^{-1/2}. \quad (28)$$

Функции с эффективными (нецелочисленными) квантовыми числами  $n^*$  использовались, например, для расчетов дипольных и квадрупольных матричных элементов в таблицах Бейтса–Дамгаард [14]. В случае задачи о перезарядке использование приближения (17), (27) с целочисленными значениями главного квантового числа  $n$  является необходимым, так как позволяет аналитически выполнить усреднение по орбитальным и магнитным квантовым числам  $lm$  и тем самым существенно упростить процедуру расчета вероятностей и сечений перезарядки.

В качестве потенциала взаимодействия  $V(r)$  в (13) используется кулоновский потенциал вида  $V(r) = -Z^*/r$ , где  $Z^*$  — эффективный заряд (27) образующегося иона  $X^{(q-1)+}$ . Программа позволяет выполнить нормировку на произвольное число каналов, однако для практических расчетов, как правило, достаточно учета  $j < 50$  конечных состояний с главными квантовыми числами  $n$ .



**Рис. 1.** Вычисленные вероятности  $\rho W(\rho)$  захвата протоном  $1s$ -электрона атома водорода  $\text{H}^+ + \text{H}(1s) \rightarrow \text{H} + \text{H}^+$  во все конечные состояния образующегося атома  $\text{H}$  как функции прицельного параметра  $\rho$  при относительной скорости  $v = 1$  а.е. Пунктир — классический расчет [15], штриховая кривая — метод сильной связи молекулярных состояний [16], сплошная — метод многоканальной нормировки (настоящая работа).



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1, для столкновений  $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+ + \text{H}^+$ .

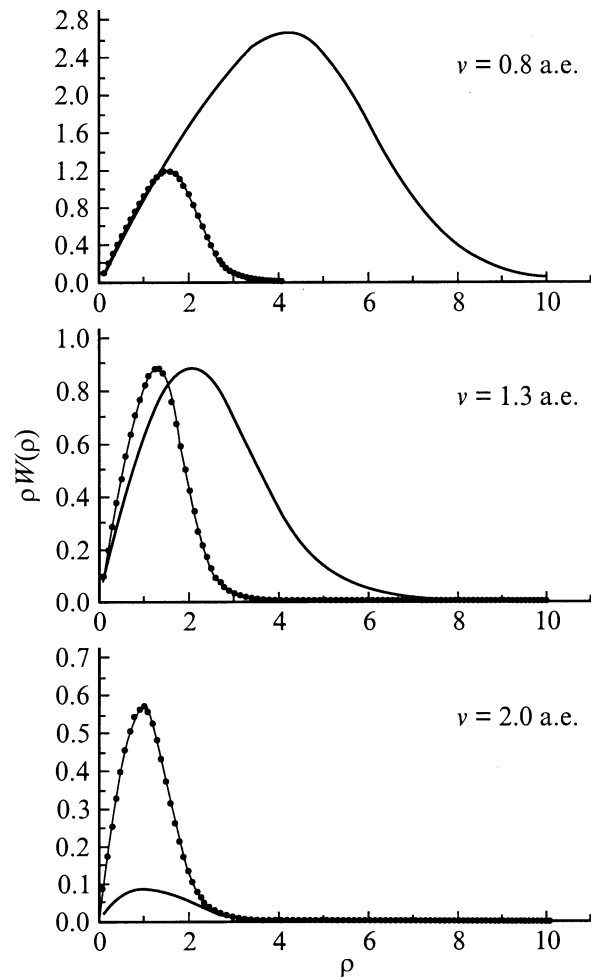
Возможен расчет как полных, так и парциальных (по главному квантовому числу  $n$ ) вероятностей и сечений, т.е. величин, усредненных по орбитальным  $l$  и магнитным  $m$  квантовым числам начального и конечного состояний.

В программе CAPTURE ненормированные вероятности одноэлектронной перезарядки  $W_{01}$  в (26) умножаются на фактор  $0.295N$ , где  $N$  — число эквивалентных электронов в оболочке мишени, из которой происходит захват, а численный коэффициент  $0.295$  обеспечивает правильную асимптотику сечения при больших энергиях [1].

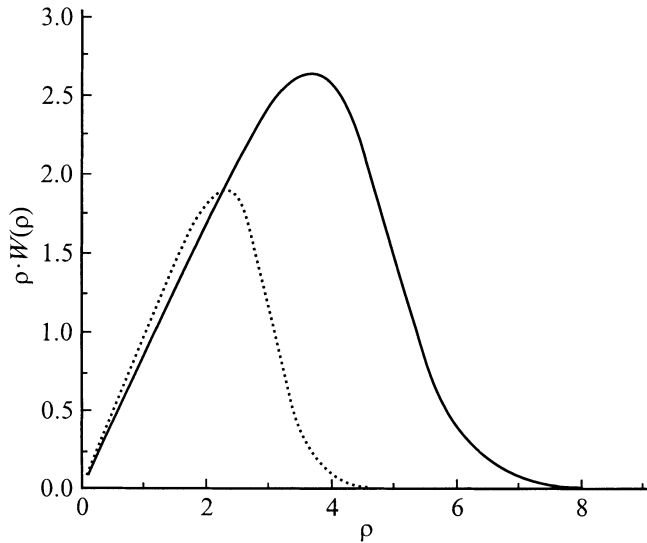
Сравнение результатов расчета вероятностей и сечений перезарядки с помощью программы CAPTURE по

формулам (9)–(15), (17), (26), (27) с экспериментальными данными и расчетами другими методами приведено на рис. 1–10. На рис. 1–3 приведены вероятности (точнее, величины  $\rho W(\rho)$ ) перезарядки протонов и  $\alpha$ -частиц на атомах водорода и лития. В случае перезарядки на атомах водорода  $\text{H}(1s)$  (рис. 1, 2) вычисленные методом многоканальной нормировки вероятности захвата электрона находятся в хорошем согласии с расчетами, выполненными методом сильной связи молекулярных состояний и классическим подходом.

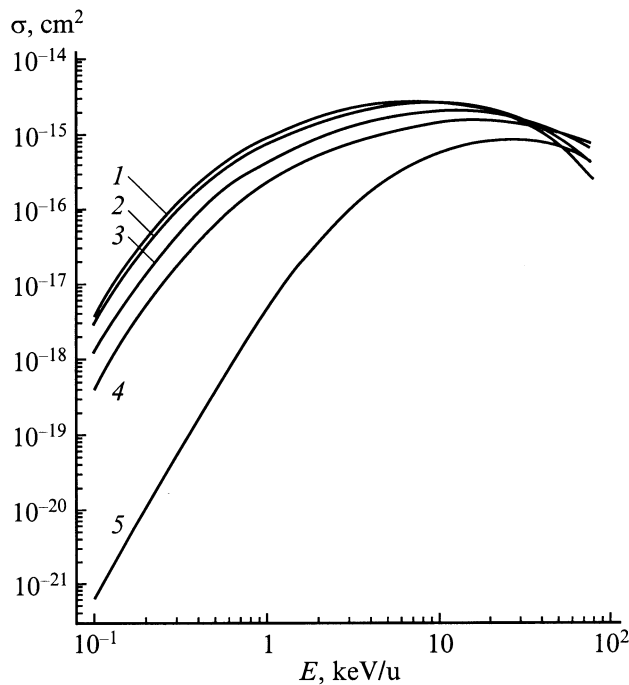
Перераспределение вероятностей захвата электронов из различных оболочек мишени в случае столкновений альфа-частиц с атомами  $\text{Li}$  приведено на рис. 3 для скоростей  $v = 0.8, 1.3$  и  $2.0$  а.е. ( $1$  а.е.  $\cong 2.2 \cdot 10^8$  см/с). При скорости  $v = 0.8$  а.е. преимущественно захватывается внешний  $2s$ -электрон, при  $v = 1.3$  а.е. вероятности захвата  $2s$ - и  $1s$ -электронов примерно равны, а при скоростях  $v > 2.0$  а.е. в основном происходит захват только внутренних  $1s$ -электронов. Полное сечение перезарядки в реакции  $\text{He}^{2+} + \text{Li}(1s^2 2s)$ , вычисленное по формулам (9)–(15), (17), (26), (27), хорошо согласуется с экс-



**Рис. 3.** Перераспределение вероятностей захвата внешнего  $2s$ - и внутреннего  $1s$ -электронов атома  $\text{Li}(1s^2 2s)$  при столкновении с ионами  $\text{He}^{2+}$ . Сплошные кривые — захват  $2s$ -электрона, точки — захват  $1s$ -электрона, настоящая работа.



**Рис. 4.** Вероятности захвата  $\rho W(\rho)$  внешнего электрона в столкновениях  $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}(6p^2) \rightarrow \text{Bi}^{0+} + \text{Bi}^{2+}$  и  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}(5f^2) \rightarrow \text{U}^{3+} + \text{U}^{5+}$  во все конечные состояния образующихся ионов  $\text{Bi}^{0+}$  и  $\text{U}^{3+}$  соответственно при относительной скорости  $v = 1$  а.е. Сплошная кривая — для столкновений ионов висмута, пунктир — для столкновений ионов урана, настоящая работа.



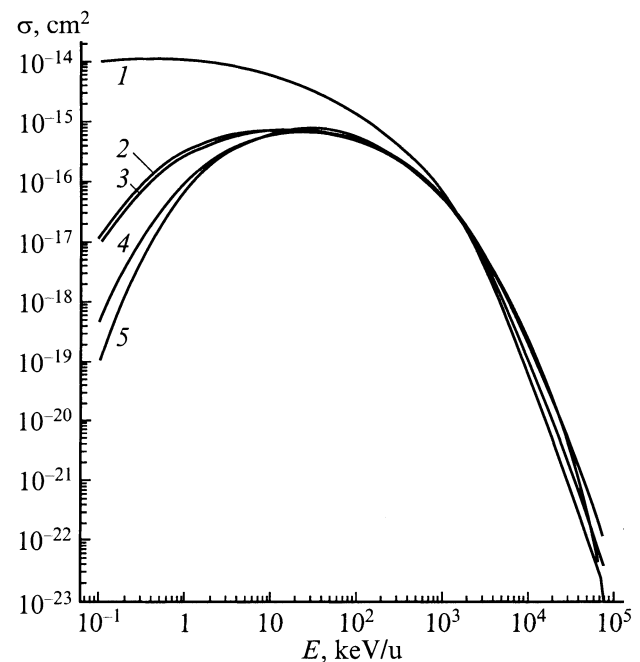
**Рис. 5.** Сечения перезарядки тяжелых однозарядных ионов (2) как функции относительной энергии сталкивающихся ионов  $E, \text{keV/u}$ . 1 —  $\text{Ba}^{1+} + \text{Ba}^{1+}$ , 2 —  $\text{U}^{1+} + \text{U}^{1+}$ , 3 —  $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}$ , 4 —  $\text{Xe}^{1+} + \text{Xe}^{1+}$ , 5 —  $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$ , настоящая работа.

периментальными данными [17,18] и расчетами других авторов.

На рис. 4 приведены вероятности захвата внешнего электрона при столкновениях  $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}$  и  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}$

во все состояния образующихся ионов  $\text{Bi}^{0+}$  и  $\text{U}^{3+}$  соответственно при относительной скорости  $v = 1$  а.е. На рисунках приведены величины  $\rho W(\rho)$ , соответствующие подынтегральному выражению в (15) и имеющие максимум при прицельных параметрах  $\rho \approx 2.2a_0$  и  $3.8a_0$ , где  $a_0$  — боровский радиус. Сами же величины нормированных вероятностей перезарядки  $W(\rho) \rightarrow \text{const}$  при  $\rho \rightarrow 0$  соответственно  $W(\rho = 0) = 0.87$  и  $0.97$  для ионов  $\text{Bi}^{1+}$  и  $\text{U}^{4+}$  и экспоненциально убывает при  $\rho \rightarrow \infty$  согласно асимптотическому поведению функций Макдональда (21).

Полные сечения перезарядки однозарядных и четырехзарядных ионов приведены на рис. 5 и 6, а численные значения сечений — в таблице как функции относительной энергии  $E [\text{keV/u}] \cong 25v^2 [\text{a.e.}]$ , где  $v$  — относительная скорость в атомных единицах. В таблице приведены также значения дефектов резонанса  $\omega$  для рассматриваемых реакций перезарядки. Из рис. 5 и 6 видно, что, несмотря на кулоновский характер взаимодействия сталкивающихся ионов, сечения перезарядки довольно велики и достигают максимума при энергиях  $E \cong 10\text{--}30 \text{ keV/u}$ , т.е. при относительной скорости  $v \cong 1$  а.е.; при этом для столкновений  $X^{1+} + X^{1+} \rightarrow X^{0+} + X^{2+}$  максимальные сечения  $\sigma_m \approx 0.5\text{--}3.0 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ , а для столкновений  $X^{4+} + X^{4+} \rightarrow X^{3+} + X^{5+}$  максимальные значения  $\sigma_m \approx 5\text{--}8 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  соответственно. При энергиях  $E < 10 \text{ keV/u}$  сечения перезарядки резко убывают с ростом дефекта резонанса  $\omega$  и существенно зависят от структуры электронных оболочек сталкивающихся ионов.



**Рис. 6.** Сечения перезарядки тяжелых четырехзарядных ионов (3) как функции относительной энергии  $E, \text{keV/u}$ . 1 —  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}$ , 2 —  $\text{Bi}^{4+} + \text{Bi}^{4+}$ , 3 —  $\text{Xe}^{4+} + \text{Xe}^{4+}$ , 4 —  $\text{Pb}^{4+} + \text{Pb}^{4+}$ , 5 —  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}$ , настоящая работа.

Вычисленные сечения перезарядки ( $\text{cm}^2$ ) при ион-ионных столкновениях (2), (3) как функции относительной энергии  $E$

$E, \text{keV/u}$	Сталкивающиеся ионы									
	$\text{Xe}^+ + \text{Xe}^+$	$\text{Cs}^+ + \text{Cs}^+$	$\text{Ba}^+ + \text{Ba}^+$	$\text{Bi}^+ + \text{Bi}^+$	$\text{U}^+ + \text{U}^+$	$\text{Xe}^{4+} + \text{Xe}^{4+}$	$\text{Pb}^{4+} + \text{Pb}^{4+}$	$\text{Bi}^{4+} + \text{Bi}^{4+}$	$\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}$	
	$\omega = 11.6$	$\omega = 19.3$	$\omega = 4.79$	$\omega = 9.40$	$\omega = 5.44$	$\omega = 13.0$	$\omega = 26.5$	$\omega = 12.1$	$\omega = 19.0$	
0.1	3.7–19	6.4–22	3.5–18	2.1–18	2.7–18	8.7–18	4.8–19	1.1–17	1.2–19	
0.2	4.6–18	1.0–20	3.5–17	1.3–17	2.7–17	3.7–17	4.2–18	4.4–17	5.1–18	
0.4	3.4–17	1.5–19	1.9–16	8.0–17	1.5–16	1.1–16	2.1–17	1.3–16	1.2–17	
0.8	1.4–16	2.0–18	6.2–16	2.9–16	5.0–16	2.5–16	6.9–17	2.8–16	5.3–17	
1.0	2.0–16	4.3–18	8.3–16	4.0–16	6.8–16	3.1–16	9.6–17	3.4–16	7.8–17	
2.0	5.0–16	3.6–17	1.6–15	8.8–16	1.4–15	5.1–16	2.2–16	5.3–16	2.0–16	
4.0	9.0–16	1.6–16	2.4–15	1.5–15	2.1–15	6.7–16	4.3–16	6.8–16	3.9–16	
8.0	1.3–15	4.3–16	2.7–15	1.9–15	2.6–15	7.4–16	6.3–16	7.3–16	5.8–16	
10	1.4–15	5.4–16	2.7–15	2.0–15	2.6–15	7.5–16	6.9–16	7.6–16	6.2–16	
20	1.5–15	8.1–16	2.1–15	1.9–15	2.2–15	7.5–16	8.0–16	7.3–16	7.3–16	
40	1.2–15	7.8–16	1.1–15	1.4–15	1.3–15	6.9–16	8.0–16	6.8–16	6.9–16	
80	7.4–16	4.3–16	2.5–16	6.7–16	4.2–16	5.7–16	6.1–16	5.9–16	6.1–16	

Примечание.  $\omega$  — дефект резонанса в eV, 3.7–19 означает  $3.7 \cdot 10^{-19}$ .

Сечения перезарядки четырехзарядных ионов (рис. 6) вычислены для более широкого диапазона энергий. В отличие от рис. 5, где при расчете сечений учитывался только захват внешнего электрона мишени, сечения на рис. 6 вычислены с учетом всех внутренних электронов мишени, которые дают основной вклад при больших энергиях столкновения. Для сравнения приведено также сечение перезарядки на нейтральных атомах урана (рис. 6, кривая 1). Как ожидалось, при малых энергиях сечение велико ( $\approx 1.1 \cdot 10^{-14} \text{cm}^2$ ) и почти не зависит от энергии столкновения. Это значение хорошо согласуется с принятой оценкой сечения перезарядки многозарядных ионов на нейтральных атомах при малых энергиях столкновения [1]

$$\sigma \approx \text{const} = 10^{-15} \text{cm}^2 \frac{q}{(I_A/Ry)^{3/2}},$$

$$E/q^{1/2} < 10 \text{keV/u}, \quad (29)$$

где  $I_A$  — потенциал ионизации нейтрального атома-мишени; для столкновений  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{0+} \rightarrow \text{U}^{3+} + \text{U}^{1+}$  оценка (29) даст значение  $\sigma \approx 1.4 \cdot 10^{-14} \text{cm}^2$ .

В рамках предложенного метода сечения перезарядки сильно зависят от дефекта резонанса реакции  $\omega$ . При относительно малых энергиях столкновения  $E < 20 \text{keV/u}$  сечения резко убывают с увеличением  $\omega$  (рис. 5, 6): сечение перезарядки минимально для реакций с максимальным значением  $\omega$  (реакции  $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$ ,  $\text{Pb}^{4+} + \text{Pb}^{4+}$ ,  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+}$ ,  $\omega = 19.3, 26.5$  и  $19.0 \text{eV}$  соответственно), а сечения реакций с одинаковыми дефектами резонанса примерно равны (кривые 1 и 2 на рис. 5 или кривые 4 и 5 на рис. 6). При больших значениях энергий столкновения сечения перезарядки от  $\omega$  практически не зависят и определяются главным образом строением электронных оболочек атома мишени. При энергиях  $E > 1 \text{MeV/u}$ , где преимущественную роль играет захват электронов внутренних оболочек мишени, сечения перезарядки для реакций  $\text{U}^{4+} + \text{U}^{4+} \rightarrow \text{U}^{3+} + \text{U}^{5+}$  и

$\text{U}^{4+} + \text{U}^{0+} \rightarrow \text{U}^{3+} + \text{U}^{1+}$ , т.е. для ион-ионных и ион-атомных столкновений практически совпадают (кривые 1 и 5), несмотря на то что мишени имеют разное число электронов. Факт равенства сечений перезарядки в ион-ионных и ион-атомных столкновениях при больших энергиях имеет большое значение для понимания процесса и следует из теории перезарядки на многоэлектронных системах [1,13].

Более детальное сравнение вычисленных сечений перезарядки тяжелых ионов с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными приведено на

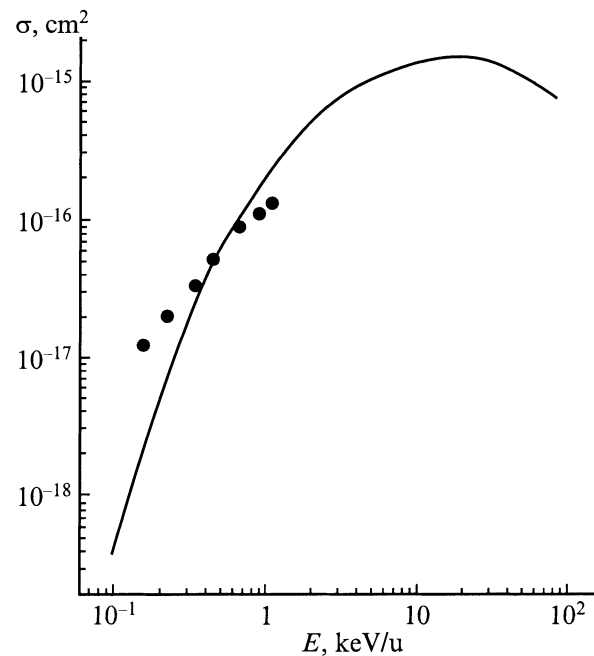
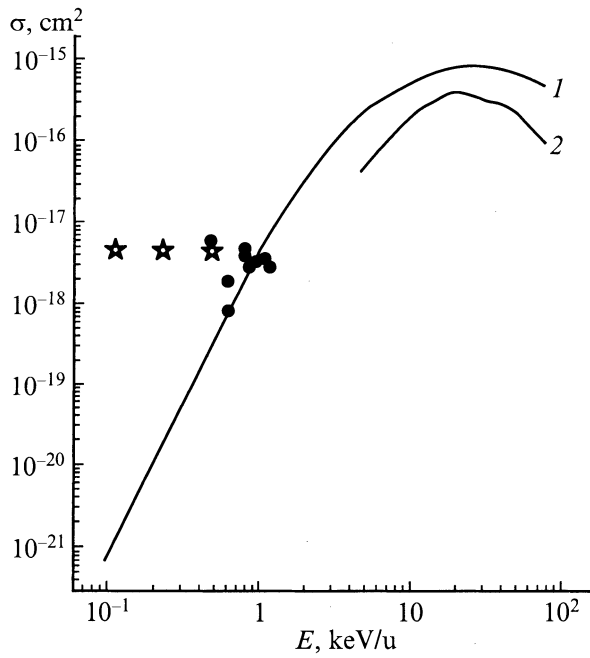
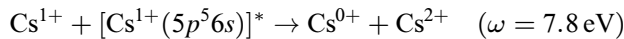


Рис. 7. Сечения перезарядки при столкновениях  $\text{Xe}^{1+} + \text{Xe}^{1+}$  как функции относительной энергии сталкивающихся ионов  $E, \text{keV}$ . Кружки — эксперимент [3], сплошная кривая — настоящая работа.

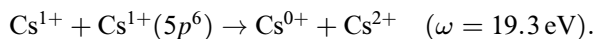


**Рис. 8.** Сечения перезарядки при столкновениях  $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$  как функции относительной энергии сталкивающихся ионов  $E, \text{keV/u}$ . Кружки — эксперимент [19], звездочки — эксперимент из работы [3]. 1 — настоящая работа, 2 — расчет методом атомных орбиталей [20].

рис. 7–10. На рис. 7, 8 вычисленные сечения для столкновений  $\text{Xe}^{1+} + \text{Xe}^{1+}$  и  $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$  сравниваются с экспериментальными данными из работы [3]. Следует отметить большие величины сечений ион-ионной перезарядки и их квазипостоянный характер при малых энергиях, зарегистрированный в группе проф. Э. Сальцборна в университете в г. Гиссен (ФРГ) для столкновений  $\text{Cs}^{1+} + \text{Cs}^{1+}$  (звездочки на рис. 8) и измеренных недавно сечений перезарядки для столкновений  $\text{Xe}^{4+} + \text{Xe}^{4+}$  и  $\text{Bi}^{4+} + \text{Bi}^{4+}$ . Такое поведение сечений ион-ионной перезарядки пока не нашло своей физической интерпретации; возможно, оно может быть объяснено наличием в пучке ионов в возбужденных метастабильных состояниях. Оценки сечения перезарядки ионов цезия на возбужденных ионах цезия при энергии  $E = 0.25 \text{ keV/u}$



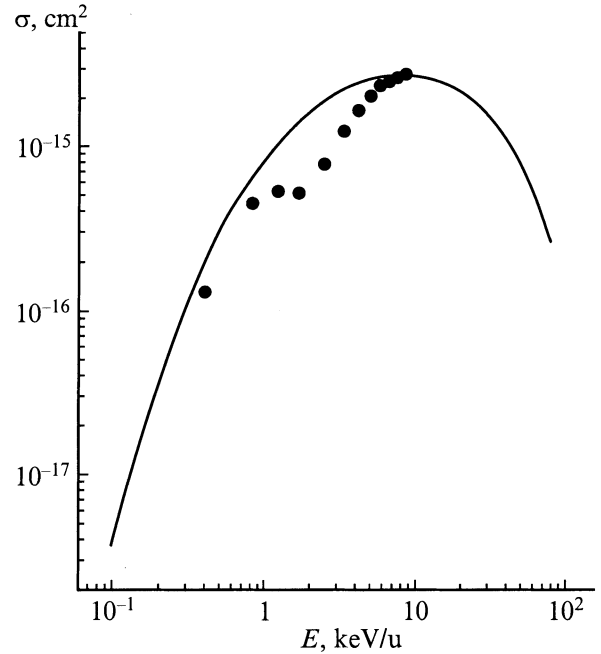
дают значение  $\sigma \approx 3.8 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ , что на несколько порядков больше, чем сечение перезарядки на ионах цезия в основном состоянии при той же энергии (рис. 8)



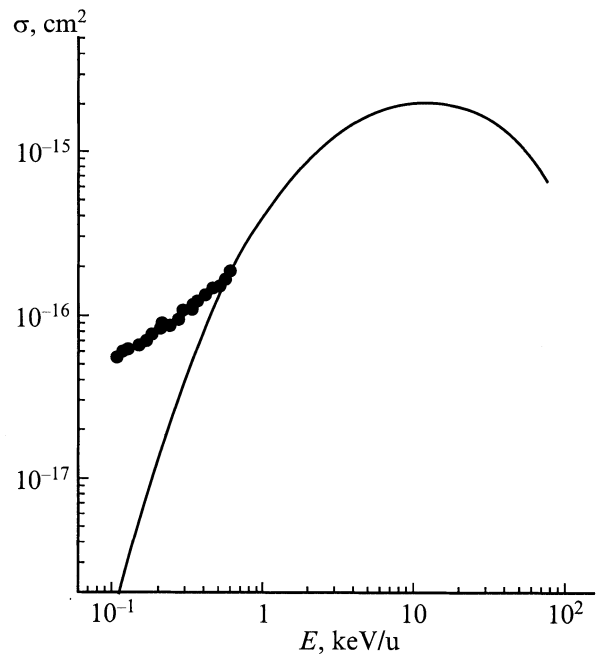
Однако этот вопрос требует специального дополнительного исследования и здесь не рассматривается.

Сечения перезарядки  $\text{Ba}^{1+} + \text{Ba}^{1+}$  и  $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}$  приведены на рис. 9, 10. При энергиях  $E > 1 \text{ keV/u}$  результаты настоящих расчетов удовлетворительно согласуются с

экспериментом и расчетами, выполненными методом молекулярных орбиталей (рис. 9) и классическим методом (рис. 10). Следует отметить, что в отличие от



**Рис. 9.** Сечения перезарядки при столкновениях  $\text{Ba}^{1+} + \text{Ba}^{1+}$  как функции относительной энергии сталкивающихся ионов  $E, \text{keV/u}$ . Кружки — метод классических траекторий [21], сплошная кривая — настоящая работа.



**Рис. 10.** Сечения перезарядки при столкновениях  $\text{Bi}^{1+} + \text{Bi}^{1+}$  как функции относительной энергии сталкивающихся ионов  $E, \text{keV/u}$ . Кружки — эксперимент [22], сплошная кривая — настоящая работа.



работы [21] настоящий метод не позволяет выполнять расчеты сечений перезарядки для определенных значений спина атома мишени или образующегося иона, а только усредненные по всем квантовым числам (кроме главного) сечения.

В целом сравнение результатов расчетов полных сечений перезарядки тяжелых малозарядных ионов, выполненных методом нормировки вероятностей в представлении параметра удара, с экспериментальными данными и другими расчетами показало, что предложенный метод дает удовлетворительное описание (с точностью до фактора 2–3) сечений в области  $E > 1-10$  keV/u. Более полные выводы сделать достаточно трудно из-за ограниченности данных по сечениям рассматриваемых систем. Тем не менее предложенный метод показывает, что сечения перезарядки в ион-ионных столкновениях могут быть довольно велики из-за наличия большого числа электронов в сталкивающихся системах и относительно малых величин дефектов резонанса. Новые экспериментальные данные и более детальные расчеты сечений перезарядки и обдирки позволят получить более полную информацию о столкновительных характеристиках многоэлектронных малозарядных ионов.

## Заключение

Методом многоканальной нормировки в представлении параметра удара выполнены первые предварительные расчеты сечений перезарядки, возникающей при столкновениях тяжелых малозарядных ионов. Вычисленные сечения качественно согласуются с имеющимися немногочисленными экспериментальными данными и расчетами других авторов в области относительных энергий столкновения  $E > 1-10$  keV/u. При меньших энергиях предложенный метод нормировки не может претендовать на высокую точность, так как не учитывает эффекты кулоновского отталкивания сталкивающихся ионов, зависимость дефекта резонанса от межъядерного расстояния и другие эффекты. Важным преимуществом предложенного метода расчета является возможность вычислять полные сечения перезарядки при столкновении тяжелых многоэлектронных атомов и ионов с учетом захвата внутренних электронов мишени и перезарядки в возбужденные состояния. Чтобы сделать окончательные выводы о применимости предложенного метода многоканальной нормировки вероятностей и сечений, необходимо провести дальнейшие детальные расчеты и сравнение их с экспериментальными данными и расчетами, выполненными другими методами.

Автор признателен И.Л. Бейгману за полезные замечания и И.Ю. Толстихиной за помощь в создании программы CAPTURE.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-02-16139).

## Список литературы

- [1] Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К. // Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М.: Атомиздат, 1986.
- [2] The HIDIF-Study // Ed. I. Hofmann, G. Plass. Report GSI-98-06. Darmstadt: GSI, 1998.
- [3] Melchert F. // Atomic Physics with Heavy Ions / Ed. H. Beyer, V.P. Shevelko. Berlin: Springer, 1999. P. 323.
- [4] Гомбау П. Статистическая теория атома. М.: ИЛ, 1951.
- [5] Olson R.E. // Phys. Rev. 1981. Vol. A24. P. 1726.
- [6] Shevelko V.P. // J. Phys. B. 1980. Vol. 13. P. L319.
- [7] Шевелько В.П. // Краткие сообщения по физике. 1981. Т. 5. С. 36.
- [8] Shevelko V.P. // Fizika (Zagreb). 1981. Vol. 13. P. 185.
- [9] Brinkman H.C., Kramers H.A. // Proc. Acad. Sci. Amst. 1930. Vol. 33. P. 973.
- [10] Пресняков Л.П. // Тр. ФИАН. 1980. Т. 119. С. 52.
- [11] Бейгман И.Л., Вайнштейн Л.А., Собельман И.И. // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 1703.
- [12] May R.M. // Phys. Rev. 1964. Vol. 136A. P. 669.
- [13] Виноградов А.В., Шевелько В.П. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 593.
- [14] Вайнштейн Л.П., Собельман И.И., Юков Е.А. // Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М.: Наука, 1973.
- [15] Errea L.F., Harel C., Illescas C. // J. Phys. B. 1998. Vol. 31. P. 3199.
- [16] Illescas C., Rabadan I., Ritra A. // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 57. P. 1809.
- [17] Murray G.A., Stone J., Mayo M., Morgan T.J. // Phys. Rev. 1982. Vol. A25. P. 1805.
- [18] Kadota K., Dijkkamp D., van der Woude R.L. // J. Phys. B. 1982. Vol. 15. P. 3275.
- [19] Peart B., Forrest R.A., Dolder K.T. // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. P. L383.
- [20] Ermolaev A.M., Noble C.J., Bransden B.H. // J. Phys. B. 1982. Vol. 15. P. 457.
- [21] Sramek S.J., Macek J.H., Gallup G.A. // Phys. Rev. A. 1980. Vol. 22. P. 1467.
- [22] Melchert F., Salzborn E., Hofmann I. et al. // Nucl. Instr. Meth. A. 1989. Vol. 278. P. 65.