

01;02

Процессы обдирки быстрых гелиеподобных ионов при кратных столкновениях с двухатомными молекулами

© В.И. Матвеев, Д.Н. Макаров, Х.Ю. Рахимов

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

Поступило в Редакцию 6 декабря 2011 г.

Проведены непертурбативные расчеты сечений однократной и двойной обдирки гелиеподобных ионов Fe^{24+} при столкновениях с молекулами азота N_2 для энергий налетающих ионов 10, 100 и 1000 MeV/nucleon. Показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительной разнице между сечениями обдирки снаряда при параллельной и перпендикулярной относительно скорости снаряда ориентации мишени, при хаотической же ориентации мишени этот эффект малозначителен.

Часто экспериментальные исследования неупругих процессов при столкновениях быстрых многозарядных ионов проводятся на молекулярных мишенях. При этом наблюдаются эффекты, обусловленные ориентацией молекул относительно направления движения снаряда. Значительная зависимость сечений многократной ионизации двухатомных молекул от их ориентации экспериментально и теоретически отмечается в ряде работ (см., например, [1] и приведенные там ссылки). В этих работах рассматривались процессы ионизации мишеней и не исследовались процессы возбуждения и ионизации электронных оболочек снаряда. К числу ориентационных эффектов следует отнести [2] и эффекты кратности столкновений, когда ион, возбужденный после столкновения с первым атомом молекулы, не успевает релаксировать и сталкивается со вторым атомом, находясь в возбужденном состоянии. Значительный вклад эффектов кратности столкновений в процессах потерь энергии и электронов быстрыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами был продемонстрирован в

работе [2] и при столкновениях с многоатомными молекулами и наночастицами — в работе [3]. Такого рода эффекты будут иметь место [2,3] при наличии „выстроенности“ вдоль какого-либо направления и при условии, что время между двумя последовательными столкновениями меньше или порядка времени релаксации электронной шубы иона.

В настоящей работе проведены непертурбативные расчеты сечений „обдирки“ (потерь одного и двух электронов) быстрых гелиеподобных высокозарядных ионов при столкновениях с двухатомными молекулами при различных ориентациях оси молекулы относительно направления движения иона.

Рассмотрим столкновение быстрого структурного иона с двухатомной молекулой, состоящей из многоэлектронных атомов (число электронов $N_A \gg 1$). В этом случае, согласно [2,4], с малой погрешностью ($\sim 1/N_A$) сечение перехода электронов снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе (т.е. после суммирования по всем конечным состояниям) электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала:

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

где \mathbf{v} — скорость снаряда, ось x направлена по \mathbf{v} , молекула (мишень) неподвижна и одно из ядер молекулы находится в начале системы координат, \mathbf{b} — параметр удара, тогда координаты ядра снаряда $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{b}, X)$, здесь и везде ниже используются атомные единицы. В формуле (1) потенциал U — взаимодействие электронов снаряда с мишенью — молекулой, описываемой как протяженный заряд. Другими словами, сечение выражено [2,3] через электронную плотность молекулы. В молекуле, состоящей из многоэлектронных атомов, электронная плотность (в основном состоянии) мало отличается [2,3] от соответствующей электронной плотности изолированных атомов. Поэтому (см. также оценки [2,3]) будем считать молекулу состоящей из двух изолированных и невзаимодействующих между собой атомов, расположенных на равновесном для данной молекулы расстоянии L . Далее будем считать атомы одинаковыми. Потенциал, создаваемый двухатомной молекулой в точке наблюдения \mathbf{r} , может быть представлен в виде [2,5]

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Z}{r_1} \Phi(r_1) + \frac{Z}{r_2} \Phi(r_2). \quad (2)$$

Здесь r_1 и r_2 — расстояния до точки наблюдения \mathbf{r} от первого и второго ядер молекулы соответственно ядра молекулы имеют одинаковый заряд Z , а $\Phi(r)$ — экранирующая функция. Тогда потенциал U , входящий в формулу (1), равен $U = -\sum \varphi(r_p)$, где \mathbf{r}_p — координаты какого-либо электрона снаряда и суммирование проводится по всем электронам снаряда. Экранирующая функция $\Phi(r)$ в формуле (2) равна [2]:

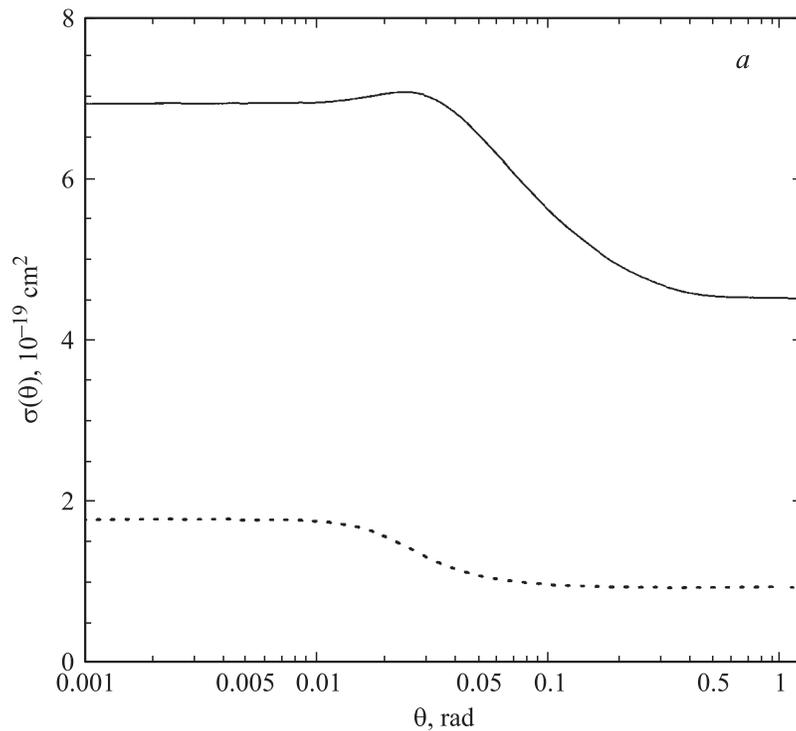
$$\Phi(r) = \sum_{i=1}^n A_i \exp[-\alpha_i r], \quad (3)$$

где A_i и α_i — постоянные табулированные [6] для всех атомных элементов. Будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд Z_p которых много больше единицы, тогда характерный размер электронной шубы иона $\sim 1/Z_p$ много меньше характерного размера мишени и можно считать среднее поле (2) однородным на размерах электронной шубы иона. Далее, следуя выкладкам, приведенным в работах [2,3], получим, что результат столкновений с первым и вторым центрами молекулы сводится к передаче импульсов \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 каждому из электронов иона. Таким образом, выражение (1) для сечения перехода электронов иона из основного состояний $|0, 0\rangle$ в произвольное состояние $|n_1, n_2\rangle$ примет вид (см. [2] и более общий случай, формулу (9) в работе [3]):

$$\sigma = \int \sum_{n_1, n_2} \left| \langle n_1, n_2 | \exp[-i(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)] | 0, 0 \rangle \right|^2 d^2 \mathbf{b}. \quad (4)$$

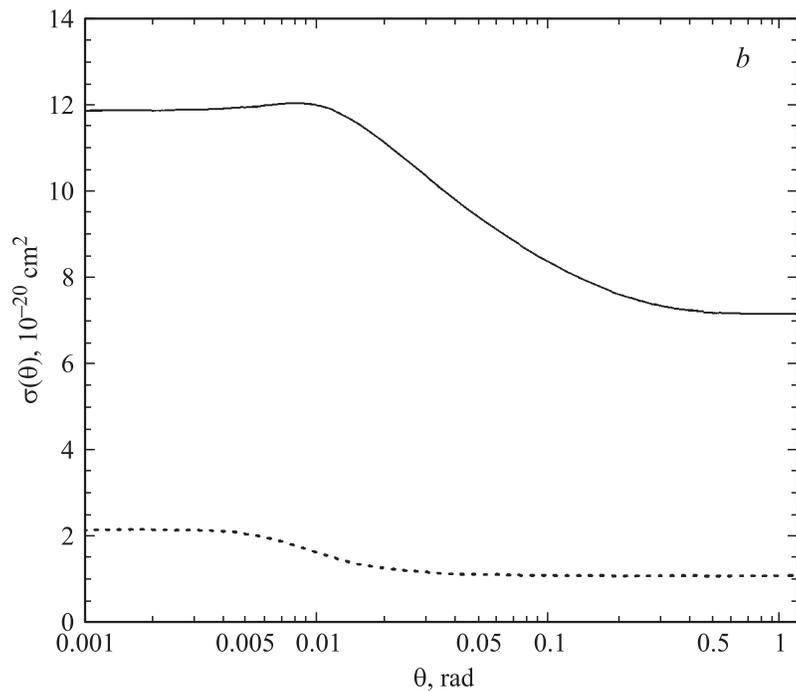
Здесь $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — координаты электронов снаряда, а переданные импульсы $\mathbf{q}_j = 2Z_A/v \sum_{i=1}^n \alpha_i A_i K_1(\alpha_i b_j) \frac{\mathbf{b}_j}{b_j}$, где $K_1(x)$ — функция Макдональда, \mathbf{b}_j — вектор параметра удара, отсчитываемый от ядра (молекулы) с номером j , $j = 1, 2$. В формуле (4) произвольные двухэлектронные состояния $|n_1, n_2\rangle$ гелиеподобного иона обозначены двумя наборами одноэлектронных квантовых чисел n_1 и n_2 . При проведении расчетов двухэлектронные состояния гелиеподобного иона описывались в виде симметризованных произведений водородоподобных одноэлектронных волновых функций с эффективными зарядами ядра, равными степени ионизации (ср. [7]).

Вычисляемое по формуле (4) сечение σ является функцией от ориентации оси молекулы, описываемой вектором \mathbf{L} , т.е. $\sigma = \sigma(\mathbf{L})$.



Сечения ионизации гелиеподобного иона Fe^{24+} в зависимости от θ — угла ориентации оси молекулы для столкновения с молекулой азота N_2 для энергии налетающего иона 10 MeV/nucleon (*a*), 100 MeV/nucleon (*b*) и 1000 MeV/nucleon (*c*). Сплошная линия — значения сечения однократной ионизации $\sigma^{1+}(\theta)$ иона Fe^{24+} ; пунктир — сечение двукратной ионизации $\sigma^{2+}(\theta)$ иона Fe^{24+} .

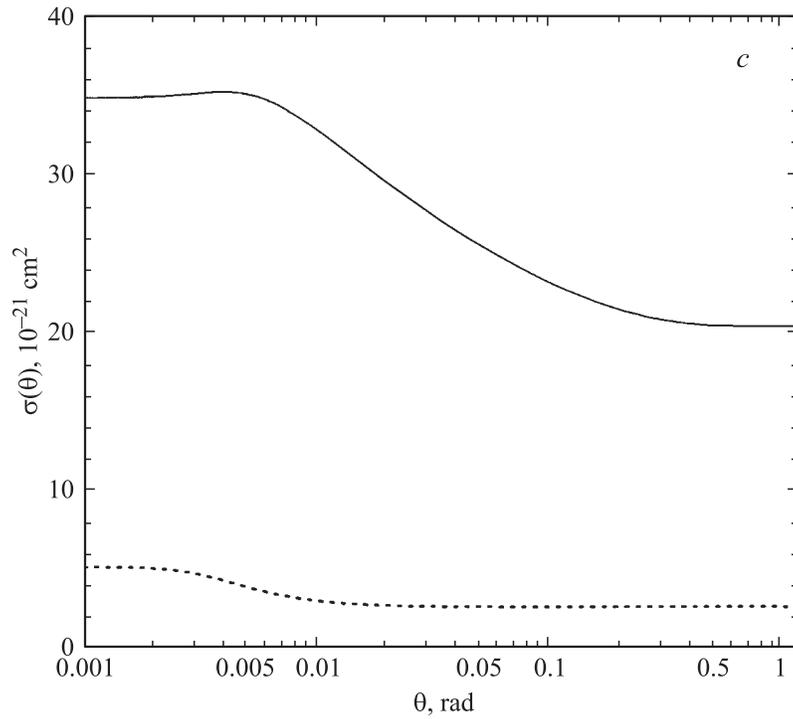
Для описания ориентации вектора \mathbf{L} используем сферическую систему координат с углами φ , θ и осью, направленной вдоль скорости движения снаряда, таким образом θ — угол отклонения \mathbf{L} от направления \mathbf{v} . Мы будем рассчитывать $\sigma(\theta)$ — среднее по углу φ значение $\sigma(\mathbf{L})$. По формуле (4) могут быть рассчитаны, в принципе, сечения всех неупругих процессов, происходящих в электронных оболочках снаряда. Сечение двойной ионизации $\sigma^{2+}(\theta)$ соответствует попаданию обоих



(Продолжение рисунка).

электронов в любое из состояний двухэлектронного континуума. Сечение однократной ионизации $\sigma^{1+}(\theta)$ соответствует попаданию одного из электронов в любое состояние континуума, а другого — в любое из состояний дискретного спектра.

Нами были проведены расчеты сечений ионизации (потери электронов) гелиеподобного иона Fe^{24+} при столкновениях с молекулой азота N_2 для различных углов ориентации молекулы и нескольких значений энергии налетающего иона. Результаты расчетов приведены на рисунке, *a–c*. Эффект кратности столкновений в зависимости от ориентации оси молекулы характеризует разность $\sigma(\theta) - \sigma_{\perp}$, где σ_{\perp} — сечение $\sigma(\theta = \pi/2)$. Очевидно, σ_{\perp} описывает случаи, когда ось молекулы расположена перпендикулярно к \mathbf{v} и ион сталкивается либо с одним атомом молекулы, либо с другим, поэтому σ_{\perp} представляет собой



(Продолжение рисунка).

удвоенное значение сечения обдирки снаряда при столкновении с одним изолированным атомом. Как видно из рисунка, для всех энергий сечения однократной и двойной ионизации существенно зависят от угла ориентации оси молекулы и при переходе от „перпендикулярной“ ориентации оси молекулы к „параллельной“ возрастают примерно на 50–100%. Точно такие же расчеты были выполнены нами и для столкновений ионов никеля N^{26+} с молекулами кислорода O_2 . Качественно поведение сечений такое же, как и в случае столкновений Fe^{24+} с молекулой азота N_2 .

На практике обычно измеряют сечения при хаотической ориентации молекул. Поэтому мы провели для всех вышеперечисленных случаев расчеты усредненных по всем направлениям оси молекулы сечений в предположении равномерного распределения по ориентациям оси

молекулы. Оказалось, относительная поправка из-за кратности столкновений при хаотической ориентации молекул очень мала, меньше или порядка одной десятой процента. Таким образом, эффект кратности столкновений в процессах обдирки, как и в процессах потери энергии [2,3], может вносить заметный вклад лишь при наличии выстроенности молекул вдоль какого-либо направления. Оценки границ применимости и краткое физическое содержание используемого нами подхода на основе эйконольного приближения при расчетах кратных столкновений приведены в работе [3].

Список литературы

- [1] *Siegman B., Werner U., Kaliman Z., Roller-Lutz Z., Kabachnik N.M., Lutz H.O.* // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. P. 052701.
- [2] *Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Рябченко С.В., Макаров Д.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 88. С. 268.
- [3] *Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Макаров Д.Н.* // ЖЭТФ. 2009. Т. 136. С. 843.
- [4] *Матвеев В.И., Сидоров Д.Б.* // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. С. 569.
- [5] *Gross E.K.U., Dreizler R.M.* // Phys. Rev. A. 1980. V. 20. P. 1798.
- [6] *Salvat F., Martinez J.D., Mayol R., Parellada J.* // Phys. Rev. A. 1987. V. 36. P. 467.
- [7] *Matveev V.I., Ryabchenko S.V., Matrasulov D.U., Rakhimov Kh.Yu., Fritzsche S., Stohlker Th.* // Phys. Rev. A. 2009. V. 79. P. 042710.