

01;02

Сечения однократной и двойной ионизации атомов при столкновениях с релятивистскими структурными тяжелыми ионами

© В.И. Матвеев, Е.С. Гусаревич

Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

Архангельск

E-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

Поступило в Редакцию 3 декабря 2001 г.

На основе приближения эйконала рассчитаны сечения однократной и двойной ионизации при столкновениях движущихся с релятивистскими скоростями структурных высокозарядных тяжелых ионов с атомами водорода и гелия. Под структурными ионами в рамках данной работы понимаются ионы, содержащие частично заполненные электронные оболочки. Показано, что учет протяженности заряда иона может приводить к заметным изменениям соответствующих сечений по сравнению с ионизацией точечными ионами тех же зарядов и энергий.

Во многих экспериментах, проводимых на ускорителях тяжелых ионов, используются частично ободранные ионы высоких зарядов и энергий (см., например, [1–7] и приведенные там ссылки). Расчетные методики, как правило, описывают такие экранированные ионы, как точечные заряды. Теоретическим же исследованиям процессов возбуждения или ионизации атомов мишени частично ободранными ионами, описываемыми как протяженные и имеющие электронную структуру заряды, посвящено сравнительно небольшое число работ. Тогда как представляется необходимым рассматривать налетающий ион не как точечную частицу, а как протяженную структурную частицу размером порядка размера электронных оболочек, на которых расположены электроны иона. Сильное поле многозарядного иона не позволяет использовать теорию возмущений, поэтому, как правило, расчеты сечений ионизации проводились (см., например, [8]) в рамках широко распространенного метода классических траекторий, не имеющего, од-

нако, достаточного обоснования [9] из первых принципов и находящего подтверждения своей применимости лишь в сравнении с экспериментом. Квантово-механическое непертурбативное 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, тогда как для расчета полного сечения ионизации была введена полуэмпирическая процедура „перенормировки“ борновского приближения.

В настоящей работе на основе приближения эйконала и метода шивки, предложенного в работах [12–14], развит непертурбативный метод расчетов сечений ионизации и возбуждения атомов мишени частично ободранными релятивистскими высокозарядными ионами, описываемыми как протяженные заряды. В качестве примера рассчитаны сечения однократной ионизации атома водорода и двойной ионизации атома гелия. Показано, что учет протяженности заряда иона может приводить к заметным изменениям соответствующих сечений по сравнению с ионизацией точечными ионами тех же зарядов и энергий. Необходимо отметить, что в данной работе не обсуждаются интенсивно исследуемые в настоящее время экспериментально и теоретически (см., например, [15,16]) процессы потери и возбуждения электронов, принадлежащих бомбардирующим ионам.

Согласно [12,13], сечение перехода, покоящегося в начале системы координат нерелятивистского (до и после столкновения) N -электронного атома из состояния $|0\rangle$ в состояние $|n\rangle$ при столкновении с движущимся со скоростью v релятивистским ионом в малоугловом эйкональном приближении, имеет вид (здесь и ниже используются атомные единицы)

$$\sigma_n = \int d^2b \left| \left\langle n \left| 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\}) dX \right\} \right| 0 \right\rangle \right|^2. \quad (1)$$

Рассеивающий кулоновский потенциал $U = U(X, \mathbf{b}; \{\mathbf{r}_a\})$ есть функция не только координат иона $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$, но и положений атомных электронов, совокупность координат которых обозначаем $\{\mathbf{r}_a\}$; $a = 1, \dots, N$. Кулоновское взаимодействие частично экранированного иона, содержащего N_i электронов на своих оболочках и находящегося в точке \mathbf{R} , с атомными электронами, расположенными в точках \mathbf{r}_a ,

следуя [11,17–19], запишем в виде:

$$U(\mathbf{R}; \{\mathbf{r}_a\}) = - \sum_a \left\{ \frac{Z(1-\nu)}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|} + \frac{Z\nu}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}|\right) \right\},$$

где λ — параметр экранирования (имеющий физический смысл эффективного радиуса иона), равный

$$\lambda = g \frac{\nu^{2/3}}{1-\nu/7} \frac{1}{Z^{1/3}}; \quad g = 0,3(3\pi^2/50)\Gamma(1/3) \approx 0.48. \quad (2)$$

Здесь мы ввели относительное число электронов иона $\nu = N_i/Z$. Специфика столкновений ионов больших зарядов с атомами состоит в том, что сечения неупругих процессов, как правило, довольно велики и существенно превышают атомные размеры. Имея в виду это обстоятельство, будем считать, что $r_a/R \ll 1$, тогда интеграл в (1) можно переписать так:

$$-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX = i\mathbf{q} \sum_a \mathbf{r}_a, \quad \mathbf{q} = \frac{2Z^*}{vb} \left[1 + \frac{\nu}{1-\nu} \frac{b}{\lambda} K_1\left(\frac{b}{\lambda}\right) \right] \frac{\mathbf{b}}{b}. \quad (3)$$

Очевидно, вектор \mathbf{q} имеет смысл импульса, передаваемого атомным электронам при столкновении с ионом при значении параметра удара \mathbf{b} , $Z^* = Z(1-\nu)$ — видимый заряд иона, $K_1(x)$ — функция Макдональда.

Рассмотрим сначала столкновение релятивистского структурного многозарядного иона с атомом водорода. Следуя [12,13], для расчетов сечений неупругих процессов воспользуемся методом шивки, позволяющим получить формулы для сечений в аналитическом виде. Для этого разобьем весь интервал $0 < b < \infty$ возможных значений параметра удара b на две области:

$$\text{A) } 0 < b < b_0, \quad \text{B) } b_0 < b < \infty;$$

где

$$b_0 \sim v\gamma, \quad \gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}, \quad \beta = v/c, \quad (4)$$

соответствующие малым и большим параметрам удара (c — скорость света). В области (A) малых параметров удара сильное поле высокозарядного иона не может быть учтено по теории возмущений, и будем

вычислять сечение по формуле (1); в области (В) больших прицельных параметров поле, создаваемое ионом, можно считать слабым, описывать ион как точечный заряд Z^* и для расчета σ_n применять теорию возмущений. Вычислив σ_n в каждой из областей (4) и сложив их, получим результирующее сечение. При этом знание точного значения границы между областями для нас несущественно, поскольку зависимость σ_n в каждой области от параметра b_0 оказывается логарифмической, что приводит к корректной сшивке вкладов смежных областей и выпадению в окончательном ответе зависимости σ_n от параметра сшивки b_0 . В результате сечение ионизации атома водорода можно представить так (ср. [13]):

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

где $\eta = \exp B = 1.781$ ($B = 0.5772$ — постоянная Эйлера), $\omega_i = 0.711$ — так называемая [13] „средняя“ энергия ионизации, $\lambda_i = 0.283$, а коэффициенты α_i рассчитываются по формуле

$$\alpha_i = \lim_{b_0 \rightarrow \infty} \frac{Z^*}{v b_0} \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_i} \frac{v^2}{8\pi Z^{*2}} \int_0^{b_0} 2\pi b db \int d^3 \mathbf{k} |\langle \mathbf{k} | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | 0 \rangle|^2 \right\}. \quad (6)$$

Полученная формула (5) по внешнему виду не отличается от соответствующей формулы [13] для сечения ионизации точечным зарядом Z^* . Однако в отличие от случая точечного заряда, когда $\alpha_i = 3.264$ является [13] не зависящим от заряда и скорости иона числом, в случае протяженного заряда, в силу определения переданного импульса по формуле (3), α_i оказывается функцией, зависящей от скорости иона v и ν — относительного числа электронов в „шубе“ иона. На рис. 1 приведены сечения ионизации атома водорода частично ободранными ионами урана U^{6+} . Сечения рассчитывались по формуле (5) для иона с зарядом ядра $Z = 92$, с числом электронов на оболочках иона $N_i = 86$, соответствующим видимому заряду иона $Z^* = 6$, значение параметра экранирования (в атомных единицах) $\lambda = 0.116$ находилось по формуле (2).

Рассмотрим теперь двойную ионизацию атома гелия. Согласно [12,13], для расчетов соответствующего сечения нет необходимости применять метод сшивки, поэтому сечение двойной ионизации может

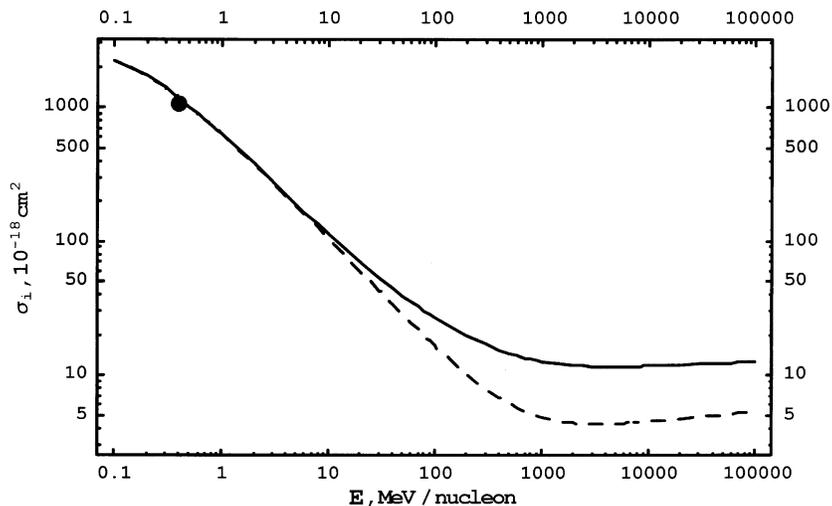


Рис. 1. Зависимость сечения ионизации атома водорода частично ободранными ионами урана U^{6+} от энергии иона. Сплошная линия — расчетное сечение для протяженного иона, пунктир — сечение ионизации точечным ионом для тех же энергии и заряда, точка — эксперимент [5] (для столкновений $C^{6+} + H$).

быть получено непосредственно из формулы (1), в которой интегрирование по d^2b может быть распространено на всю плоскость параметра удара и, очевидно, будет иметь вид

$$\sigma^{2+} = \iiint |\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \exp(i\mathbf{q}\{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2\}) | 0, 0 \rangle|^2 d^3\mathbf{k}_1 d^3\mathbf{k}_2 d^2b, \quad (7)$$

где $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle$ — волновая функция атома гелия с двумя электронами в континууме с соответствующими импульсами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , $|0, 0 \rangle$ — волновая функция основного состояния атома гелия. При расчетах волновые функции представлялись в виде симметризованных произведений водородоподобных одноэлектронных волновых функций с одним и тем же значением эффективного заряда ядра атома гелия $Z_c = 1.97$ (согласно [13], такое значение эффективного заряда приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными для двойной ионизации атома гелия ударом голого релятивистского иона). Результаты расчетов

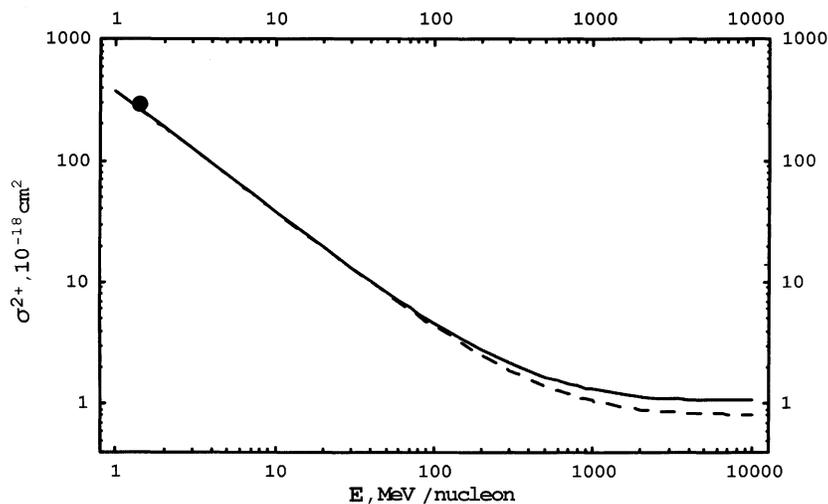


Рис. 2. Зависимость сечения двойной ионизации атома гелия частично ободранными ионами железа Fe^{15+} от энергии иона. Сплошная линия — расчетное сечение для протяженного иона, пунктир — сечение двойной ионизации точечным ионом для тех же энергии и заряда, точка — эксперимент [6] (для столкновений $\text{Fe}^{15+} + \text{He}$).

представлены на рис. 2, где приведено сечение двойной ионизации атома гелия частично ободранными ионами железа Fe^{15+} в зависимости от энергии иона. Сечения рассчитывались по формуле (7) для иона с $Z = 26$, $N_i = 11$, $Z^* = 15$, значение $\lambda = 0.096$ находилось по формуле (2).

Как видно из рисунков, с ростом энергии налетающего иона эффекты протяженности заряда иона могут приводить к значительному росту сечений однократной и двойной ионизации по сравнению с соответствующими сечениями, рассчитанными для точечного иона. Такое поведение сечений понятно из физических соображений, действительно: при столкновениях с большими параметрами удара атомные электроны взаимодействуют с налетающим ионом как с точечным зарядом, равным видимому заряду экранированного иона (в наших обозначениях Z^*). При столкновениях же с малыми параметрами удара атомные элек-

троны воспринимают ион как голый заряд Z . В сечения вносят вклад все области параметров удара, и так как Z больше Z^* , то эффективно атомные электроны взаимодействуют с ионом заряда, большим чем Z^* , что и приводит к увеличению сечений, которое может оказаться значительным при $Z \gg Z^*$. Для оценки эффекта протяженности заряда иона введем относительную поправку $\chi_H = (\sigma_i - \sigma_{i(\text{Point})})/\sigma_{i(\text{Point})}$, где $\sigma_{i(\text{Point})}$ — сечение ионизации атома водорода точечным ионом того же заряда Z^* , что и видимый заряд налетающего протяженного иона и при той же относительной скорости. Введем эффективный радиус r такой, что $\sigma_{i(\text{Point})} = \pi r^2$. Тогда (исходя из геометрических соображений, согласно которым ион рассматривается как шарик радиусом λ) сечение с учетом протяженности заряда иона следует оценить так: $\sigma_i \sim \pi(r+\lambda)^2$. Тогда для $\lambda \ll r$ (в рассматриваемых нами случаях это неравенство справедливо) легко получить оценку поправки χ_H через расчетное значение $\sigma_{i(\text{Point})}$ сечения ионизации точечным ионом и эффективный радиус иона λ : $\chi_H \sim 2\lambda/r = 2\pi^{1/2}\lambda/[\sigma_{i(\text{Point})}]^{1/2}$. Таким образом, пока с ростом энергии $\sigma_{i(\text{Point})}$ убывает, относительная поправка χ_H растет. Как нетрудно убедиться, рисунки показывают именно такое поведение сечений, очевидно, имеющее общий характер и для остальных сечений неупругих процессов, сопровождающих столкновения релятивистских структурных тяжелых ионов с атомами.

Авторы благодарят Министерство образования Российской Федерации (грант Е00–3.1–390) и Российский фонд фундаментальных исследований (грант 01–02–17047) 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., Stohlker 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–L452.
- [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., Mandal C.R. // J. Phys. 2001. V. B34. P. 755.
- [9] Illescas 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., Толманов С.Г. // ЖЭТФ. 1995. Т. 107. С. 1780.
- [13] Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю. // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 1646.
- [14] Matveev V.I., Matrasulov D.U. // J. Phys. 2000. V. B33. P. 2721.
- [15] Ludziejewski T., Stohlker Th., Ionescu D.C. et al. // Phys. Rev. 2000. V. A61. P. 052706.
- [16] Voitkiv A.B., Muller C., Grun N. // Phys. Rev. 2000. V. A62. P. 062701.
- [17] Maynard G., Gardes D., Chabot M. et al. // Nucl. Instr. Meth. 1998. V. B146. P. 88.
- [18] Maynard G., Chabot M., Gardes D. // Nucl. Instr. Meth. 2000. V. B164/165. P. 139.
- [19] Brandt W., Kitagawa M. // Phys. Rev. 1982. V. B52. P. 5631.