

УДК 537.563.3

ИОНИЗАЦИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ НЕЙТРАЛЬНЫМИ АТОМАМИ ПРИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭНЕРГИЯХ

С. Н. Андреев, И. Л. Бейгман, И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько,

Г. Баур¹, Т. Штёлькер²

Рассмотрены процессы ионизации тяжелых ионов, сталкивающихся с атомами и ионами при релятивистских энергиях. Приведены формулы для расчета сечений ионизации в борновском приближении в представлении переданного импульса без учета магнитных взаимодействий, а также в дипольном и импульсном приближениях. С помощью программ LOSS-R [25] и HERION выполнены расчеты сечений ионизации H-подобных многозарядных ионов с зарядом ядра $Z \approx 80 - 90$ при столкновениях с нейтральными атомами, а также многозарядных ионов урана при столкновении с протонами и атомами углерода. Результаты расчетов сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Процессы ионизации положительных ионов тяжелыми частицами (протонами, ионами и нейтральными атомами) играют важную роль при решении многих задач ускорительной техники, тумотерапии и технологии материалов (см., напр., [1–4]).

Несмотря на достигнутый прогресс в исследовании ион-атомных столкновений, процессы ионизации тяжелых многоэлектронных ионов атомами и ионами изучены явно недостаточно, что связано со значительными трудностями как в постановке эксперимента, так и в теоретической интерпретации экспериментальных данных (см., напр.,

¹Форшунгсцетрум, Юлих, Германия.

²ГСИ, Дармштадт, Германия.

[5–13] в области нерелятивистских энергий). Однако для многих приложений, например, для оценки технических требований к характеристикам вакуума и времен жизни ионных пучков в ускорителях, необходима информация о сечениях ионизации многоэлектронных ионов на атомах и молекулах остаточного газа.

Динамика релятивистских атомных столкновений с участием многозарядных ионов рассматривается в книгах [14, 15] и обзорах [16, 17]. Численные расчеты сечений релятивистской ионизации ионов представлены в литературе для ионизации H- и He-подобных ионов из основного 1s-состояния (см., напр., [18–24]). Поскольку волновые функции для таких ионов известны, изучение столкновений с их участием позволяет исследовать такие тонкие эффекты, как влияние магнитных взаимодействий.

В работе [25] приведены выражения для сечений ионизации ионов ядрами и нейтральными атомами в борновском приближении при релятивистских энергиях в представлении переданного импульса без учета магнитных взаимодействий. Приведенные выражения реализованы в программе LOSS-R, также описанной в [25] и созданной на базе программы LOSS [7] для расчета сечений при нерелятивистских столкновениях.

Для приложений представляют также интерес сравнительно простые методы расчета сечений (дипольное, импульсное приближение и другие), позволяющие правильно оценить сечения и выявить их основные закономерности. Целью настоящей работы является исследование дипольного и импульсного приближений для сечений ионизации и сравнение их с экспериментом, программой LOSS-R и другими более сложными методами. Расчеты сечений в дипольном и импульсном приближениях в настоящей работе проводились по новой программе HERION (High-Energy Relativistic IONization), описание которой приводится ниже.

Программа LOSS-R для релятивистских столкновений. Для ионов с большими скоростями v сечения ионизации при столкновении с тяжелыми частицами можно рассматривать в релятивистском борновском приближении. В представлении переданного импульса матричный элемент ионизации определяется выражением [14–17]:

$$M_{fi} = \langle f | (1 - \beta \alpha_z) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | i \rangle, \quad (1)$$

где $\beta = v/c$ – релятивистский фактор, c – скорость света, α_z – z -компоненты вектора α -матриц Дирака, q – переданный импульс, $|i\rangle$ и $|f\rangle$ – полные волновые функции системы в начальном и конечном состояниях. Первый член в (1) соответствует электрическим взаимодействиям, второй описывает магнитные взаимодействия налетающей частицы с мишенью. Вычисление матричного элемента (1) представляет собой довольно сложную

задачу и было выполнено только для ионизации водородоподобных ионов из основного $1s$ -состояния.

В работе [25] рассмотрены ион-атомные столкновения при релятивистских скоростях ($\beta \rightarrow 1$), когда, тем не менее, электроны атома мишени и налетающей частицы могут быть описаны нерелятивистскими волновыми функциями. При этом сечение релятивистской ионизации тяжелой атомной частицей в борновском приближении имеет вид:

$$\sigma(v) = 8\pi \left(\frac{v_0}{v}\right)^2 \sum_{nl} \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} d\varepsilon \int_{Q_{\min}}^{\infty} \frac{dQ}{Q^3} \left|F_P(Q, \varepsilon, \lambda)\right|^2 \cdot \left|F_T(Q)\right|^2, \quad (2)$$

$$|F_P(Q, \varepsilon, \lambda)|^2 = |\langle \varepsilon | \exp(i\vec{Q}\vec{r}) | nl \rangle_P|^2, \quad (3)$$

$$|F_T(Q)|^2 = \left[Z_T - \sum_{j=1}^N \langle j | \exp(i\vec{Q}\vec{r}) | j \rangle \right]^2 + \left[N - \sum_{j=1}^N |\langle j | \exp(i\vec{Q}\vec{r}) | j \rangle|^2 \right]. \quad (4)$$

Здесь $v_0 = 2.18 \cdot 10^8$ см/с – атомная единица скорости, n и l – главное и орбитальное квантовые числа вылетевшего электрона, ε и λ – его энергия и орбитальный момент, $F_P(Q, \varepsilon, \lambda)$ – форм-фактор налетающего иона и $Z_T(Q)$ – эффективный заряд, создаваемый зарядом ядра Z_n и N электронами мишени (для нейтральных мишеней $Z_n = N$, для протонов $Z_n = 1$, $N = 0$). В уравнениях (2)–(4) для ионной скорости v и минимального переданного момента q_{\min} необходимо использовать релятивистские выражения:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = 1 + \frac{E}{m_0 c^2}, \quad Q_{\min} = \frac{I_P + \varepsilon}{\gamma v}, \quad (5)$$

где E – кинетическая энергия налетающей частицы на один нуклон, $m_0 c^2 = 931.494$ MeV, m_0 – единица атомной массы, I_P – потенциал ионизации налетающего иона. Выражение для Q_{\min} в (5) было получено Бете [26] из рассмотрения энергии, переданной атому при столкновении с тяжелой частицей (см. также [14]). Таким образом, приближение Борна для релятивистских энергий отличается от “обычного” нерелятивистского борновского приближения двумя факторами: 1) при $E \rightarrow \infty$, в нерелятивистском приближении $v \rightarrow \infty$, а в релятивистском приближении $v \rightarrow c$, и 2) в релятивистском приближении минимальный переданный момент Q_{\min} зависит от фактора γ согласно (5), так что при $E \rightarrow \infty$, $\gamma \rightarrow \infty$ и $Q_{\min} \rightarrow 0$. Отметим, что выражения, соответствующие (5), можно также получить в рамках метода параметра удара в дипольном приближении (см., напр., [16]).

В программе LOSS-R расчет релятивистских сечений ионизации многозарядных ионов проводится с радиальными волновыми функциями оптического электрона в непрерывном и дискретном спектре, которые находятся путем численного решения уравнения

Шредингера с эффективным полем атомного остова, состоящего из ядра и остальных электронов (см. [7]). При расчете эффективного заряда мишени используются безузловые функции Слетера, а максимальное число парциальных волн свободного электрона равно $\lambda_{\max} = 12$.

Дипольное и импульсное приближения. Программа HERION. Для физического анализа релятивистской ионизации, процесс столкновения естественно рассматривать раздельно для больших и малых параметров удара. При больших параметрах удара основную роль играет дальнодействующее дипольное взаимодействие; при этом взаимодействие налетающей частицы с атомом мало, и, следовательно, справедлива теория возмущений. При малых параметрах удара процессы столкновений, как правило, связаны с большими передачами энергии, малыми радиусами взаимодействия, что оправдывает использование импульсного приближения. Таким образом, дипольное приближение (большие параметры удара, малые передачи энергии) и импульсное приближение (малые параметры удара, большие передачи энергии) дополняют друг друга.

В дипольном приближении вероятность и сечение ионизации при столкновениях с заряженными частицами выражаются через сечение фотоионизации $\sigma_{ph}(\omega)$. Для релятивистских столкновений эта зависимость имеет вид (см., напр., [16]) :

$$\sigma_{\text{dip}}(v) = \int_{\omega_{\min}}^{\infty} n(\omega) \sigma_{ph}(\omega) \frac{d\omega}{\omega}, \quad (6)$$

где $n(\omega)$ – т.н. число эквивалентных фотонов, которое равно:

$$n(\omega) = \frac{2Z_{\text{eff}}^2}{\pi\alpha} \left(\frac{v_0}{v} \right)^2 \left[x_{\min} K_0(x_{\min}) K_1(x_{\min}) - \frac{1}{2} (\beta x_{\min})^2 (K_1^2(x_{\min}) - K_0^2(x_{\min})) \right],$$

$$x_{\min} = \omega_{\min} b_{\min} / (v\gamma), \quad (7)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, Z_{eff} – эффективный заряд мишени, ω_{\min} – пороговая частота фотоионизации, $K_n(x)$ – функции Макдоальда. Параметр b_{\min} определяет размер ионной оболочки nl иона, из которой происходит ионизация:

$$b_{\min} \approx \frac{n}{\sqrt{I_{nl}/Ry}} a_0, \quad (8)$$

где $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-8}$ см – Боровский радиус.

При больших передачах энергии столкновение заряженной частицы с атомом можно рассматривать в импульсном приближении как совокупность бинарных столкновений

налетающей частицы с атомными электронами. Причем, эти столкновения (с кулоновским взаимодействием) рассматриваются в рамках классической механики. Такое приближение широко используется в теории нерелятивистских атомных столкновений (см., напр., [27, 28]). Здесь мы даём обобщение импульсного приближения на случай релятивистских столкновений. Следуя [29], рассмотрим столкновение двух частиц с массами m_1, m_2 и энергиями $E_1, E_2: E_1 m_1, E_2 m_2 \rightarrow E'_1 m_1, E'_2 m_2$. Будем считать, что до столкновения вторая частица (атомный электрон) покоялась $E_2 = m_2 c^2; p_2 = 0$. Переданная энергия равна:

$$E_t = E_1 - E'_1 = E'_2 - m_2 c^2 = \frac{p_0^2}{m_2} (1 - \cos \chi) \approx \frac{p_0^2 \chi^2}{2m_2}, \quad (9)$$

где p_0, χ – относительный импульс и угол рассеяния в системе центра инерции (мы учитываем, что главный вклад дает рассеяние на малые углы). Сечение передачи энергии E_t для прицельного параметра b имеет вид:

$$\frac{d\sigma_{\text{non-dip}}}{dE_t} = 2\pi b \left| \frac{dE_t}{db} \right|^{-1} = \frac{\pi b^2}{E_t} = \frac{8\pi a_0^2}{m_2 v^2} (Z_1 Z_2)^2 \left(\frac{Ry}{E_t} \right)^2 \quad (10)$$

или

$$\frac{d\sigma_{\text{non-dip}}}{d(E_t/Ry)} = 8\pi a_0^2 \frac{Ry}{mc^2} \left(\frac{Z_1 Z_2}{\beta^2} \right)^2 \left(\frac{Ry}{E_t} \right)^2. \quad (11)$$

Для рассматриваемого нами случая частица “2” – электрон ($Z_2 = -1, m_2 = m_e$ – масса электрона). Сечение ионизации из оболочки налетающего иона с потенциалом I и числом эквивалентных электронов N равно:

$$\sigma_{\text{non-dip}} = \int_I^{E_{\max}} \frac{d\sigma_{\text{non-dip}}}{dE_t} dE_t = 4\pi a_0^2 N \alpha^2 \left(\frac{Z_1}{\beta^2} \right)^2 \left(\frac{Ry}{I} - \frac{Ry}{E_{\max}} \right), \quad (12)$$

где E_{\max} – максимальная переданная энергия. В рамках сделанных в [29] предположений (главный вклад дают малые углы) должно выполняться условие $E_{\max} \gg I$ и, следовательно, вторым слагаемым в (12) можно пренебречь.

Таким образом, в релятивистском пределе

$$\sigma(\beta \rightarrow 1) \approx 4\pi a_0^2 \sum_{nl} (Z_1 \alpha)^2 N_{nl} \left(\frac{Ry}{I_{nl}} \right), \quad (13)$$

где суммирование проводится по всем оболочкам налетающего иона с энергиями связи I_{nl} и N_{nl} эквивалентными электронами.

Формулы (6)–(8), (12) для расчета суммарного (в дипольном и импульсном приближениях) релятивистского сечения ионизации реализованы в новой программе HERION (High-Energy Relativistic IONization), использующей в качестве вспомогательной программу FAC (Flexible Atomic Code [30]) для расчета волновых функций и сечений фотопионизации в приближении Дирака–Фока.

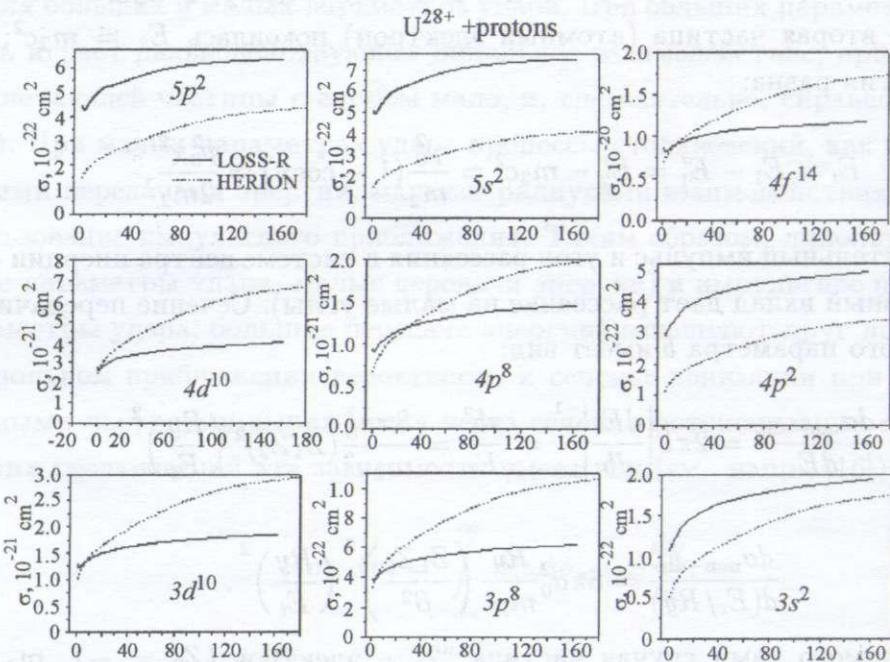


Рис. 1. Дипольные сечения релятивистской ионизации оболочек nl ионов U^{28+} протонным ударом ($Z_{\text{eff}} = 1$): пунктирные кривые – программа HERION, формулы (6)–(7), сплошные кривые – программа LOSS-R, формулы (2)–(5) с $\lambda = l \pm 1$.

Численные расчеты сечений релятивистской ионизации. Сравнение результатов расчетов по программам LOSS-R и HERION сечений релятивистской ионизации ионов U^{28+} и Pb^{81+} с имеющимися экспериментальными данными приведено на рис. 1–4. На рис. 1 приведены дипольные сечения ионизации из внешней ($5p^6$) и внутренних ($3s^2$, $3p^6$, ..., $5s^2$) оболочек ионов U^{28+} протонным ударом, вычисленные по программам LOSS-R и HERION. Сечения согласуются в пределах фактора 2, причем сечения, вычисленные по HERION, могут быть как больше, так и меньше сечений LOSS-R. Эти отличия, по-видимому, связаны с использованием различных волновых функций: в HERION используются релятивистские волновые функции, а в LOSS-R – нерелятивистские функции.

Кроме того, в программе HERION при расчете дипольных сечений ионизации используются сечения фотоионизации, которые значительно превышают сечения ионизации, вычисленные в обычном нерелятивистском приближении, из-за наличия т.н. гигантских резонансов, связанных с взаимодействием конфигураций конечных состояний (подробнее см. [31]).

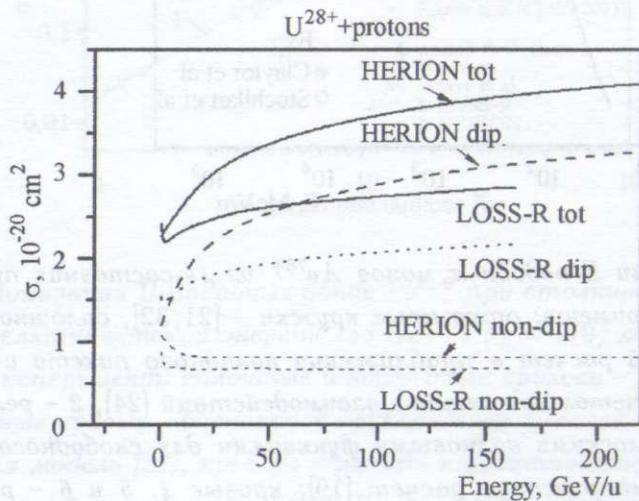


Рис. 2. Дипольные, недипольные части и полные (суммарные по всем оболочкам) сечения ионизации ионов U^{28+} протонным ударом; программы HERION, LOSS-R. Non-dip – недипольная часть сечения ионизации, dip – дипольная часть, tot – полное сечение ионизации.

На рис. 2 приведены суммарные по оболочкам сечения релятивистской ионизации ионов U^{28+} протонами в дипольном и импульсном приближениях, а также полные сечения, вычисленные по программам LOSS-R и HERION. В программе LOSS-R недипольная часть сечений соответствует переходам в состояния непрерывного спектра с орбитальными моментами $\lambda \neq l_0 \pm 1$ (см. формулы (2)–(3)). Из рисунка 2 видно, что недипольная часть сечения, вычисленная по программе LOSS-R, согласуется с формулой (8) для импульсного приближения в пределах 30%. Что касается дипольной части и полного сечения, то ситуация такая же, как и на рис. 1: программы LOSS-R и HERION дают сечения, которые согласуются между собой с точностью до фактора 2. Следует отметить, что дипольная часть сечений ионизации тяжелыми частицами составляет 60–70% от полного сечения, при этом для релятивистских скоростей недипольная часть сечения слабо зависит от энергии и поэтому дипольная часть практически имеет ту же форму, что и полное сечение.

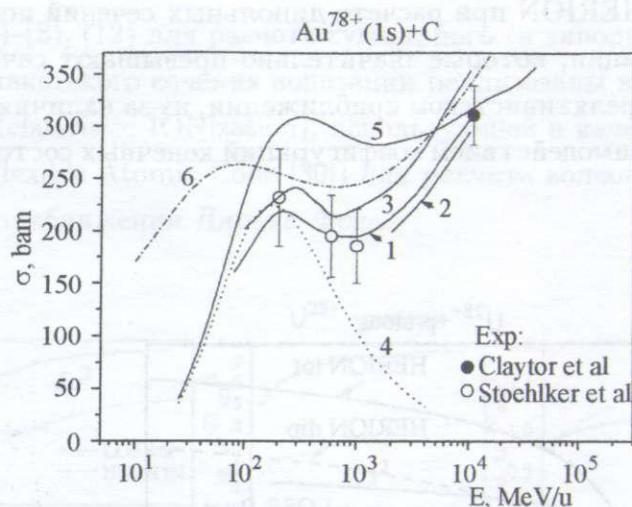


Рис. 3. Сечения ионизации Н-подобных ионов Au^{78+} из $1s$ -состояния при столкновении с атомами углерода. Эксперимент: открытые кружки – [21, 32], сплошной кружок [33]. Теория: 1 – релятивистский расчет в приближении волнового пакета с релятивистскими волновыми функциями и учетом магнитных взаимодействий [24], 2 – релятивистское борновское приближение с плоскими волновыми функциями для свободного электрона [18], 3 – релятивистский полуэмпирический расчет [19]; кривые 4, 5 и 6 – результат настоящей работы: 4 – нерелятивистское и 5 – релятивистское борновское приближение с нерелятивистскими волновыми функциями, программы LOSS и LOSS-R, соответственно, 6 – программа HERION с $Z_{\text{eff}}^2 = Z^2 + N = 42$ (см. текст).

На рис. 3 приведены сечения ионизации Н-подобных ионов $Au^{78+}(1s)$ при столкновении с атомами углерода в широкой области энергий $E = 0.1\text{--}40 \text{ GeV/u}$, включая область минимума сечения $E_{\min} \approx 1 \text{ GeV/u}$. Открытые кружки соответствуют экспериментальным данным, полученным при энергиях $E = 0.2, 0.6$ и 1.0 GeV/u на накопительном кольце Института ГСИ, Дармштадт [21, 32], и при $E = 10.8 \text{ GeV/u}$ – на синхротронном ускорителе Брукхейвенской Национальной лаборатории [33]. Теоретические расчеты представлены кривыми 1–6. Релятивистские расчеты сечения ионизации в приближении волнового пакета [24] с релятивистскими кулоновскими волновыми функциями соответствуют кривой 1; эти расчеты дают наилучшее согласие с экспериментом в области $0.1\text{--}10 \text{ GeV/u}$. Кривые 2 и 3 – расчет сечений в релятивистском борновском приближении с плоскими волновыми функциями свободного электрона [18] и в полуэмпирическом приближении [19], соответственно, а расчеты по HERION – кривая 6.

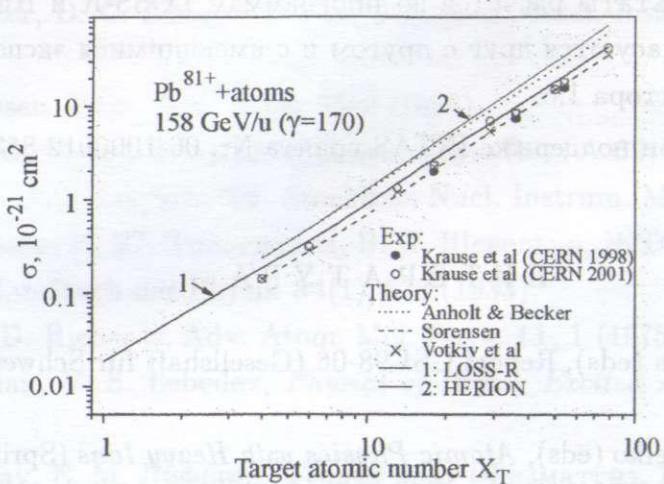


Рис. 4. Сечения ионизации H-подобных ионов Pb^{81+} при столкновениях с нейтральными атомами на ультрарелятивистской энергии 158 GeV/u ($\gamma = 170$) как функция заряда ядра атома мишени Z_T . Эксперимент: сплошные и открытые кружки – [34] и [35], соответственно. Теория: пунктирные кривые – борновское приближение плоских волн [19], штриховые кривые – релятивистская модель [22], кресты – расчет с релятивистскими волновыми функциями Дарвина [23], кривая 1 – программа LOSS-R, кривая 2 – программа HERION.

На рис. 4 приведены сечения ионизации H-подобных ионов Pb^{81+} нейтральными атомами при ультрарелятивистских энергиях 158 GeV/u ($\gamma = 170$) как функция заряда ядра атома мишени. Экспериментальные данные, полученные в ЦЕРНе, представлены сплошными [34] и открытыми [35] кружками. Вычисления в борновском приближении плоских волн [18] изображены пунктирными кривыми, которые лежат довольно близко к штриховым кривым, соответствующим расчетам [22], [23] с дарвиновскими волновыми функциями и расчетам по программам LOSS-R, HERION.

Таким образом, результаты расчетов согласуются друг с другом и имеющимися экспериментальными данными в пределах 20–30%.

Заключение. Прямые расчеты релятивистских сечений ионизации тяжелых ионов нейтральными атомами связаны со значительными трудностями. В работе [25] приведено описание программы LOSS-R для расчета указанных сечений, являющейся модификацией программы LOSS [7] для расчета сечений ионизации ионов при релятивистских энергиях.

В настоящей работе предложен подход, основанный на дипольном и импульсном приближениях для полного сечения релятивистской ионизации, и на его основе создана про-

грамма HERION. Результаты расчетов по программам LOSS-R и HERION показали, что обе программы согласуются друг с другом и с имеющимися экспериментальными данными в пределах фактора 1.5.

Работа выполнена при поддержке INTAS гранта Nr. 06-1000012-8530.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] I. Hoffmann, G. Plass (eds), Report GSI-98-06 (Gesellschaft fur Schwerionen Forschung, Darmstadt, 1998).
- [2] H. Beyer, V. P. Shevelko (eds), *Atomic Physics with Heavy Ions* (Springer series Atoms and Plasmas, Vol. 26, Springer, Berlin, 1999) [in English].
- [3] G. Kraft, Progr. Part. Nucl. Phys. **45** (Suppl. 2), 473 (2000).
- [4] F. J. Currell (ed.), *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions* (Kluwer Academic Pub., Dordrecht, 2003).
- [5] V. P. Shevelko, D. Boehne, Th. Stoehlker, Nucl. Instrum. Methods A **415**, 609 (1998).
- [6] V. P. Shevelko, O. Brinzaescu, W. Jacoby, M. Rau, Th. Stoehlker, Hyp. Int. **114**, 289 (1998).
- [7] V. P. Shevelko, I. Yu. Tolstikhina, Th. Stoehlker, Nucl. Instrum. Methods B **184**, 295 (2001).
- [8] D. Mueller, L. Grisham, I. Kaganovich, et al., Phys. Plasmas **8**, 1753 (2001).
- [9] R. L. Watson, Y. Peng, V. Horvat, et al., Phys. Rev. A **67**, 022706 (2003).
- [10] A. C. F. Santos, R. D. DuBois, Phys. Rev. A **69**, 042709 (2004).
- [11] R. D. DuBois, A. C. F. Santos, Th. Stoehlker, et al., Phys. Rev. A **70**, 032712 (2004).
- [12] R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat, et al., J. Phys. B **37**, 4539 (2004).
- [13] R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat, et al., NIMA **544**, 333 (2005).
- [14] Б. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питалевский, *Квантовая электродинамика* (Наука, Москва, 1989).
- [15] J. Eichler and W. E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions* (Acad. Press, San Diego, 1995).
- [16] C. A. Bertulani, G. Baur, Phys. Rep. **163**, 299 (1988).
- [17] A. B. Voitkiv, Phys. Rep. **392**, 191 (2004).
- [18] R. Anholt et al., Phys. Rev. A **32**, 3302 (1985).
- [19] R. Anholt, U. Becker, Phys. Rev. A **36**, 4628 (1987).
- [20] D. M. Davidovic, B. L. Moiseiwitsch, P. H. Norrington, J. Phys. B **11**, 847 (1978).

- [21] Th. Stoehlker, D. C. Ionescu, P. Rymuza, et al., Nucl. Instrum. Methods B **124**, 160 (1997).
- [22] A. H. Sorensen, Phys. Rev. A **58**, 2895 (1998).
- [23] A. B. Voitkov, C. Mueller, and N. Gruen, Phys. Rev. A **62**, 062701 (2000).
- [24] S. Fritzsch, A. Surzhykov, Th. Stoehlker, Nucl. Instrum. Methods B **205**, 469 (2003).
- [25] И. Л. Бейгман, И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько, ЖТФ, 2008 (в печати).
- [26] H. Bethe, Handbuch der Physik **34**(1), 273 (1933).
- [27] I. Percival, D. Richards, Adv. Atom. Mol. Phys. **11**, 1 (1975).
- [28] I. L. Beigman, V. S. Lebedev, *Physics of Highly Excited Atoms and Ions* (Springer, 1998).
- [29] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля* (Физматгиз, 1973).
- [30] M. F. Gu (<http://kipac-tree.stanford.edu/fac>)
- [31] М. Я. Амусья, *Атомный фотозаффект* (Наука, Москва, 1987).
- [32] C. Scheidenberger, H. Geissel, Th. Stoehlker, et al., Nucl. Instrum. Methods B **90**, 36 (1994).
- [33] N. Claytor, A. Belkacem, T. Dinneen, B. Feinberg, H. Gould, Phys. Rev. A **55**, R842 (1998).
- [34] H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz, et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 1190 (1998).
- [35] H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz, et al., Phys. Rev. A **63**, 032711 (2001).

Поступила в редакцию 4 февраля 2008 г.

Контактные телефоны редакции:
(495) 122-6711, (495) 122-6117, (495) 733-3646,
факс (495) 733-4643; E-mail: pavelf@sci.lebedev.ru