

УДК 539.184.5

## О СТРУКТУРЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ ПРИ МЕДЛЕННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ИОНОВ ФУЛЛЕРЕНОВ С АТОМНЫМИ ИОНАМИ

А. А. Нарич, Л. П. Пресняков, Э. Сальцборн<sup>1</sup>

*Предложена квантовая модель для расчета дифференциальных сечений перезарядки атомных ионов на ионах фуллеренов. Результаты расчета свидетельствуют о возможности экспериментального наблюдения осцилляторных структур в дифференциальных сечениях.*

Дифференциальные сечения процессов перезарядки содержат уникальную информацию как о строении сталкивающихся атомных (молекулярных) систем, так и о динамике электронных переходов. Впервые дифференциальные (по углу рассеяния) сечения симметричной резонансной перезарядки в ион-ионных столкновениях ( $He^{2+} + He^+$ ) были недавно исследованы в совместной работе [1] экспериментаторами Университета г. Гиссен (Германия) и теоретиками отдела спектроскопии ФИАН. В настоящее время быстро развивается физика экспериментов с участием фуллеренов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{84}$  и др. В частности, экспериментально и теоретически исследованы полные сечения перезарядки многозарядных атомных ионов на  $C_n$  [2] и процессы ионизации и фрагментации нейтральных и однозарядных фуллеренов электронным ударом [3, 4].

Целью настоящей работы является развитие теории для описания дифференциальных сечений в процессах перезарядки типа



при энергиях в системе центра масс от 1 до 20 кэВ. Примем следующую упрощенную квантовую модель процесса. Будем рассматривать ион  $He^{2+}$  как точечную частицу, а

<sup>1</sup>Институт ядерной физики, Университет г. Гиссен, ФРГ.

ион  $C_6^+$  как сферу с радиусом  $R_0 = 8.52 \text{ a.e.}$  (атомные единицы используются далее во всех формулах). Дифференциальное сечение перезарядки в единицу телесного угла запишем в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{1}{2ik} \sum_{L=0}^{\infty} (2L-1) P_L(\cos\theta) |S_L^{ex}| e^{i2\delta_L} \right|^2. \quad (2)$$

Здесь  $k$  – волновое число в системе центра масс,  $L$  – орбитальный момент относительно движения,  $P_L$  – полином Лежандра,  $|S_L^{ex}|$  – модуль матричного элемента перезарядки. Отметим, что следуя приближению, хорошо исследованному в задачах о кулоновском возбуждении ядер [5], мы будем считать, что фазы  $\delta_L$  в основном определяются процессами упругого рассеяния. Качественно это аргументируется тем, что переход электрона от одного тяжелого иона к другому мало влияет на межйонное рассеяние. Недиагональный элемент матрицы рассеяния  $S_L^{ex}$  должен стремиться к нулю при  $L \rightarrow \infty$ . Тем самым обеспечивается сходимость выражения (2) при нулевых углах рассеяния даже в присутствии кулонова поля. В рамках нашего приближения мы полностью пренебрегаем процессами двухэлектронной перезарядки, ионизации и фрагментации  $C_n$ . При этом мы можем принять для расчета фаз рассеяния, дополнительных к кулоновским, модель рассеяния на жесткой сфере. Фаза рассеяния принимает вид

$$\delta_L = \delta_L^c + \delta_L^h, \quad (3)$$

где  $\delta_L^c$  – парциальная фаза кулоновского рассеяния в поле отталкивания. Фаза рассеяния на жесткой сфере в указанной выше области энергий для  $L \gg 1$  равна

$$\delta_L^h = \arctg(J_{L+1/2}(kR_0)/Y_{L+1/2}(kR_0)). \quad (4)$$

Здесь  $J$  и  $Y$  – функции Бесселя и Неймана соответственно,  $k$  – волновое число в системе центра масс и  $R_0$  – эффективный радиус (для  $C_{60}$   $R_0 = 8.52$ ). Характерные значения  $L$ , дающие основной вклад в сумму (2) для процесса перезарядки (1), имеют порядок величины  $L \sim kR_0 \approx 3 \times 10^3$ . Очевидно, что попытки использовать какие-либо рекуррентные соотношения для функций  $J_L$  и  $Y_L$  в данном случае не приведут к успеху. Задача о равномерном представлении функций Бесселя с помощью функций Эйри была решена В. А. Фоком [6] и Ф. Олвером [7] различными методами, приведшими к одному и тому же результату:

$$\frac{J_{L+1/2}(kR_0)}{Y_{L+1/2}(kR_0)} = -\frac{Ai(t)}{Bi(t)}, \quad (5)$$

$$t = \frac{L + 1/2 - kR_0}{(kR_0/2)^{1/3}}, \quad |L - kR_0| \leq (kR_0)^{2/3}. \quad (6)$$

Отметим, что Олвер [7] установил аргумент функций Эйри (5) и за пределами неравенства (6) с помощью развитых им методов эталонных уравнений. Фок [6] использовал метод, основанный на интегральном представлении функции Эйри. Формула (5) при подстановке в (4) позволяет устойчиво вычислять фазы  $\delta_L^h$  и их производные аналитически и численно.

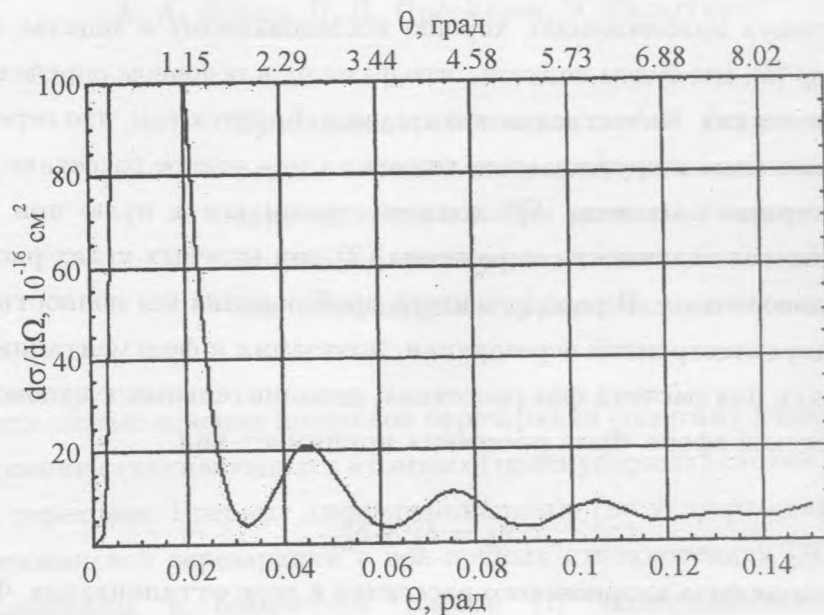


Рис. 1.

Матричный элемент одноэлектронной перезарядки вычислялся как коэффициент прохождения через барьер, разделяющий ионы фуллерена  $C_{60}^{2+}$  и гелия  $He^{2+}$ . Форма барьера и физический смысл барьерного приближения детально обсуждался авторами [2].

В нашей работе коэффициент подбарьерного и надбарьерного прохождения вычислялся с помощью метода фазовых уравнений, ранее развитого одним из авторов этой работы [8].

Результаты расчета приведены на рис. 1 для скорости относительного движения  $(v/v_0) = 0.39$  а.е. Отметим, что три хорошо выраженных максимума при углах  $\theta > 1.5^\circ$  обязаны своим происхождением фазе рассеяния на жесткой сфере,  $\delta_L^h$ . Главный максимум при  $\theta \sim 0.5^\circ$  возникает вследствие дальнедействующего кулоновского поля

отталкивания. Как уже отмечалось ранее, сечение (2) обращается в нуль при  $\theta = 0$  за счет быстрого убывания  $S_L^{ex}$  при  $L > 10^4$ .

Приведенные результаты указывают на возможность обнаружения осцилляторных структур в дифференциальных сечениях процесса перезарядки (1).

Авторы признательны Д. Б. Ускову за полезные обсуждения.

Работа частично поддержана INTAS (грант 99-1326). А. А. Н. и Л. П. П. признательны за поддержку РФФИ (проект N 99-16602) и Федеральной программе "Интеграция" (АО-133).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Krue d e n e r S., M e l c h e r t F., D i e m a r K. V., et al. Phys. Rev. Lett., **79**, 1002 (1997).
- [2] T h u m m U., B a s t u g T., and F r i c k e B. Phys. Rev., A **52**, 2955 (1995).
- [3] S c h r i e r P., H a t h i r a m a n i D., A r n o l d W., et al. Phys. Rev. Lett., **84**, 1261 (2000).
- [4] H a t h i r a m a n i D., A i c h e l e K., A r n o l d W., et al. Mol. Materials, **13**, 343 (2000).
- [5] A l d e r K., B o h r A., H u n s T., et al. Rev. Mod. Phys., **28**, 432 (1956).  
[Русский перевод в сб. "Деформация атомных ядер" под ред. Л. А. Слива, М., ИЛ, 1958, стр. 10-231].
- [6] Ф о к В. А. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн. М., "Сов. радио", 1979, стр. 467.
- [7] O l v e r F. W. J. Asymptotics and Special Functions, Academic Press, N. Y. 1974.  
[Русский перевод: Ф. Олвер. Асимптотика и специальные функции, М., Наука, 1990.]
- [8] P r e s n y a k o v L. P. Phys. Rev., A **44**, 5626 (1991); in Progress in Optics, edited by E. Wolf, North-Holland, **34**, 159 (1995).

Поступила в редакцию 25 декабря 2000 г.