

ЭФФЕКТИВНОЕ ТОРМОЖЕНИЕ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ СТРУКТУРНЫХ ИОНОВ ПРИ КРАТНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ С МОЛЕКУЛАМИ И НАНОЧАСТИЦАМИ

*В. И. Матвеев**, *Е. С. Гусаревич*, *Д. Н. Макаров*

*Поморский государственный университет им. М. В. Ломоносова
163002, Архангельск, Россия*

Поступила в редакцию 23 марта 2009 г.

Развит непертурбативный метод расчетов потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях со сложными молекулами и наночастицами с учетом всевозможных возбуждений и ионизации как снаряда, так и мишени. Проведены расчеты вкладов эффектов кратности столкновений и ориентации мишени относительно направления движения снаряда в процессы потерь энергии. В качестве примеров рассмотрены потери энергии при столкновениях с молекулой XeF_4 и нанотрубкой C_{300} , показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительным изменениям эффективного торможения при изменении ориентации мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен.

PACS: 34.50.Bw

1. ВВЕДЕНИЕ

Часто экспериментальные исследования неупругих процессов, сопровождающих столкновения быстрых высокозарядных ионов с различного рода мишенями (см., например, [1–4]), проводятся на молекулярных мишенях. В подобных случаях, в отличие от столкновений с атомарными мишенями, в процессы потерь энергии вносят вклад эффекты ориентации молекулы-мишени относительно направления движения снаряда. Для учета влияния на процессы потерь энергии ориентационных молекулярных эффектов развито (см., например, [5, 6]) в первом порядке теории возмущений обобщение теории Бете. Теория возмущений применима, если выполнено неравенство $Z/v \ll 1$, где Z — заряд иона, v — относительная скорость сталкивающихся частиц. Здесь и везде ниже используются атомные единицы. При рассмотрении ионов высоких зарядов $Z \gg 1$ теория возмущений неприменима [7], поскольку даже при $v \gg 1$ часто оказывается, что $Z/v \geq 1$. Во многих экспериментах используются частично обданные — структурные ионы высоких зарядов и энергий, состоящие из ядра заряда Z и некоторо-

го количества N_P связанных электронов, так что «видимый» заряд иона равен $Z_P = Z - N_P$. Строго говоря, столкновения таких ионов с атомами и молекулами следует рассматривать как столкновение двух сложных систем, при котором происходит одновременное возбуждение электронных оболочек обеих сталкивающихся систем. Например, в работах [1, 2] проведены измерения сечений многократной ионизации (потеря до 15 электронов) быстрых ионов урана U^{q+} , $q = 4, 6, 10, 28$, (с энергиями 1.4, 3.5 и 6.5 МэВ/нуклон) при столкновениях с многоэлектронными нейтральными атомами и молекулами. Подобные измерения были проведены для ионов Xe^{18+} (с энергиями 6 МэВ/нуклон) при столкновениях с атомами He, Ne, Ar, Kr, Xe [8], для ионов Xe^{18+} (с энергиями 2.0–9.3 МэВ/нуклон) — с молекулой N_2 [3], а также для ионов Xe^{11+} , Kr^{7+} — с молекулой N_2 с энергией 3.4 МэВ/нуклон [4]. Измерения показали, что при увеличении степени ионизации на единицу соответствующее сечение убывает менее чем в два раза, и была отмечена необходимость рассчитывать подобные процессы непертурбативными (не предполагающими малости возмущения) методами (причем вклад многоэлектронных процессов в полные сечения потерь электронов достигает 50 % и бо-

*E-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

лее, см., например, [9]). Аналогичный вывод справедлив и для процессов ионизационных потерь энергии. Действительно, эффективное торможение можно оценить как произведение энергии ионизации на сечение ионизации. На двукратную ионизацию приходится примерно в два раза большая энергия, чем на однократную, и если сечение двукратной ионизации в два раза меньше, чем сечение однократной ионизации, то произведение энергии на соответствующее сечение не меняется, аналогично и для ионизации более высокой кратности. Другими словами, вклад многоэлектронных переходов в эффективное торможение оказывается сравнимым [10] по порядку величины с вкладом одноэлектронных возбуждений и ионизации. Ясно, что такие процессы не описываются в рамках теории возмущений. Квантовомеханическое описание подобных непертурбативных эффектов, сопровождающих столкновения быстрых высокозарядных структурных ионов со сложными нейтральными атомами, было развито в работах [10–12] на основе применимых при $v \gg 1$ и тесно связанных между собой приближений внезапных возмущений и эйконала, не требующих малости Z/v по сравнению с единицей.

К числу непертурбативных эффектов относятся и эффекты кратности столкновений [13], не допускающие описание в рамках первого борновского приближения. Проще всего, следуя работе [13], проиллюстрировать вклад кратности столкновений на примере столкновения быстрых структурных высокозарядных ионов с двухатомной молекулой (состоящей из одинаковых атомов), когда в процессы потерь энергии снарядом заметную поправку вносит учет двух последовательных столкновений иона с атомными остовами, входящими в состав одной молекулы. Для движущихся с релятивистской скоростью снарядов время между двумя такими столкновениями порядка 10^{-19} с. Очевидно, что это время намного меньше среднего времени жизни возбужденных состояний структурного иона (снаряда) относительно радиационных и оже-распадов и снаряд, возбужденный в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со вторым ядром молекулы, находясь в возбужденном состоянии. Далее, поскольку эффективный размер возбужденных состояний больше размера основного состояния, сечения возбуждения и ионизации из возбужденного состояния оказываются больше сечений возбуждения и ионизации из основного состояния и следует ожидать заметный вклад в потери энергии от учета последовательных столкновений. Пусть при

последовательном столкновении с двумя центрами электроны снаряда получают импульс \mathbf{q}_1 от первого центра и импульс \mathbf{q}_2 от второго центра. Тогда эффективное торможение будет пропорционально квадрату суммарного переданного при столкновении импульса $\mathbf{q}^2 = (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)^2$, причем эффект кратности столкновений описывается слагаемым $2\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2$. При скорости иона, параллельной оси молекулы, снаряд последовательно сталкивается с двумя атомами молекулы и $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2$, поэтому $\mathbf{q}^2 = \mathbf{q}_{\parallel}^2 = (2\mathbf{q}_1)^2$. При перпендикулярной ориентации оси молекулы движущийся по прямолинейной траектории ион сталкивается либо с одним атомом молекулы, либо с другим, тогда либо $\mathbf{q}_1 \neq 0$ и $\mathbf{q}_2 = 0$, либо $\mathbf{q}_1 = 0$ и $\mathbf{q}_2 \neq 0$. В этих случаях либо $\mathbf{q}^2 = \mathbf{q}_1^2 = \mathbf{q}_2^2$, либо $\mathbf{q}^2 = \mathbf{q}_1^2 = \mathbf{q}_2^2$, что после суммирования по всем траекториям приводит [13] к примерно двукратной разнице между значениями эффективного торможения, соответствующими параллельной и перпендикулярной ориентациям молекулы. Нетрудно убедиться, что в случае выбора N -атомной линейной молекулы (состоящей из N одинаковых атомов) эффективное торможение возрастает примерно в N раз при переходе от перпендикулярной ориентации молекулы к параллельной при условии, что снаряд, возбужденный в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со всеми остальными ядрами молекулы, находясь в возбужденном состоянии. Подчеркнем, что эффект кратности столкновений относится только к потерям энергии на возбуждение электронных оболочек снаряда, тогда как потери энергии на возбуждение электронов мишени не изменяются [13] за счет кратности столкновения. Действительно, в этом случае при последовательном столкновении с каждым из двух атомов молекулы импульсы \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 передаются разным атомам, поэтому их не следует складывать для вычисления общих потерь: электроны первого атома получают импульс \mathbf{q}_1 , а второго — \mathbf{q}_2 , и потери энергии пропорциональны $\mathbf{q}_1^2 + \mathbf{q}_2^2$. Ясно, что аналогичные аргументы справедливы и для столкновений достаточно быстрых структурных ионов с молекулами, состоящими более чем из двух атомов, либо с более сложными мишенями (например, с нанотрубками). Потери энергии на возбуждение электронных оболочек снаряда пропорциональны числу электронов на оболочках снаряда. Именно это и обусловило выбор в данной статье в качестве снарядов многоэлектронных структурных ионов, для корректного описания столкновений которых необходимо использовать непертурбативные подходы. В работе [13] на

основе подхода [10] развита непertурбативная теория потерь энергии быстрыми тяжелыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами с учетом всевозможных, в том числе многократных, возбуждений и ионизации как снаряда, так и мишени.

В настоящей работе на основе обобщения на многоатомные мишени непertурбативной теории [13] развит непertурбативный метод расчетов потерь энергии быстрыми тяжелыми высокозарядными структурными ионами при столкновениях со сложными многоатомными молекулами и наночастицами с учетом всевозможных возбуждений и ионизации как снаряда, так и мишени. Существенного упрощения задачи удалось достичь путем рассмотрения ионов высоких зарядов и многоэлектронных мишеней. Проведены расчеты зависимостей эффективного торможения от ориентации мишени относительно направления движения снаряда. Зависимости содержат характерные пики, соответствующие таким ориентациям мишени, для которых на одной прямой, параллельной скорости снаряда, располагаются два или несколько атомов мишени. В качестве примеров рассмотрены потери энергии при столкновениях с молекулой XeF_4 и нанотрубкой C_{300} . Показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительным изменениям эффективного торможения при изменении ориентации мишени, при хаотической же ориентации этот эффект малозначителен.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Согласно работам [10, 13], потери энергии с учетом всевозможных, в том числе многоэлектронных, возбуждений и ионизации мишени и снаряда можно записать в виде

$$\kappa = \kappa^{(p)} + \kappa^{(t)}. \quad (1)$$

Здесь $\kappa^{(p)}$ — потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов снаряда мишенью при произвольной (т. е. полученной путем суммирования по полному набору всех конечных состояний электронов мишени) судьбе электронов мишени; аналогично $\kappa^{(t)}$ — потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов мишени снарядом при произвольной судьбе электронов снаряда. При этом для наших целей достаточно вычислить только $\kappa^{(p)}$, поскольку $\kappa^{(t)}$ не содержит вклада кратности столкновений. В качестве снарядов будем рассматривать быстрые структурные высокозарядные ионы, а в ка-

честве мишеней — сложные многоатомные молекулы, состоящие из многоэлектронных атомов. В таких молекулах электронная плотность мало отличается от электронной плотности изолированных атомов, поскольку при их объединении в молекулу наибольшее изменение претерпевает электронная плотность внешних — валентных — электронов, число которых не велико по сравнению с общим числом атомных электронов. Электронная плотность же подавляющего количества остальных — остовных — электронов искажается слабо. Учитываемые величиной $\kappa^{(p)}$ сечения неупругих процессов, происходящих в электронных оболочках снаряда, выражаются [10–12] через плотность электронов мишени. Поэтому влиянием «молекулярности» электронной структуры мишени на величину сечений можно пренебречь [13] и рассчитывать сечения для мишеней в виде многоатомных молекул, формально составленных из изолированных атомов, без искажения их электронных оболочек. Все дальнейшие выкладки будем проводить именно для такой модели молекулы, ввиду возможности выполнения наглядных аналитических вычислений и незначительного (см. разд. 3) изменения результатов при использовании модели Томаса–Ферми для описания молекулы.

Согласно работам [10, 11], сечение перехода электронов снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала:

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

где v — скорость снаряда, U — энергия взаимодействия электронов налетающего иона с молекулой, описываемой как протяженный заряд, ось X направлена по вектору скорости \mathbf{v} , мишень неподвижна, $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$ — координаты ядра снаряда относительно начала системы координат. Представим потенциал взаимодействия электронов снаряда с мишенью в виде суммы потенциалов взаимодействия с отдельными атомами, входящими в состав мишени:

$$U = \sum_{m=1}^N U_m(\mathbf{R}_m, \{\mathbf{r}_p\}). \quad (3)$$

Здесь N — число атомов в мишени, $U_m(\mathbf{R}_m, \{\mathbf{r}_p\})$ — энергия взаимодействия электронов иона с m -м атомом молекулы, $\mathbf{R}_m = (X_m, \mathbf{b}_m)$ — координаты ядра снаряда относительно ядра m -го атома мишени, \mathbf{b}_m — прицельный параметр относительно m -го атома, $\{\mathbf{r}_p\}$ — совокупность ($p = 1, 2, \dots, N_p$) коор-

динат электронов структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда, N_P — полное число электронов в ионе. Электронную плотность каждого атома мишени будем описывать в модели [14] Дирака–Хартри–Фока–Слейтера, согласно которой пространственная плотность электронного заряда в атоме имеет вид

$$\rho_m(r) = -\frac{Z_m}{4\pi r} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \alpha_{m,i}^2 \exp(-\alpha_{m,i} r), \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^3 A_{m,i} = 1,$$

где Z_m — заряд ядра атома с номером m , $A_{m,i}$ и $\alpha_{m,i}$ — постоянные, табулированные [14] для всех атомных элементов ($Z_m = 1, 2, \dots, 92$). Тогда с учетом (4) энергия взаимодействия электронов иона с m -м атомом молекулы может быть представлена в виде

$$U_m(\mathbf{R}_m, \{\mathbf{r}_p\}) = -\sum_{p=1}^{N_P} \frac{Z_m}{|\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_p|} \times \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \exp(-\alpha_{m,i} |\mathbf{R}_m + \mathbf{r}_p|). \quad (5)$$

Далее, принимая во внимание соотношения (3) и (5), для эйкональной фазы в (2) получим

$$\chi = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U dX = \sum_{m=1}^N \chi_m, \quad (6)$$

$$\chi_m = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U_m(\mathbf{R}_m, \{\mathbf{r}_p\}) dX_m = \frac{2Z_m}{v} \sum_{p=1}^{N_P} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} K_0(\alpha_{m,i} |\mathbf{b}_m + \mathbf{s}_p|), \quad (7)$$

где $K_0(z)$ — функция Макдональда, \mathbf{s}_p — проекция \mathbf{r}_p на плоскость параметра удара. Согласно [10] формула (2) с эйкональной фазой (7) применима и в случае релятивистских столкновений и описывает сечение перехода электронов снаряда из состояния $|0\rangle$ в состояние $|k\rangle$ при произвольной судьбе электронов мишени с небольшой относительной погрешностью около $1/N_A$, N_A — полное число электронов в мишени, для многоэлектронных мишеней $N_A \gg 1$.

Будем рассматривать высокозарядные структурные ионы, видимый заряд Z_P которых много больше единицы (например, для иона железа Fe^{10+} заряд

$Z_P = 10$). Тогда характерный размер электронной шубы иона будет много меньше характерного размера нейтрального атома (входящего в состав мишени) и можно считать среднее поле атома однородным на размерах иона, что соответствует разложению эйкональной фазы (7) по малым r_p/b с использованием формулы

$$K_0(\alpha |\mathbf{b} + \mathbf{s}_p|) \approx K_0(\alpha b) - K_1(\alpha b) \frac{\alpha \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}_p}{b}. \quad (8)$$

Слагаемое $K_0(\alpha b)$, как не вызывающее электронных переходов, может быть опущено, в результате формула (2) при ортогональных $|0\rangle$ и $|k\rangle$ примет вид

$$\sigma = \int \left| \langle k | \exp\left(-i\mathbf{q} \cdot \sum_{p=1}^{N_P} \mathbf{r}_p\right) | 0 \rangle \right|^2 d\mathbf{b}. \quad (9)$$

Здесь вектор \mathbf{q} имеет смысл импульса, передаваемого электронам иона при его столкновении с мишенью, и равен

$$\mathbf{q} = \sum_{m=1}^N \mathbf{q}_m, \quad (10)$$

где

$$\mathbf{q}_m = \frac{2Z_m}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_{m,i} A_{m,i} K_1(\alpha_{m,i} b_m) \frac{\mathbf{b}_m}{b_m} \quad (11)$$

имеет смысл импульса, передаваемого каждому электрону снаряда при столкновении с m -м атомом молекулы, $K_1(z)$ — функция Макдональда. Далее, формально обобщая на N -атомный потенциал выкладки, приведенные в работе [13] для вычисления $\kappa^{(p)}$ в случае двухатомной молекулы (двухатомного потенциала), получим эффективное торможение $\kappa^{(p)}$ в виде

$$\kappa^{(p)} = \frac{N_P}{2} \int \left(\sum_{m=1}^N \mathbf{q}_m \right)^2 d\mathbf{b}. \quad (12)$$

Раскрывая в правой части выражения (12) квадрат суммы, запишем

$$\kappa^{(p)} = \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)} + \Delta\kappa, \quad (13)$$

где

$$\kappa_m^{(p)} = \frac{N_P}{2} \int \mathbf{q}_m^2 d\mathbf{b}_m, \quad (14)$$

очевидно, имеет смысл потерь энергии при столкновении с m -м изолированным атомом молекулы. Соответственно, $\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}$ имеет смысл суммы потерь на

всех N изолированных атомах молекулы. Для одинаковых атомов сумма $\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}$ есть просто умноженные на число атомов N потери на одном изолированном атоме. В формуле (13) слагаемое

$$\Delta\kappa = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \Delta\kappa_{m,n} \quad (15)$$

(ср. [13]) имеет смысл потерь энергии за счет кратности столкновений,

$$\Delta\kappa_{m,n} = \frac{N_P}{2} \int (2\mathbf{q}_m \mathbf{q}_n) d\mathbf{b}. \quad (16)$$

Таким образом, поправка $\Delta\kappa$ за счет кратности столкновений со всеми атомами мишени (в рамках модели независимых атомов) точно и формально выражается через сумму поправок $\Delta\kappa_{m,n}$ за счет двукратных столкновений иона с парой атомов m и n , суммирование в формуле (15) ведется по всем возможным значениям m и n . Поэтому вычисления $\Delta\kappa_{m,n}$ аналогичны расчетам [13] поправки $\Delta\kappa$ для двухатомной молекулы. Интегрирование в формуле (16) проводится по всей плоскости параметра удара и может быть выполнено аналитически, результат этого интегрирования обозначим $\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn})$. Здесь L_{\perp}^{mn} — абсолютная величина проекции на плоскость параметра удара расстояния L^{mn} между ядрами m и n . Если атомы m и n различны,

$$\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn}) = 8\pi N_P \frac{Z_m Z_n}{v^2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{A_{m,i} A_{n,j}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{n,j}^2} \times \\ \times [\alpha_{m,i}^2 K_0(\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}) - \alpha_{n,j}^2 K_0(\alpha_{n,j} L_{\perp}^{mn})], \quad (17)$$

где Z_m и Z_n — заряды ядер атомов с номерами m и n . Переходя к пределу одинаковых атомов, когда $A_{m,i} = A_{n,i}$ и $\alpha_{m,i} \rightarrow \alpha_{n,i}$ (после выделения слагаемых с $i = j$ и раскрытия в них неопределенности по правилу Лопиталья) для $Z_m = Z_n$ получим

$$\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn}) = 8\pi N_P \frac{Z_m^2}{v^2} \times \\ \times \left[2 \sum_{i,j=1, (i \neq j)}^3 \frac{A_{m,i} A_{m,j}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{m,j}^2} \alpha_{m,i}^2 K_0(\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}) + \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^3 A_{m,i}^2 \left\{ K_0(\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}) - \frac{\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}}{2} K_1(\alpha_{m,i} L_{\perp}^{mn}) \right\} \right]. \quad (18)$$

Таким образом, $\Delta\kappa_{m,n}$ как функция от L_{\perp}^{mn} принимает конечные значения при всех L_{\perp}^{mn} за исключением $L_{\perp}^{mn} \rightarrow 0$, когда $\Delta\kappa_{m,n}$ ведет себя как $\ln(1/L_{\perp}^{mn})$. Такая расходимость связана (как и в случае двухатомной мишени [13]) с неприменимостью приближения однородного поля и разложения (8) при малых (меньших характерного размера $1/Z_P$ электронной «шубы» снаряда) параметрах удара относительно ядра m либо ядра n . В результате, в точках расположения ядер в плоскости параметра удара появляются две особенности. При $L_{\perp}^{mn} \rightarrow 0$ обе особенности сливаются в плоскости параметра удара. Поэтому формулы (17) и (18) описывают $\Delta\kappa_{m,n}$ как функцию от L_{\perp}^{mn} лишь в области $1/Z_P \leq L_{\perp}^{mn} \leq L^{mn}$. Для вычисления $\Delta\kappa_{m,n}$ в области $0 \leq L_{\perp}^{mn} \leq 1/Z_P$ сначала найдем

$$\Delta\kappa_{m,n} = N_P \int (\mathbf{q}_m \cdot \mathbf{q}_n) d\mathbf{b}$$

при $L_{\perp}^{mn} = 0$ в случае одинаковых атомов m и n , когда $\mathbf{q}_m = \mathbf{q}_n$:

$$\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn} = 0) = \kappa_m^{(p)} + \kappa_n^{(p)} = 2\kappa_n^{(p)} = 2\kappa_m^{(p)}. \quad (19)$$

Таким образом, $\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn} = 0)$ в случае столкновения с парой одинаковых атомов равно (ср. с результатами [13]) удвоенным потерям $2\kappa_m^{(p)}$ на одном изолированном атоме, где

$$\kappa_m^{(p)} = \frac{4\pi Z_m^2 N_P}{v^2} \times \\ \times \left[\ln(2a_{m,m} \gamma v) - \frac{1}{2} \beta^2 + \Delta L_{Bloch}^{Z_m} + \Delta L_{Mott}^{Z_m} \right]. \quad (20)$$

Здесь $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v/c$, c — скорость света, $\Delta L_{Bloch}^{Z_m}$ и $\Delta L_{Mott}^{Z_m}$ — поправки Блоха и Мотта, зависящие от заряда Z_m , в поле которого рассеиваются принадлежащие структурному иону электроны; постоянные $a_{m,m}$, такие что

$$\ln a_{m,m} = \\ = \sum_{i,j=1 (i \neq j)}^3 A_{m,i} A_{m,j} \frac{\alpha_{m,j}^2 \ln \alpha_{m,j} - \alpha_{m,i}^2 \ln \alpha_{m,i}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{m,j}^2} - \sum_{i=1}^3 A_{m,i}^2 \ln(\alpha_{m,i} \sqrt{e}). \quad (21)$$

Аналогично, для разных атомов m и n

$$\Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn} = 0) = 8\pi N_P \frac{Z_m Z_n}{v^2} \times \\ \times \left[\ln(2a_{m,n} v \gamma) - \frac{\beta^2}{2} + \Delta L_{Bloch}^{Z_m, n} + \Delta L_{Mott}^{Z_m, n} \right], \quad (22)$$

где $Z_{m,n}^2 = Z_m Z_n$, а

$$\ln a_{m,n} = \sum_{i,j=1}^3 A_{m,i} A_{n,j} \frac{\alpha_{n,j}^2 \ln \alpha_{n,j} - \alpha_{m,i}^2 \ln \alpha_{m,i}}{\alpha_{m,i}^2 - \alpha_{n,j}^2}. \quad (23)$$

Легко убедиться, что $\ln a_{m,n}$ переходит в $\ln a_{m,m}$ для одинаковых атомов, когда $A_{m,i} = A_{n,i}$ и $\alpha_{m,i} \rightarrow \alpha_{n,i}$ (после выделения слагаемых с $i = j$ и раскрытия в них неопределенности по правилу Лопиталя).

Отметим, что телесный угол, в котором расположен вектор \mathbf{L}^{mn} (расстояние между атомами с номерами m и n), соответствующий значениям L_{\perp}^{mn} , таким что $0 \leq L_{\perp}^{mn} \leq 1/Z_P$, при $Z_P \gg 1$ имеет порядок величины $(1/Z_P)^2$ и мал. Поэтому мы можем аппроксимировать функцию $\Delta\kappa_{m,n}$ для всех возможных значений $0 \leq L_{\perp}^{mn} \leq L^{mn}$ следующим образом:

$$\Delta\kappa_{m,n} = \left[1 - \exp\left(-\frac{(L_{\perp}^{mn})^2}{1/Z_P^2}\right) \right] \Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn}) + \exp\left(-\frac{(L_{\perp}^{mn})^2}{1/Z_P^2}\right) \Delta\kappa_{m,n}(L_{\perp}^{mn} = 0). \quad (24)$$

Вычисленная по этой формуле функция $\Delta\kappa_{m,n}$ и, следовательно,

$$\Delta\kappa = \sum_{m,n} \Delta\kappa_{m,n}/2$$

(15), зависят от ориентации молекулы. Мы рассматривали молекулы с различной пространственной структурой, поэтому ориентацию описывали углами Эйлера φ, θ, ψ [15]. Для этого мы ввели две системы координат: подвижную систему $x y z$, жестко связанную с молекулой (ось z будем называть осью молекулы), и неподвижную — $X Y Z$, ось Z которой направлена вдоль скорости \mathbf{v} иона, тогда угол θ между осью z и направлением \mathbf{v} будем называть углом выстроенности оси молекулы. Вычисляемая по формуле (15) функция $\Delta\kappa$ зависит лишь от углов θ и ψ , т. е. $\Delta\kappa = \Delta\kappa(\theta, \psi)$, так как зависимость от φ , очевидно, исчезает в результате интегрирования по параметру удара.

Складывая $\Delta\kappa$ с независимыми от углов ориентации мишени потерями на всех изолированных атомах $\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}$, входящих в состав молекулы, получим зависящие от углов ориентации потери энергии (13) с учетом эффекта кратности столкновений:

$$\kappa^{(p)}(\theta, \psi) = \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)} + \Delta\kappa(\theta, \psi). \quad (25)$$

Результаты наших расчетов удобно проиллюстрировать путем введения относительной величины эффективного торможения

$$\xi(\theta, \psi) = \frac{\kappa^{(p)}(\theta, \psi)}{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}} = \frac{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)} + \Delta\kappa(\theta, \psi)}{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}}. \quad (26)$$

Вычисляемая по этой формуле величина ξ , согласно (12) и (11), не зависит от заряда иона Z_P (за исключением указанного выше условия $Z_P \gg 1$) и от числа N_P электронов в ионе. Таким образом, расчеты относительной величины эффективного торможения можно выполнять, задавая лишь параметры мишени и энергию движения иона.

Будем рассчитывать $\Delta\kappa$ в трех случаях: 1) зависимость $\Delta\kappa$ от угла выстроенности θ при фиксированном ψ , результат такого расчета будем обозначать $\Delta\kappa(\theta)$; 2) зависимость $\Delta\kappa$ от угла выстроенности θ после усреднения по углу ψ (в предположении равновероятности его значений), результат такого усреднения будем обозначать $\overline{\Delta\kappa}(\theta)$; 3) значения $\Delta\kappa$ после усреднения по обоим углам ориентации молекулы θ и ψ (в предположении равновероятности их значений), результат такого усреднения будем обозначать $\overline{\Delta\kappa}$. Соответственно, для этих трех случаев будем рассчитывать относительные величины:

$$\xi(\theta) = 1 + \Delta\kappa(\theta) / \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}, \quad (27)$$

$$\overline{\xi}(\theta) = 1 + \overline{\Delta\kappa}(\theta) / \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}, \quad (28)$$

$$\overline{\xi} = 1 + \overline{\Delta\kappa} / \sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}. \quad (29)$$

Мы провели расчеты относительной величины эффективного торможения структурных ионов для ряда многоатомных молекул в зависимости от углов ориентации молекул. Ясно, что максимумы, обусловленные учетом кратности столкновений, будут наблюдаться на графиках при таких ориентациях молекулы, при которых два или более атомов мишени расположатся на одной прямой, параллельной скорости снаряда \mathbf{v} . Для сложных многоатомных мишеней таких прямых, параллельных \mathbf{v} и проходящих через два или более атомов мишени, может быть несколько. Высота максимумов относительной величины эффективного торможения может быть оценена по простой формуле:

$$\xi_{max} = 1 + \frac{\frac{1}{2} \sum_{i,j} \Delta\kappa_{i,j}(L_{\perp}^{ij} = 0)}{\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}} \approx 1 + \frac{\sum_{\alpha} \left[\sum_{i,j \in \alpha} Z_i Z_j \right]}{\sum_{m=1}^N Z_m^2}, \quad (30)$$

где α — номера прямых линий (параллельных при данной ориентации мишени скорости снаряда \mathbf{v}), таких что на каждой линии находятся два или более атомов мишени. Индексы $i, j \in \alpha$ — номера атомов, расположенных на линии с номером α . Суммирование $\sum_{i,j \in \alpha}$ проводится независимо по индексам i и j , но при этом учитываются только номера атомов, расположенных на прямой линии с номером α , далее проводится суммирование по всем таким линиям. Подчеркнем, что по формуле (30) могут быть оценены лишь ξ_{max} — значения $\xi(\theta)$ в точках максимумов. Если при некоторой ориентации мишени нет прямых линий (параллельных \mathbf{v}), проходящих через два или более атомов мишени, то при данной ориентации мишени нет максимумов эффективного торможения, обусловленных учетом кратности столкновений.

Формула (30) получена из (27) путем замены $\kappa_m^{(p)}$ и $\Delta\kappa_{i,j}(L_{\perp}^{ij} = 0)$, рассчитываемых по формулам (20) и (22), на их значения в приближении «больших логарифмов», когда считается, что $\ln(2\gamma v) \gg 1$ и можно пренебречь слагаемыми $\beta^2/2$, $\ln a_{m,n}$ и поправками Блоха и Мотта, вносящими общий вклад порядка 1. Поэтому погрешность формулы (30) можно оценить как величину порядка $1/\ln(2\gamma v)$. Отметим, что для линейных мишеней, состоящих из одинаковых расположенных на одной прямой атомов, формула (30) является точной и, например, для молекулы, состоящей из N одинаковых атомов,

$$\xi_{max} = 1 + N(N - 1)/N = N.$$

Забегая вперед (см. ниже сравнение с численными результатами), следует заметить, что для всех рассчитываемых нами многоатомных молекул погрешность, вносимая формулой (30), составляла $\leq 1\%$.

На рис. 1 представлены графики зависимостей $\xi(\theta)$ и $\bar{\xi}(\theta)$ от угла выстроенности θ для плоской молекулы XeF_4 , представляющей собой квадрат, в вершинах которого находятся атомы фтора, а в центре — атом ксенона. В качестве оси молекулы нами выбрана одна из диагоналей квадрата, причем

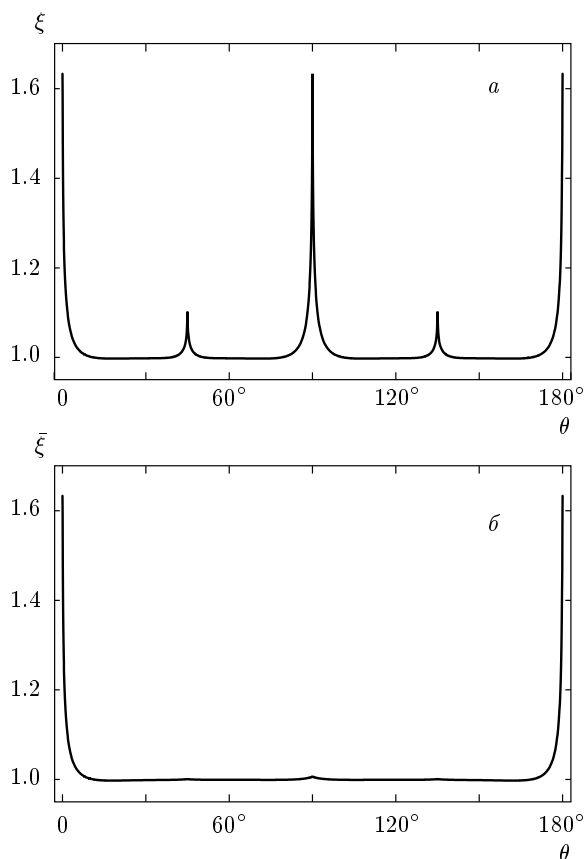


Рис. 1. Зависимости $\xi(\theta)$ (а) и $\bar{\xi}(\theta)$ (б) для молекулы XeF_4 при энергии иона Fe^{10+} , равной 1000 МэВ/нуклон

предполагается такой выбор фиксированного значения угла $\psi = 0$, что при расчетах $\xi(\theta)$ скорость иона \mathbf{v} лежит в плоскости молекулы. Как видно на рис. 1 график $\xi(\theta)$ содержит пять пиков, три из которых принимают одинаковое значение 1.63 в максимуме при углах $\theta = 0, 90^\circ, 180^\circ$ и соответствуют расположению (в прямом или обратном порядке) троек атомов F–Xe–F параллельно скорости иона, а два оставшихся максимума величиной 1.10 при $\theta = 45^\circ, 135^\circ$ соответствуют расположению параллельно скорости иона двух пар атомов фтора. Значения этих максимумов можно оценить и по формуле (30). Так, в случае первого максимума вдоль скорости иона нет прямых, на которых расположены два атома, и есть только одна прямая, на которой расположены три атома: два атома F и посередине между ними атом Xe. Поэтому, учитывая, что $Z_F = 9$, а $Z_{Xe} = 54$, согласно (30) получим:

$$\xi_{max} \approx 1 + \frac{2 \cdot 2Z_F Z_{Xe} + 2Z_F^2}{4Z_F^2 + Z_{Xe}^2} = 1.65.$$

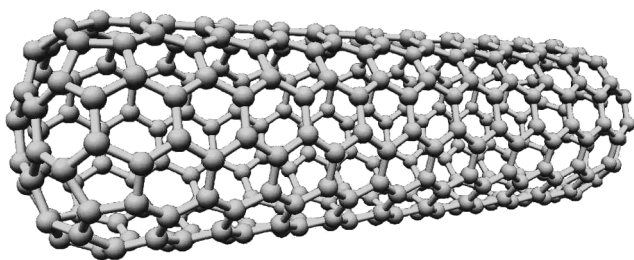


Рис. 2. Внешний вид нанотрубки C₃₀₀ с киральностью (6, 6)

Два оставшихся максимума при $\theta = 45^\circ, 135^\circ$, как было сказано ранее, обусловлены двумя парами атомов фтора, расположенными на двух параллельных прямых, поэтому для них согласно (30):

$$\xi_{max} \approx 1 + \frac{2Z_F^2}{4Z_F^2 + Z_{Xe}^2} + \frac{2Z_F^2}{4Z_F^2 + Z_{Xe}^2} = 1.10.$$

Зависимость $\bar{\xi}(\theta)$ также содержит пять пиков, однако пики при промежуточных углах $\theta = 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$ существенно меньше по сравнению с соответствующими пиками функции $\xi(\theta)$, поскольку получены путем усреднения $\xi(\theta)$ (при фиксированном значении угла θ) по углу ψ (в предположении равновероятности его значений), тогда как такое усреднение при углах $\theta = 0, 180^\circ$, очевидно, не влияет на величину соответствующих пиков.

Помимо рассмотренной выше довольно простой молекулы мы провели расчет значений $\xi(\theta)$ и $\bar{\xi}(\theta)$ для более сложной структуры мишени — нанотрубки C₃₀₀ диаметром 8 Å (см. рис. 2), обладающей киральностью (6, 6). Качественно разница в поведении пиков величин $\xi(\theta)$ и $\bar{\xi}(\theta)$ такая же, как и в случае молекулы XeF₄. Результаты расчетов для $\xi(\theta)$ и $\bar{\xi}(\theta)$ приведены на рис. 3. В качестве оси выбрана главная ось симметрии нанотрубки. Рассматриваемая нами нанотрубка состоит из 12 пятиугольных и 140 шестиугольных граней. Из рис. 3 видно, что график $\xi(\theta)$ для C₃₀₀, как и следовало ожидать, содержит значительное количество пиков и среди них два основных пика вблизи углов $\theta = 0, 180^\circ$ со значениями $\xi(\theta)$ в максимуме, равными 9.11 (значение, рассчитанное по формуле (30), равно 9.16). При $\theta = 90^\circ$ значение $\xi(\theta)$ равно 1.34 (или 1.35 по формуле (30)). Таким образом, в соответствии с определениями (27), (28) относительной величины эффективного торможения могут быть сделаны следующие выводы. При изменении ориентации оси нанотрубки от перпендикулярной до параллельной скорости иона потери энергии на возбуждение и ионизацию

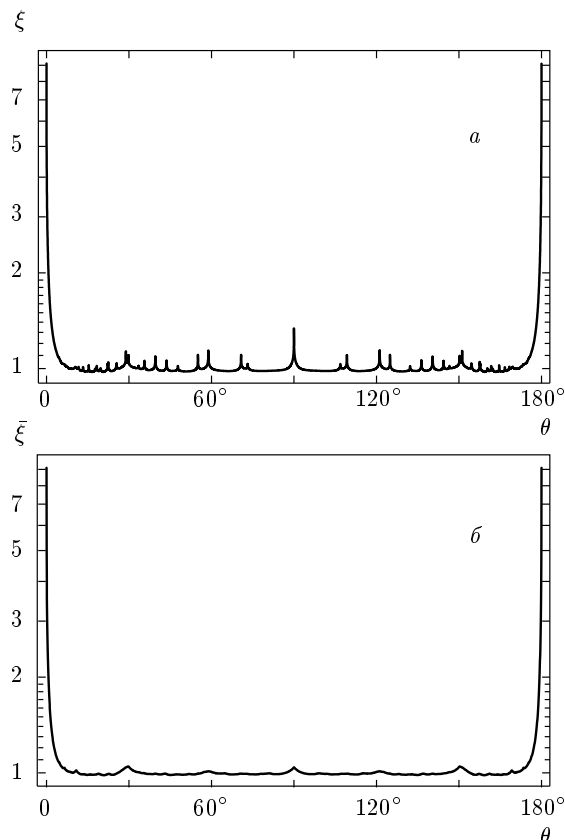


Рис. 3. Зависимости $\xi(\theta)$ (а) и $\bar{\xi}(\theta)$ (б) для нанотрубки C₃₀₀ при энергии иона Fe⁵⁺, равной 10000 МэВ/нуклон

электронов снаряда возрастают примерно в 6.8 раз. При параллельной ориентации оси нанотрубки потери энергии на возбуждение и ионизацию электронов снаряда с учетом эффекта кратности столкновений оказываются в 9.11 раз больше независимых от ориентации суммарных потерь энергии $\sum_{m=1}^N \kappa_m^{(p)}$ отдельных атомах нанотрубки. При перпендикулярной ориентации оси нанотрубки это увеличение за счет кратности столкновений составляет 1.34 раза. На практике обычно измеряют потери энергии при хаотичной ориентации мишеней. Поэтому мы провели расчеты усредненной по всем ориентациям мишени величины $\bar{\xi}$ в предположении равновероятного распределения по углам:

$$\bar{\xi} = \int_0^\pi \bar{\xi}(\theta) \frac{1}{2} \sin \theta d\theta. \tag{31}$$

Оказалось, что при хаотической ориентации мишени отличие $\bar{\xi}$ от единицы составляет величину,

меньшую 0.5 %. Таким образом, эффект кратности столкновений может вносить заметный вклад лишь при наличии выстроенности мишеней вдоль какого-либо направления.

3. УСЛОВИЯ ПРИМЕНИМОСТИ ПОДХОДА

Наше рассмотрение справедливо для ионов больших зарядов $Z_P \gg 1$ и нейтральных мишеней, образованных из многоэлектронных атомов, что требует выполнения неравенств $Z_t \gg 1$, где $t = 1, 2, \dots, N$ — номера атомов, входящих в состав N -атомной мишени. Вычисление сечений основано на приближении эйконала, условия применимости которого состоят в следующем: кинетическая энергия снаряда E предполагается настолько большой, что $E \gg U$ и $kL \gg 1$, где U — энергия взаимодействия снаряда и мишени, k — импульс снаряда, L — радиус взаимодействия U . В нашем случае нейтральных мишеней с размерами, много большими размеров снаряда, в качестве оценки величины L можно принять характерные размеры мишени. Эти условия, очевидно, выполнены в нашем случае для быстрых ионов, движущихся со скоростью $v \gg 1$. Кроме того, для столкновения сложных систем необходимо добавить условия из работ [7, 16]: за время столкновения электроны снаряда не успевают заметно изменить своего положения относительно ядра снаряда и электроны мишени не успевают заметно изменить своего положения относительно покоящейся как целое мишени, другими словами, время столкновения $\tau_c \sim L/v$ должно быть намного меньше τ_e — характерных электронных периодов в системе покоя для каждой из сталкивающихся систем, или $L/v \ll \tau_e$. Выполнение этого условия позволяет, например, описывать движение снаряда при фиксированных положениях электронов мишени [16]. В случае релятивистских скоростей v это условие следует переписать как

$$\sqrt{1 - v^2/c^2} L/v \ll \tau_e.$$

Для каждого конкретного выбора сталкивающихся систем может быть проведена оценка характерных периодов времени τ_e . Если же иметь целью (см., например, [11, 12]) рассмотрение столкновений многоэлектронных систем, у которых подавляющее число электронов находится на верхних оболочках с большими квантовыми числами, то характерное время обращения электронов на орбите τ_e можно считать порядка 1.

Выбор нами модели изолированных атомов для описания молекул, состоящих из многоэлектронных

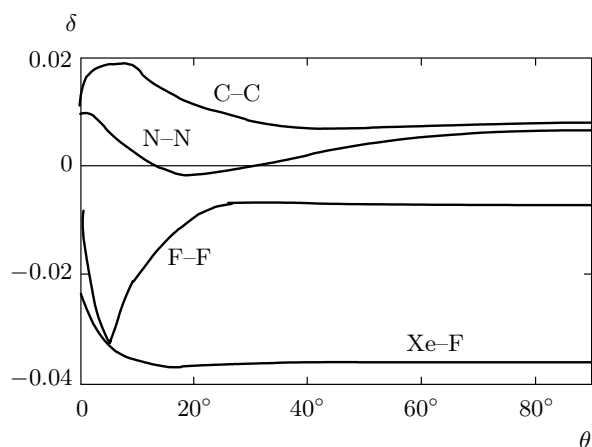


Рис. 4. Относительная разность δ (формула (32)) результатов расчетов эффективного торможения иона Fe^{10+} с энергией 1000 МэВ/нуклон для двух моделей мишени в зависимости от угла θ

атомов, позволяющий явно выделить эффект кратности столкновений, строго говоря, нуждается в дополнительных комментариях. В кратком сообщении [13] приведено сравнение результатов расчетов сечений однократной ионизации водородоподобного снаряда при столкновении с двухатомной молекулой азота, описываемой в двух моделях: в модели молекулы, формально составленной из двух изолированных атомов, и в модели Томаса–Ферми. Оказалось, что разница сечений однократной ионизации, рассчитанных в этих двух моделях, меньше или порядка одного процента. При этом в эффективное торможение входят не только сечения однократной ионизации, но и сечения всевозможных одноэлектронных и многоэлектронных возбуждений и ионизации снаряда. Поэтому мы, используя результаты работы [13], провели расчеты эффективного торможения $\kappa^{(p)}$ иона Fe^{10+} с энергией 1000 МэВ/нуклон для двух приведенных выше моделей двухатомной молекулы азота. Сравнение полученных в рамках двух моделей результатов расчетов удобно представить, введя относительную разность

$$\delta = (\kappa_{IA}^{(p)} - \kappa_{TF}^{(p)}) / \kappa_{IA}^{(p)}, \quad (32)$$

где $\kappa_{IA}^{(p)}$ — эффективное торможение $\kappa^{(p)}$, вычисленное в модели молекулы, формально составленной из двух изолированных атомов; $\kappa_{TF}^{(p)}$ — эффективное торможение $\kappa^{(p)}$, вычисленное в модели Томаса–Ферми. Как следует из работы [13], определенную по формуле (32) величину δ можно считать не зависящей от заряда иона Z_P и слабо

(логарифмически) зависящей от скорости иона v (при выполнении условий $Z_P \gg 1$ и $v \gg 1$). На рис. 4 представлена зависимость δ от угла θ ориентации оси двухатомной мишени относительно направления скорости иона. Кроме значений δ для молекулы N_2 — пары из двух атомов азота N–N на рис. 4 представлены результаты наших расчетов δ для пар атомов C–C, F–F и Xe–F, входящих в состав мишеней XeF_4 и C_{300} (см. рис. 1–3). Из рис. 4 следует, что для всех случаев значения $|\delta| < 0.04$. Таким образом, погрешность в вычислении $\kappa^{(p)}$ представляется несущественной для обсуждаемых в данной статье эффектов, приводящих к значительным изменениям эффективного торможения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-6201.2008.2) и РФФИ (гранты № 08-02-00711-а и частично № 08-02-98801-р-север-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. R. D. DuBois, A. C. F. Santos, Th. Stohlker et al., *Phys. Rev. A* **70**, 032712 (2004).
2. R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat et al., *J. Phys. B* **37**, 4539 (2004).
3. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat, and K. E. Zaharakis, *J. Phys. B* **35**, 1893 (2002).
4. D. Mueller, L. Grisham, I. Kaganovich, R. L. Watson, V. Horvat, and K. E. Zaharakis, *Phys. Plasmas* **8**, 1753 (2001).
5. S. P. Apell, S. B. Trickey, and J. R. Sabin, *Phys. Rev. A* **70**, 4616 (1998).
6. H. H. Mikkelsen, J. Oddershede, and J. R. Sabin, *Nucl. Instr. Math. B* **100**, 451 (1995).
7. J. Eichler and W. E. Meyrhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Acad. Press, New York (1995).
8. R. L. Watson, Y. Peng, V. Horvat, G. J. Kim, and R. E. Olson, *Phys. Rev. A* **67**, 022706 (2003).
9. V. P. Shevelko, M. S. Litsarev, M.-Y. Song, H. Tawara, and J.-S. Yoon, *J. Phys. B* **42**, 065202 (2009).
10. В. И. Матвеев, Д. Б. Сидоров, *ЖЭТФ* **132**, 569 (2007).
11. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, С. В. Рябченко, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 455 (2005).
12. V. I. Matveev, S. V. Ryabchenko, D. U. Matrasulov et al., *Phys. Rev. A* **79**, 042710 (2009).
13. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, С. В. Рябченко, Д. Н. Макаров, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 268 (2008).
14. F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, *Phys. Rev. A* **36**, 467 (1987).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1988).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).