

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Столкновительные процессы с участием тяжёлых многоэлектронных ионов при взаимодействии с нейтральными атомами

И.Ю. Толстихина, В.П. Шевелько

Представлен обзор экспериментальных данных и теоретических методов расчёта эффективных сечений перезарядки (захвата электронов) и обдирки (ионизации налетающего иона) с участием тяжёлых многоэлектронных ионов (типа Xe^{q+} , Pb^{q+} , W^{q+} , U^{q+}), сталкивающихся с нейтральными атомами (H, He, N, Ne, Ar, Kr, Xe) при энергиях $E \approx 10$ кэВ/н – 10 ГэВ/н, т.е. от низких до релятивистских энергий. Такие процессы с изменением зарядового состояния происходят с большой вероятностью (полные сечения достигают в максимуме величин $10^{-14} - 10^{-16}$ см²), поэтому они существенно влияют на кинетику лабораторной и астрофизической плазмы и определяют времена жизни ионных пучков в ускорительных установках. Рассмотрены также многоэлектронные процессы перезарядки и обдирки, роль которых в случае столкновений сложных атомных систем возрастает, а вклад в полное сечение достигает 50 % и более. Изучены влияние электронов внутренних оболочек сталкивающихся атомных систем и роль изотопического эффекта при перезарядке медленных ионов с энергией $E \approx 10 - 100$ эВ/н на изотопах водорода H, D и T. Дано краткое описание соответствующих компьютерных программ для расчёта сечений перезарядки и обдирки сложных атомов и ионов в широком диапазоне энергий сталкивающихся частиц.

PACS numbers: 34.10.+x, 34.50.Fa, 34.70.+e

DOI: 10.3367/UFNr.0183.201303a.0225

Содержание

1. Введение (225).
2. Процессы одноэлектронной перезарядки (226).
 - 2.1. Свойства процессов одноэлектронной перезарядки. Роль захвата электронов внутренних оболочек мишени.
 - 2.2. Методы и программы для расчёта сечений перезарядки.
3. Процессы обдирки (ионизации налетающего иона) (231).
 - 3.1. Борновское приближение.
 - 3.2. Классическое приближение.
4. Многоэлектронные процессы в ион-атомных столкновениях (237).
 - 4.1. Многоэлектронная перезарядка.
 - 4.2. Многоэлектронная обдирка.
 - 4.3. Рекомендуемые данные по сечениям перезарядки и обдирки.
5. Эффекты плотности мишени (240).
 - 5.1. Влияние эффектов плотности на сечения перезарядки.
 - 5.2. Влияние эффектов плотности на сечения обдирки.
6. Времена жизни ионных пучков в ускорителях (242).
7. Перезарядка при медленных столкновениях (244).
 - 7.1. Резонансная перезарядка протона на атоме водорода.

И.Ю. Толстихина. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский просп. 53, 119991 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 132-67-15. E-mail: inga@sci.lebedev.ru
Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер. 9, 141700 Долгопрудный, Московская обл., Российская Федерация
В.П. Шевелько. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский просп. 53, 119991 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 783-36-84. E-mail: shev@sci.lebedev.ru

Статья поступила 26 марта 2012 г.,
после доработки 19 апреля 2012 г.

7.2. Изотопические эффекты перезарядки с участием изотопов водорода.

8. Заключение (253).
- Список литературы (253).

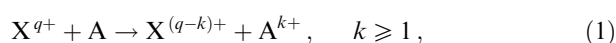
1. Введение

Радиационные и столкновительные процессы, протекающие в лабораторной и астрофизической плазме, определяются взаимодействием составляющих плазму атомных частиц (электронов, атомов, молекул и ионов) между собой и с фотонами. К таким элементарным процессам относятся процессы возбуждения, ионизации, рекомбинации, возникающие в электрон-атомных и ион-атомных столкновениях, а также фотопроцессы. Элементарные процессы представляют интерес для многих областей атомной физики и атомной спектроскопии, физики плазмы, квантовой электроники, физики ускорителей и термоядерного синтеза, а установление связей между характеристиками элементарных процессов и интенсивностью излучения позволяет развивать надёжные методы спектроскопической и корпускулярной диагностики плазмы. Свойства элементарных процессов и их роль в лабораторной и астрофизической плазме рассмотрены во многих обзорах и монографиях [1 – 24].

В последние годы существенно возрос интерес к изучению атомных процессов с участием тяжёлых многоэлектронных ионов. Это вызвано стремительным развитием ускорительной техники, а также использованием тяжёлых ионов в различных приложениях в физике УТС (управляемого термоядерного синтеза) [25, 26], в про-

цессах торможения пучков тяжёлых ионов в средах [27], в пучковой диагностике лабораторной плазмы [28], при фрагментации экзотических ядер [29], при исследовании взаимодействия лазерной плазмы с поверхностью твёрдого тела [30] и генерации экстремальных состояний вещества [31], в астрофизике [32], в пучковой терапии опухолей [33, 34], при проектировании новых типов ускорителей и накопительных колец и т.д. Исследования тяжёлых ионов, ускоренных до релятивистских энергий, находятся в сфере внимания нового международного проекта FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research), который начался в 2011 г. в Институте тяжёлых ионов в Дармштадте (GSI, Darmstadt) [35].

Среди большого числа ион-атомных процессов прежде всего следует отметить процессы с изменением зарядового состояния сталкивающихся частиц. Ион, сталкиваясь с атомом или молекулой, может уменьшить или увеличить свой заряд соответственно в результате захвата электронов мишени (процесс *перезарядки*):



или ионизации собственных электронов атомами мишени (процесс *обдирки*):



Здесь X^{q+} — налетающий ион с зарядом q , A — атом мишени. Сумма $\sum A$ означает, что атом мишени может перейти из основного состояния в возбуждённое или ионизоваться. Для тяжёлых ионов (типа Xe^{q+} , Pb^{q+} , W^{q+} , U^{q+}) возрастает роль многоэлектронных процессов ($k > 1$, $m > 1$), которые вносят существенный вклад (50 % и более) в полные, суммарные по всем k и m сечения, и поэтому должны быть учтены наряду с одноэлектронными процессами.

Процессы перезарядки и обдирки играют большую роль в элементарных процессах, протекающих во многих источниках лабораторной и астрофизической плазмы, а также в ускорительных установках. Например, процессы перезарядки в низкотемпературной плазме токамака являются практически единственным механизмом образования примесных тяжёлых ионов в возбуждённых состояниях, радиационный распад которых приводит к коротковолновому излучению, используемому для диагностики плазмы, а процессы обдирки существенно ограничивают время жизни быстрых ионных пучков в ускорительных установках.

Цель настоящего обзора — представить информацию о современном состоянии процессов с изменением зарядового состояния атомов и ионов (перезарядки и обдирки) с участием тяжёлых многоэлектронных атомных систем, включая информацию о теоретических подходах и компьютерных программах расчёта эффективных сечений, а также о законах подобия (скелирования) сечений по основным атомным параметрам: относительной скорости сталкивающихся частиц, потенциалов ионизации, зарядов иона и ядра атома и др.

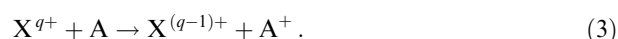
Существенная часть обзора посвящена рассмотрению процессов с участием многоэлектронных атомов и ионов, т.е. имеющих более одной электронной оболочки. Наличие большого числа электронов в сталкивающихся системах часто приводит к ситуациям, когда внутренние электроны играют существенную, а иногда и основную роль. Так, захват внутренних электронов многоэлектронного атома мишени целиком определяет величину и свойства сечений перезарядки при больших энергиях

столкновения, а ионизация (обдирка) внутренних электронов налетающего иона даёт главный вклад в сечение обдирки в области средних и больших энергий.

Используется система атомных единиц: $e = m_e = \hbar = 1$, где e и m_e — заряд и масса электрона, $\hbar$ — постоянная Планка.

2. Процессы одноэлектронной перезарядки

В этом разделе рассмотрены процессы одноэлектронной перезарядки:



Процесс (3) фактически является *реакцией*, в которой в начальном и конечном каналах присутствуют различные атомные частицы. Одноэлектронная перезарядка, как правило, является доминирующим процессом, однако в случае тяжёлых многозарядных ионов ($q \gg 1$) из-за влияния сильного кулоновского поля налетающего иона многоэлектронный захват становится существенным и вносит значительный вклад (до 50 %) в полное сечение (см. раздел 4.1).

Эффективные сечения процесса (3) могут быть довольно большими, порядка $10^{-14} - 10^{-16}$ см², и поэтому играют значительную роль при решении многих проблем атомной физики, астрофизики, физики плазмы и физики ускорителей. Так, реакция (3) является эффективным механизмом передачи возбуждения в плазме [8, 10, 12] и образования пучков быстрых нейтральных атомов, существенно влияет на распределение зарядовых состояний при прохождении ионного пучка через твёрдую или газообразную среду [36], играет важную роль при исследовании проблем удержания термоядерной плазмы в токамак-системах [17, 37], образования инверсной среды с излучением в коротковолновой области спектра [38, 39], астрофизики [32], ускорительной техники [40–42] и др.

В настоящем обзоре рассматриваются процессы *нерадиационной* перезарядки, т.е. не связанные с излучением или поглощением фотонов. Процессы *радиационной* перезарядки, обратные процессу фотоионизации, существенны для многозарядных ионов ($q \gg 1$) с несколькими электронами и играют важную роль при очень высоких энергиях, когда сечения нерадиационной перезарядки становятся пренебрежимо малыми (подробнее см. [43]).

Основным процессом, конкурирующим с перезарядкой в ион-атомных столкновениях, является обдирка — ионизация налетающего иона атомом мишени (см. раздел 3). Оба процесса имеют различные зависимости от относительной скорости столкновения v , заряда налетающего иона q и эффективного заряда Z_{eff} атома мишени, поэтому вклад каждого из процессов существенно зависит от рассматриваемой области энергий и атомной структуры сталкивающихся частиц. При больших энергиях столкновения E сечения перезарядки σ_{EC} (EC — electron capture) и обдирки σ_{EL} (EL — electron loss) имеют следующие асимптотики для оболочки мишени с фиксированным значением Z_{eff} :

$$\sigma_{\text{EC}} \sim \frac{q^5 Z_{\text{eff}}^5}{E^{5.5}}, \quad v^2 \gg I_p, \quad (4)$$

$$\sigma_{\text{EL}} \sim \frac{Z_{\text{eff}}^2}{q^2 E}, \quad v^2 \gg I_p, \quad (5)$$

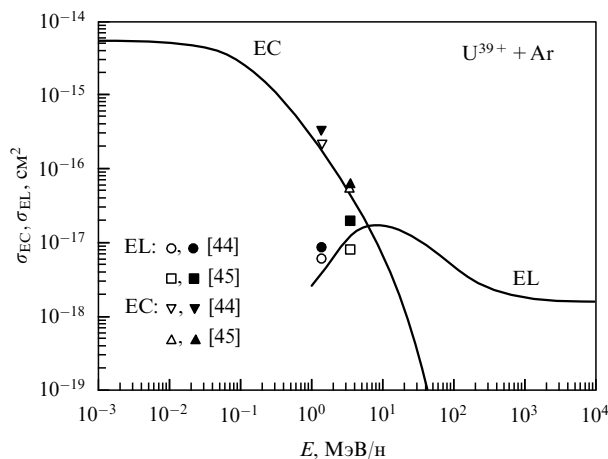


Рис. 1. Сечения перезарядки (EC) и обдирки (EL) при столкновении ионов U^{39+} с атомами аргона как функции энергии ионов. Эксперимент: светлые и чёрные символы — соответственно одноэлектронные и полные сечения из работ [44] и [45]. Теория: сплошные кривые — расчёт по программам CAPTURE, DEPOSIT и RICODE (см. текст).

где I_p — энергия связи налетающего иона. Таким образом, сечение перезарядки с увеличением энергии убывает значительно быстрее, чем сечение обдирки, но растёт быстрее с увеличением зарядов q и Z_{eff} .

Типичное соотношение между сечениями перезарядки и обдирки показано на рис. 1 на примере столкновений ионов U^{39+} (53 электрона) с атомами аргона (18 электронов). Видно, что в области $E < 1$ МэВ/н сечение изменения зарядового состояния ионов U^{39+} в основном определяется процессом перезарядки, а при $E > 30$ МэВ/н — процессом обдирки. Область энергий ($E \approx 7$ МэВ/н), в которой оба процесса вносят примерно одинаковый вклад, зависит от атомной структуры сталкивающихся частиц. В релятивистской области энергий, $E > 200$ МэВ/н, сечение обдирки нейтральным атомом стремится к постоянной величине, а не убывает по закону (5) из-за влияния релятивистского взаимодействия между частицами (см. раздел 3.1.3).

В настоящем разделе рассмотрен случай бинарных столкновений, когда плотность атомной или молекулярной мишени относительно мала. С увеличением плотности возрастает частота столкновений частиц в среде, возникающие эффекты плотности мишени существенно изменяют величины сечений перезарядки и обдирки. Обычные формулы для расчёта сечений в таком случае неприменимы (см. раздел 5).

2.1. Свойства процессов одноэлектронной перезарядки. Роль захвата электронов внутренних оболочек мишени

Процесс перезарядки (3) — сложный процесс с перераспределением частиц, в результате которого изменяется состав атомов и ионов до и после столкновения, поэтому изучение таких реакций с теоретической точки зрения является более сложной задачей, чем исследование электрон-атомных столкновений. Так, если характеристики электрон-атомных столкновений в настоящее время могут быть вычислены с точностью до 10–20 %, то в случае ион-атомных столкновений, в особенности связанных с перераспределением частиц, определение сечений с точностью до фактора 2 часто является весьма трудоёмкой задачей. Это связано с тем, что при описании

таких процессов при расчётах возникают принципиальные трудности, связанные с использованием потенциалов взаимодействия до и после столкновения (так называемое post – prior расхождение), неортогональностью волновых функций начального и конечного состояний полной системы, наличием кулоновского взаимодействия между образующимися ионами в конечном канале и отсутствием такового при столкновении ионов с нейтральными атомами в начальном канале и т.д.

В принципе, корректная формулировка теории таких процессов с перераспределением частиц могла бы быть дана на основе уравнений Фаддеева [46]. Однако даже в случае простейшей реакции перезарядки протонов на атомах водорода (один электрон в поле двух кулоновских центров) эти уравнения не позволяют решить задачу точно. Поэтому на практике при рассмотрении процессов перезарядки используют приближённые методы, зависящие от относительной скорости сталкивающихся частиц v , их атомной структуры и дефекта резонанса реакции ΔE_e — разности между энергиями связи захватываемого электрона в мишени А и образующемся ионе $X^{(q-1)+}$:

$$\Delta E_e = I_A(n_0 l_0) - I_X(n_1 l_1),$$

где $n_0 l_0$ и $n_1 l_1$ — главные и орбитальные квантовые числа атома мишени А и образующегося иона $X^{(q-1)+}$ соответственно. Заметим, что дефект резонанса ΔE_e может быть как положительной, так и отрицательной величиной.

Среди методов расчёта эффективных сечений перезарядки можно назвать ряд основных, которые дают удовлетворительное описание экспериментальных данных: метод сильной связи с молекулярным или атомным базисом [47–50]), модель "просачивания" электрона через кулоновский барьер [51], модель "поглощающей" сферы, основанная на теории Ландау–Зинера [52], модель классического надбарьерного прохождения [53], метод искажённых волн с нормировкой [54, 55], релятивистский метод, основанный на решении двухцентрового уравнения Дирака для столкновений ядро + водородоподобная мишень [56] и др. Описание большинства этих методов можно найти в работах [6, 8, 11, 13, 14, 19, 21, 24]. Некоторые методы расчёта сечений при медленных столкновениях (например, адиабатическое приближение, программа ARSENY) детально обсуждаются в разделе 7.

При разных энергиях столкновения процессы перезарядки ионов на атомах реализуются в результате разных физических процессов, поэтому обычно выделяют две области относительных скоростей столкновения: адиабатическую, $v < v_c$, и неадиабатическую, $v > v_c$, где v_c — характерная орбитальная скорость электронов мишени. В области $v < v_c$ (медленные столкновения) связанные электроны мишени адиабатически подстраиваются под изменяющееся поле налетающего иона, и поэтому, как правило, используется квазимолекулярный подход, при котором решение задачи строится на разложении волновой функции полной системы по волновым функциям квазимолекулы при фиксированном расстоянии между ядрами R . При этом переходы между различными состояниями отвечают переходам между термами квазимолекулы, соответствующими локализации оптического электрона у одного из ядер. Такой подход особенно эффективен для описания реакций резо-

нансной ($\Delta E_e = 0$) и квазирезонансной ($\Delta E_e \approx 0$) перезарядки (см., например, [2, 11, 13, 14]).

При энергиях налетающего иона $E > 25$ кэВ/н, т.е. когда относительная скорость сталкивающихся частиц больше орбитальной скорости электронов мишени, преобладают процессы нерезонансной перезарядки, и использование квазимолекулярного подхода становится невозможным. Это связано прежде всего с существенным влиянием переноса импульса, уносимого захваченным электроном (так называемый *фактор трансляции* $\exp(ivr)$), которым при малых энергиях можно пренебречь и выразить матричные элементы взаимодействия через расщепление соответствующих молекулярных термов.

При средних энергиях $E \sim 1-25$ кэВ/н захватываются главным образом электроны внешних оболочек мишени, и из-за вклада перезарядки в большое число возбужденных состояний образующегося иона $X^{(q-1)+}$ сечение перезарядки носит квазипостоянный характер, т.е. слабо зависит от энергии столкновения. Квазипостоянное поведение сечения перезарядки многозарядных ионов на атомах при малых скоростях предсказано в работе [47], а величина сечения, наиболее близкая к экспериментальным данным, оценивается в модели "просачивания" электрона через кулоновский барьер, создаваемый атомом и налетающим ионом, по формуле [51]

$$\sigma(v) \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] \approx 10^{-15} \frac{q}{(I_T/Ry)^{3/2}}, \quad q \geq 5, \quad v < \left(\frac{I_T}{Ry} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

где I_T — потенциал ионизации атома мишени в единицах Ry , $1 Ry = 13,606$ эВ. В результате перезарядки при средних энергиях преимущественно заселяются уровни иона $X^{(q-1)+}(n)$ с главными квантовыми числами n :

$$n \approx q^{3/4} \left(\frac{I_T}{Ry} \right)^{-1/2}. \quad (7)$$

В формуле (6) и в дальнейшем сечения даны в единицах $\text{см}^2/\text{атом}$, т.е. рассматриваются сечения, отнесенные к одному атому. Это связано с тем, что при расчётах сечений на молекулярных мишенях используется *правило аддитивности Брэгга* (см. [57]), согласно которому эффективное сечение взаимодействия с молекулой представляется в виде суммы сечений взаимодействия с составляющими её атомами. Например, в случае перезарядки на молекуле H_2 соответствующее сечение вычисляется как удвоенное сечение на атомах H : $\sigma(H_2) [\text{см}^2] = 2\sigma(H) [\text{см}^2/\text{атом}]$. Использование правила Брэгга связано с трудностями расчёта сечений для молекулярных мишеней, однако оно оправдано тем, что при больших энергиях основной вклад в сечения дают электроны внутренних оболочек, структура которых в атомах и молекулах примерно одинакова.

В области относительно больших энергий столкновения ($v > v_e$) для описания процессов перезарядки используется первый порядок теории возмущений по взаимодействию налетающего иона с атомом или его модификации, например, метод искажённых волн [58, 59], приближение Бринкмана–Крамерса с многоканальной нормировкой в представлении параметра удара (см. раздел 2.2). Эта область охватывает диапазон относительных энергий столкновения $E = 25$ кэВ/н–30 МэВ/н и

характеризуется тем, что в ней становится существенным наличие оболочечной структуры атома мишени, т.е. захват электронов внутренних оболочек. Заметим, что в приближении Бринкмана–Крамерса сечение перезарядки определяется произведением фурье-образов волновых функций активного электрона в начальном и конечном состояниях с весом, равным потенциалу взаимодействия электрона с налетающим ионом.

Преимущественный захват внутренних электронов атома мишени является основным свойством реакций перезарядки, отличающим её от других процессов в столкновениях *быстрых* ионов с атомами. С увеличением энергии сечение захвата электрона мишени из *одной* фиксированной оболочки быстро убывает ($\sim E^{-5,5}$), в отличие от сечений ионизации и возбуждения ($\sim E^{-1}$), и становится существенным захват электронов более глубоких (внутренних) оболочек мишени, имеющих орбитальную скорость v_e , близкую к скорости налетающего иона v , $v_e \sim v$ (так называемое условие совпадения скоростей, *velocity matching*). При этом вклад захвата электронов внешних атомных оболочек мишени становится пренебрежимо малым (в отличие от случаев низких и средних энергий). В результате суммарное по оболочкам мишени сечение перезарядки с увеличением энергии убывает значительно медленнее, чем по закону $E^{-5,5}$, который реализуется лишь в области очень высоких энергий, где основной вклад вносит захват только К-электронов мишени. По этой причине сечения перезарядки на простых атомах (H, He) убывают быстрее, чем в случае тяжёлых мишеней (Ne, Ar, Kr, Xe), имеющих несколько электронных оболочек.

2.2. Методы и программы для расчёта сечений перезарядки

В настоящее время для расчёта сечений перезарядки тяжёлых многоэлектронных ионов на атомах используются несколько методов и соответствующие компьютерные программы: метод классических траекторий Монте-Карло (CTMC — Classical Trajectory Monte Carlo) при энергиях $E > 1$ МэВ/н, метод искажённых кулоновских волн (CDW — Continuum Distorted Wave) при $E > 10$ МэВ/н, метод эйконала при $E > 1$ МэВ/н и приближение Бринкмана–Крамерса с нормировкой (программа CAPTURE) при $E > 10$ кэВ/н. Точность расчёта сечений перезарядки указанными методами составляет фактор 2.

Коротко остановимся на указанных методах. Метод CTMC [60] основан на численном решении системы классических уравнений движения Гамильтона для всех электронов налетающего иона и атома мишени с использованием большого числа прицельных параметров (~ 5000) для заданных траекторий. Система состоит из $6(N+2)$ нелинейных уравнений первого порядка в частных производных и решается численно для координат и импульсов всех N электронов и двух ядер в декартовой системе координат. Так, для одного электрона ($N = 1$) в кулоновском поле двух ядер a и b классические уравнения Гамильтона имеют вид

$$H = \frac{p_a^2}{2M_a} + \frac{p_b^2}{2M_b} + \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}} - \frac{Z_a e}{R_{ae}} - \frac{Z_b e}{R_{be}}, \quad (8)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial C_j}, \quad j = x, y, z, \quad (9)$$

где C_j и p_j — координаты и импульсы электрона и ядер; m_e, e — масса и заряд электрона; $M_{a,b}, Z_{a,b}$ — массы и заряды ядер; $R_{\alpha\beta}$ — расстояние между частицами. Из (9) следует 18 связанных уравнений первого порядка для нахождения эволюции координат и импульсов всех рассматриваемых частиц.

Использование метода СТМС довольно трудоёмко из-за необходимости учёта большого числа электронов и атомных траекторий для получения достаточной статистики при определении эффективных сечений перезарядки и обдирки (см. также раздел 3.2.1). Метод СТМС применим для средних энергий столкновения, когда молекулярными эффектами можно пренебречь. Следует отметить, что ввиду указанной сложности расчётов число опубликованных данных по сечениям перезарядки тяжёлых ионов (даже одноэлектронной), полученных методом СТМС, весьма ограничено (см., например, [61–63]).

Метод CDW [55, 58, 59] основан на использовании модификации борновского приближения (метод искажённых волн) для расчёта сечений одноэлектронной перезарядки многоэлектронных ионов на атомах при достаточно высоких энергиях $E > 10$ МэВ/н. В качестве волновых функций связанных состояний используются функции Клементи–Роеитти, а промежуточных состояний непрерывного спектра — кулоновские волновые функции. Преимуществом этого метода является возможность расчёта сечений перезарядки в квантовые состояния с определёнными квантовыми числами nl образующегося иона $X^{(q-1)+}$.

Метод эйконала (eikonal approximation) [64] предназначен для расчёта сечений одноэлектронной перезарядки и основан на использовании квазиклассического приближения и трёх основных предположениях: о прямолинейной траектории налетающих ионов, о водородоподобных волновых функциях и об искажении волновой функции системы в конечном канале с помощью эйконального фазового фактора. Однако в настоящее время метод эйконала применяется крайне редко (см., например, [61]).

Программа CAPTURE [65] предназначена для расчёта вероятностей и сечений одноэлектронной перезарядки и основана на использовании приближения Бринкмана–Крамерса (борновское приближение без учёта межъядерного взаимодействия) с нормировкой в представлении параметра удара b . В приближении Бринкмана–Крамерса, которое соответствует первому порядку временной теории возмущений, вероятность перезарядки $P(b, v)$ определяется интегралом следующего вида (см. [1]):

$$P(b, v) = |a(b, v)|^2, \quad a(b, v) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\Delta E_c t) \times \\ \times \int d\mathbf{r} \varphi_X^*(\mathbf{r}_2) V\varphi_A(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{v}\mathbf{r}) = \\ = \frac{1}{(2\pi)^2 v} \int_P d\mathbf{k} \Phi_X^*(\mathbf{k}) \Phi_A(\mathbf{a}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{b}). \quad (10)$$

Здесь $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, ΔE_c — дефект резонанса реакции, V — потенциал взаимодействия активного электрона с ионом X^{q+} ; индексы "A" и "X" относятся к волновым функциям атома A и иона $X^{(q-1)+}$ соответственно; интегрирование в (10) проводится по плоскости P ,

описываемой уравнением

$$\mathbf{k}\mathbf{v} - \Delta E_c - \frac{v^2}{2} = 0.$$

Функции Φ являются фурье-компонентами волновой функции φ_X и произведения $V\varphi_A$:

$$\Phi_X^*(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} \varphi_X^*(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}),$$

$$\Phi_A(\mathbf{a}) = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \varphi_A(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{a}\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{a} = \mathbf{v}, \quad k^2 - a^2 = 2\Delta E_c.$$

Интеграл от произведения фурье-образов (10) представляет собой квантово-механическую амплитуду перезарядки в приближении Бринкмана–Крамерса для прямолинейной траектории.

В программе CAPTURE вычисляются нормированные вероятности перезарядки $P^{(\text{norm})}(b, v)$ как функции параметра удара b и скорости v , сечения перезарядки в определённые квантовые состояния n образующегося иона $X^{(q-1)+}(n)$ и суммарные по n сечения $\sigma_{\text{tot}}(v)$:

$$\sigma_{\text{tot}}(v) = \sum_{n=n_0}^{n=n_{\text{cut}}} \sigma_n(v), \quad \sigma_n(v) \equiv \sum_s \sigma_{sn}(v), \\ \sigma_{sn}(v) = 2\pi \int_0^{\infty} P_{sn}^{(\text{norm})}(b, v) b db, \quad (11) \\ P_{sn}^{(\text{norm})}(b, v) = \frac{P_{sn}(b, v)}{1 + \sum_{n'=n_0}^{n_{\text{max}}} P_{sn'}(b, v)}.$$

Здесь $P_{sn}(b, v)$ — вероятность захвата электрона из оболочки s атома мишени в состояние n в приближении Бринкмана–Крамерса (без учёта нормировки), n_{max} — максимальное главное квантовое число, учитываемое в программе. Параметр n_{cut} зависит от плотности мишени: в случае низкой плотности (разреженный газ) он велик, а в случае плотной мишени (фольга) он резко уменьшается из-за влияния эффектов плотности мишени (см. раздел 5).

Для активного электрона, т.е. для электрона, который совершает переход, в начальном (атом мишени) и конечном (ион $X^{(q-1)+}$) состояниях используются водородоподобные волновые функции с эффективным зарядом, учитывающим эффекты экранировки. Преимуществом программы CAPTURE является использование нормированных вероятностей перезарядки $P_{sn}^{(\text{norm})}(b, v) < 1$, что позволяет выполнять расчёты сечений в широкой области энергий — от нескольких десятков кэВ/н до нескольких десятков МэВ/н.

Нижняя по энергии граница применимости нормированного приближения Бринкмана–Крамерса зависит от атомной структуры сталкивающихся частиц. Заметим также, что программа CAPTURE допускает возможность учёта конечных состояний с большими квантовыми числами n (до $n_{\text{max}} \approx 500$), что необходимо для расчётов нормированных сечений перезарядки многозарядных ионов $q \gg 1$ на атомах.

Для оценки сечений одноэлектронной перезарядки часто используется полуэмпирическая формула, полученная в работе [66] на основе экспериментальных

данных:

$$\sigma_{\text{Sch}} \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] = \frac{1,1 \times 10^{-8}}{\tilde{E}^{4,8}} \frac{q^{0,5}}{Z_T^{1,8}} (1 - \exp(-0,037 \tilde{E}^{2,2})) \times (1 - \exp(-2,44 \times 10^{-5} \tilde{E}^{2,6})), \quad (12)$$

$$\tilde{E} = \frac{E}{Z_T^{1,25} q^{0,7}}, \quad q \geq 3, \quad \tilde{E} \geq 10, \quad (13)$$

где Z_T — заряд ядра атома мишени, E [кэВ/н] — энергия налетающего иона. Формулы (12), (13) отражают закон подобия (скейлирования) сечений перезарядки по энергии, заряду иона и заряду ядра атома мишени и широко используются для оценки сечений с точностью до фактора 2.

В пределе низких и высоких энергий полуэмпирическое сечение (12) имеет следующие асимптотики:

$$\sigma_{\text{Sch}}(E \rightarrow 0) \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] \approx 10^{-14} \frac{q^{0,5}}{Z_T^{1,8}}, \quad (14)$$

$$\sigma_{\text{Sch}}(E \rightarrow \infty) \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] \approx 1,1 \times 10^{-8} \frac{q^{3,86} Z_T^{4,2}}{E^{4,8}}. \quad (15)$$

Заметим, что формула (6) более точно по сравнению с (14) отражает зависимость сечений от атомных параметров, поэтому оценку (14) следует применять с осторожностью, так как она может завышать или занижать значения сечений перезарядки при малых энергиях.

Характерные примеры сечений перезарядки тяжёлых ионов на атомах и молекулах представлены на рис. 2, 3. На рисунке 2 приведены сечения перезарядки ионов Ge^{31+} и Xe^{18+} на атомах Ne и молекулах N_2 . Экспериментальные данные сравниваются с результатами расчётов методом СТМС, в приближении эйконала, по программам CDW и CAPTURE, а также по полуэмпирической формуле (12). В случае столкновения Н-подобных ионов Ge^{31+} с атомами Ne теоретические расчёты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными, однако для столкновений ионов

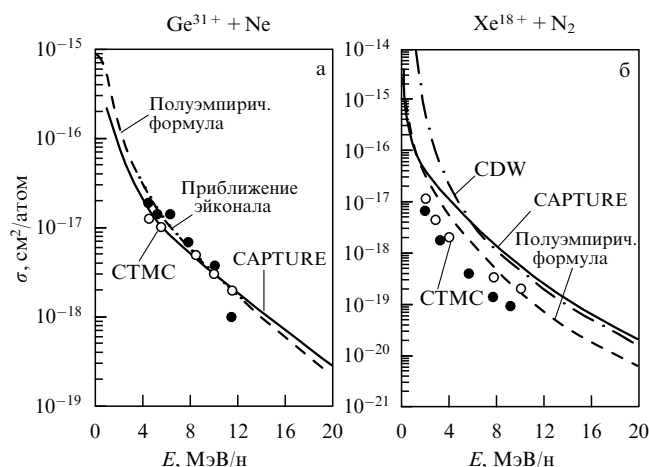


Рис. 2. Зависимость одноэлектронных сечений перезарядки Н-подобных ионов Ge^{31+} на атомах неона (а) и ионов Xe^{18+} на молекулах азота (б) от энергии иона. Эксперимент: чёрные кружки [61] (а), [68] (б); штриховые кривые — полуэмпирическая формула (12). Теория: светлые кружки — расчёт методом СТМС [61] (а), [68] (б); пунктирная кривая (а) — приближение эйконала [61]; штрихпунктирная кривая (б) — приближение CDW [67]; сплошные кривые — программа CAPTURE [67].

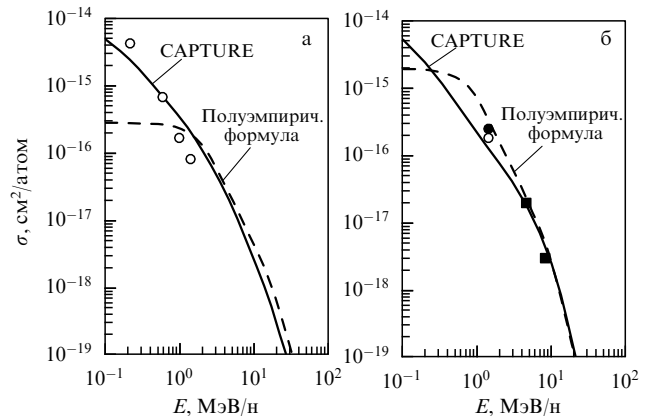


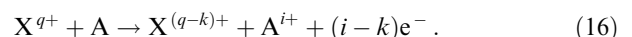
Рис. 3. Зависимость сечений перезарядки ионов Rb^{25+} на атомах аргона (а) и ионов Rb^{39+} на молекулах азота (б) от энергии иона. Эксперимент: (а) светлые кружки — [44], (б) светлый и чёрный кружки — одноэлектронное и полное сечения [44], чёрные квадраты — [69]; штриховые кривые — полуэмпирическая формула (12). Теория: сплошные кривые — программа CAPTURE [67].

Xe^{18+} с N_2 наблюдается сильное расхождение: результаты расчётов по программам CDW и CAPTURE больше экспериментальных данных в 5–6 раз, а результаты расчётов методом СТМС, хотя и показывают лучшее согласие, но при возрастании энергии также больше экспериментальных данных примерно в 3 раза.

На рисунке 3 приведены сечения перезарядки ионов свинца на мишенях Ag и N_2 как функции энергии иона. Результаты, полученные с помощью полуэмпирической формулы (12) и по программе CAPTURE для сечений одноэлектронной перезарядки, хорошо согласуются друг с другом при энергиях $E > 3$ МэВ/н. При более низких энергиях формула (12) неприменима из-за ограничения по энергии (13).

Анализ экспериментальных данных по сечениям перезарядки тяжёлых многоэлектронных ионов на атомах и молекулах позволяет сделать следующие выводы.

1. Существующие компьютерные программы описывают экспериментальные данные с точностью до фактора 2 в широкой области энергий — от десятков кэВ/н до десятков МэВ/н. Тем не менее в ряде случаев теоретические и экспериментальные результаты могут различаться в 10 и более раз (например, для перезарядки ионов U^{28+} на Ag и N_2). Причины такого расхождения, по крайней мере для атомных мишеней, пока не ясны. Однако следует отметить, что реакции (1) и (3) представляют собой частный случай более общего процесса с изменением зарядового состояния, называемого *передачей заряда с ионизацией* (transfer ionization), в котором перезарядка происходит одновременно с ионизацией атома мишени:



Таким образом, реакции перезарядки (1) и (3) являются частным случаем реакции (16) при $i = k$. В большинстве случаев при определении сечений перезарядки измеряется только число ионов $\text{X}^{(q-k)+}$ в конечном канале, хотя корректные экспериментальные данные могут быть получены при одновременном измерении обоих зарядов — рассеянных ионов и ионов мишени — с использованием *метода совпадений*. Однако количество данных, полученных методом совпадений, весьма ограничено,

поэтому, строго говоря, сравнение вычисленных сечений перезарядки с экспериментальными данными должно выполняться с учётом возможного влияния реакции (16) на измеренные сечения (см. [70]).

2. В случае молекулярных мишеней расхождение между теоретическими и экспериментальными результатами может быть связано с неправомерностью использования аддитивного правила Брэгга (см. раздел 2.1) — взаимодействие налетающего иона с молекулярной мишенью неравносильно взаимодействию иона с атомами, составляющими молекулу. На это обстоятельство указывалось в работе [71], где было установлено, что отношение сечений перезарядки многозарядных ионов на молекулах и атомах водорода не равно 2, $\sigma(\text{H}_2)/\sigma(\text{H}) \neq 2$, а растёт немонотонно от 0,8 до 4,0 с увеличением энергии. Таким образом, вопрос о применимости правила Брэгга для молекулярных мишеней требует дополнительного рассмотрения.

3. Что касается процессов многоэлектронного захвата тяжёлыми многозарядными ионами (см. раздел 4.1), то экспериментально известно, что с возрастанием заряда налетающего иона сечения многоэлектронного захвата увеличиваются, однако их зависимости от энергии и атомной структуры сталкивающихся частиц исследованы пока недостаточно полно (см., например, [44, 45]).

3. Процессы обдирки (ионизации налетающего иона)

Процессы обдирки (2) являются конкурирующими по отношению к процессам перезарядки, рассмотренным в разделе 2, и поэтому также играют важную роль в атомных процессах, протекающих в лабораторной и астрофизической плазме, а также в ускорительных установках.

Экспериментально и теоретически процессы обдирки тяжёлых ионов нейтральными атомами изучены более детально, чем процессы перезарядки, включая процессы многоэлектронной обдирки ($m > 1$). Эффективные сечения обдирки в области низких и средних энергий довольно велики даже для ионизации многозарядных ионов, особенно в случае многоэлектронных атомных мишеней (см. раздел 4.2).

3.1. Борновское приближение

Для расчёта сечений одноэлектронной обдирки быстрых ионов нейтральными атомами используются: борновское приближение [72], метод внезапных возмущений [73], метод классических траекторий Монте-Карло [60] и классический подход в представлении переданной энергии [74].

В первом порядке временной теории возмущений вероятность обдирки определяется выражением вида (см. [72])

$$P(b, v) = |a(b, v)|^2, \\ a(b, v) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\Delta E_c t) \times \\ \times \langle \varphi_T^{(i)}(\mathbf{r}_j) \varphi_{X^+}(\mathbf{r}_1) | V | \varphi_T^{(i)}(\mathbf{r}_j) \varphi_X(\mathbf{r}) \rangle, \\ V = \frac{Z_T}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} - \sum_{j=1}^{N_T} \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}, \\ \Delta E_c = I_p + \varepsilon + \Delta E_{if},$$

где $\varphi_T^{(i,f)}$ — волновые функции атома мишени до и после столкновения, φ_{X,X^+} — волновые функции налетающего иона до и после столкновения, V — потенциал кулоновского взаимодействия активного электрона с электронами и ядром атома мишени, I_p — энергия связи налетающего иона, R — расстояние между ядрами, ε — кинетическая энергия выбитого электрона, ΔE_{if} — энергия возбуждения атома мишени, Z_T и N_T — заряд ядра и полное число электронов атома мишени.

После ряда преобразований сечение обдирки иона структурной частицей представляется в виде интеграла от произведения формфакторов сталкивающихся частиц по переданному импульсу K (см. [75]):

$$\sigma_{EL}(v) = \\ = \frac{8\pi}{v^2} \sum_{nl} N_{nl} \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} d\varepsilon \int_{K_0}^{\infty} \frac{dK}{K^3} F_T^2(Z_T, N_T, K) F_{nl}^2(\varepsilon, \lambda, K), \quad (17)$$

$$K_0 = \frac{I_{nl} + \varepsilon}{v}, \quad F_{nl} = \langle \varepsilon \lambda | \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) | nl \rangle, \quad (18)$$

где v — скорость иона, I_{nl} — энергия связи электрона в оболочке nl иона, $|nl\rangle$ и $|\varepsilon\lambda\rangle$ — волновые функции связанного состояния и непрерывного спектра, λ — орбитальное квантовое число выбитого электрона, F_{nl} — формфактор налетающего иона. Сумма по nl в (17) означает суммирование по всем электронным оболочкам налетающего иона, n и l — главное и орбитальное квантовые числа электронной оболочки с числом эквивалентных электронов N_{nl} .

В выражении (17) сделано дополнительное предположение: $\Delta E_{if} \ll I_p + \varepsilon$, это так называемое замкнутое приближение (closure approximation), которое устраняет зависимость нижнего предела интегрирования K_0 от энергии возбуждения ΔE_{if} и существенно упрощает численные расчёты. Учёт энергии возбуждения ΔE_{if} в нижнем пределе интегрирования по K важен только для случая лёгких мишеней H и He и приводит к увеличению сечения обдирки на таких мишенях примерно в два раза (см., например, [21]).

Эффективный заряд мишени F_T зависит от переданного импульса K , заряда ядра и количества электронов мишени и имеет вид

$$|F_T(K)|^2 = \left[Z_T - \sum_{j=1}^{N_T} \langle j | \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) | j \rangle \right]^2 + \\ + \left[N_T - \sum_{j=1}^{N_T} |\langle j | \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) | j \rangle|^2 \right],$$

где $|j\rangle$ — радиальные волновые функции электронов мишени. Заметим, что выражение для эффективного заряда $F_T(K)$ получено с учётом свойства полноты волновых функций мишени и содержит только диагональные матричные элементы. Формулы для сечения ионизации атомов и ионов голыми ядрами с зарядом Z_T имеют вид, аналогичный (17), (18); при этом $F_T(K) \equiv Z_T$.

Как видно, расчёт сечений обдирки даже в упрощённом борновском приближении представляет собой довольно трудоёмкую задачу из-за необходимости расчёта волновых функций для большого числа связанных состояний (оболочки) и непрерывного спектра (λ), а также

интегрирования по всем энергиям выбитого электрона (ε).

Заряд мишени F_T имеет следующие асимптотики по переданному импульсу K :

$$F_T^2(K) \rightarrow (Z_T - N_T)^2, \quad K \rightarrow 0, \quad (19)$$

$$F_T^2(K) \rightarrow Z_T^2 + N_T, \quad K \rightarrow \infty. \quad (20)$$

Формулы (19) и (20) отражают влияние экранирования и "антиэкранирования" электронов мишени на сечения при малых и больших скоростях соответственно (screening и anti-screening effects). Асимптотика (20) достигается в пределе очень больших скоростей, когда электроны и ядро мишени можно считать неподвижными в системе координат, связанной с налетающим ионом. Тогда сечение можно приближённо описать формулой Бора через сечения ионизации иона электронным σ_e и протонным σ_p ударами:

$$\sigma_{EL} \approx Z_T^2 \sigma_p(v) + N_T \sigma_e(v), \quad v \gg I_p^{1/2}, \quad (21)$$

где I_p — потенциал ионизации налетающего иона. Из (21) следует, что сечение обдирки на нейтральных атомах при больших энергиях пропорционально фактору масштабирования $Z_T^2 + Z_T$, т.е. чем тяжелее атом мишени, тем легче ионизируется налетающий ион. Численные расчёты показывают, что сечения обдирки тяжёлых ионов зависят от атомного номера мишени слабее, чем сечения в (21), примерно как $\sigma_{EL} \sim Z_T^{1.8}$, что связано с эффектами экранирования электронов мишени (см. раздел 3.1.3 и [76]).

В случае *многоэлектронных* тяжёлых ионов при расчёте сечений обдирки (17) необходимо учитывать вклад ионизации электронов большого количества (5–10) оболочек иона независимо от того, с какой частицей происходит столкновение: с электроном, протоном или сложным атомом. Так, для обдирки ионов U^{28+} (64 электрона) необходимо учитывать ионизацию примерно девяти электронных оболочек иона U^{28+} — от внутренней оболочки $3s^2$ до внешней $5p^2$. Величины потенциалов ионизации и энергий связи тяжёлых атомов и ионов, необходимые для численных расчётов, содержатся в работах [77–80].

При больших скоростях сечения обдирки в нерелятивистском борновском приближении убывают по закону:

$$E \rightarrow \infty, \quad v \rightarrow \infty, \quad \sigma_{EL} \rightarrow \frac{\ln v}{v^2}. \quad (22)$$

3.1.1. Программы LOSS и LOSS-R. Расчёт по формулам (17), (18) одноэлектронных сечений обдирки в нерелятивистском борновском приближении реализован в программе LOSS, описанной в работе [75]. В программе радиальные волновые функции связанных состояний $|n\rangle$ и непрерывного спектра $|\varepsilon\rangle$ активного электрона вычисляются путём численного решения уравнения Шрёдингера с эффективным потенциалом атомного остатка, а в качестве волновых функций мишени используются аналитические безузловые функции Слэтера. Точность расчёта сечений по программе LOSS в области энергий за максимумом сечения составляет около 30 %.

Примеры зависимости сечений обдирки тяжёлых ионов на атомах и молекулах от энергии налетающего иона приведены на рис. 4, где экспериментальные данные

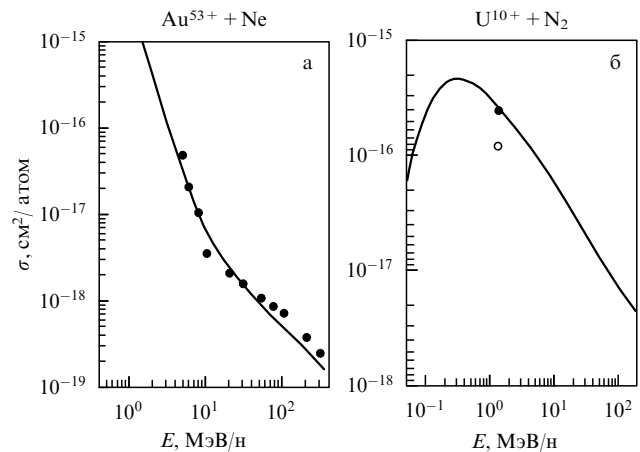


Рис. 4. Сечения одноэлектронной обдирки ионов Au^{53+} (26 электронов) и U^{10+} (82 электрона) атомами Ne и молекулами N_2 соответственно как функции энергии ионов. Эксперимент: чёрные кружки — [81] (а), [82] (б), светлый кружок — [83] (б). Сплошные кривые — результаты расчёта по программе LOSS.

сравниваются с результатами расчётов по программе LOSS. В случае молекулярных мишеней при расчётах сечений обдирки используется правило аддитивности Брэгга, аналогично сечениям перезарядки.

В последние годы значительно возрос интерес к поведению сечений обдирки тяжёлых многоэлектронных ионов нейтральными атомами при релятивистских энергиях, т.е. при $E > 200$ МэВ/н. Это связано как с чисто теоретическими расчётами, так и с экспериментальными исследованиями, начавшимися в 2011 г. в рамках Международного проекта FAIR [35], в которых предполагается ускорение и исследование тяжёлых ионов (U^{28+}) до энергий порядка 10 ГэВ/н. В релятивистской области энергий экспериментальные данные и теоретические расчёты по сечениям обдирки тяжёлых многоэлектронных ионов в настоящее время практически отсутствуют (см. [76, 84, 85]).

Свойства релятивистских сечений обдирки наиболее детально исследованы для H- и He-подобных ионов, т.е. для систем с одним и двумя электронами (см. [86–90]). Основная трудность, возникающая при релятивистских расчётах сечений обдирки тяжёлых ионов, состоит в нахождении матричных элементов ионизации в релятивистском приближении Борна [86]:

$$M_{EL} = \langle f | (1 - \beta \alpha_z) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) | i \rangle, \quad (23)$$

где $\beta = v/c$ — релятивистский фактор, v — скорость иона, c — скорость света, α_z — z -компонента матрицы Дирака $\boldsymbol{\alpha}$, $|i\rangle$ и $|f\rangle$ — волновые функции системы до и после столкновения.

Первое слагаемое в (23) описывает вклад в матричный элемент взаимодействия иона со скалярным потенциалом, создаваемым полем нейтрального атома, и соответствует "обычному" нерелятивистскому борновскому приближению (17), (18). Второе слагаемое, часто называемое *магнитным взаимодействием*, описывает вклад векторного потенциала атома мишени. Расчёт второго слагаемого представляет собой достаточно трудоёмкую задачу и выполнен для случая ионизации H- и He-подобных ионов из состояний с главными квантовыми числами $n = 1-6$ [89, 90].

Вклад второго (релятивистского) члена в матричный элемент (23) можно оценить следующим образом:

$$\beta\alpha_z \sim \frac{v}{c} \frac{\langle p_e \rangle}{m_e c} \sim \frac{v}{c} \frac{v_e}{c}, \quad (24)$$

где m_e , v_e и $\langle p_e \rangle$ — масса покоя, орбитальная скорость и матричный элемент импульса электрона налетающего иона. Из (24) видно, что влияние магнитного взаимодействия максимально ($\beta\alpha_z \sim 1$), когда скорость иона v и скорость электрона на орбите v_e близки к скорости света. Существуют и другие ситуации, когда вклад магнитного слагаемого велик: например, когда скорость иона мала ($v \ll c$), но ионизация происходит с малым переданным импульсом K [88].

Для исследования свойств и расчёта сечений релятивистской обдирки тяжёлых ионов в Физическом институте РАН был создан пакет программ: LOSS-R (Relativistic LOSS) [91], HERION (High Energy Relativistic IONization) [92] и RICODE (Relativistic Ionization CODE) [76]. Программа RICODE является наиболее точной в серии программ по расчёту сечений одноэлектронной обдирки в широкой области энергии, включающей релятивистские энергии.

Программа LOSS-R использует те же уравнения (17), (18), что и программа LOSS, но с двумя отличиями в скорости и минимальном переданном импульсе K_0 :

$$v \rightarrow \beta c, \quad K_0 \rightarrow \frac{I_{nl} + \varepsilon}{\gamma v}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (25)$$

т.е. минимальный переданный импульс K_0 в γ раз меньше, чем в нерелятивистском приближении (18); γ — релятивистский фактор. При релятивистских энергиях программа LOSS-R обеспечивает правильное поведение сечений обдирки (ср. с (22)):

$$E \rightarrow \infty, \quad v \rightarrow c, \quad \sigma \rightarrow \ln \gamma \quad \text{для ионных мишеней,} \\ \sigma \rightarrow \text{const} \quad \text{для атомных мишеней,} \quad (26)$$

а при нерелятивистских скоростях результаты, полученные по программам LOSS и LOSS-R, совпадают.

Приближение для K_0 в (25) довольно грубое, сделанное на основе работы Бете [93] для оценки энергии, переданной атому ионом в результате столкновения. Тем не менее результаты расчётов по программе LOSS-R при использовании этих простых предположений находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными и результатами более точных, но трудоёмких расчётов (см. раздел 3.1.3).

На рисунке 5 представлены сечения ионизации протонами К-оболочек тяжёлых нейтральных атомов Zr ($Z = 40$), Tb ($Z = 65$) и U ($Z = 92$) как функции энергии ионов от нескольких МэВ/н до 10 ГэВ/н. Видно, что нерелятивистские сечения (программа LOSS) убывают с увеличением энергии по борновскому закону, а релятивистские сечения, вычисленные по программе LOSS-R, слегка возрастают при $E > 400$ МэВ/н. При $E = 10$ ГэВ/н различие между результатами, полученными с помощью программ LOSS и LOSS-R, достигает порядка величины. Различия между экспериментальными данными [94], результатами релятивистских расчётов [95] и расчётов по программе LOSS-R находятся в пределах 30 %.

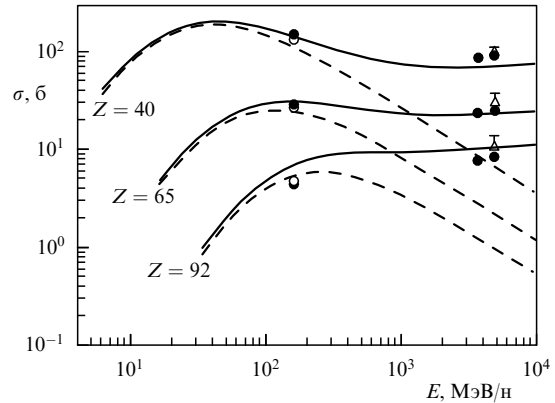


Рис. 5. Сечения ионизации протонами электронов К-оболочки нейтральных атомов Zr, Tb и U как функции энергии протона. Треугольники — эксперимент при энергии 4,8 ГэВ [94]. Светлые и чёрные кружки — соответственно нерелятивистский и релятивистский расчёты [95] при энергиях протона 0,16, 3,672 и 4,88 ГэВ. Сплошные и штриховые кривые — релятивистский и нерелятивистский расчёты по программам LOSS-R и LOSS соответственно (см. [91]).

3.1.2. Программа HERION. Задачу о нахождении сечения релятивистской обдирки можно сформулировать в представлении параметра удара (прицельного параметра), когда сечение может быть записано в виде суммы дипольной (dip) и недипольной (nondip) частей:

$$\sigma(v) = \sigma_{\text{dip}}(v) + \sigma_{\text{nondip}}(v). \quad (27)$$

Дипольное сечение соответствует вкладу взаимодействий при больших прицельных параметрах, когда дипольное взаимодействие между сталкивающимися частицами играет основную роль, а взаимодействие между электроном налетающего иона и мишенью мало, при этом переход происходит с малой передачей импульса, так что может быть использована теория возмущений. При малых прицельных параметрах область взаимодействия мала, а передача энергии велика, и для расчёта сечения обдирки используется импульсное приближение.

В дипольном приближении сечение $\sigma_{\text{dip}}(v)$ выражается через сечение фотоионизации налетающего иона $\sigma_{\text{ph}}(nl, \omega)$ и так называемое число эквивалентных фотонов $n(\omega)$ (см. [96, 97]):

$$\sigma_{\text{dip}}(nl, v) = \int_{\omega_{\min}}^{\infty} n(\omega) \sigma_{\text{ph}}(nl, \omega) \frac{d\omega}{\omega}, \quad (28)$$

$$n(\omega) = \frac{2Z_{\text{eff}}^2}{\pi(\beta c)^2} \left[x K_0(x) K_1(x) - \frac{1}{2} (\beta x)^2 (K_1^2(x) - K_0^2(x)) \right], \quad (29)$$

$$x = \frac{\omega b_{\min}}{\gamma \beta c}, \quad b_{\min} = \frac{n}{(2I_{nl})^{1/2}}, \quad (30)$$

где I_{nl} — энергия связи электрона в оболочке nl налетающего иона, Z_{eff} — эффективный заряд мишени, $K_m(x)$ — функция Макдональда.

Для недипольной части сечения использование импульсного приближения приводит к выражению [92]

$$\sigma_{\text{nondip}}(nl, v) = \frac{2\pi N_{nl}}{I_{nl}} \left(\frac{Z_{\text{eff}} \alpha}{\beta} \right)^2, \quad (31)$$

где N_{nl} — число эквивалентных электронов в оболочке nl .

Уравнения (28)–(31) реализованы в программе HERION, в которой для расчёта сечений фотоионизации тяжёлых ионов используются релятивистские функции Дирака–Фока (см. [92]). Программа предназначена для расчёта сечений обдирки при энергиях $E > 100$ МэВ/н. Она не учитывает магнитное взаимодействие между сталкивающимися частицами, а также зависимость эффективного заряда мишени от прицельного параметра b .

Сечения обдирки, вычисленные по программам HERION и LOSS-R, могут отличаться фактором 2, что связано главным образом с использованием различных радиальных волновых функций: нерелятивистских в LOSS-R и релятивистских в HERION. В программе HERION дипольная часть сечений составляет примерно 60–70 % полного сечения и воспроизводит форму полного сечения. Результаты расчётов по программе HERION оказались весьма полезными для понимания поведения сечений обдирки при релятивистских энергиях.

3.1.3. Программа RICODE — релятивистское борновское приближение. Общие формулы для сечений обдирки ионов на атомах при больших энергиях (включая релятивистскую область) получены в работе [98] в релятивистском приближении Борна с учётом магнитных взаимодействий для отрыва электрона с произвольными квантовыми числами nl . На основе этих формул создана программа RICODE, описанная в статьях [76, 99], которая является наиболее точной по сравнению с предыдущими программами (LOSS, LOSS-R и HERION) по расчёту одноэлектронных сечений обдирки тяжёлых ионов атомами и ионами.

Формулы, используемые в RICODE, отличаются от формул (17), (18) для программы LOSS-R наличием дополнительного слагаемого, описывающего релятивистские (магнитные) взаимодействия между сталкивающимися частицами, и имеют вид

$$\sigma_{EL}(v) = \frac{8\pi}{(\beta c)^2} \sum_{nl} N_{nl} \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} d\varepsilon \times \\ \times \int_{K_0}^{\infty} \frac{dK}{K^3} \left(F_T^2(Z_T, N_T, K) F_{nl}^2(\varepsilon, \lambda, K) + \right. \\ \left. + F_T^2(Z_T, N_T, K') \frac{\beta^2(1 - K_0^2/K^2)}{(1 - \beta^2 K_0^2/K^2)^2} G_{nl}^2(\varepsilon, \lambda, K) \right), \quad (32)$$

$$K_0 = \frac{I_{nl} + \varepsilon}{\beta c}, \quad K' = \sqrt{K^2 - \beta^2 K_0^2}. \quad (33)$$

Здесь G_{nl} — интеграл, зависящий от волновых функций начального и конечного состояний, а также от производной волновой функции связанного состояния $|nl\rangle$ (подробнее см. [98]), F_T — эффективный заряд мишени, определённый в разделе 3.1.

Формулы (32), (33) получены в борновском релятивистском приближении на основе кулоновского представления для матричного элемента (23), при этом первое слагаемое соответствует нерелятивистскому приближению, а второе — релятивистскому взаимодействию. Релятивистские эффекты для атома мишени учтены в эффективном заряде F_T^2 через импульс K' .

В программе RICODE, так же как и в LOSS и LOSS-R, используются нерелятивистские радиальные волновые

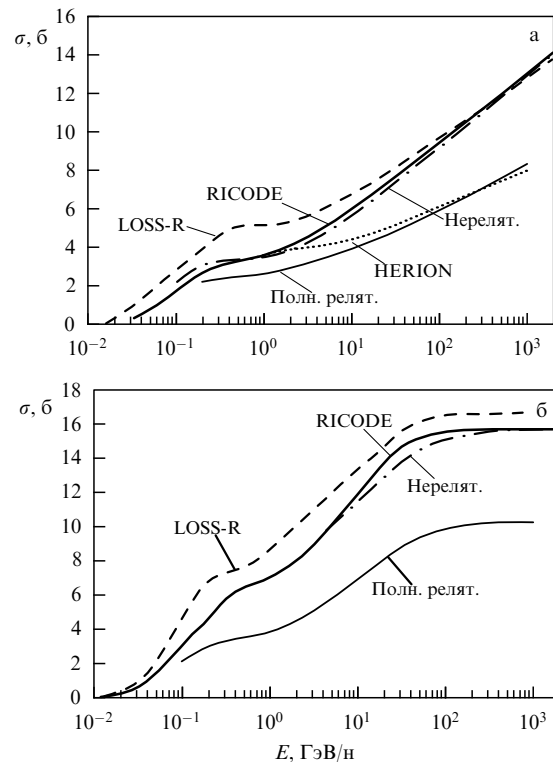


Рис. 6. Борновские сечения релятивистской ионизации ионов $U^{91+}(1s)$ протонным ударом (а) и атомами $H(1s)$ (б) как функции энергии. Кривые LOSS-R, RICODE и HERION — расчёт по соответствующим компьютерным кодам, штрихпунктирные кривые — расчёт с релятивистским взаимодействием и нерелятивистскими волновыми функциями, тонкие сплошные кривые — полный релятивистский расчёт [89, 90].

функции для связанных состояний и непрерывного спектра. Для случая многоэлектронных тяжёлых ионов это оправдано тем, что основной вклад в полное сечение вносит ионизация электронов оболочек, для которых релятивистские эффекты малы. В случае же тяжёлых ионов, имеющих несколько электронов, влияние релятивистских эффектов на волновые функции велико и приводит к уменьшению сечений обдирки в несколько раз. Это иллюстрируется на рис. 6, где приведены рассчитанные сечения ионизации H-подобных ионов $U^{91+}(1s)$ протонным ударом и атомами $H(1s)$ в сравнении с результатами релятивистских расчётов (см. [99]).

Из рисунка 6 видно, что сечения обдирки многозарядных ионов с несколькими электронами, рассчитанные в полном релятивистском приближении, т.е. с релятивистским взаимодействием и релятивистскими волновыми функциями, примерно в два раза меньше сечений, полученных с помощью программы RICODE. Из рисунка также видно, что результаты расчётов по программам LOSS-R и RICODE близки друг к другу, а результаты расчётов по программе HERION — к результатам релятивистских расчётов [89, 90], так как в HERION используются релятивистские волновые функции.

Заметим также, что все вычисленные сечения для столкновений с протонами возрастают с увеличением энергии, что характерно для столкновений с заряженными частицами. При столкновении с нейтральными атомами сечения обдирки в пределе больших скоростей не возрастают логарифмически, а стремятся к постоян-

ной величине (см. рис. 6). Дело в том, что при столкновении с заряженными частицами (протоны, ионы) отрыв электрона налетающего иона происходит из-за дальнегодействующего кулоновского взаимодействия, и сечение растёт с увеличением энергии примерно как $\sigma \sim \ln \gamma$ (см. формулу (26)). В случае столкновения с нейтральным атомом активный электрон взаимодействует с экранированным полем нейтральной частицы, которое является кулоновским только при малых расстояниях и экспоненциально малым при больших (подробнее см. [87]).

Другой характерной особенностью борновского приближения для сечений обдирки тяжёлых ионов (программы LOSS, LOSS-R, RICODE) является возможность масштабирования (скалирования) сечений по заряду ядра атома мишени Z_T , т.е. для иона с фиксированным зарядом q сечение $\sigma_{EL} \sim Z_T^{d(q)}$ во всей области энергии с точностью $\sim 20\%$. Величина показателя $d(q)$ зависит от структуры налетающего иона и его заряда, а с возрастанием заряда q величина d увеличивается от $\sim 1,2$ до максимального значения $\sim 1,8$. Такая зависимость связана с эффектами экранирования в атомах мишени: в ионах с малым зарядом ($q \sim 1$) ионизация происходит при больших прицельных параметрах, когда заряд ядра мишени сильно экранирован её электронами, а в случае многозарядных ионов ($q \gg 1$) отрыв электронов налетающего иона происходит на малых расстояниях, где эффекты экранирования ядра мишени невелики (подробнее см. [76]). Свойство масштабирования борновских сечений обдирки тяжёлых ионов атомами может быть полезно для оценки сечений для произвольной атомной мишени, если данные для атома с определённым значением Z_T известны из эксперимента или из аккуратных численных расчётов.

3.1.4. Полуэмпирическая формула для сечений одноэлектронной обдирки ионов. С использованием свойств сечений обдирки в первом борновском приближении и результатов соответствующих численных расчётов по программе RICODE в работе [76] получена полуэмпирическая формула для сечений одноэлектронной обдирки тяжёлых ионов на нейтральных атомах, включая область релятивистских энергий:

$$\sigma \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] = 0,88 \times 10^{-16} (Z_T + 1)^2 \frac{u}{u^2 + 3,5} \times \left(\frac{Ry}{I_1} \right)^{1+0,01q} \left(4 + \frac{1,31}{n_0} \ln(4u + 1) \right), \quad (34)$$

$$u = \frac{v^2}{I_1/Ry} = \frac{(\beta c)^2}{I_1/Ry}, \quad (35)$$

где v и q — скорость и заряд налетающего иона, $c = 137$ — скорость света, u — приведённая энергия налетающего иона, I_1 — первый потенциал ионизации иона в Ry, n_0 — главное квантовое число внешней оболочки налетающего иона. Множитель $(Z_T + 1)^2$ в (34) введён вместо обычного множителя Z_T^2 с целью достижения лучшего согласия с расчётами RICODE для лёгких атомных мишеней, таких как H, He, Li, Be и В.

Сечение обдирки (34) достигает максимального значения при $u \approx 2$:

$$\sigma_{\max} \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] \approx 10^{-16} (Z_T + 1)^2 \left(\frac{Ry}{I_1} \right)^{1+0,01q}, \quad u_{\max} \approx 2. \quad (36)$$

При $v \rightarrow c$ сечение (34) стремится к постоянной величине, которая равна

$$\sigma \left[\frac{\text{см}^2}{\text{атом}} \right] \approx 3 \times 10^{-20} (Z_T + 1)^2 \left(\frac{Ry}{I_1} \right)^{0,01q}, \quad u \approx c^2 \frac{Ry}{I_1}. \quad (37)$$

Формула (34) совместно с полуэмпирической формулой (12) для сечения перезарядки может быть использована для оценки времён жизни ионных пучков в ускорителях и средних зарядов ионов, проходящих через газообразные среды (см. раздел 6).

3.2. Классическое приближение

3.2.1. Метод классических траекторий Монте-Карло.

Большой объём физических результатов и численных расчётов по сечениям обдирки тяжёлых ионов атомами и молекулами получен в классическом приближении — методом классических траекторий Монте-Карло (СТМС [68, 100]) и методом переданной энергии [74]. Метод СТМС кратко описан в разделе 2.2. К основным достижениям, полученным методом СТМС при рассмотрении обдирки многоэлектронных ионов атомами, можно отнести следующие результаты: большой вклад многоэлектронной обдирки в полное сечение при низких и средних энергиях, медленное (по сравнению с борновским) убывание сечений с возрастанием скорости, $\sigma_{EL} \sim v^{-1}$, и уменьшение вклада многоэлектронной обдирки при больших энергиях, когда столкновения приводят к ионизации главным образом одного электрона налетающего иона.

3.2.2. Метод переданной энергии. Программа DEPOSIT.

Модель переданной энергии (energy-deposition model) предложена Н. Бором [101] и состоит в том, что при столкновении атома или иона с другой атомной частицей может произойти ионизация атома (иона), если в результате столкновения переданная электронам атома кинетическая энергия $T(b)$ превосходит его первый потенциал ионизации I_1 , т.е. если $T(b) \geq I_1$, где b — прицельный параметр (параметр удара).

Метод переданной энергии использован в работе [102] для объяснения экспериментальных данных по сечениям многократной ионизации атомов при столкновении с ионами. Классический метод переданной энергии был развит для ионизации ионов при столкновении с атомами [74], т.е. для сечений обдирки. Следует отметить, что задача несимметрична: ионизация атома ионом происходит при взаимодействии активного электрона с дальнедействующим кулоновским полем, а ионизация иона атомом — при взаимодействии активного электрона с полем нейтрального атома, которое близко к кулоновскому только при малых расстояниях и экспоненциально мало при больших расстояниях.

На основе метода переданной энергии создана программа DEPOSIT [103], которая эффективно используется для расчёта сечений одно- и многократной обдирки ионов нейтральными атомами при низких и средних энергиях столкновения. В программе кинетическая энергия $T(b)$, переданная электронам иона атомом мишени, вычисляется по классической формуле Бора:

$$T(b) = \sum_s \int \rho_s(r) \Delta E_{se}(p) d^3r, \quad (38)$$

где $\rho_s(r)$ — электронная плотность оболочки s налетающего иона на расстоянии r от его ядра, ΔE_{se} — приращение кинетической энергии одного электрона при взаимодействии с атомом мишени, b — прицельный параметр ядра иона относительно ядра атома, p — прицельный параметр электрона иона относительно ядра атома, сумма по s обозначает суммирование по всем электронам иона. Векторы $\mathbf{r}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{p}$ связаны простым геометрическим соотношением. Полная плотность $\rho(r)$ нормирована на полное число электронов N налетающего иона:

$$\int_0^\infty \sum_s \rho_s(r) dr = \int_0^\infty \rho(r) dr = \sum_s N_s = N. \quad (39)$$

В программе DEPOSIT электронная плотность $\rho_s(r)$ оболочки s вычисляется с помощью безузловых функций Слетера, а величины ΔE_{se} — через производную $\partial U(R)/\partial R$ от поля нейтрального атома $U(R)$, создаваемого атомом мишени на расстоянии R от его ядра. В качестве $U(R)$ в программе используется аналитическое выражение, полученное в работе [104] с помощью расчётов методом Дирака–Хартри–Фока–Слетера для атомов от H до U в виде суммы потенциалов Юкавы с пятью аппроксимационными параметрами:

$$U(R) = -\frac{Z_T}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i R), \quad \sum_{i=1}^3 A_i = 1, \quad (40)$$

где A_i и α_i — параметры аппроксимации.

В модели передачи энергии ионизация происходит при условии

$$T(b) \geq I_1, \quad (41)$$

где I_1 — первый потенциал ионизации налетающего иона. Тогда полное сечение обдирки, т.е. сумма одно- и многоэлектронных сечений, имеет вид

$$\sigma_{\text{tot}}(b) \equiv \sum_{m=1}^N \sigma_m = \pi b_{\text{max}}^2. \quad (42)$$

Здесь σ_m — сечение обдирки (ионизации) m электронов иона (раздел 4.2), а величина b_{max} находится из уравнения

$$T(b_{\text{max}}) = I_1. \quad (43)$$

Таким образом, в модели переданной энергии задача вычисления полных сечений обдирки в классическом приближении сводится к расчёту трёхмерного интеграла (38) (ср. метод СТМС). Точность расчёта сечений обдирки методом переданной энергии — фактор 2, т.е. примерно такая же, как и методом СТМС. Следует отметить, что в методе переданной энергии нет ограничения на число электронов налетающего иона, как в методе СТМС. Более того, результаты, полученные методом переданной энергии, тем точнее, чем тяжелее налетающий ион и атом мишени.

Сечения обдирки тяжёлых ионов нейтральными атомами приведены на рис. 7 для столкновений ионов U^{28+} с мишенями H_2 , N_2 , Ar , Kr и Xe . На рисунке экспериментальные данные сравниваются с результатами расчётов методом СТМС и в модели переданной энергии (см. [105]). Как видно из рис. 7, все экспериментальные дан-

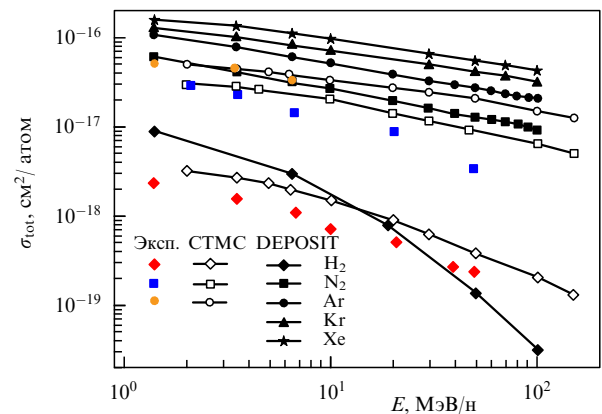


Рис. 7. (См. в цвете онлайн.) Полные сечения обдирки ионов U^{28+} при столкновении с мишенями H_2 , N_2 , Ar , Kr и Xe как функции энергии иона. Эксперимент: мишени H_2 (красные символы), N_2 (синие символы), Ar (оранжевые символы), данные из работ [44, 68, 100, 106]. Теория: кривые со светлыми символами — метод СТМС, кривые с чёрными символами — метод переданной энергии (DEPOSIT) (см. [105]).

ные и результаты классических расчётов согласуются друг с другом в пределах фактора 2 за исключением случая мишени H_2 , так как применение классической модели для лёгких атомов и низких энергий довольно ограничено (см. [103]).

Из расчётов по программе DEPOSIT следует поведение сечений обдирки при больших энергиях вида

$$\sigma_{\text{EL}} \sim E^{-a(Z_T)}, \quad a(Z_T) \approx \frac{0,8}{Z_T^{0,3}}, \quad v^2 \gg I_1, \quad (44)$$

где $a(H) = 0,80$, $a(Ne) = 0,40$, $a(Ar) = 0,34$, $a(Xe) = 0,24$, $a(U) = 0,21$. Таким образом, чем тяжелее атом мишени, тем медленнее убывает сечение обдирки, что связано с различными вкладами сечений многоэлектронной обдирки в полное сечение (см. раздел 4.2). Из формулы (44) видно, что классическое сечение обдирки σ_{cl} убывает значительно медленнее, чем борновское сечение σ_B :

$$\sigma_{\text{cl}} \sim E^{-a}, \quad a < 1, \quad \sigma_B \sim \frac{\ln E}{E}, \quad v^2 \gg I_1. \quad (45)$$

В работе [103] сформулированы условия применимости классической модели переданной энергии для случая обдирки иона атомом с потенциалом (40) в виде

$$R_A \left(\sum_s N_s r_s^2 \right)^{-1/2} \left(\frac{2I_1}{Z_T} \right)^{1/2} < v < \frac{2R_A}{R_{\text{ion}}} \left(\frac{2I_1}{Z_T} \right)^{1/2}, \quad (46)$$

где R_A и R_{ion} — размеры атома мишени и налетающего иона, r_s — размер оболочки s налетающего иона. Нижний предел по скорости в (46) следует из условия (41), т.е. из условия передачи электронам иона минимальной кинетической энергии, превосходящей первый ионизационный потенциал иона. Верхняя граница применимости метода в (46) определяется тем, что время взаимодействия мало, и приращение орбитальной скорости электрона Δu_s в результате столкновения должно быть меньше её абсолютной величины u_s , т.е. $\Delta u_s \ll u_s$.

Из анализа численных расчётов полных сечений обдирки следует, что классический подход в представлении переданной энергии даёт удовлетворительные ре-

зультаты в области скоростей ионов, примерно равной (в атомных единицах скорости, $1 \text{ а.е.} \approx 2,2 \times 10^8 \text{ см с}^{-1}$): $0,1 < v < 10$.

4. Многоэлектронные процессы в ион-атомных столкновениях

Процессы перезарядки и ионизации с участием тяжёлых ионов характеризуются большой вероятностью многоэлектронного захвата и ионизации, приводящей к значительному вкладу многоэлектронных процессов в полные сечения. Величина вклада зависит от энергии столкновения и атомной структуры сталкивающихся атомных частиц. В таблице 1 приведены полученные экспериментально сечения одноэлектронных процессов и полные сечения обдирки и перезарядки при столкновении ионов урана с аргоном при энергии 3,5 МэВ/н [45]. Видно, что с увеличением заряда иона вклад многоэлектронной ионизации (обдирки) убывает с 70 % до 50 %, а вклад многоэлектронной перезарядки, напротив, возрастает до 40 %.

Таблица 1. Экспериментально полученные сечения обдирки и перезарядки (в ед. 10^{-18} см^2) для столкновений ионов U^{q+} , $q = 28-51$, с атомами Ar при энергии 3,5 МэВ/н [45]

Заряд иона q	$\sigma_{\text{EL}}^{(1)}$	$\sigma_{\text{EL}}^{(\text{tot})}$	$\sigma_{\text{EC}}^{(1)}$	$\sigma_{\text{EC}}^{(\text{tot})}$
28	13,4	40,6	12,6	12,6
31	12,5	34,7	19,7	20,8
33	8,7	26,3	25,0	27,0
39	8,0	19,7	52,3	60,7
42	6,7	13,8	61,6	79,7
51	—	—	82,5	130

$\sigma_{\text{EL}}^{(1)}, \sigma_{\text{EL}}^{(\text{tot})}$ — одноэлектронные и полные сечения обдирки,
 $\sigma_{\text{EC}}^{(1)}, \sigma_{\text{EC}}^{(\text{tot})}$ — одноэлектронные и полные сечения перезарядки.

4.1. Многоэлектронная перезарядка

При энергиях $E = 0,01 \text{ эВ/н} - 10 \text{ кэВ/н}$, соответствующих медленным столкновениям, экспериментальные данные по многоэлектронной перезарядке ионов на атомах

$$\text{X}^{q+} + \text{A} \rightarrow \text{X}^{(q-k)+} + \text{A}^{k+}, \quad k \geq 1,$$

можно найти в работах [107–115].

Сечения многоэлектронного захвата тяжёлых мало-зарядных ионов на атомах инертных газов и молекулах даны в работах [108, 109] для следующих процессов:

$$\begin{aligned} \text{X}^{q+} + \text{A} &\rightarrow \text{X}^{(q-k)+} + \text{A}^{k+}, \quad k \geq 1, \quad 2 \leq q \leq 8, \\ \text{X} &= \text{Ne, Ar, Kr, Xe}, \\ \text{A} &= \text{He, Ne, Ar, Kr, Xe, H}_2, \text{N}_2, \text{O}_2, \text{CH}_4, \text{CO}_2. \end{aligned} \quad (47)$$

Эти данные показывают квазипостоянное поведение сечений при низких энергиях, а для захвата $k \leq 4$ электронов полученные экспериментально сечения аппроксимировались формулой [109]

$$\sigma_{q,q-k} [\text{см}^2] = 10^{-12} C(k) q^{A(k)} \left(\frac{I_T}{\text{эВ}} \right)^{-B(k)}, \quad q \leq 8, \quad v \ll 1 \text{ а.е.} \quad (48)$$

где I_T — ионизационный потенциал атома мишени, C , A и B — параметры аппроксимации, приведённые в табл. 2.

В работе [113] представлены экспериментальные данные по многоэлектронной перезарядке ионов Xe^{q+} , $15 \leq q \leq 43$, при столкновении с He, Ar и Xe при скорос-

Таблица 2. Параметры аппроксимации сечений k -электронного захвата (48) при скоростях $v \ll 1 \text{ а.е.} \approx 2,2 \times 10^8 \text{ см с}^{-1}$. Данные из работы [109]

k	$C(k)$	$A(k)$	$B(k)$
1	$1,43 \pm 0,76$	$1,17 \pm 0,09$	$2,76 \pm 0,19$
2	$1,08 \pm 0,95$	$0,71 \pm 0,14$	$2,80 \pm 0,32$
3	$(5,50 \pm 5,8) \times 10^{-2}$	$2,10 \pm 0,24$	$2,89 \pm 0,39$
4	$(3,57 \pm 8,9) \times 10^{-4}$	$4,20 \pm 0,79$	$3,03 \pm 0,86$

тях $v = 0,1-0,2 \text{ а.е.}$, а в работе [114] эти данные аппроксимируются полуэмпирической формулой. Экспериментальные сечения многоэлектронного захвата медленными ионами при столкновении с атомами и молекулами можно найти в работах [116–118]. Следует отметить также экспериментальные [119–121] и теоретические [119, 122] работы по одно- и многоэлектронной перезарядке с участием фуллеренов (молекулярных соединений углерода), которые представляют определённый интерес для исследования процессов перезарядки на сложных мишенях.

Экспериментальные сечения по трёхэлектронной перезарядке многозарядных ионов (от Ne^{6+} до U^{48+}) на Ar при энергии 1,4 МэВ/н, полученные методом совпадений, даны в работе [117]; полученные данные удовлетворительно описываются расчётами с помощью метода СТМС. При более высоких энергиях, $E = 1-10 \text{ МэВ/н}$, сечения измерены в основном для тяжёлых ионов Xe, Pb и U, сталкивающихся с газовыми мишенями (см. [44, 45, 82, 100]).

Теоретические работы по многоэлектронной перезарядке весьма ограничены и относятся к области низких и средних энергий. Прежде всего следует отметить классическую модель Бора–Линхарда [123], развитую позже в работах [124, 125]. Модель Бора–Линдхарна используется главным образом для налетающих ионов с несколькими электронами. Численные расчёты сечений многоэлектронной перезарядки выполнены в основном для двухэлектронного захвата с использованием метода сильной связи [126–128], квазимолекулярной модели [129] и приближения независимых частиц [130]. Теоретические методы многоэлектронной перезарядки ($k > 2$) тяжёлых ионов на атомах в настоящее время развиты недостаточно полно (см. [122, 125, 131]).

4.2. Многоэлектронная обдирка

В случае тяжёлых ионов вероятность многоэлектронной обдирки

$$\text{X}^{q+} + \text{A} \rightarrow \text{X}^{(q+m)+} + \sum \text{A} + m e^-, \quad m \geq 1,$$

может быть велика, а вклад многоэлектронных сечений в полное сечение может достигать 50 % и более. Это свойство демонстрируется в табл. 3, где представлены экспериментальные данные одноэлектронных и полных сечений обдирки. Видно, что вклад многоэлектронных процессов растёт с увеличением атомного номера мишени и убывает с увеличением заряда иона q .

Согласно теории многоэлектронной ионизации, сечение m -электронной обдирки в представлении параметра удара можно представить в виде

$$\sigma_m(b) = 2\pi \int_0^\infty P_m(b) b db, \quad (49)$$

Таблица 3. Полученные экспериментально сечения m -электронной обдирки σ_m ($m = 1, 2, 3$) и полные сечения σ_{tot} (в ед. 10^{-18} см²) при столкновении ионов Xe^{18+} (потенциал ионизации $I_1 = 573$ эВ) и Ar^{8+} ($I_1 = 420$ эВ) с атомами инертных газов

Процесс	Энергия, МэВ/н	σ_1	σ_2	σ_3	σ_{tot}	Литература
$\text{Xe}^{18+} + \text{He}$	6	3,0	1,7	0,2	4,9	[132]
$\text{Xe}^{18+} + \text{Ne}$	6	16	7,8	3,8	36	[132]
$\text{Xe}^{18+} + \text{Ar}$	6	24	11	5,6	56	[132]
$\text{Xe}^{18+} + \text{Kr}$	6	27	13	7,2	75	[132]
$\text{Xe}^{18+} + \text{Xe}$	6	34	16	9,0	95	[132]
$\text{Ar}^{8+} + \text{Xe}$	19	23	10	5,5	44	[133]

где $P_m(b)$ — вероятность ионизации m электронов из налетающего иона как функция прицельного параметра b . Полное (суммарное по всем m) сечение обдирки определяется по формуле

$$\sigma_{\text{tot}}(v) = \sum_{m=1}^N \sigma_m(v), \quad (50)$$

где N — полное число электронов в ионе. При расчётах обычно ограничиваются значением $N = 18$, при котором сумма по m в (50) достаточно быстро сходится.

В рамках метода СТМС вероятности $P_m(b)$ находятся численно путём решения большого числа дифференциальных уравнений (см. раздел 2.2), а в программе DEPOSIT (раздел 3.2.2) используются аналитические выражения для $P_m(b)$ в статистической модели Рассека – Мели [134]:

$$P_m(b) = \binom{N}{m} S_m \left(\frac{E_K}{I_1} \right) \left[\sum_{i=1}^N \binom{N}{i} S_i \left(\frac{E_K}{I_1} \right) \right]^{-1}, \quad (51)$$

$$\sum_{m=1}^N P_m(b) = 1,$$

$$E_K = T(b) - \sum_{i=1}^m I_i, \quad S(x) = \frac{2^{[(m-1)/2]} \pi^{[m/2]} x^{(3m-2)/2}}{(3m-2)!!}, \quad (52)$$

где $\binom{N}{m}$ — биномиальный коэффициент, $T(b)$ — энергия, переданная иону атомом, как функция прицельного параметра b , I_i — i -й потенциал ионизации иона, E_K — кинетическая энергия выбитых электронов при m -электронной ионизации, $[a]$ обозначает целую часть числа a . Энергии связи тяжёлых ионов содержатся в работах [77–80]. Как видно из (51), вероятность $P_m(b)$ в модели Рассека – Мели сильно зависит от переданной энергии $T(b)$.

На рисунке 8 приведены зависимости $T(b)$ и $P_m(b)$ для случая обдирки ионов Xe^{18+} атомами Xe при энергии 6 МэВ/н ($v = 15,5$ а.е.), вычисленные по программе DEPOSIT [103]. В случае функции $T(b)$ (рис. 8а) указан вклад оболочек Xe^{18+} в полную передачу энергии, а на рис. 8б приведены вероятности $P_m(b)$ как функции прицельного параметра. При каждом значении прицельного параметра b сумма по m всех вероятностей $P_m(b)$ равна единице, согласно (51). На рисунке 9 приведены сечения m -электронной обдирки для случая столкновений ионов Xe^{18+} с атомами He, Ne, Ar, Xe, вычисленные по программе DEPOSIT [105] при энергии 6 МэВ/н, в сравнении с экспериментальными данными [132].

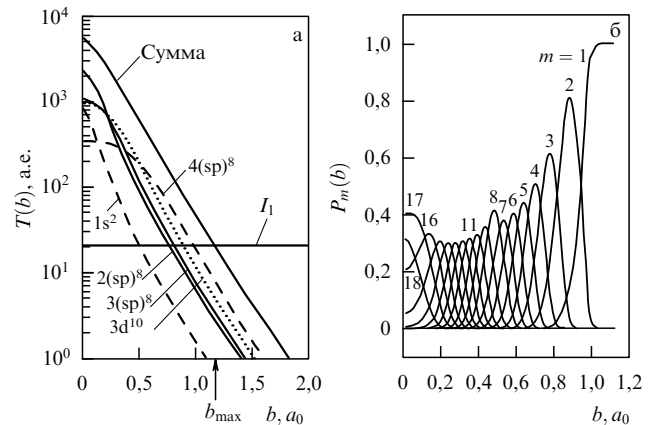


Рис. 8. (а) Зависимость передачи энергии $T(b)$ иону Xe^{18+} при столкновении с атомами Xe как функции прицельного параметра b при энергии $E = 6$ МэВ/н ($v = 15,5$ а.е.) — расчёт по программе DEPOSIT [103]. Указан вклад различных оболочек Xe^{18+} и полная переданная иону энергия (сумма). Горизонтальная прямая $I_1 = 21$ а.е. (572,5 эВ) соответствует первому ионизационному потенциалу иона Xe^{18+} и показывает минимальное значение переданной энергии, необходимой для ионизации, а точка b_{max} соответствует значению для определения полного сечения обдирки. Обозначения оболочек: например, $2(\text{sp})^8$ означает конфигурацию $2s^2 2p^6$. (б) Вычисленные по программе DEPOSIT вероятности многоэлектронной ионизации $P_m(b)$ по формуле (51) с энергией $T(b)$, показанной на рис. а [103]. a_0 — боровский радиус.

Экспериментальные исследования сечений многоэлектронной обдирки тяжёлых ионов и теоретические расчёты методом СТМС показали [68, 100], что с увеличением энергии столкновения вклад процессов многоэлектронной обдирки убывает и основной вклад в полное сечение вносит одноэлектронная обдирка. Этот фундаментальный результат иллюстрируется на рис. 10, где приведена зависимость среднего числа выбитых электронов $\langle m \rangle$,

$$\langle m \rangle = \frac{\sum_m m \sigma_m}{\sum_m \sigma_m}, \quad (53)$$

от энергии, т.е. число выбитых электронов при одном столкновении иона U^{28+} с атомами H, N и Ag и энергиях от 1 до 100 МэВ/н. Из рисунка видно, что при одном столкновении с атомами Ag при низких энергиях из иона U^{28+} в среднем выбивается четыре электрона (!), а при высоких — только один электрон.

Исследования законов масштабирования (масштабирования) одно- и многоэлектронных сечений обдирки ионов атомами в широкой области энергий выполнены в работах [135, 136], в которых авторы систематизировали свойства экспериментальных сечений обдирки в зависимости от энергии и атомных параметров, таких как заряд иона и заряд ядра мишени, квантовые числа активных электронов и т.д. Полученные законы масштабирования описывают экспериментальные данные в пределах фактора 2.

Следует отметить, что в настоящее время не существует единого теоретического подхода для описания сечений обдирки в широком диапазоне энергий, поэтому для приложений используются полуэмпирические методы получения так называемых рекомендуемых данных по сечениям. Они основаны на использовании раз-

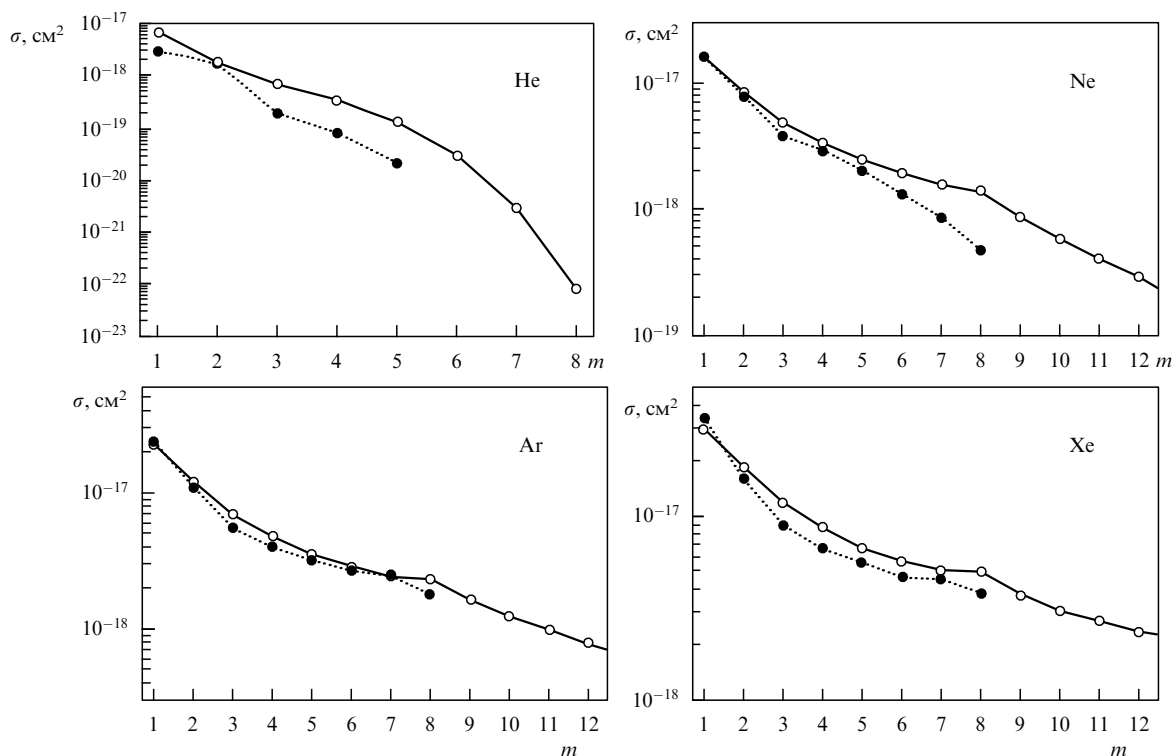


Рис. 9. Сечения m -электронной обдирки для столкновений ионов Xe^{18+} с атомами He, Ne, Ar, Xe, вычисленные по программе DEPOSIT (светлые точки) [105] при энергии 6 МэВ/н, в сравнении с экспериментальными данными (чёрные точки) [132].

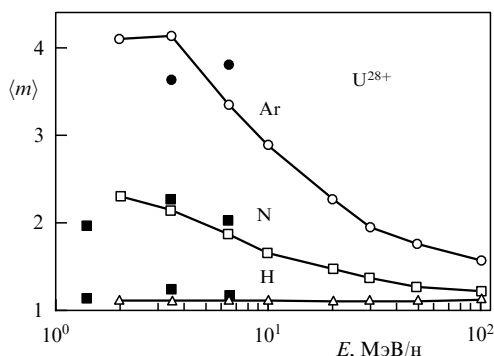


Рис. 10. Среднее число $\langle m \rangle$ (53) выбитых из ионов U^{28+} электронов при столкновении с атомами H, N и Ar как функция энергии ионов. Эксперимент: чёрные символы — при энергии 1,4 МэВ/н [44], 3,5 и 6,5 МэВ/н [45, 68]. Теория: кривые со светлыми символами, расчёты методом СТМС [100].

личных методов расчёта при низких и высоких энергиях и последующей их "сшивки" (см. раздел 4.3).

4.3. Рекомендуемые данные по сечениям перезарядки и обдирки

В разделе 2 рассмотрены процессы перезарядки и методы расчёта сечений таких процессов в широкой области энергий. Показано, что в настоящее время удовлетворительные результаты при расчёте сечений одноэлектронной перезарядки в области энергий $E > 10$ кэВ/н с участием тяжёлых ионов даёт приближение Бринкмана–Крамерса с нормировкой, которое реализовано в программе CAPTURE. При медленных столкновениях, $E < 10$ кэВ/н, наилучшие результаты даёт метод сильной связи и адиабатическая теория переходов (см. раздел 7).

В случае обдирки ситуация с расчётами сечений также не укладывается в рамки одного приближения: при низких и средних энергиях используется классическое приближение, которое описывает многоэлектронную обдирку и полные сечения, а при больших и релятивистских энергиях используется борновское приближение для случая одноэлектронной ионизации.

Следует отметить, что в настоящее время не существует единой теории, описывающей поведение сечений обдирки во всём рассматриваемом диапазоне энергий $E = 1$ кэВ/н–10 ГэВ/н, поэтому часто приходится проводить "сшивку" классических и квантово-механических результатов для получения так называемых рекомендуемых данных. В работах [76, 85] для этой цели использовалась простая формула, аналогичная формуле для нахождения приведённой массы двух частиц:

$$\frac{1}{\sigma_{\text{rec}}} = \frac{1}{\sigma_{\text{DEPOSIT}}} + \frac{1}{\sigma_{\text{RICODE}}}, \quad (54)$$

где σ_{rec} — рекомендуемые сечения, σ_{DEPOSIT} и σ_{RICODE} — сечения, вычисленные по программам DEPOSIT и RICODE в классическом и квантово-механическом приближениях соответственно. Такой метод позволяет эффективно описать сечения в широком диапазоне энергий, включая средние энергии, где расчёт сечений весьма затруднителен. Формула, аналогичная (54), использовалась в работе [137] для "сшивки" сечений ионизации ионов электронами при низких и высоких энергиях столкновения.

Рекомендуемые данные (результаты комбинированных расчётов по программам RICODE и DEPOSIT, а также по формуле (54)) по сечениям обдирки ионов U^{28+} атомами H, N и Ar в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 11 при энергиях ионов

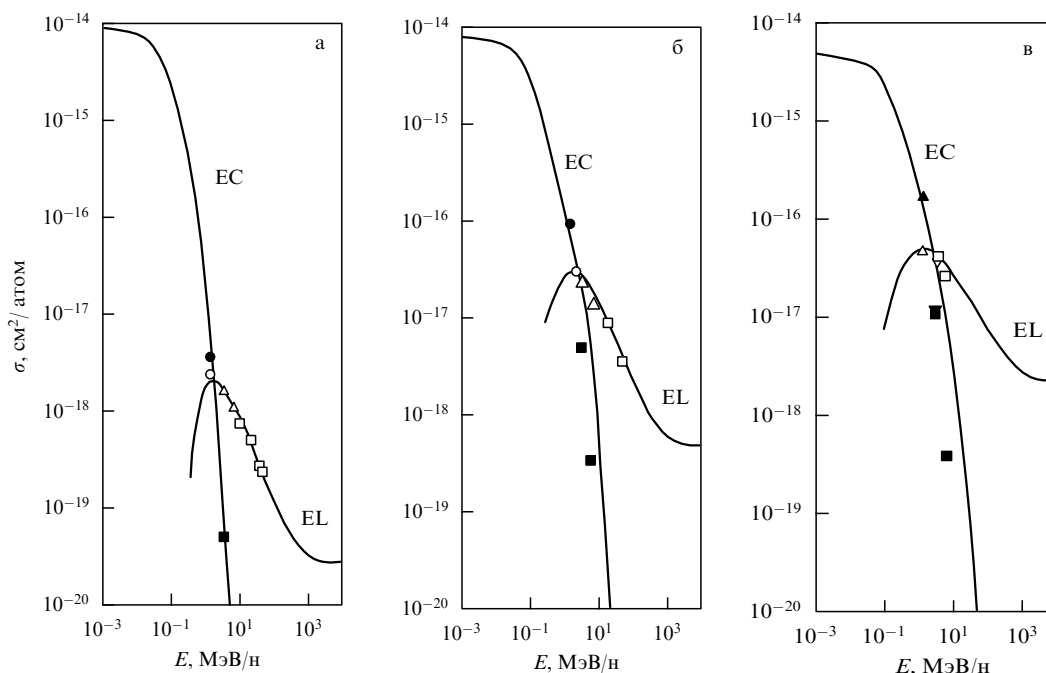


Рис. 11. Рекомендуемые сечения перезарядки (ЕС) и обдирки (ЕЛ) (сплошные кривые) в сравнении с экспериментальными данными при столкновении ионов U^{28+} с H_2 (а), N_2 (б) и Ag (в) как функции энергии ионов [76]. Эксперимент: (а, б) сечения перезарядки — чёрные кружки [82], чёрные квадраты [100]; сечения обдирки — светлые кружки [82], треугольники [100], светлые квадраты [138]; (в) сечения перезарядки — чёрный треугольник вверх [44], чёрный квадрат [100], чёрный треугольник вниз [45], сечения обдирки — светлый треугольник вверх [44], светлый квадрат [68], светлый треугольник вниз [45].

урана $E = 1$ кэВ/н–10 ГэВ/н [76]. Аналогичные данные для других ионов урана получены в работе [85], где сечения обдирки аппроксимировались полиномами седьмого порядка. Такие данные в аналитическом виде необходимы для приложений, особенно в физике ускорителей, например, для определения времён жизни ионного пучка в ускорителе, нахождения среднего (равновесного) заряда ионов при прохождении через газовые мишени и т.д. (см. также раздел 6).

5. Эффекты плотности мишени

Эффект плотности (target-density или gas-solid effect) был обнаружен экспериментально и описан в работе [139, 140] при исследовании зарядовых фракций пучков ионов урана, проходящих через графитовую фольгу и газовую мишень, и позже — при измерении потерь энергии (stopping power) ионов в газовых и твёрдых средах [141]. Эффектом плотности называли увеличение среднего (равновесного) заряда ионов при прохождении ионного пучка через твёрдое тело по сравнению со средним зарядом при прохождении через газовую мишень. Первые теоретические модели влияния эффекта на фракции ионов и энергетические потери представлены в работах [123, 142]. Позднее, с развитием ускорительной техники тяжёлых ионов экспериментальные и теоретические исследования эффектов плотности были продолжены в работах [27, 143–146]. В настоящее время термин эффекты плотности понимается в более широком смысле: их влияние на сечения процессов, торможение ионов в плотной среде, равновесные заряды ионных пучков при прохождении через плазму и фольги и т.д.

В предыдущих разделах этого обзора рассмотрены процессы с изменением зарядового состояния (пере-

зарядка, обдирка), происходящие в бинарных столкновениях, т.е. при низких плотностях мишени. Однако с ростом плотности среды частота столкновений ионов с атомами мишени возрастает, время между соседними столкновениями становится короче времени жизни возбуждённых состояний в среде, так что часть ионов испытывает дальнейшие столкновения, находясь уже в возбуждённых состояниях. Возбуждённые ионы не успевают перейти в нижние квантовые состояния радиационным или иным путём, что приводит к их эффективной ионизации при последующих столкновениях с частицами среды.

В результате влияния эффектов плотности, с ростом плотности среды сечения перезарядки уменьшаются, а сечения обдирки увеличиваются. Прямое экспериментальное доказательство этому утверждению получено в работах [145, 147, 148]. Совокупное влияние обоих эффектов, как будет видно из дальнейшего, и приводит к увеличению среднего заряда ионов в более плотной среде.

5.1. Влияние эффектов плотности на сечения перезарядки

Для простоты рассмотрим влияние эффектов плотности мишени на примере процесса перезарядки с образованием иона в состоянии с определённым главным квантовым числом n :



где $*$ обозначает возбуждённое состояние.

В разреженной среде (газ с низкой плотностью) ионы $X^{(q-1)+}(n)$ образуются во всех возможных квантовых состояниях n : от основного n_0 до состояний с большими

$n \gg 1$, при этом полное сечение перезарядки определяется суммой по всем состояниям n :

$$\sigma_{\text{tot}}(v) = \sum_{n=n_0}^{\infty} \sigma_n(v). \quad (56)$$

С увеличением плотности мишени существует некоторое пограничное состояние с главным квантовым числом n_{cut} , таким что ионы $X^{(q-1)+}(n)$ с $n > n_{\text{cut}}$ ионизуются атомами среды в последующих столкновениях, а ионы с $n \leq n_{\text{cut}}$ стабилизируются в основное состояние в результате радиационных распадов. При этом сечение перезарядки с учётом эффектов плотности σ_{DE} (DE — density effect) будет определяться суммой по n с ограниченным верхним пределом:

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{DE}}(v) = \sum_{n=n_0}^{n_{\text{cut}}} \sigma_n(v). \quad (57)$$

Таким образом, с увеличением плотности мишени число "уцелевших" состояний иона $X^{(q-1)+}(n)$ уменьшается, что и приводит к уменьшению сечений перезарядки.

Величину граничного уровня n_{cut} можно оценить из уравнения баланса между скоростью ионизации и вероятностью радиационного распада возбуждённого уровня:

$$\rho_T v \sigma_{\text{EL}}(n_{\text{cut}}) = A(n_{\text{cut}}), \quad (58)$$

где ρ_T — плотность среды, σ_{EL} — сечение обдирки (ионизации) иона $X^{(q-1)+}(n)$ атомами мишени, $A(n)$ — полная вероятность радиационного распада уровня.

Используя классические формулы Томсона для сечения ионизации σ_{EL} и Крамерса для полной вероятности $A(n)$, из (58) можно оценить зависимость n_{cut} от атомных параметров (см. [65]):

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{EL}} &\sim \frac{Z_T^2 n^2}{q^2 v^2}, \quad A(n) \sim \frac{q^4}{n^5}, \\ n_{\text{cut}} &\approx q \left(\frac{10^{18}}{Z_T^2 \rho_T [\text{см}^{-3}]} \right)^{1/7} \left(\frac{v^2}{10 q^2} \right)^{1/14} \approx \\ &\approx q \left(\frac{10^{18}}{Z_T^2 \rho_T [\text{см}^{-3}]} \right)^{1/7} \left(\frac{E [\text{кэВ/н}]}{250 q^2} \right)^{1/14}, \end{aligned} \quad (59)$$

где E — энергия налетающего иона. Из формулы (59) видно, что эффекты плотности велики (n_{cut} мало) при больших значениях плотности ρ_T и заряда ядра атома мишени Z_T , а также малых значениях заряда налетающего иона q и его энергии E . Формула (59) является приближённой, но отражает основные зависимости величины обрезания верхнего состояния n_{cut} от плотности среды и других атомных параметров. Для более точной оценки n_{cut} на практике используют более строгое условие "плотности" мишени:

$$\frac{\rho_T v \sigma_{\text{EL}}(n_{\text{cut}})}{A(n_{\text{cut}})} \gg d, \quad (60)$$

где d — константа, $d > 1$. Например, $d = 10$ означает, что 90 % ионов в состоянии с главным квантовым числом n_{cut} ионизованы, а 10 % радиационно стабилизированы в основное состояние. Ввиду зависимости (59) величина n_{cut} слабо зависит от числа d : $n_{\text{cut}} \sim d^{1/7}$.

На рисунке 12 приведены зависимости скорости ионизации $\rho v \sigma$ и вероятности радиационного распада в

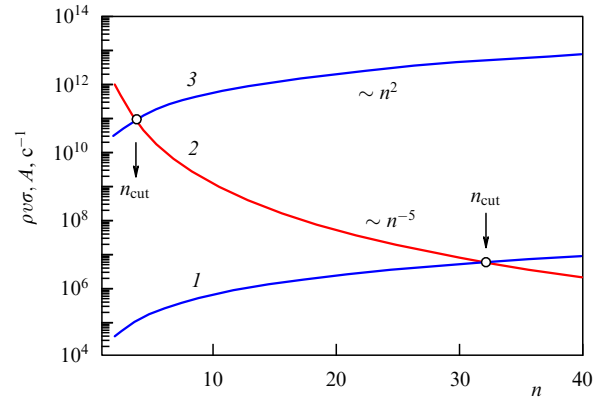


Рис. 12. (См. в цвете онлайн.) Зависимость от n скорости обдирки (ионизации) $\rho v \sigma$ (1, 3) и полной вероятности радиационного распада $A(n)$ (2) уровня с главным квантовым числом n ионов $O^{6+}(n)$, образованных в результате реакции перезарядки $O^{7+} + \text{He} \rightarrow O^{6+}(n) + \text{He}^+$, при энергии 3,2 МэВ/н и плотностях гелия 10^{13} см^{-3} (1) и 10^{19} см^{-3} (3) [149]. Точки пересечения кривых (см. (57)) дают величины максимальных квантовых чисел, с которыми могут "уцелеть" ионы O^{6+} в гелиевой мишени, при двух различных плотностях.

основное 1s-состояние ионов $O^{6+}(n)$, образованных в результате реакции перезарядки $O^{7+} + \text{He} \rightarrow O^{6+}(n) + \text{He}^+$, при энергии 3,2 МэВ/н, как функции главного квантового числа n при плотностях ρ гелия, равных 10^{13} и 10^{19} см^{-3} . Из рисунка следует, что при плотности гелиевой мишени $\rho = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ максимальное квантовое число образующихся ионов O^{6+} приблизительно равно $n_{\text{cut}} \approx 30$, а при плотности $\rho = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ — только $n_{\text{cut}} \approx 3$, что приводит к уменьшению сечения перезарядки почти на порядок: с $5,5 \times 10^{-16}$ до $8,0 \times 10^{-17} \text{ см}^2$ (см. [149]).

Как показали расчёты, в общем случае уменьшение сечений перезарядки с увеличением плотности мишени может быть значительным (до 10 и более раз) в зависимости от величины n_{cut} , которая, в свою очередь, определяется энергией ионов и атомной структурой сталкивающихся частиц. Другими словами, плотность мишени может быть небольшой по абсолютной величине, а эффект плотности — огромным.

5.2. Влияние эффектов плотности на сечения обдирки

Формулы, выведенные в разделе 5.1 для сечений перезарядки с учётом плотности мишени, могут быть получены и для сечений одноэлектронной обдирки (ионизации налетающих ионов):

$$X^{q+}(n_0) + A \rightarrow X^{(q+1)+} + A + e^-, \quad (61)$$

где n_0 — главное квантовое число основного состояния налетающего иона, A — атом мишени.

С увеличением плотности мишени процессы обдирки помимо ионизации из основного состояния n_0 включают ионизацию из возбуждённых состояний n , образованных при столкновении с атомами мишени, так что полное сечение $\sigma_{\text{ion}}^{\text{DE}}(v)$ ионизации (обдирки) иона $X^{q+}(n_0)$ с учётом эффектов плотности равно

$$\sigma_{\text{ion}}^{\text{DE}}(v) = \sigma_{\text{ion}}(n_0) + \sum_{n>n_0} \sigma_{\text{ion}}(n) B(n), \quad (62)$$

$$B(n) = \frac{\rho_T v \sigma_{\text{ex}}(n_0 - n)}{A(n) + \rho_T v \sigma_{\text{de-ex}}(n - n_0) + \rho_T v \sigma_{\text{ion}}(n)}, \quad (63)$$

где $B(n)$ — коэффициент ветвления возбуждённого уровня n , $\sigma_{\text{ion}}(n_0, n)$ — сечения ионизации с уровня n_0 , n без учёта эффектов плотности; $\sigma_{\text{ex}}(n_0 - n)$, $\sigma_{\text{de-ex}}(n - n_0)$ — сечения возбуждения и девозбуждения соответственно при столкновении с атомами мишени; $A(n)$ — полная вероятность радиационного распада уровня n . Сечения σ_{ex} и $\sigma_{\text{de-ex}}$ связаны соотношением Клейна – Росселанда [150]:

$$g_0 \left(\frac{v^2}{2} + \Delta E \right) \sigma_{\text{de-ex}}(\sqrt{v^2 + \Delta E}) = g_1 \frac{v^2}{2} \sigma_{\text{ex}}(v), \quad (64)$$

где ΔE — энергия перехода $n_0 - n_1$, g_0, g_1 — статистические веса начального и конечного состояний: $g_0 = 2n_0^2$, $g_1 = 2n_1^2$.

Учитывая, что для быстрых ионов $v^2 \gg \Delta E$ и

$$\sigma_{\text{ion}}(n) \sim n^2, \quad \sigma_{\text{ex}}(n_0 - n) \sim n^{-3}, \quad \sigma_{\text{de-ex}}(n_0 - n) \sim n^{-1}, \quad (65)$$

коэффициент ветвления $B(n)$ можно записать в виде

$$B(n) = \frac{\rho_T v \sigma_{\text{ion}}(n)}{A(n) + \rho_T v \sigma_{\text{ion}}(n)}. \quad (66)$$

Принимая во внимание свойства (65) и то обстоятельство, что в сумму по n в (62) главный вклад вносит возбуждение и ионизация с резонансного уровня n_r (дипольно-разрешённого к основному уровню n_0), для сечения ионизации (обдирки) с учётом эффектов плотности окончательно получаем:

$$\sigma_{\text{ion}}^{\text{DE}}(v) = \sigma_{\text{ion}}(n_0) + \sigma_{\text{ex}}(n_0 - n_r) B(n_r), \quad (67)$$

где $\sigma_{\text{ex}}(n_0 - n_r)$ — сечение возбуждения резонансного перехода $n_0 - n_r$, n_r — главное квантовое число резонансного уровня, коэффициент $B(n_r)$ определён в (66).

Формула (67) отражает основную зависимость сечений обдирки от плотности мишени и других параметров и легко обобщается на случай ионизации из состояния с орбитальными квантовыми числами nl [149].

При низкой плотности мишени (разрежённый газ) коэффициент ветвления $B \rightarrow 0$ и сечение определяется "обычной" формулой для бинарных столкновений:

$$\sigma_{\text{ion}}^{\text{DE}}(v) \approx \sigma_{\text{ion}}(n_0), \quad \rho_T \rightarrow 0, \quad B \rightarrow 0. \quad (68)$$

В случае очень плотной мишени (твёрдое тело) $B \rightarrow 1$ и сечение обдирки равно сумме сечений ионизации из основного состояния и возбуждения на резонансный уровень

$$\sigma_{\text{ion}}^{\text{DE}}(v) \approx \sigma_{\text{ion}}(n_0) + \sigma_{\text{ex}}(n_0 - n_r), \quad \rho_T \rightarrow \infty, \quad B \rightarrow 1. \quad (69)$$

Поскольку

$$\sigma_{\text{ion}}(n_0) \approx \sigma_{\text{ex}}(n_0 - n_r), \quad (70)$$

из уравнения (69) следует, что сечение обдирки в плотной мишени увеличивается примерно в два раза по сравнению с сечением в разрежённом газе. Напомним, что в случае перезарядки эффекты плотности приводят к более значительному изменению сечения — уменьшению в 10 и более раз.

Обоюдное изменение сечений перезарядки и обдирки, рассмотренные выше, количественно объясняет увеличе-

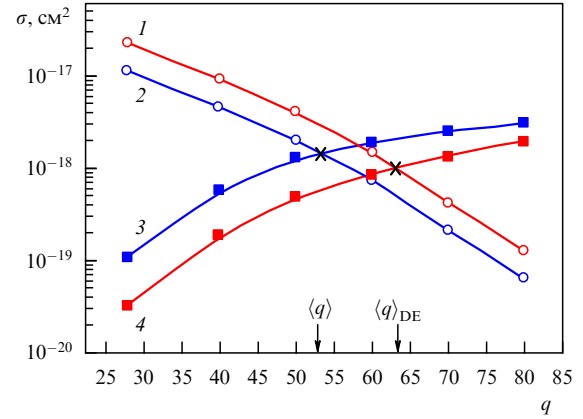


Рис. 13. (См. в цвете онлайн.) Сечения перезарядки и обдирки пучка ионов U^{q+} с энергией 11 МэВ/и как функции заряда q при прохождении через плотную углеродную плазму с плотностью $5 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [151]. Кривые — сечения обдирки, вычисленные с учётом (1) и без учёта (2) эффектов плотности, сечения перезарядки с учётом (4) и без учёта (3) эффектов плотности. Стрелками указаны равновесные заряды $\langle q \rangle$, оценённые по сечениям с учётом $\langle q \rangle_{\text{DE}}$ и без учёта $\langle q \rangle$ эффектов плотности. Экспериментальное значение $\langle q \rangle_{\text{exp}} = 63 \pm 1$.

ние среднего заряда ионов при прохождении ионного пучка через более плотную среду. Это иллюстрирует рис. 13, где приведены зависимости сечений перезарядки и обдирки при прохождении тяжёлых ионов урана через плотную плазму (см. [151]). Заряды, соответствующие пересечению кривых, отвечают равновесным зарядам $\langle q \rangle$, т.е. условию "равновесия" между процессами перезарядки и обдирки. Учёт эффектов плотности приводит к увеличению равновесного заряда и к хорошему согласию с экспериментом.

Таким образом, при прохождении пучка ионов через среду (газ, плазму, твёрдое тело) обычные формулы для сечений с изменением зарядового состояния, вообще говоря, неприменимы и необходимо использовать формулы, учитывающие зависимость сечений от плотности среды (см. уравнения (57), (62), (63)).

6. Времена жизни ионных пучков в ускорителях

Одним из основных приложений, где используются сечения перезарядки и обдирки тяжёлых ионов, является определение времени жизни τ инжектированного пучка в ускорителе, которое определяется выражением

$$I(t) = I_0 \exp \left(-\frac{t}{\tau} \right), \quad (71)$$

где I_0 — начальная интенсивность инжектированных ионов, $I(t)$ — её эволюция во времени. Величина τ зависит от параметров вакуума, т.е. от давления и концентраций компонентов остаточного газа в ускорителе, а также от энергии ионов и сечений их взаимодействия с атомами и молекулами остаточного газа, состоящего обычно из смеси H_2 , He, O_2 , N_2 , H_2O , CO, CO_2 , CH_4 и Ar. Для оценки условий вакуума часто используют концентрации "базисных" атомов и молекул в ускорителях, т.е. H_2 , N_2 и Ar. В ускорителях концентрации "базисных" атомов и молекул остаточного газа обычно составляют: $Y(H_2) \sim 70-90\%$, $Y(N_2) \sim 20-30\%$, $Y(Ar) \sim 1-3\%$.

Для оценки времени жизни ионного пучка в ускорительных установках обычно используется формула

$$\tau = \left[\rho \beta c \sum_T Y_T (\sigma_{\text{ЕС}}(q, v, Z_T) + \sigma_{\text{ЕЛ}}(q, v, Z_T)) \right]^{-1},$$

$$\sum_T Y_T = 1, \quad (72)$$

где ρ — плотность остаточного газа, $\beta = v/c$ — релятивистский фактор, q и v — заряд и скорость ионов, Z_T и Y_T — заряд ядра и концентрация газовых компонентов, $\sigma_{\text{ЕС}}$ и $\sigma_{\text{ЕЛ}}$ — полные, т.е. с учётом многоэлектронных процессов, сечения обдирки и перезарядки ионов пучка с атомами и молекулами остаточного газа.

В реальных условиях плотность газа ρ и концентрации Y_T имеют разные значения в разных точках объёма ускорителя и зависят от времени. Кроме того, атомы и молекулы остаточного газа ионизуются ионами пучка, что изменяет их взаимодействие с ионами, а при очень высоких плотностях пучка возникают так называемые *динамические эффекты вакуума* [42], что ограничивает использование формулы (72). Однако, как правило, она даёт удовлетворительные результаты по оценке времён жизни ионов в ускорителях и накопительных кольцах.

На рисунке 14 в качестве примера приведены экспериментальная и теоретическая зависимости времени жизни пучка ионов U^{28+} в ускорителе от энергии ионов при определённых параметрах вакуума, указанных на рисунке (см. [76]). При расчёте в качестве сечений использовались данные, приведённые на рис. 11, а также результаты расчётов для мишеней С и О. Как видно, имеется хорошее согласие теории с экспериментом, выполненным на синхротронном источнике ионов SIS18 в Дармштадте. Заметим, что в рассматриваемой области энергий $E > 9$ МэВ/н сечениями перезарядки ионов U^{28+} на атомах и молекулах остаточного газа можно пренебречь по сравнению с сечениями обдирки.

В области релятивистских энергий $E > 5$ ГэВ/н расчёты времён жизни ионных пучков дают постоянную

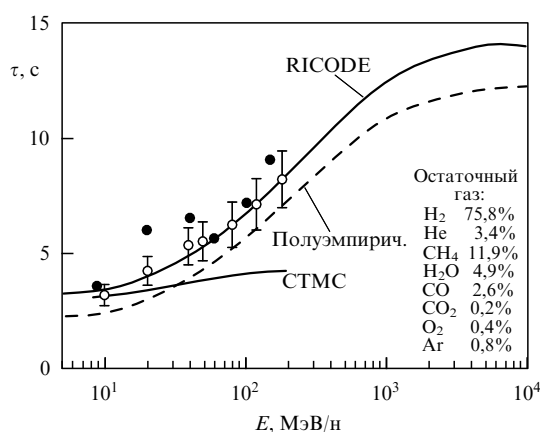


Рис. 14. Времена жизни ионов U^{28+} как функция энергии при давлении вакуумной установки порядка 10^{-10} мбар и концентрации атомов и молекул остаточного газа, указанных на рисунке. Эксперимент: чёрные кружки [152], светлые кружки [138]. Теория: CTMC — расчёт (72) с сечениями обдирки, вычисленными в приближении CTMC; RICODE — то же с сечениями обдирки, полученными по релятивистской программе RICODE, штриховая кривая — время жизни (72), оценённое с помощью полуэмпирических формул для перезарядки (12) и обдирки (34).

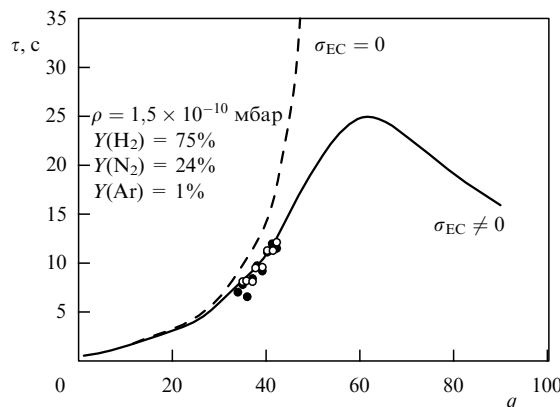


Рис. 15. Времена жизни пучков ионов урана U^{q+} с энергией $E = 11,4$ МэВ/н как функция заряда q . Кружки — эксперимент SIS (Дармштадт) [153]. Штриховая кривая — расчёт с учётом только процессов обдирки ионов U^{q+} , сплошная кривая — с учётом процессов обдирки и перезарядки. Параметры вакуума, использованные для расчёта, указаны на рисунке.

величину порядка 13 с для рассматриваемых параметров вакуума. Из рисунка 14 видно, что использование полуэмпирических формул для сечений перезарядки (12) и обдирки (34) приводит к вполне разумным результатам для оценки времён жизни пучков ионов в широкой области энергий, включая релятивистскую область.

Как следует из формулы (72), время жизни пучков ионов в ускорителе зависит от параметров вакуума и сечений с изменением зарядового состояния ионов. На практике измерить одновременно времена жизни, плотность и концентрации остаточного газа бывает довольно затруднительно. В этом случае можно решить обратную задачу: оценить параметры вакуума, т.е. плотность и концентрации атомов и молекул остаточного газа, по известным экспериментальным величинам τ и теоретическим значениям сечений перезарядки и обдирки.

На рисунке 15 представлены времена жизни пучков ионов урана с зарядом $q = 1-90$ при энергии ионов $E = 11,4$ МэВ/н. Экспериментальные данные τ получены на установке SIS18 в Дармштадте для зарядов $q = 34-42$ [153], однако параметры вакуума не были измерены. Сечения перезарядки и обдирки для ионов урана вычислены по программам CAPTURE, DEPOSIT и RICODE. По экспериментальным данным τ и теоретическим сечениям были оценены параметры вакуума, которые составили: $\rho = 1,5 \times 10^{-10}$ мбар, $Y(\text{H}_2) \approx 75\%$, $Y(\text{N}_2) \approx 24\%$, $Y(\text{Ar}) \approx 1\%$, т.е. с этими параметрами теоретически полученные времена τ хорошо согласуются с экспериментальными значениями. Определённые таким образом параметры вакуума близки к предполагаемым значениям. Следует отметить важную роль процессов перезарядки при энергии $E = 11,4$ МэВ/н: их учёт приводит к убыванию времён жизни для ионов урана с зарядом $q > 60$, а пренебрежение процессами перезарядки — к бесконечному росту τ при увеличении заряда ионов. Таким образом, ионы U^{q+} с $q \approx 60$ являются наилучшими кандидатами с точки зрения получения максимального времени жизни ионных пучков $\tau \approx 25$ с при энергии 11,4 МэВ/н. Естественно, решение такой обратной задачи не является однозначным, однако предложенная процедура оценки параметров вакуума полезна для интерпретации экспериментальных данных и планирова-

ния экспериментов с пучками тяжёлых многоэлектронных ионов в ускорителях.

7. Перезарядка при медленных столкновениях

В этом разделе рассмотрен процесс перезарядки при медленных столкновениях, когда скорость сталкивающихся частиц $v \ll 1$ а.е. и движение ядер можно считать классическим. Медленные столкновения представляют особый интерес как с экспериментальной (процессы в низкотемпературной плазме), так и с теоретической точки зрения. Характерной особенностью медленных столкновений является образование квазимолекулы при уменьшении межъядерного расстояния между взаимодействующими частицами. Изучение механизмов электронных переходов при таких столкновениях и нахождение их вероятностей повлекли за собой развитие новых теоретических подходов и методов. Наиболее распространённым является *адиабатическое приближение*, основанное на приближённом разделении "быстрых" (электронное движение) и "медленных" (движение ядер) переменных динамической системы.

Основы адиабатического приближения — приближённое разделение электронных, колебательных и вращательных степеней свободы в молекулах и решение нестационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом, медленно меняющимся во времени, — были заложены в работах [154, 155]. Вероятность неадиабатического перехода изучалась в ряде работ, в которых использовались разные теоретические подходы [156, 157], решалась модельная задача [158] и рассматривалось квантовое движение взаимодействующих частиц [159].

Развитию и применению адиабатического подхода для расчёта сечений возбуждения, перезарядки и ионизации при медленных атом-атомных и атом-молекулярных столкновениях посвящён ряд монографий и обзоров [2, 160–164]. Возросший интерес к медленным ион-атомным столкновениям, обусловленный созданием установок с магнитным удержанием плазмы, повлёк за собой ряд работ, в которых были рассмотрены точно решаемые модели [165–169]. Эти модели позволили исследовать большое число конкретных физически важных процессов и создать *адиабатическую теорию переходов* при медленных столкновениях [13, 170], в которой они выступают уже в качестве эталонных задач.

В настоящей работе процесс перезарядки рассматривается в рамках адиабатической теории [13, 170], когда переходы между электронными состояниями сталкивающихся атомов описываются в классическом по движению ядер приближении нестационарным уравнением Шрёдингера:

$$H(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, t) = i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t},$$

где $\mathbf{r}$ — совокупность электронных координат, $H(\mathbf{R})$ — электронный гамильтониан двухатомной квазимолекулы, зависящий от времени только через входящее в него межъядерное расстояние $\mathbf{R} = \mathbf{R}(vt)$ (v — относительная скорость ядер), которое считается заданной функцией времени.

В наиболее общей форме адиабатическое приближение представляет собой асимптотическое разложение решения нестационарного уравнения Шрёдингера по

малому параметру v . В этом приближении электронная волновая функция находится в виде разложения

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_p g_p(t) \varphi_p(\mathbf{r}, R) \exp \left(-i \int^t E_p(R(vt')) dt' \right)$$

по собственным функциям φ_p мгновенного электронного гамильтониана

$$H(\mathbf{R}) \varphi_p(\mathbf{r}, R) = E_p(R) \varphi_p(\mathbf{r}, R),$$

которые зависят от R как от входящего в гамильтониан параметра. Собственные значения $E_p(R)$ имеют в физике атомных столкновений несколько названий: молекулярные потенциальные кривые, адиабатические термы или просто термы. В таком представлении адиабатическое приближение сводится к вычислению главных членов асимптотики коэффициентов разложения $g_p(t)$ при $v \rightarrow 0$.

Для численного расчёта сечений перезарядки используется программа ARSENY [171], основанная на методе скрытых пересечений электронных термов, которые являются собственными значениями двухцентровой кулоновской задачи [172]. Наряду с методом скрытых пересечений для расчёта сечений перезарядки при медленных столкновениях используются также программы, созданные на основе методов сильной связи [173–178], электронно-ядерной динамики (Electron Nuclear Dynamics) [179] и решения кулоновской задачи трёх тел [180].

В низкотемпературной плазме (пристеночная плазма и плазма в диверторе токамаков и стеллараторов) перезарядка является доминирующим процессом в заселении возбуждённых состояний ионов плазмы и играет важную роль в зарядовом распределении ионов, радиационном охлаждении и переносе частиц. Эксперименты по диагностике холодной плазмы показали, что при моделировании такой плазмы необходимо учитывать резонансную перезарядку (РП) между высоковозбуждёнными состояниями частиц (H, He) и примесей (Li, Be, C, W) плазмы [181, 182], а это потребовало создания теории РП между возбуждёнными состояниями. Такая теория была разработана для медленных столкновений протона и водорода в возбуждённом состоянии, так как состояние атома, при котором один из внешних электронов возбуждён, можно приближённо описать как атом водорода с эффективным зарядом, создаваемым ядром и остальными электронами.

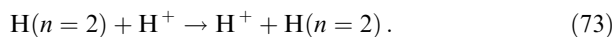
Здесь подробно рассмотрены два процесса: резонансная перезарядка при медленных столкновениях протона и водорода в возбуждённом состоянии и перезарядка тяжёлых ионов с участием изотопов водорода. Эти процессы были выбраны для детального описания из-за новизны теоретического подхода для расчёта сечений РП и эффекта, возникающего в реакциях с участием изотопов водорода H, D и T.

7.1. Резонансная перезарядка протона на атоме водорода

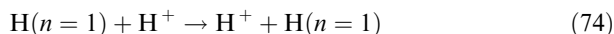
В этом разделе обсуждается РП при медленных столкновениях (энергия в системе центра масс $E \leq 1$ а.е. $\approx 27,202$ эВ) протона и атома водорода в возбуждённом состоянии. РП между основными (начальными и конечными) состояниями атома водорода при медленных столкновениях описывается теорией Фирсова–Демкова [165, 183] и хорошо изучена теоретически [175, 184, 185].

Однако эта теория не распространяется на возбуждённые состояния из-за их вырождения. Действительно, в настоящее время существует ограниченное число данных для сечений РП с участием возбуждённых вырожденных состояний, рассчитанных методом сильной связи [173, 174], но при этом для энергий ниже 1 а.е. данные практически отсутствуют.

Впервые теория РП между возбуждёнными состояниями, которая является расширением теории Фирсова – Демкова на случай вырожденных начальных и конечных состояний, была развита и описана в работе [186]. На основе этой теории создана компьютерная программа RCE (Resonant Charge Exchange) и впервые получены сечения перезарядки для энергий $E < 1$ а.е. для реакции



7.1.1. Резонансная перезарядка в р–Н столкновениях с участием атомов водорода в основном состоянии. Для иллюстрации надёжности предлагаемого метода расчёта сечений РП между вырожденными возбуждёнными состояниями рассмотрим сначала хорошо известный случай РП с участием основных состояний и сравним полученные результаты с имеющимися данными. Метод расчёта сечений РП для реакции



при низких энергиях столкновения развит Фирсовым [183]. Его теория даёт следующее квазиклассическое выражение для сечения РП:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\infty \sin^2 \left(\int_b^\infty \frac{E_g(R) - E_u(R)}{2v\sqrt{R^2 - b^2}} R dR \right) b db, \quad (75)$$

где R — межъядерное расстояние, b — прицельный параметр, v — относительная скорость, $E_g(R)$ и $E_u(R)$ — энергии электрона (собственные значения двухцентровой кулоновской задачи [172]), соответствующие чётному (gerade) и нечётному (ungerade) состояниям, приведённым на рис. 16а. Чётность электронного состояния, описываемого сфероидальными квантовыми числами n_η, n_ξ и m , определяется как $(-1)^{n_\eta}$ [172].

Теория Фирсова даёт метод расчёта РП, но не описывает механизм электронного перехода. Демков рассмотрел более общую задачу квазирезонансной перезарядки [165], когда энергии начального и конечного состояний отличаются на малую величину ΔE . Используя точно решаемую модель Розена–Зинера [187], он развил теорию, которая широко применяется в физике атомных столкновений. В рамках этой теории адиабатические состояния соответствуют состояниям удалённых атомов, а адиабатические состояния — молекулярным состояниям. Адиабатические состояния совпадают с диабатическими при $R \rightarrow \infty$. Неадиабатическое взаимодействие как функция межъядерного расстояния имеет максимум, когда диабатические (атомные) состояния перестраиваются в адиабатические (молекулярные) состояния. В этот момент происходит электронный переход. Таким образом, теория Демкова описывает общий механизм перезарядки в квазирезонансном случае. Важно отметить, что в пределе $\Delta E = 0$ эта теория даёт результат, совпадающий с формулой (75), полученной Фирсовым [183].

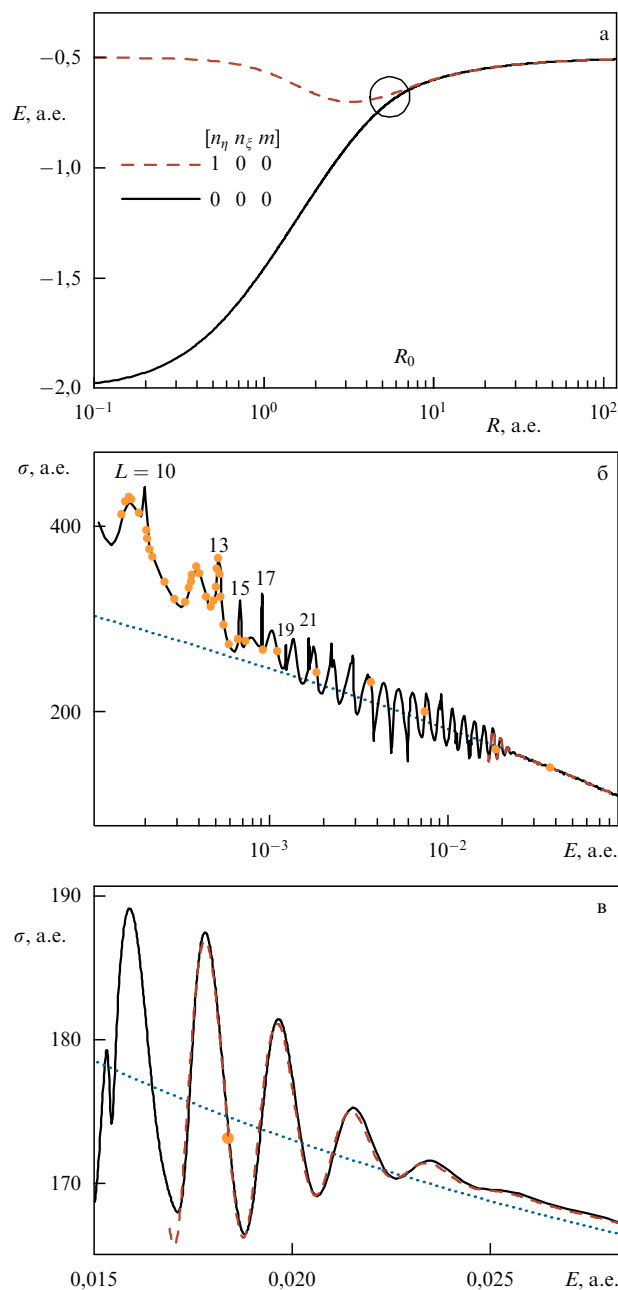


Рис. 16. (См. в цвете онлайн.) (а) Электронные энергии чётного (сплошная линия) и нечётного (штриховая линия) состояний, участвующих в процессе РП $\text{H}(n=1) + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}(n=1)$, как функции межъядерного расстояния. Электронный переход, обусловленный механизмом Демкова, происходит в выделенной окрестности области вблизи точки R_0 , определяемой формулой (76). (б, в) Сечения РП реакции $\text{H}(n=1) + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}(n=1)$ как функции энергии столкновения в системе центра масс: расчёт (77) с квантовыми (сплошные линии) и квазиклассическими (штриховые линии) значениями $\delta_{g,u}(L)$, пунктирные линии — расчёт (75), точки — результаты расчётов из [185]. На рисунке в подробно показана область сходимости квантовых и квазиклассических расчётов.

Рассматриваемая одноэлектронная столкновительная реакция (74) позволяет сделать значительно более глубокий анализ, так как переменные задачи двух кулоновских центров разделяются в продольных сфероидальных координатах [172]. Адиабатическая теория переходов при медленных столкновениях в электронных системах $Z_1 - e - Z_2$, где Z_1 и Z_2 — эффективные заряды

ядер, была развита Соловьёвым [13, 170]. Было показано, что в квазирезонансном случае, $|1 - Z_1/Z_2| \ll 1$, что соответствует малым значениям ΔE , существует так называемая Р-серия скрытых переходов, ответственная за механизм Демкова [188]. Теория Соловьёва не описывает РП в симметричных системах, когда $Z_1 = Z_2$, так как чётное и нечётное состояния в этом случае не взаимодействуют и скрытых переходов, соединяющих соответствующие поверхности электронных энергий в плоскости комплексных значений R , нет. Тем не менее теория Демкова, описывающая и резонансный случай ($\Delta E = 0$), применима к более общему классу столкновительных систем. Таким образом, в работе [186] делается вывод (это следует рассматривать как правдоподобное предположение, а не доказанное утверждение), что в процессе РП переходы локализованы в области, где атомные состояния перестраиваются в молекулярные. Это происходит вблизи точки R_0 , где чётное и нечётное состояния становятся приблизительно вырожденными. Используя квазиклассическое приближение [172], значение R_0 можно оценить из уравнения

$$R_0^2 E(R_0) + 2\lambda_u(R_0) + 4\sqrt{\lambda_u(R_0)} = 0, \quad (76)$$

где $E(R)$ и $\lambda_u(R)$ — электронная энергия и константа разделения для нечётного состояния. На рисунке 16а область вблизи точки R_0 для случая $n = 1$ выделена окружностью.

Квантовое представление уравнения (75) имеет следующий вид [184, 185]:

$$\sigma = \frac{\pi}{(v\mu)^2} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \sin^2(\delta_g(L) - \delta_u(L)), \quad (77)$$

где $\delta_{g,u}(L)$ — сдвиги фаз рассеяния, μ — приведённая масса, L — угловой момент, связанный с межъядерной осью. Начиная с пионерских работ [184, 185], уравнение (77) использовалось для расчёта сечения РП рассматриваемой реакции (74) и детально изучалась его зависимость от энергии столкновения (см., например, [175]). В этом подходе ядра сталкивающихся частиц (протонов) считаются классическими. Насколько известно, существует только одна работа по квантовому расчёту сечения квазирезонансной перезарядки водорода в основном состоянии и дейтрона на основе решения кулоновской задачи трёх тел [180].

В работе [186] сечения РП для реакции (74) рассчитываются на основе метода Фирсова тремя различными способами. Первый — квазиклассический, и сечение определяется формулой (75). В двух других способах используется формула (77), но сдвиги фаз рассеяния вычисляются по-разному: в квантовом подходе из стационарного уравнения Шрёдингера

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi_{g,u}(R) + \left[2\mu \left(\frac{1}{R} + E_{g,u}(R) - \varepsilon_{cm} \right) + \frac{L(L+1)}{R^2} \right] \times \psi_{g,u}(R) = 0, \quad (78)$$

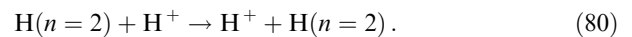
а в квазиклассическом подходе [189] по формуле

$$\delta_{g,u}(L) = \int_{R_t}^{\infty} \left[\sqrt{2\mu \left(\varepsilon_{cm} - \frac{1}{R} - E_{g,u}(R) \right) - \frac{(L+1/2)^2}{R^2}} - k \right] dR + \frac{\pi}{2} \left(L + \frac{1}{2} \right) - kR_t, \quad (79)$$

где μ — приведённая масса, ε_{cm} — энергия столкновения в системе центра масс, R_t — точка поворота, $k = \sqrt{2\mu\varepsilon_{cm}}$. Результаты расчётов [186] приведены на рис. 16б, в.

При расчёте этих сечений была достигнута сходимость по отношению ко всем численным параметрам. Сравнение полученных сечений с результатами, приведёнными в работе [185] (точки на рис. 16б), показывает хорошее согласие во всех областях энергий, за исключением небольших различий при низких энергиях. Эти различия связаны с учётом неадиабатических поправок к потенциалу в [185]. Осцилляции сечений и положения орбитальных резонансов (на рис. 16б некоторым из резонансов приписаны значения момента L) находятся в очень хорошем согласии с данными, опубликованными в работах [175, 190]. С ростом энергии время расчёта в рамках квантового подхода значительно увеличивается, и хорошая сходимость квантового и квазиклассического результатов вычислений (рис. 16в) позволяет использовать квазиклассические значения $\delta_{g,u}(L)$ для расчёта сечений РП начиная с энергии около 0,017 а.е. Сечения, рассчитанные по формуле (75), (пунктирная линия) не воспроизводят колебательной структуры и сходятся с двумя другими расчётными результатами при энергии около 1 а.е.

7.1.2. Резонансная перезарядка в р–Н столкновениях с участием возбуждённых атомов водорода в состоянии с $n = 2$. В качестве примера РП между возбуждёнными вырожденными состояниями рассмотрим следующую реакцию:



На рисунке 17а показаны электронные энергии шести состояний, сходящихся к уровню $n = 2$ в пределе удалённых атомов ($R \rightarrow \infty$), которые имеют отношение к обсуждаемой реакции. В пределе удалённых атомов главное квантовое число n выражается через сфероидальные квантовые числа электронного состояния n_η , n_ξ и m следующим образом:

$$n = n_\xi + \left[\frac{n_\eta}{2} \right] + m + 1, \quad (81)$$

где $[a]$ обозначает целую часть числа a . В этом пределе сфероидальные координаты переходят в параболические, и соответствие между сфероидальными (n_η, n_ξ, m) и параболическими (n_1, n_2, m) квантовыми числами определяется формулой [172]

$$n_1 = n_\xi, \quad n_2 = \left[\frac{n_\eta}{2} \right]. \quad (82)$$

Прежде всего отметим, что электронные состояния, показанные на рис. 17а, могут быть разбиты на три пары, каждая из которых содержит чётное и нечётное состояния, имеющие одинаковые значения n_ξ и m . Внутри каждой пары значение n_η для нечётного состояния превышает значение n_η для чётного состояния на единицу, поэтому оба состояния описываются одинаковым набором параболических квантовых чисел n_1 , n_2 и m при $R \rightarrow \infty$. Отметим, что вырождение внутри пары происходит при значительно меньших межъядерных расстояниях, чем вырождение между парами. В дальнейшем

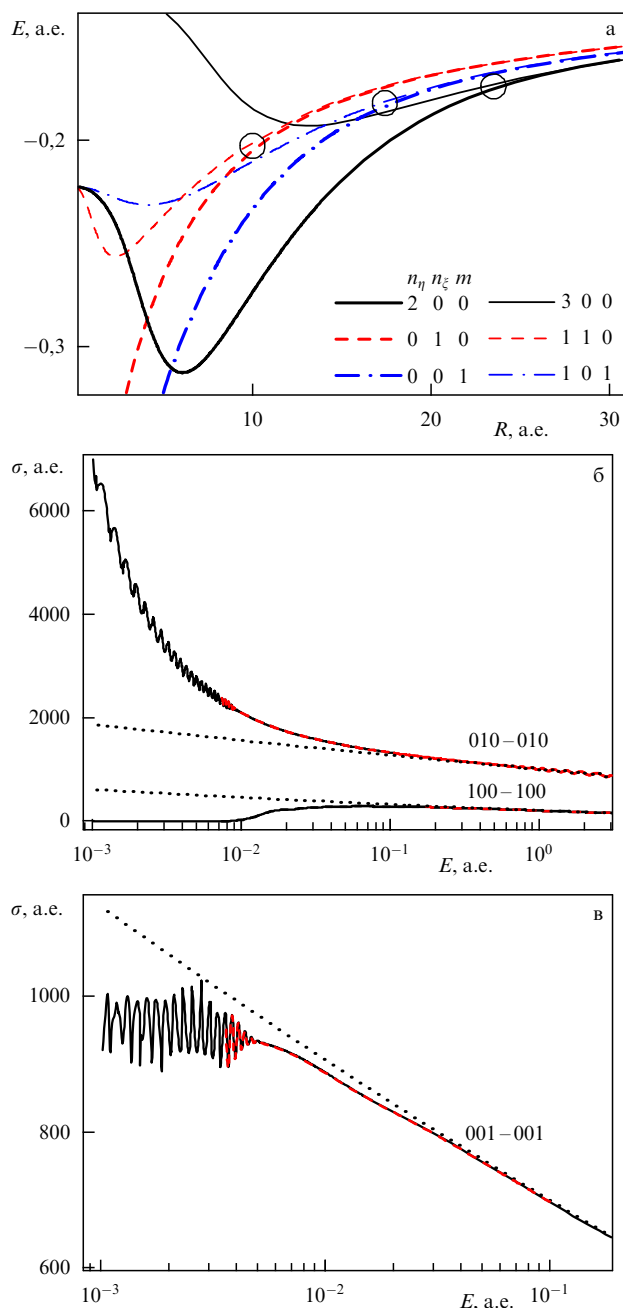


Рис. 17. (См. в цвете онлайн.) (а) Электронные энергии чётных (жирные линии) и нечётных (тонкие линии) состояний, участвующих в процессе РП $H(n=2) + H^+ \rightarrow H^+ + H(n=2)$, как функции межъядерного расстояния. Электронные переходы, обусловленные механизмом Демкова, происходят в выделенных окружностях областей, определяемых формулой (76). (б, в) Сечения РП реакции $H(n_1, n_2, m) + H^+ \rightarrow H^+ + H(n_1, n_2, m)$ как функции энергии столкновения в системе центра масс для параболических состояний 010 (б), 100 (б), 001 (в): результаты расчёта по (77) с квантовыми (сплошные линии) и квазиклассическими (штриховые красные линии) значениями $\delta_{g,u}(L)$, пунктирные линии — результаты расчёта по (75).

такие пары состояний будут называться вырожденными. На рисунке 17а для состояний, принадлежащих к одной и той же вырожденной паре, используются линии одного типа.

Подход к расчёту сечения РП в реакции (80) заключается в следующем: электронные переходы внутри вырожденных пар описываются теорией Фирсова – Дем-

кова, при этом взаимодействием между различными парами, сходящимися к уровню с $n=2$, а также их взаимодействием с состояниями, сходящимися к другим уровням, пренебрегается. В адиабатическом приближении (медленные столкновения) этот подход может быть оправдан тем, что области локализованных переходов в вырожденных парах, которые описываются механизмом Демкова, хорошо разделены по межъядерному расстоянию (кружки на рис. 17а). Аналогичный подход использован в работе [191] для расчёта сечений квазирезонансной перезарядки между состояниями с $n=2$, когда учитывалось взаимодействие Демкова внутри каждой пары квазивырожденных состояний и пренебрегалось всеми другими взаимодействиями. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися точными квантовыми результатами для такой трёхчастичной кулоновской системы [192]. Этот факт является дополнительным независимым аргументом в пользу применения данного подхода.

Сечения РП между параболическими состояниями с $n=2$ и $m=0$ и 1 показаны на рис. 17б, в. Сечения, соответствующие переходам между параболическими состояниями 010–010 и 001–001, имеют резонансную структуру и увеличиваются с уменьшением энергии, в то время как сечение перехода 100–100 не имеет резонансов и уменьшается. На рисунке 18а изображены потенциалы

$$U(R) = \frac{1}{n^2} + \frac{1}{R} + E_{g,u}(R)$$

для трёх пар сфероидальных состояний. Из рисунка видно, что потенциалы состояний 010 и 110 являются отталкивательными. Точка поворота R_t (межъядерное расстояние, на котором аргумент квадратного корня в уравнении (79) равен нулю) перемещается вправо при уменьшении энергии. Когда R_t становится больше, чем 10 а.е. (R_0 для этих состояний), что происходит при энергии около 0,02 а.е., сечение быстро убывает, что и видно на рис. 17б. Несколько резонансов для перехода между параболическими состояниями 010–010 и соответствующие моменты L показаны на рис. 18б.

На вставке рис. 18б приведены потенциалы

$$U(R) = \frac{1}{n^2} + \frac{1}{R} + E_{g,u}(R) + \frac{L(L+1)}{2\mu R^2}$$

для сфероидальных состояний 200 и 300 для момента $L=90$. В потенциале состояния 200 существует барьер, который обуславливает первый орбитальный резонанс на рис. 18б. Поскольку энергия столкновения $E_{L=90}$, соответствующая этому резонансу, очень близка к вершине барьера, ширина резонанса достаточно велика. Была изучена сходимость сечения РП между параболическими состояниями 010–010, рассчитанного по формуле (77) с квантовым и квазиклассическим фазовыми сдвигами $\delta_{g,u}(L)$, а также сходимость сечений, определённых формулами (75) и (77). Анализ результатов позволяет сделать следующий вывод: можно вычислять сечения РП по формуле (77) с квазиклассическими фазовыми сдвигами $\delta_{g,u}(L)$, начиная от энергии столкновения около 0,008 а.е., и использовать формулу (75) при энергиях, больших 2 а.е.

Переход от параболических координат к сферическим осуществляется с помощью коэффициентов Клебша – Гордана [189]. Сечение РП между сферическими состояниями $nlm - nl'm$ может быть представлено в следующем

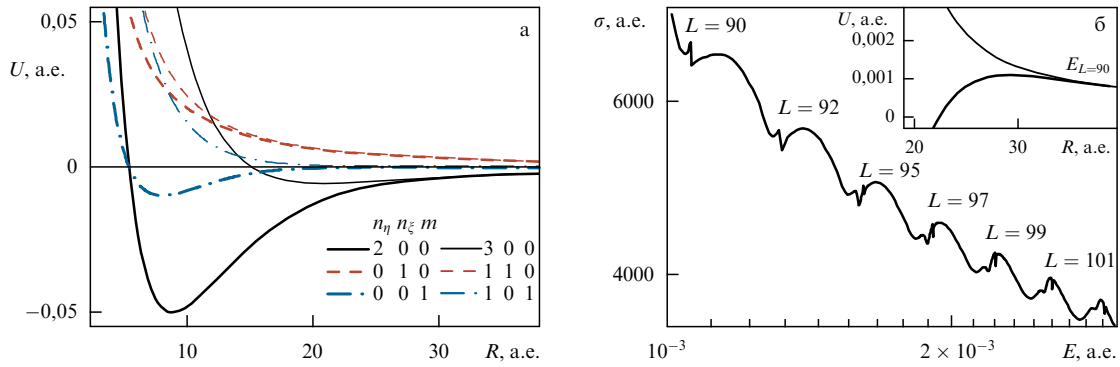


Рис. 18. (См. в цвете онлайн.) (а) Потенциалы $U(R) = 1/n^2 + 1/R + E_{g,u}(R)$ для чётных и нечётных сфероидальных состояний как функции межъядерного расстояния. (б) Орбитальные резонансы в сечениях РП как функция энергии столкновения в системе центра масс для параболических состояний 010–010. Вставка: потенциалы $U(R) = 1/n^2 + 1/R + E_{g,u}(R) + L(L+1)/(2\mu R^2)$ для сфероидальных состояний 200 (жирная кривая) и 300 (тонкая кривая) для момента $L = 90$ как функции межъядерного расстояния.

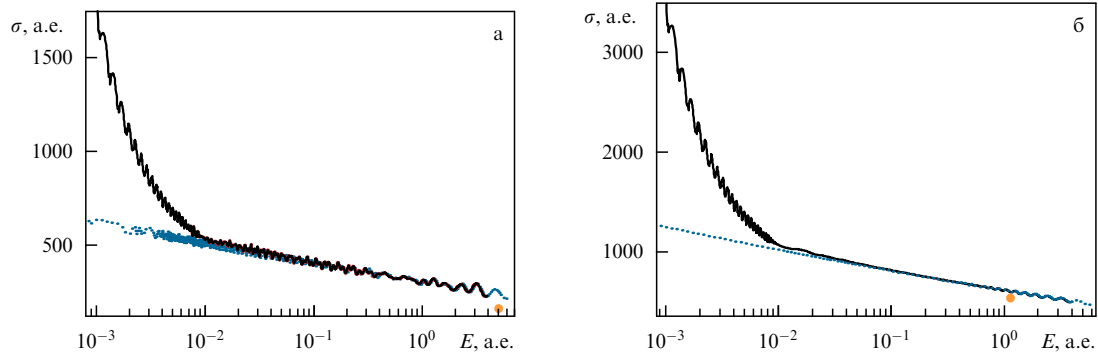


Рис. 19. (См. в цвете онлайн.) (а) Сечения РП реакции $H(n, l, m) + H^+ \rightarrow H^+ + H(n, l, m)$ как функции энергии столкновения в системе центра масс для сферических состояний 2s0 и 2p0: результаты расчёта по (77) с квантовыми (сплошная линия) и квазиклассическими (штриховая красная линия) значениями $\delta_{g,u}(L)$, пунктирная синяя линия — результаты расчёта по (75), точка — результаты работы [173]. (б) Полное сечение РП реакции $H(2s0) + H^+ \rightarrow H^+ + H(2s0, 2p0)$ как функции энергии столкновения в системе центра масс для сферических состояний 2s0 и 2p0: сплошная линия — результаты расчёта по (77), пунктирная синяя линия — по (75), точка — результаты работы [174].

виде:

$$\sigma_{nlm-n'l'm}(v) = \frac{\pi}{(v\mu)^2} \sum_{L=0}^{\infty} (2L+1) \times \left| \sum_{n_1 n_2 m} c(n_1 n_2 m - nlm) A_{n_1 n_2 m}(L) c(n_1 n_2 m - n'l'm) \right|^2, \quad (83)$$

где

$$A_{n_1 n_2 m}(L) = \sin[\delta_g(L) - \delta_u(L)] \exp[i(\delta_g(L) + \delta_u(L))] \quad (84)$$

— амплитуда РП в параболических координатах и

$$c(n_1 n_2 m - nlm) = (-1)^{n_1+m} \sqrt{2l+1} \times \begin{pmatrix} \frac{n-1}{2} & \frac{n-1}{2} & l \\ \frac{n_2-n_1+m}{2} & \frac{n_1-n_2+m}{2} & -m \end{pmatrix}. \quad (85)$$

Второе суммирование в правой части (83) проводится по параболическим состояниям с одинаковыми квантовыми числами n и m . В результате получаем сечения РП для следующих переходов: 2s0–2s0, 2p0–2p0, 2p0–2s0 и 2p1–2p1. Из-за свойств коэффициентов Клебша–Гор-

дана сечения переходов 2s0–2s0 и 2p0–2p0 равны. Они представлены на рис. 19а. Точкой на рисунке обозначено сечение перехода 2s0–2s0 для скорости столкновения 0,1 а.е., рассчитанное квазиклассическим методом сильной связи [173]. Разницу между результатами настоящего расчёта и данными из [173], составляющую около 30 %, можно объяснить тем, что в описываемом методе не учитываются процессы нерезонансной перезарядки, возбуждения и ионизации, вероятности которых становятся существенными с ростом энергии столкновения.

На рисунке 19б приведены сечения переходов 2s0–2s0 и 2s0–2p0. Полученные данные сравниваются с полным сечением из состояния 2s0 при столкновении на скорости 0,05 а.е., вычисленным методом сильной связи в молекулярном подходе [174]. Отличие на 9 % означает, что на этой скорости вклад процессов, которые мы не учитываем, уменьшается по сравнению с их вкладом на скорости столкновения 0,1 а.е. Насколько известно авторам, других данных для области применимости описываемой теории нет. Сечение РП перехода 2p1–2p1 (рис. 17в) не изменяется при переходе от параболических координат к сферическим.

Рисунок 20 иллюстрирует справедливость теории, развитой в работе [186] на примере состояний с $n = 2$, для любых возбуждённых состояний. На рисунке изображены электронные энергии возбуждённых вырожден-

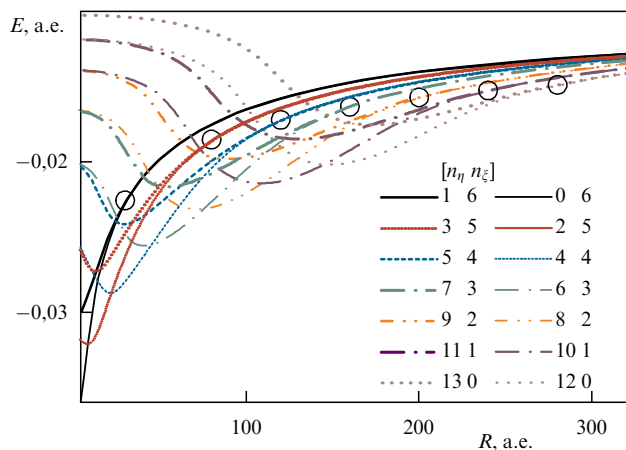
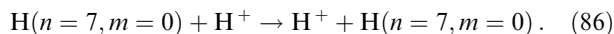


Рис. 20. (См. в цвете онлайн.) Электронные энергии чётных и нечётных состояний, участвующих в процессе РП $H(n=7, m=0) + H^+ \rightarrow H^+ + H(n=7, m=0)$, как функции межъядерного расстояния. Электронные переходы, обусловленные механизмом Демкова, происходят в выделенных окружностях областях, определяемых формулой (76).

ных состояний водорода в следующем процессе РП:



Как видно из рис. 20, система из 14 электронных состояний разделяется на 7 пар чётных и нечётных состояний, и области переходов внутри каждой вырожденной пары (кружки на рисунке) хорошо разделены по межъядерному расстоянию. Это означает, что предлагаемый подход применим для энергий столкновения, при которых процессами, обусловленными взаимодействием между парами, можно пренебречь.

7.2. Изотопические эффекты перезарядки с участием изотопов водорода

В этом разделе рассматривается влияние изотопического эффекта (зависимость сечения перезарядки от масс сталкивающихся частиц) на процесс перезарядки при медленных столкновениях ионов Li, C и W (материалов, используемых для покрытия поверхностей, граничащих с плазмой, в термоядерных установках) с изотопами водорода (H, D и T). Изотопический эффект исследуется в рамках адиабатической теории переходов при медленных столкновениях [13, 170]. Результаты численных расчётов представлены для вероятностей и сечений перезарядки ионов Li, C и W, сталкивающихся с изотопами водорода, а также для обратных реакций.

7.2.1 Механизм изотопического эффекта при медленных столкновениях. Впервые изотопический эффект наблюдался при столкновении альфа-частиц (He^{2+}) и атомов H, D и T при очень низких энергиях $E = 1 - 500$ эВ/н [193]. Этот эффект обусловлен вращательным перемешиванием электронных состояний при малых межъядерных расстояниях R . Вращательное взаимодействие перемешивает пары электронных состояний, имеющих одинаковые главное и орбитальное квантовые числа n и l , одинаковые чётности и магнитные квантовые числа, отличающиеся на единицу ($\Delta m = \pm 1$). Амплитуда перехода с изменением m , вызванного вращательным взаимодействием, зависит от траектории сталкивающихся

частиц, которая, в свою очередь, зависит от их приведённой массы: чем тяжелее изотоп, тем больше сечение перезарядки.

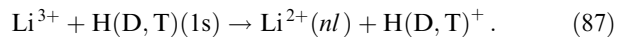
Неадиабатические переходы, вызванные вращательной связью между квазимолекулярными состояниями, вырожденными в пределе объединённого атома ($R = 0$), представляют интерес с теоретической точки зрения, так как они не являются переходами типа Ландау–Зинера [13, 170]. Влияние вращательного взаимодействия на сечения перезарядки при медленных столкновениях изучалось в работе [194] для реакции $He^{2+} + H(1s)$. Было показано, что для энергий ниже 1 кэВ/н основной вклад в сечение перезарядки дают переходы, вызванные вращательным взаимодействием при близких столкновениях.

Сильный изотопический эффект, обусловленный вращательным взаимодействием, обнаружен и исследован в [193, 195, 196] для процессов $He^{2+} + H, D, T$, которые представляют значительный интерес для моделирования плазмы в термоядерных установках. В этих работах использовался теоретический подход, известный как Electron Nuclear Dynamics (END) [179], основанный на решении нестационарного уравнения Шрёдингера с траекториями тяжёлых частиц, определяемыми потенциалом рассеяния, который эволюционирует в соответствии с динамикой электронов.

Для изучения влияния изотопического эффекта на процесс перезарядки при медленных столкновениях изотопов H, D и T с ионами Li, C и W в [197, 198] используется адиабатическая теория, основанная на методе скрытых пересечений [13, 170]. Этот процесс играет ключевую роль в транспорте частиц и зарядовом распределении примесей в D–T-плазме. В теории ион-атомных столкновений адиабатическое приближение используется для описания электронных переходов, когда скорость столкновения мала, а движение ядер может быть описано классически. В этой теории нет никаких предположений о конкретном виде электронного гамильтониана и используется только малость относительной скорости ядер. Это приводит к более глубокому пониманию природы неадиабатических переходов.

Поскольку изотопический эффект возникает при столкновениях в области энергий, где адиабатическая теория применима, адиабатическое приближение является естественным теоретическим инструментом для изучения изотопического эффекта. Численные расчёты вероятностей и сечений перезарядки выполнены с помощью программы ARSENY [171], основанной на адиабатическом приближении. Для нахождения амплитуды перехода с изменением m , вызванного вращательным взаимодействием, численно решалось нестационарное уравнение Шрёдингера с кулоновской траекторией ядер в пределе объединённого атома.

7.2.2. Расчёт сечений перезарядки в адиабатическом приближении. Для иллюстрации применимости адиабатического подхода [197] рассмотрим реакцию



На рисунке 21a показаны электронные энергии состояний для реакции (87). Эти энергии являются собственными значениями двухцентровой кулоновской задачи [172], которая сепарабельна в продольных сфероидальных координатах и в нашем подходе решается для комплекс-

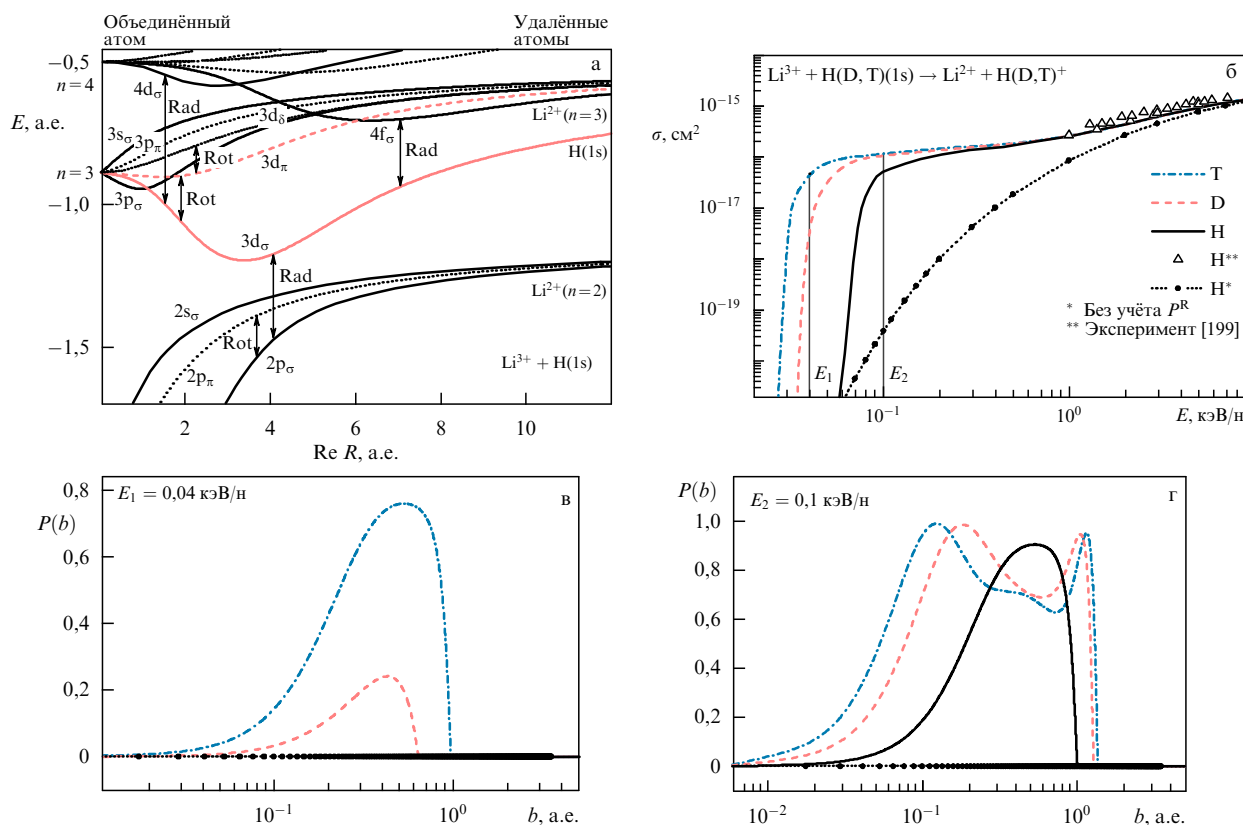


Рис. 21. (См. в цвете онлайн.) (а) Потенциальные кривые, описывающие процесс перезарядки $\text{Li}^{3+} + \text{H}(\text{D}, \text{T})(1s) \rightarrow \text{Li}^{2+}(nl) + \text{H}(\text{D}, \text{T})^+$ как функции межъядерного расстояния (см. текст). (б) Полное сечение перезарядки как функция энергии столкновения. (в, г) Вероятность как функция прицельного параметра, рассчитанная с учётом и без учёта вращательного взаимодействия P^R для случая реакции $\text{Li}^{3+} + \text{H}(\text{D}, \text{T})(1s)$. Типы кривых показаны на рис. 6.

ного межъядерного расстояния. На рисунке 21а квази-молекулярные состояния описываются сферическими квантовыми числами объединённого атома. В адиабатической теории переходы, приводящие к перезарядке, происходят на межъядерных расстояниях, при которых электронная волновая функция быстро меняется. Это случается, когда неадиабатическое взаимодействие достигает своего максимума.

Переходы, вызванные радиальной связью, происходят в скрытых пересечениях (точках ветвления) на комплексных межъядерных расстояниях R , где электронные энергии двух состояний равны. Возникновение скрытых пересечений связано с прохождением системы через состояние, соответствующее неустойчивой периодической траектории. Скрытые пересечения невидимы на изображении адиабатических потенциальных кривых для действительных значений адиабатического параметра R (межъядерного расстояния) и требуют прямого расчёта в плоскости комплексных R .

На рисунке 21а эти "радиальные" переходы обозначены стрелками Rad, которые соединяют начальное ($\text{H}(1s)$ в пределе удалённых атомов) и конечное состояние электрона и расположены на вещественных значениях R соответствующих скрытых пересечений. Три перехода такого рода происходят на межъядерных расстояниях 1,5, 4 и 7 а.е. (мы рассматриваем резонансный канал $\text{Li}^{3+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{Li}^{2+}(n=3) + \text{H}^+$, ответственный за изотопический эффект). Переход, происходящий при $\text{Re } R = 1,5$ а.е., не даёт вклада в процесс перезарядки, так как соответствующее скрытое пересечение принадлежит

S-серии (так называемое "супервыдвижение" адиабатического термина в континуум [13, 170]). Такое взаимодействие связывает пары электронных состояний $E_{nlm}(R)$ и $E_{n+1,lm}(R)$ и приводит к процессу ионизации в адиабатическом приближении. Два других перехода приводят к изменению зарядового состояния, и переход между состояниями $3d_\sigma$ и $4f_\sigma$ является основным радиальным переходом резонансного канала.

Вращательное взаимодействие, связанное с вращением межъядерной оси при тесных столкновениях, вызывает переходы между электронными состояниями $E_{nlm}(R)$ и $E_{nlm\pm 1}(R)$, вырожденными в пределе объединённого атома. Потенциальные кривые этих состояний имеют точное пересечение при комплексных значениях R ($\text{Re } R = 0$). На рисунке 21а эти переходы показаны стрелками Rot, расположенными на произвольных значениях R . Вращательный переход $3d_\sigma - 3d_\pi$ является переходом, который вызывает изотопический эффект в реакции (87).

Для расчёта сечений используется программа ARSENY, созданная на основе метода скрытых переходов [171]. В адиабатическом приближении радиальные неупругие переходы происходят в областях наибольшего сближения потенциальных кривых и раскладываются на последовательность отдельных двухуровневых переходов через скрытые пересечения. Сначала находятся адиабатические потенциальные кривые как решение двух-центральной кулоновской задачи в комплексной плоскости R . Затем с помощью программы находятся все точки ветвления и вычисляются соответствующие параметры

Штюкельберга:

$$A_{pq} = \left| \text{Im} \int_{\text{Re } R_c}^{R_c} \left[E_p(R) - E_q(R) \right] \frac{dR}{v(R, b)} \right|, \quad (88)$$

где p и q образуют набор квантовых чисел, E_p и E_q — энергии конечного и начального состояний электрона, R_c — комплексная точка ветвления, $v(R, b)$ — радиальная межъядерная скорость, b — прицельный параметр.

Вероятность P_{pq} как функция прицельного параметра рассчитывается для всей совокупности неадиабатических переходов как

$$P_{pq} = \exp(-2A_{pq}). \quad (89)$$

После этого рассчитывается S -матрица как произведение элементарных S -матриц для отдельных переходов, индуцированных различными точками ветвления. Стартуя с начальной S -матрицы $S_{ij}^{(n)} = \delta_{ij}$, определяем изменение S -матрицы, вызванное n -м переходом между состояниями p и q , индуцированным точкой ветвления на межъядерном расстоянии R_c , следующим образом:

$$S_{ip}^{(n)} = S_{ip}^{(n-1)}(1 - P_{pq}) + S_{iq}^{(n-1)}P_{pq}, \quad (90)$$

$$S_{iq}^{(n)} = S_{iq}^{(n-1)}(1 - P_{pq}) + S_{ip}^{(n-1)}P_{pq}. \quad (91)$$

Интегрируя S -матрицу по прицельному параметру, мы, наконец, получаем полный набор сечений между произвольными начальными и конечными состояниями:

$$\sigma_{qq} = 2\pi \int_0^\infty |1 - S_{qq}|^2 b db \quad (92)$$

для упругого рассеяния и

$$\sigma_{pq} = 2\pi \int_0^\infty |S_{pq}|^2 b db \quad (93)$$

для неупругого перехода, где S_{pq} — элементы S -матрицы. Для нахождения амплитуды перехода с изменением m , обусловленного вращательным взаимодействием, численно решалось нестационарное уравнение Шрёдингера с кулоновской траекторией ядер в приближении объединённого атома. Вращательное взаимодействие учитывается при выполнении следующего условия: межъядерное расстояние должно быть меньше, чем

$$R_{\max} = \frac{(l + 1/2)^2}{Z_1 + Z_2}, \quad (94)$$

где l — орбитальный момент электрона, Z_1 и Z_2 — заряды ядер. Это условие определяет границу области объединённого атома. Поскольку угол рассеяния

$$\chi = 2 \arctan \frac{Z_1 Z_2}{\mu b v^2} \quad (95)$$

зависит от приведённой массы μ , траектории тяжёлых частиц в реакциях с Н, Д и Т различаются. Это, в свою очередь, приводит к различию в соответствующих сечениях перезарядки. Амплитудой вращательного перехода является решение нестационарного уравнения Шрёдингера ($b < R_{\max}$ и $R_{\max} > R_{\text{clmb}}$, где R_{clmb} — межъядерное

расстояние, соответствующее наибольшему сближению):

$$i\dot{a}_m - E_m a_m + i \sum_{m'=-l}^l \left\langle \varphi_{nlm} \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_{nlm'} \right\rangle a_{m'} = 0. \quad (96)$$

Здесь

$$E_m = 3Dm^2 R^2, \quad (97)$$

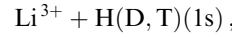
$$D = \frac{Z_1 Z_2 (Z_1 + Z_2)^2}{n^3 l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)}, \quad (98)$$

$$\begin{aligned} \sum_{m'=-l}^l \left\langle \varphi_{nlm} \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_{nlm'} \right\rangle = \\ = \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \left[\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \delta_{m', m-1} + \right. \\ \left. + \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \delta_{m', m+1} \right], \quad (99) \end{aligned}$$

φ_{nlm} — адиабатические волновые функции. В программе ARSENY φ_{nlm} выражаются через сферические функции в неподвижной системе координат с помощью d -функции Вигнера [13, 170].

7.2.3. Результаты расчётов и их обсуждение. Программа ARSENY, используемая для численных расчётов, основана на теоретическом подходе, описанном в [171]. Такой подход справедлив, когда энергия системы $\varepsilon = \mu v^2/2$ намного выше, чем электронная энергия начального состояния. Это условие определяет нижний предел энергии столкновения для рассматриваемых реакций: $E \geq 10$ эВ/н.

Полные сечения перезарядки реакций



рассчитанные при помощи программы ARSENY, показаны на рис. 21б. Показано также сечение, рассчитанное без учёта вращательного взаимодействия P^R . Как видно из рисунка, вращательная связь начинает давать вклад в сечения, когда энергия становится ниже 10 кэВ/н. Этот вклад растёт с уменьшением энергии, и его величина больше для более тяжёлого изотопа. Сравнение с экспериментальными данными [199] даёт хорошее согласие с результатами расчётов для реакции с Н. При дальнейшем уменьшении энергии влияние вращательной связи уменьшается. Для энергий ниже 60 эВ/н сечение, соответствующее реакции с Н, определяется только радиальной связью, в то время как основной вклад в сечения для Д и Т всё ещё даёт вращательное взаимодействие. Это можно объяснить тем, что при столкновении иона Li^{3+} с водородной мишенью межъядерное расстояние R_t (точка поворота), которое удовлетворяет условию [189]

$$\varepsilon = \frac{(L + 1/2)^2}{2\mu R_t^2} + \frac{Z_1 Z_2}{R_t}, \quad (100)$$

больше, чем $R_{\max}$ (94), и для таких энергий столкновения ион Li^{3+} не достигает области, где возникает вращательное взаимодействие.

На рисунке 21в, г показана вероятность захвата на уровень $n = 3$ иона Li^{2+} (резонансный канал) в зависимости от прицельного параметра для реакции (87), усреднённая по осцилляциям Штюкельберга. Эти вероятности соответствуют энергиям столкновения $E_1 = 0,04$ кэВ/н и

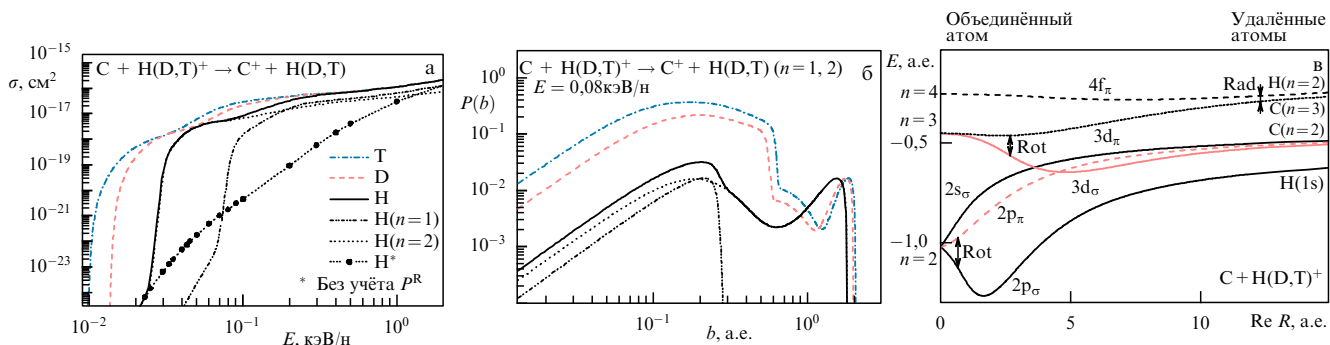
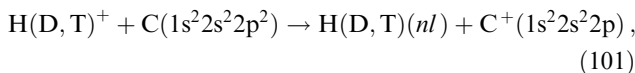


Рис. 22. (См. в цвете онлайн.) (а) Полное сечение перезарядки как функция энергии столкновения, рассчитанное с учётом и без учёта вращательного взаимодействия P^R . (б) Вероятность как функция прицельного параметра. (в) Потенциальные кривые, описывающие процесс перезарядки $H^+ + C(1s^2 2s^2 2p^2)$ как функции межъядерного расстояния.

$E_2 = 0,1$ кэВ/н, обозначенным на рис. 21б. При энергии E_1 вероятности перезарядки для мишеней D и T определены вероятностями вращательных переходов $3d_\sigma - 3d_\pi$, а для H вероятность близка к нулю и совпадает с вероятностью, рассчитанной без учёта вращательного взаимодействия. Из рисунка видно, что для тритиевой мишени вращательная связь влияет на сечения перезарядки в более широком диапазоне прицельных параметров, чем при столкновениях с дейтериевой мишенью. Для энергии E_2 в столкновениях с водородной мишенью ион также попадает в область вращательной связи, и все три вероятности соответствуют вращательным переходам.

В работе [197] изучен обратный процесс:



для которого сечения и вероятности перезарядки были рассчитаны с эффективным зарядом $Z_{\text{eff}} = 1,86$ для начального состояния электрона $2p$ в атоме C. Для расчёта эффективного заряда использовалась программа CDW [54], основанная на приближении искажённых кулоновских волн. Результаты расчётов приведены на рис. 22. В этом случае основной вклад в полное сечение дают два канала с конечными состояниями $H(D, T)(n=1)$ и $H(D, T)(n=2)$: для более низких ($n=2$) и более высоких ($n=1$) энергий столкновения, при которых вращательное взаимодействие играет основную роль. Этот факт проявляется в немонотонном поведении сечения.

Вклад каждого канала в полное сечение для иона H⁺ показан на рис. 22а. Электронные энергии состояний, дающих вклад в изотопический эффект в процессе перезарядки (101), представлены на рис. 22в. Начальные состояния электрона $2p_0$ и $2p_1$ в атоме C соответствуют состояниям $3d_\sigma$ и $2p_\pi$ в пределе объединённого атома. Переход из начального состояния $C(2p_1)$ в конечное состояние $H(D, T)(1s_0)$ ($2p_\sigma$ в пределе объединённого атома) происходит за счёт вращательного перехода $2p_\pi - 2p_\sigma$. Вращательный переход $3d_\sigma - 3d_\pi$ и последующий радиальный переход $3d_\pi - 4f_\pi$, который происходит при $R = 13,7$ а.е., обуславливают переход в конечное состояние $H(D, T)(n=2)$ (состояние $4f_\pi$ соответствует состоянию $H(D, T)(2p_1)$ в пределе удалённых атомов).

На рисунке 22б показана вероятность перезарядки в зависимости от прицельного параметра для энергии столкновения $E = 0,08$ кэВ/н. При этой энергии все три

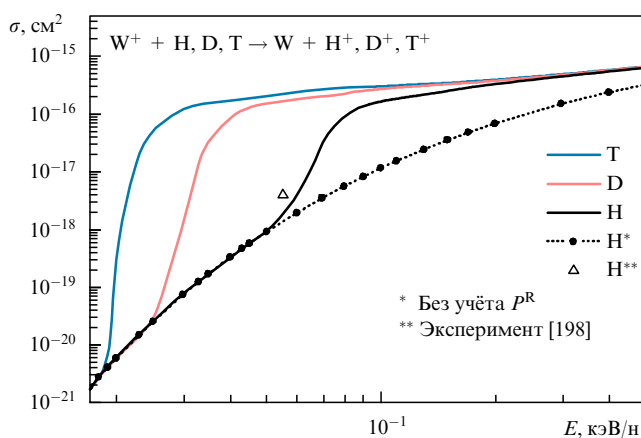
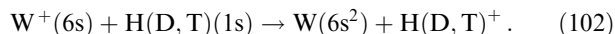


Рис. 23. (См. в цвете онлайн.) Полное сечение перезарядки как функция энергии столкновения, рассчитанное с учётом и без учёта вращательного взаимодействия P^R , для реакции $W^+(6s) + H(D, T)(1s)$.

иона достигают области вращательного взаимодействия. Вклады каналов $n = 1$ и $n = 2$ показаны для иона H⁺.

На рисунке 23 приведены полные сечения перезарядки для реакции



В настоящее время этот процесс вызывает большой интерес, так как вольфрам ($Z = 74$) выбран перспективным элементом для покрытия стенок токамака и его дивертора в проекте ITER, где будет использоваться тритиевая плазма. Такой процесс играет важную роль в зарядовом распределении, радиационном охлаждении и переносе частиц в низкотемпературной плазме (пристеночной плазме и плазме дивертора). Сравнение рассчитанных и экспериментальных данных показывает хорошее согласие в случае реакции с водородной мишенью [198].

Анализируя полученные данные, можно заключить, что изотопический эффект становится ярко выраженным, если реакция перезарядки имеет резонансный или квазирезонансный канал, т.е. если энергии начального и конечного состояний электронов в точности равны или отличаются на очень малую величину. В этом случае при энергиях столкновения, удовлетворяющих условию $R_t < R_{\text{max}}$ (уравнения (100) и (94)), вращательное взаимо-

действие преобладает над радиальным, вращательные переходы дают основной вклад в полное сечение перезарядки и наблюдается изотопический эффект. Существенная разница в сечениях реакций с H, D и T (несколько порядков величины) указывает на необходимость учёта изотопического эффекта при моделировании пристеночной плазмы и плазмы дивертора в установках, использующих изотопы водорода.

8. Заключение

Развитие ускорительной техники и методов пучковой диагностики плазмы в последние годы вызвали повышенный интерес к теоретической физике атомных столкновений с участием тяжёлых многоэлектронных атомов и ионов, причём особенно востребованными оказались данные по эффективным сечениям процессов с изменением зарядового состояния сталкивающихся частиц — перезарядки и обдирки. Получение новых экспериментальных результатов по сечениям на самых мощных ускорителях способствовало появлению новых теоретических моделей и соответствующих компьютерных программ. Характерной особенностью таких атомных систем является роль электронов внутренних оболочек: во многих случаях они играют основную роль, а вклад внешних электронных оболочек становится пренебрежимо малым. Влияние электронов внутренних оболочек приводит к изменению законов масштабирования (скелирования) сечений по атомным параметрам. Часть настоящего обзора и посвящена указанным вопросам, хотя много проблем ждут своего решения в будущем. Есть нерешённые проблемы и для экспериментального исследования, например, изучение процессов обдирки при релятивистских энергиях $E > 200$ МэВ/н, при которых экспериментальные данные практически отсутствуют. В этом плане перспективным является начавшийся в 2011 г. Международный проект FAIR, согласно которому тяжёлые ионы типа U^{28+} будут ускоряться до релятивистских энергий ~ 10 ГэВ/н и можно будет исследовать их спектроскопические и столкновительные свойства.

Другой интересный аспект современной физики атомных столкновений, рассмотренный в данном обзоре, — исследование влияния изотопического эффекта на процессы резонансной и квазирезонансной перезарядки ионов на изотопах водорода (H, D и T) при низких энергиях. Такие процессы, по-видимому, будут находиться в центре внимания в ближайшем будущем при исследовании D–T-плазмы по двум основным причинам. Во-первых, эти процессы являются главным механизмом образования в плазме примесных ионов в возбуждённых состояниях, радиационный распад которых используется для диагностики плазмы. Во-вторых, важную роль в настоящее время играет взаимодействие атомов и ионов вольфрама ($Z = 74$) с частицами плазмы и изотопами водорода в связи с тем, что вольфрам признан наиболее перспективным элементом для изготовления стенок и дивертора в плазменных установках с магнитным удержанием. Следует отметить, что обычные законы скелирования сечений перезарядки при медленных столкновениях с изотопами водорода неприменимы, а влияние изотопического эффекта на сечения резонансной и квазирезонансной перезарядки огромно (достигает трёх и более порядков величины), и поэтому

рассмотрение таких процессов требует особого внимания.

Авторы признательны В.С. Лебедеву и А.А. Наричу за обсуждение рукописи и полезные замечания.

Список литературы

1. Bates D R *Atomic and Molecular Processes* (New York: Academic Press, 1962) [Бейтс Д (Ред.) *Атомные и молекулярные процессы* (М.: Мир, 1964)]
2. Bethe H A *Intermediate Quantum Mechanics* (New York: W.A. Benjamin, 1964)
3. Mott N F, Massey H S W *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford: Clarendon Press, 1965) [Мотт Н, Мессис Г *Теория атомных столкновений* (М.: Мир, 1969)]
4. Пресняков Л П *УФН* **119** 49 (1976) [Presnyakov L P *Sov. Phys. Usp.* **19** 387 (1976)]
5. Вайнштейн Л А, Собельман И И, Юков Е А *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий* (М.: Наука, 1979) [Sobelman I I, Vainshtein L A, Yukov E A *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Line* (Berlin: Springer-Verlag, 1981)]
6. Смирнов Б М *УФН* **133** 569 (1981) [Smirnov B M *Sov. Phys. Usp.* **24** 251 (1981)]
7. Janev R K, Presnyakov L P *Phys. Rep.* **70** 1 (1981)
8. Пресняков Л П, Шевелько В П, Янев Р К *Элементарные процессы с участием многозарядных ионов* (М.: Энергоатомиздат, 1986)
9. Вайнштейн Л А, Шевелько В П *Структура и характеристики ионов в горячей плазме* (М.: Наука, 1986)
10. Janev R K et al. *Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasmas* (Springer Series on Atoms + Plasmas, Vol. 4) (Berlin: Springer-Verlag, 1987)
11. Никитин Е Е, Смирнов Б М *Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями* (М.: Наука, 1988)
12. Парилис Э С и др. *Оже-процессы при атомных столкновениях* (Отв. ред. О Б Фирсов) (Ташкент: ФАН, 1989)
13. Соловьев Е А *УФН* **157** 437 (1989) [Solov'ev E A *Sov. Phys. Usp.* **32** 228 (1989)]
14. Никитин Е Е, Смирнов Б М *Медленные атомные столкновения* (М.: Энергоатомиздат, 1990)
15. Fritsch W, Lin C D *Phys. Rep.* **202** 1 (1991)
16. Bransden B H, McDowell M R C *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions* (Oxford: Clarendon Press, 1992)
17. Janev R K (Ed.) *Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasmas* (New York: Plenum Press, 1995)
18. Lebedev V S, Beigman I L *Physics of Highly Excited Atoms and Ions* (Springer Series on Atoms + Plasmas, Vol. 22) (Berlin: Springer-Verlag, 1998)
19. Beyer H F, Shevelko V P (Eds) *Atomic Physics with Heavy Ions* (Springer Series on Atoms + Plasmas, Vol. 26) (Berlin: Springer, 1999)
20. Смирнов Б М *УФН* **171** 233 (2001) [Smirnov B M *Phys. Usp.* **44** 221 (2001)]
21. Stolterfoht N, DuBois R D, Rivarola R D *Electron Emission in Heavy-Ion-Atom Collisions* (Springer Series on Atoms + Plasmas, Vol. 20) (Berlin: Springer, 1997)
22. Beyer H F, Shevelko V P *Introduction to the Physics of Highly Charged Ions* (Bristol: IOP Publ., 2003)
23. Currell F J (Ed.) *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions* (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2003)
24. Shevelko V, Tawara H (Eds) *Atomic Processes in Basic and Applied Physics* (Springer Ser. on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Vol. 68) (Berlin: Springer-Verlag, 2012)
25. Sharkov B Yu *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **577** 14 (2007)
26. Logan B G, Perkins L J, Barnard J J *Phys. Plasmas* **15** 072701 (2008)
27. Geissel H et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **195** 3 (2002)
28. Hickok R L *Rev. Sci. Instrum.* **38** 142 (1967)
29. Geissel H, Münzenberg G, Riisager K *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **45** 163 (1995)
30. Mazing M A et al. *Phys. Rev. A* **32** 3695 (1985)
31. Фортвов В Е, Хоффманн Д, Шарков Б Ю *УФН* **178** 113 (2008) [Fortov V E, Hoffmann D H H, Sharkov B Yu *Phys. Usp.* **51** 109 (2008)]
32. Dennerl K *Space Sci. Rev.* **157** 57 (2010)
33. Amaldi U, Kraft G *Europhys. News* **36** 114 (2005)

34. Nikoghosyan A et al. *Int. J. Radiat. Oncology Biol. Phys.* **58** 89 (2004)
35. FAIR Baseline Technical Report (2006), <http://www.fair-center.eu/for-users/publications/fair-publications.html>
36. Betz H-D *Rev. Mod. Phys.* **44** 465 (1972)
37. Isler R C *Plasma Phys. Control. Fusion* **36** 171 (1994)
38. Cantrell C D, Scully M O, in *Progress in Lasers and Laser Fusion* (Studies in the Natural Sciences, Vol. 8, Eds A Perlmutter, S M Widmayer) (New York: Plenum Press, 1975) p. 147
39. Rocca J J *Rev. Sci. Instrum.* **70** 3799 (1999)
40. Mokler P H, Stöhlker Th *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **37** 297 (1996)
41. Каминский А К, Васильев А А *ЭЧАЯ* **29** 489 (1998) [Kaminskii A K, Vasil'ev A A *Phys. Part. Nucl.* **29** 201 (1998)]
42. Omet C et al. *New J. Phys.* **8** 284 (2006)
43. Eichler J, Stöhlker Th *Phys. Rep.* **439** 1 (2007)
44. Erb W, GSI Report P-7-78 (Darmstadt: GSI, 1978)
45. Perumal A Net al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **227** 251 (2005)
46. Фаддеев Л Д *Труды МИАН* **69** 3 (1963)
47. Пресняков Л П, Уланцев А Д *Квантовая электроника* **1** 2377 (1974) [Presnyakov L P, Ulansev A D *Sov. J. Quantum Electron.* **4** 1320 (1974)]
48. Пресняков Л П, Усков Д Б, Янев Р К *ЖЭТФ* **83** 933 (1982) [Presnyakov L P, Uskov D B, Janev R K *Sov. Phys. JETP* **56** 525 (1982)]
49. Wu Y et al. *Phys. Rev. A* **84** 022711 (2011)
50. Никулин В К, Гущина Н А *ЖТФ* **77** (2) 8 (2007) [Nikulin V K, Guschina N A *Tech. Phys.* **52** 148 (2007)]
51. Чибисов М И *Письма в ЖЭТФ* **24** 56 (1976) [Chibisov M I *JETP Lett.* **24** 46 (1976)]
52. Olson R E, Salop A *Phys. Rev. A* **14** 579 (1976)
53. Bárány A, Setterlind C J *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **98** 184 (1995)
54. Ryufuku H, Watanabe T *Phys. Rev. A* **20** 1828 (1979)
55. Belkić Dž, Mančev I, Hanssen J *Rev. Mod. Phys.* **80** 249 (2008)
56. Tupitsyn I I et al. *Phys. Rev. A* **82** 042701 (2010)
57. Thwaites D I *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **12** 84 (1985)
58. Belkić Dž, Gayet R, Salin A *Comput. Phys. Commun.* **23** 153 (1981)
59. Belkić Dž, Gayet R, Salin A *Comput. Phys. Commun.* **32** 385 (1984)
60. Olson R E, Ullrich J, Schmidt-Böcking H *Phys. Rev. A* **39** 5572 (1989)
61. Stöhlker T et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **25** 4527 (1992)
62. Perez J A, Olson R E, Beiersdorfer P J *Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **34** 3063 (2001)
63. Blank I et al. *Phys. Rev. A* **85** 022712 (2012)
64. Eichler J, Chan F T *Phys. Rev. A* **20** 104 (1979)
65. Shevelko V P et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **37** 201 (2004)
66. Schlachter A S et al. *Phys. Rev. A* **27** 3372 (1983)
67. Shevelko V P et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **268** 2611 (2010)
68. Olson R E et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **35** 1893 (2002)
69. Alonso J, Gould H *Phys. Rev. A* **26** 1134 (1982)
70. Cocke C L, Olson R E *Phys. Rep.* **205** 153 (1991)
71. Knudsen H, Haugen H K, Hvelplund P *Phys. Rev. A* **24** 2287 (1981)
72. Bates D R, Griffing G W *Proc. Phys. Soc. A* **68** 90 (1955)
73. Матвеев В И, Сидоров Д Б *ЖТФ* **77** (7) 18 (2007) [Matveev V I, Sidorov D B *Tech. Phys.* **52** 839 (2007)]
74. Shevelko V P, Litsarev M S, Tawara H *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **41** 115204 (2008)
75. Shevelko V P, Tolstikhina I Yu, Stöhlker Th *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **184** 295 (2001)
76. Shevelko V P et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **269** 1455 (2011)
77. Carlson T A et al. *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **2** 63 (1970)
78. Desclaux J P *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **12** 311 (1973)
79. Zschornack G, Musiol G, Wagner W "Dirac-Fock-Slater X-ray energy shifts and electron binding energy changes for all ion ground states in elements up to uranium", Preprint ZfK-574 (Rossendorf bei Dresden: Zentralinstitut für Kernforschung, 1986)
80. Rashid K, Saadi M Z, Yasin M *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **40** 365 (1988)
81. Gröbner O et al. (GSI/CERN Collab.) (Darmstadt: GSI, 1993), unpublished
82. Franzke B *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **28** 2116 (1981)
83. DuBois R D et al. *Phys. Rev. A* **70** 032712 (2004)
84. Müller C, Voitkiv A B, Grün N *Phys. Rev. A* **66** 012716 (2002)
85. Shevelko V P et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **278** 63 (2012)
86. Eichler J, Meyerhof W E *Relativistic Atomic Collisions* (San Diego: Academic Press, 1995)
87. Voitkiv A B *Phys. Rep.* **392** 191 (2004)
88. Voitkiv A, Ullrich J *Relativistic Collisions of Structured Atomic Particles* (Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, Vol. 49) (Berlin: Springer, 2008)
89. Voitkiv A B, Najjari B, Surzhykov A *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **41** 111001 (2008)
90. Najjari B, Surzhykov A, Voitkiv A B *Phys. Rev. A* **77** 042714 (2008)
91. Бейгман И Л, Толстихина И Ю, Шевелько В П *ЖТФ* **78** (5) 15 (2008) [Beigman I L, Tolstikhina I Yu, Shevelko V P *Tech. Phys.* **53** 547 (2008)]
92. Андреев С Н и др. *Краткие сообщения по физике ФИАН* **35** (3) 39 (2008) [Andreev S N et al. *Bull. Lebedev Phys. Inst.* **35** 89 (2008)]
93. Bethe H, in *Handbuch der Physik* Vol. 34 (Berlin: Springer, 1933) p. 273
94. Anholt R et al. *Phys. Rev. A* **32** 3302 (1985)
95. Davidovic D M et al. *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **11** 847 (1978)
96. Jackson J D *Classical Electrodynamics* (New York: Wiley, 1975)
97. Bertulani C A, Baur G *Phys. Rep.* **163** 299 (1988)
98. Baur G et al. *Phys. Rev. A* **80** 012713 (2009)
99. Tolstikhina I Yu, Shevelko V P *Письма в ЖЭТФ* **94** 157 (2011) [*JETP Lett.* **94** 152 (2011)]
100. Olson R E et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **37** 4539 (2004)
101. Bohr N *Philos. Mag.* **30** 581 (1915)
102. Cocke C L *Phys. Rev. A* **20** 749 (1979)
103. Shevelko V P et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **43** 215202 (2010)
104. Salvat F et al. *Phys. Rev. A* **36** 467 (1987)
105. Song M-Y et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **267** 2369 (2009)
106. Olson R E et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **544** 333 (2005)
107. Crandall D H et al. *Phys. Rev. Lett.* **36** 858 (1976)
108. Klinger H, Muller A, Salzborn E *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **8** 230 (1975)
109. Müller A, Salzborn E *Phys. Lett. A* **62** 391 (1977)
110. Crandall D H, Phaneuf R A, Meyer F W *Phys. Rev. A* **22** 379 (1980)
111. Tawara H et al. *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **18** 337 (1985)
112. Müller A et al. *Phys. Rev. A* **33** 3010 (1986)
113. Selberg N, Biedermann C, Cederquist H *Phys. Rev. A* **54** 4127 (1996)
114. Selberg N, Biedermann C, Cederquist H *Phys. Rev. A* **56** 4623 (1997)
115. Suzuki K, Okuno K, Kobayashi N *Phys. Scripta* **1997** (T73) 172 (1997)
116. Kimura M et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **28** L643 (1995)
117. Nakamura N et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **28** 2959 (1995)
118. Sakaue H A et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **37** 403 (2004)
119. Bräuning H et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 168301 (2003)
120. Zettergren H et al. *Eur. Phys. J. D* **38** 299 (2006)
121. Wethekam S et al. *Phys. Rev. B* **81** 121416(R) (2010)
122. Narits A A *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **41** 135102 (2008)
123. Bohr N, Lindhard J *Danske Videnskab. Selskab. Math.-Fys. Medd.* **28** (7) (1954)
124. Bárány A et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **9** 397 (1985)
125. Niehaus A *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **19** 2925 (1986)
126. Harel C, Jouin H *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **25** 221 (1992)
127. Chen Z, Shingal R, Lin C D *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **24** 4215 (1991)
128. Hansen J P, Taulbjerg K *Phys. Rev. A* **45** R4214 (1992)
129. Nikulin V K, Guschina N A *Phys. Scripta* **1997** (T71) 134 (1997)
130. Sidorovich V A, Nikolaev V S, McGuire J H *Phys. Rev. A* **31** 2193 (1985)
131. Cederquist H et al. *Phys. Rev. A* **61** 022712 (2000)
132. Watson R L et al. *Phys. Rev. A* **67** 022706 (2003)
133. Mueller D et al. *Phys. Plasmas* **8** 1753 (2001)
134. Russek A, Meli J *Physica* **46** 222 (1970)
135. DuBois R D et al. *Phys. Rev. A* **68** 042701 (2003)
136. Santos A C F, DuBois R D *Phys. Rev. A* **69** 042709 (2004)
137. Rost J M, Pattard T *Phys. Rev. A* **55** R5 (1997)
138. Weber G et al. *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **12** 084201 (2009)
139. Lassen N O *Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd.* **26** (5) (1951)
140. Lassen N O *Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd.* **26** (12) (1951)
141. Geissel H et al. *Phys. Lett. A* **99** 77 (1983)
142. Betz H D, Grodzins L *Phys. Rev. Lett.* **25** 211 (1970)
143. Miyoshi T et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **258** 329 (2007)

144. Fettouhi A et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **245** 32 (2006)
145. Ogawa H et al. *Phys. Rev. A* **75** 020703(R) (2007)
146. Eisenbarth S et al. *Laser Part. Beams* **25** 601 (2007)
147. Ryding G, Betz H D, Wittkower A *Phys. Rev. Lett.* **24** 123 (1970)
148. Woods C J et al. *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **17** 867 (1984)
149. Shevelko V P et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **38** 2675 (2005)
150. Klein O, Rosseland S Z. *Phys.* **4** 46 (1921)
151. Валь Х и др. *Краткие сообщения по физике ФИАН* (8) 28 (2001)
152. Krämer A et al., in *Proc. of the 8th European Particle Accelerator Conf., EPAC 2002, Paris, 3–7 June 2002* (Geneva: EPS-IGA, CERN, 2002) p. 2547; <http://accelconf.web.cern.ch/accelconf/e02/PAPERS/WEPLE116.pdf>
153. Spiller P et al., GSI Scientific Report 2010 (Darmstadt: GSI, 2011) p. 270
154. Born M, Oppenheimer R *Ann. Physik* **84** 457 (1927)
155. Born M, Fock V Z. *Phys.* **51** 165 (1928)
156. Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **1** 88 (1932)
157. Дыхне А М *ЖЭТФ* **41** 1324 (1961) [Dykhne A M *Sov. Phys. JETP* **14** 941 (1962)]
158. Zener C *Proc. R. Soc. Lond. A* **137** 696 (1932)
159. Stueckelberg E C G *Helv. Phys. Acta* **5** 369 (1932)
160. Смирнов Б М *Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме* (М.: Атомиздат, 1968)
161. Никитин Е Е *Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах* (М.: Химия, 1970) [Nikitin E E *Theory of Elementary Atomic and Molecular Processes in Gases* (Oxford: Clarendon Press, 1974)]
162. Никитин Е Е *Теория элементарных атомно-молекулярных реакций* Ч. 1, 2 (Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та, 1970, 1974)
163. Никитин Е Е, Смирнов Б М *УФН* **124** 201 (1978) [Nikitin E E, Smirnov B M *Sov. Phys. Usp.* **21** 95 (1978)]
164. Никитин Е Е, Уманский С Я *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях* (М.: Атомиздат, 1979) [Nikitin E E, Umanskii S Ya *Theory of Slow Atomic Collisions* (Berlin: Springer-Verlag, 1984)]
165. Демков Ю Н *ЖЭТФ* **45** 195 (1963) [Demkov Yu N *Sov. Phys. JETP* **18** 138 (1964)]
166. Никитин Е Е *Оптика и спектроскопия* **13** 761 (1962) [Nikitin E E *Opt. Spectrosc.* **13** 431 (1962)]
167. Ошеров В И *ЖЭТФ* **49** 1157 (1965) [Osherov V I *Sov. Phys. JETP* **22** 804 (1965)]
168. Демков Ю Н *ДАН СССР* **166** 1076 (1966) [Demkov Yu N *Sov. Phys. Dokl.* **11** (8) 138 (1966)]
169. Демков Ю Н, Ошеров В И *ЖЭТФ* **53** 1589 (1967) [Demkov Yu N, Osherov V I *Sov. Phys. JETP* **26** 916 (1968)]
170. Solov'ev E A *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **38** R153 (2005)
171. Solov'ev E A, in *Workshop on Hidden Crossings in Ion-Collisions and in Other Nonadiabatic Transitions* (Cambridge: Harvard Smithsonian Centre for Astrophysics, 1991)
172. Комаров И В, Пономарев Л И, Славянов С Ю *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции* (М.: Наука, 1976)
173. Esry B D et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **26** 1579 (1993)
174. Blanco S A, Falcon C A, Piacentini R D *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **19** 3945 (1986)
175. Krstić P S et al. *Phys. Rev. A* **70** 042711 (2004)
176. Toshima N, Tawara H, NIFS-DATA-026 (Nagoya: NIFS, 1995)
177. Zhang P et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 19026 (2011)
178. Chen C Y et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **34** 469 (2001)
179. Deumens E et al. *Rev. Mod. Phys.* **66** 917 (1994)
180. Igarashi A, Lin C D *Phys. Rev. Lett.* **83** 4041 (1999)
181. Kado S et al., in *Proc. of the 19th Intern. Conf. on Plasma-Surface Interaction, San Diego, May 24–28, 2010*
182. Kado S et al. *J. Plasma Fusion Res.* **81** 810 (2005)
183. Фирсов О Б *ЖЭТФ* **21** 1001 (1951)
184. Матвеев А В, Пономарев Л И *ЖЭТФ* **68** 920 (1975) [Matveenko A V, Ponomarev L I *Sov. Phys. JETP* **41** 456 (1975)]
185. Hunter G, Kuriyan M *Proc. R. Soc. Lond. A* **353** 575 (1977)
186. Tolstikhina I Yu, Kato D *Phys. Rev. A* **82** 032707 (2010)
187. Rosen N, Zener C *Phys. Rev.* **40** 502 (1932)
188. Овчинников С Ю, Соловьев Е А *ЖЭТФ* **90** 921 (1986) [Ovchinnikov S Yu, Solov'ev E A *Sov. Phys. JETP* **63** 538 (1986)]
189. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1989) [Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press, 1977)]
190. Macek J H, Krstić P S, Ovchinnikov S Yu *Phys. Rev. Lett.* **93** 183203 (2004)
191. Ostrovsky V N *Phys. Rev. A* **61** 032505 (2000)
192. Tolstikhin O I, Namba C *Phys. Rev. A* **60** 5111 (1999)
193. Stolterfoht N et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 103201 (2007)
194. Grozdanov T P, Solov'ev E A *Phys. Rev. A* **42** 2703 (1990)
195. Stolterfoht N et al. *Phys. Rev. A* **81** 052704 (2010)
196. Cabrera-Trujillo R et al. *Phys. Rev. A* **83** 012715 (2011)
197. Tolstikhina I Yu, Kato D, Shevelko V P *Phys. Rev. A* **84** 012706 (2011)
198. Tolstikhina I Yu et al. *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **45** 145201 (2012)
199. Seim W et al. *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **14** 3475 (1981)

Collision processes involving heavy many-electron ions interacting with neutral atoms

I.Yu. Tolstikhina, V.P. Shevelko

*P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences,
Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation
Tel. +7 (499) 132 67 15. E-mail: inga@sci.lebedev.ru
Moscow Institute of Physics and Technology (State University),
Institutskii per. 9, 141700 Dolgoprudnyi, Moscow region, Russian Federation*

V.P. Shevelko

*P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences,
Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation
Tel. +7 (499) 783 36 84. E-mail: shev@sci.lebedev.ru*

An overview is given of experimental data on and methods for the calculation of effective cross sections for charge-exchange (electron capture) and electron-loss (projectile ionization) processes involving heavy many-electron ions (like Xe^{q+} , Pb^{q+} , W^{q+} , U^{q+}) colliding with neutral atoms (H, He, N, Ne, Ar, Kr, Xe) at energies E ranging from low (≈ 10 keV/u) to relativistic (≈ 10 GeV/u). Because these charge-changing processes occur with a high probability (cross-section values reach up to 10^{-14} – 10^{-16} cm² at the maximum), they strongly influence the kinetics of laboratory and astrophysical plasmas as well as determining ion beam lifetimes in accelerators. The paper also discusses multielectron capture and loss processes which, for heavy projectiles, increase in importance to account for up to and over 50% of the total cross section. Also covered are the influence of the inner-shell electrons of both colliding systems and the role of isotopic effects in the electron capture of very slow ($E = 10$ – 100 eV/u) ions on the hydrogen isotopes H, D, and T. A brief description is given of suitable computer programs for calculating electron-capture and electron-loss cross sections for complex atoms and ions over a wide range of collision energies.

PACS numbers: **34.10.+x**, **34.50.Fa**, **34.70.+e**
Bibliography — 199 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **183** (3) 225–255 (2013)

DOI: 10.3367/UFNr.0183.201303a.0225
Received 26 March 2012, revised 19 April 2012
Physics – Uspekhi **56** (3) (2013)