

СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ РЕЛЯТИВИСТСКИМИ МНОГОЗАРЯДНЫМИ ИОНАМИ

Е. С. Гусаревич, В. И. Матвеев*

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

Поступила в редакцию 29 октября 2007 г.

На основе релятивистского обобщения приближения эйконала и метода шивки рассмотрено возбуждение и ионизация водородоподобных атомов из произвольного начального состояния дискретного спектра ударом голого релятивистского многозарядного иона. Для сечений возбуждения и ионизации получены асимптотические по скорости ($v \rightarrow c$, c — скорость света) и заряду ($Z \gg 1$) иона аналитические выражения, аналогичные формулам Бете.

PACS: 34.10.+x, 34.50.Fa

1. ВВЕДЕНИЕ

При проведении теоретических и экспериментальных исследований часто возникает необходимость в определении (оценке) сечений ряда изучаемых процессов. Это тем более актуально при проведении таких технически сложных и важных в прикладных аспектах исследований, как изучение столкновений тяжелых релятивистских многозарядных ионов с веществом. Известно [1], что трудно переоценить роль асимптотических формул Бете для сечений неупругих процессов и потерь энергии при столкновениях быстрых заряженных частиц с атомами. Параметры, входящие в эти формулы, либо могут быть рассчитаны, либо получены из эксперимента. Именно последнее совместно с простотой записи и интерпретации и обеспечивает исключительно широкую область применимости формул Бете. Основой для получения асимптотики Бете является теория возмущений, которая применима при $Z/v \ll 1$, где Z — заряд налетающей на атом частицы, v — относительная скорость столкновения (здесь и ниже используются атомные единицы). Однако, как отмечено в работах [2,3], для полей, создаваемых достаточно большими зарядами, теория возмущений становится неприменимой

даже при сколь угодно больших энергиях столкновения. В таких случаях приходится описывать исследуемые процессы непertурбативными методами, что заметно усложняет расчеты и делает не очевидной возможность получения аналитических формул для сечений исследуемых процессов. Сравнительно недавно появились работы [4–9], в которых на основе разработанного авторами непertурбативного метода был предложен общий способ получения асимптотических по скорости ($v \rightarrow c$, c — скорость света) и заряду ($Z \gg 1$) формул, аналогичных формулам Бете, для сечений возбуждения и ионизации атомов ударом тяжелых релятивистских многозарядных ионов. Формулы, полученные для водородоподобных и гелиеподобных атомов, оказались лишь незначительно сложнее формул Бете. Однако процедура вычисления параметров, входящих в эти формулы, оказалась довольно сложной и даже для водородоподобных атомов была выполнена лишь численно.

Целью данной работы является получение полностью аналитических формул, аналогичных формулам Бете, для сечений возбуждения и ионизации водородоподобных атомов из произвольного начального состояния дискретного спектра ударом голого релятивистского многозарядного иона. Эти формулы имеют следующую структуру:

1) для возбуждения (дипольно разрешенный пе-

*E-mail: gusarevich.eugeniy@pomorsu.ru

реход) и ионизации —

$$\sigma = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda \left(\ln \frac{2\alpha v^2 \gamma}{\eta Z \Omega} - \frac{\beta^2}{2} \right),$$

где λ, α, Ω — постоянные коэффициенты, зависящие от конкретного перехода,

$$\beta = \frac{v}{c}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \eta = e^{\gamma_e} = 1.781,$$

$\gamma_e = 0.577216$ — постоянная Эйлера;

2) для возбуждения (дипольно запрещенный переход) —

$$\sigma = A_0 \frac{Z^2}{v^2},$$

где A_0 — постоянная, определяемая типом перехода.

Приведенные выше формулы имеют более широкую область применимости по сравнению с формулами Бете, так как получены в рамках непертурбативного метода [4–9], основанного на релятивистском обобщении приближения эйконала и методе шивки, т. е. на заряды ионов никаких ограничений, связанных с применением теории возмущений, в данной работе не налагается. При $v \rightarrow c$ (большие γ) указанные выше сечения асимптотически приближаются к сечениям σ_B , рассчитываемым по формулам Бете, а именно

$$\frac{\sigma - \sigma_B}{\sigma} \sim \frac{1}{\ln \gamma}.$$

В настоящей работе получены аналитические выражения для сечений возбуждения водородоподобных атомов в состояния дискретного спектра, соответствующие одному и тому же главному квантовому числу n (по орбитальному моменту l конечного состояния и его проекции m подразумевается суммирование), из произвольного начального состояния того же спектра с главным квантовым числом n' и орбитальным l' (по проекции начального момента m' ведется усреднение) при взаимодействии с голым релятивистским многозарядным ионом. В качестве примера рассмотрены возбуждения атома водорода из состояний $1s, 2s$ и $2p$ в состояния с фиксированным n . Кроме того, получены аналитические формулы для сечений возбуждения водородоподобных атомов в состояния с фиксированными n и l (по m предполагается суммирование) из состояний с заданными n' и l' (по m' проводится усреднение). Рассмотрены сечения переходов в атоме водорода $1s \rightarrow 2s, 1s \rightarrow 2p, 2s \rightarrow 3s, 2s \rightarrow 3p, 2s \rightarrow 3d$ под действием удара иона. Представлены выражения для

сечений ионизации водородоподобных атомов релятивистскими многозарядными голыми ионами из состояний $1s, 2s, 2p$. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Рассмотрим столкновение голого релятивистского многозарядного иона с зарядом ядра Z и скоростью v с атомом водорода. Впоследствии все полученные формулы могут быть легко обобщены на случай столкновения иона с водородоподобным атомом. Будем считать, что атом покоится в начале системы координат, а ион движется вдоль оси x . Рассмотрим переход атома водорода из начального состояния $|i\rangle$ с энергией ε_i в конечное состояние $|f\rangle$ с энергией ε_f , вызванный столкновением с голым релятивистским многозарядным ионом. Далее под переходом $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ будем понимать переход из состояния, характеризуемого главным квантовым числом n' и орбитальным моментом l' (по начальным проекциям орбитального момента m' подразумевается усреднение) в любое состояние дискретного спектра с главным квантовым числом n ($n \neq n'$) и произвольным значением момента l и его проекции m . Для описания такого перехода воспользуемся непертурбативным методом [4–9], основанным на приближении эйконала и методе шивки. Суть этого метода заключается в следующем. Разобьем весь интервал $0 < b < \infty$ возможных значений параметра удара b на две области:

$$\text{А) } 0 < b < b_0, \quad \text{В) } b_0 < b < \infty, \quad (1)$$

соответствующие малым и большим параметрам удара, где

$$b_0 \approx \frac{v\gamma}{\Omega_{n'}^n}, \quad \Omega_{n'}^n = |\varepsilon_f - \varepsilon_i|,$$

$$\varepsilon_f = -\frac{1}{2n^2}, \quad \varepsilon_i = -\frac{1}{2n'^2}.$$

В области А малых параметров удара поле, создаваемое многозарядным ионом в точке нахождения атомного электрона, велико, поэтому для расчета сечения перехода $\sigma_{n'l'}$ в этой области применим приближение эйконала, позволяющее учесть сильное поле иона непертурбативным образом. В области В больших параметров удара поле иона является слабым, поэтому для расчета сечения в этой области воспользуемся теорией возмущений. Вычислив $\sigma_{n'l'}$ в каждой из областей (1) и сложив их, получим результирующее сечение.

Рассмотрим подробно вклад каждой области (1) в сечение.

А) Вклад области малых параметров удара $0 < b < b_0$.

Для нахождения вклада области $0 < b < b_0$ в сечение перехода атома водорода из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ при столкновении с голым релятивистским многозарядным ионом воспользуемся эйкональным приближением, которое, согласно работам [4–9], может быть записано в виде

$$\sigma_{n'l'}^n(b < b_0) = 2\pi \int_0^{b_0} \left| \langle f | 1 - \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{R}; \mathbf{r}) dX \right\} | i \rangle \right|^2 b db. \quad (2)$$

Здесь рассеивающий кулоновский потенциал

$$U(\mathbf{R}; \mathbf{r}) = \frac{Z}{R} - \frac{Z}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|},$$

создаваемый атомом мишени, зависит не только от координат иона $\mathbf{R} = (X, \mathbf{b})$, но и от координат атомного электрона $\mathbf{r} = (x, \mathbf{s})$, где \mathbf{s} — проекция \mathbf{r} на плоскость параметра удара \mathbf{b} . Выполнив интегрирование в показателе экспоненты, для эйкональной фазы получим выражение

$$\chi = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{R}; \mathbf{r}) dX = -\frac{2Z}{v} \ln \frac{|\mathbf{b} - \mathbf{s}|}{b}. \quad (3)$$

Дальнейшее использование выражения (3) совместно с (2) позволяет выполнить только лишь численный расчет сечения возбуждения атома водорода. Однако, поскольку целью нашей работы является получение аналитических выражений для сечения рассматриваемого процесса, попытаемся упростить выражение (3), используя тот факт, что при больших Z сечения неупругих процессов, как правило, довольно велики и существенно превышают атомные размеры. Поэтому, выполняя разложение выражения (3) по малому параметру s/b , вместо (2) получим

$$\sigma_{n'l'}^n(b < b_0) = 2\pi \int_0^{b_0} |\langle f | \exp \{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}\} | i \rangle|^2 b db. \quad (4)$$

Здесь величина $\mathbf{q} = 2Z\mathbf{b}/vb^2$ имеет смысл импульса, передаваемого атомному электрону голым ионом. Следует заметить, что в случае релятивистского иона параметр сшивки b_0 достаточно велик, а

это, в свою очередь, означает, что интеграл в формуле (4) как функция верхней границы будет логарифмически зависеть от b_0 . Именно это обстоятельство делает невозможным использование приближения эйконала в данной формулировке во всей плоскости параметра удара, что и приводит к необходимости разбиения интервала возможных значений b на части и применения в каждой из них своего метода расчета. Исходя из этих соображений, нетрудно показать, что вклад области А в сечение окончательно может быть представлен в виде

$$\sigma_{n'l'}^n(b < b_0) = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_{n'l'}^n \ln \frac{\alpha_{n'l'}^n v b_0}{Z}, \quad (5)$$

где $\lambda_{n'l'}^n = |\langle f | \mathbf{r} | i \rangle|^2 / 3$,

$$\alpha_{n'l'}^n = \lim_{b_0 \rightarrow \infty} \frac{Z}{vb_0} \times \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_{n'l'}^n} \frac{v^2}{4Z^2} \int_0^{b_0} |\langle f | \exp \{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}\} | i \rangle|^2 b db \right\}. \quad (6)$$

В) Вклад области больших параметров удара $b_0 < b < \infty$.

Как упоминалось ранее, взаимодействие иона с атомом мишени в этой области оказывается слабым, поэтому для расчета сечения мы можем воспользоваться результатом теории возмущений, записанным в виде асимптотики Бете [1, 3, 10, 11]. Вклад области (В) в сечение примет вид

$$\sigma_{n'l'}^n(b > b_0) = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_{n'l'}^n \left(\ln \frac{2v\gamma}{\eta b_0 \Omega_n^n} - \frac{\beta^2}{2} \right). \quad (7)$$

Суммируя вклады (5) и (7) от обеих областей (1), получим результирующее сечение. При этом знание точного значения границы между областями для нас несущественно, поскольку зависимость сечений в каждой области от параметра b_0 оказывается логарифмической, что приводит к корректной сшивке вкладов смежных областей и выпадению в окончательном ответе зависимости $\sigma_{n'l'}^n$ от параметра сшивки b_0 . В результате сечение перехода атома водорода из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ примет вид

$$\sigma_{n'l'}^n = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_{n'l'}^n \left(\ln \frac{2\alpha_{n'l'}^n v^2 \gamma}{\eta Z \Omega_n^n} - \frac{\beta^2}{2} \right). \quad (8)$$

Пусть

$$f_{n'l'}^n(q) = |\langle f | \exp \{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}\} | i \rangle|^2$$

— неупругий формфактор, отвечающий переходу $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$. Тогда вместо (6) для $\alpha_{n'l'}^n$ можно записать выражение

$$\alpha_{n'l'}^n = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_{n'l'}^n} \int_{q_0}^{\infty} f_{n'l'}^n(q) \frac{dq}{q^3} \right\}, \quad (9)$$

где $q_0 = 2Z/vb_0$. В общем случае $f_{n'l'}^n(q)$ можно представить в виде [1, 12–14]

$$f_{n'l'}^n(q) = A q^2 \frac{(q^2 + C)^{n-a}}{(q^2 + D)^{n+a}} \sum_{k=0}^{k_0} B_k q^{2k}, \quad (10)$$

где

$$a = 2n' + 1, \quad k_0 = 4n' - l' - 3, \\ D = \left(\frac{1}{n'} + \frac{1}{n} \right)^2, \quad C = \left(\frac{1}{n'} - \frac{1}{n} \right)^2,$$

A и B_k — коэффициенты, зависящие от начального и конечного состояний. Величина же $\lambda_{n'l'}^n$ в выражении (9) имеет вид

$$\lambda_{n'l'}^n = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{f_{n'l'}^n(q)}{q^2} = AB_0 \frac{C^{n-a}}{D^{n+a}}. \quad (11)$$

Подставляя (10) в (9) и интегрируя, можно получить общую формулу (39) для $\alpha_{n'l'}^n$ (см. Приложение).

Таким образом, формулы (8), (11) и (39) решают поставленную задачу о нахождении сечения $\sigma_{n'l'}^n$ возбуждения атома водорода ударом голого релятивистского многозарядного иона.

3. ПРИМЕРЫ ПЕРЕХОДОВ $n', l' \rightarrow n$

3.1. Переходы из состояния $1s$

В качестве примера рассмотрим сначала переходы в атоме водорода из основного состояния $1s$. В этом случае формфактор $f_{1s}^n(q)$ и коэффициент λ_{1s}^n , соответствующие переходу из основного состояния в любое состояние с главным квантовым числом n , имеют вид [1, 12, 13]

$$f_{1s}^n(q) = \frac{256 q^2}{3 n^3} \frac{\left[q^2 + \left(\frac{n-1}{n} \right)^2 \right]^{n-3}}{\left[q^2 + \left(\frac{n+1}{n} \right)^2 \right]^{n+3}} \times \\ \times \left(3q^2 + 1 - \frac{1}{n^2} \right), \quad (12)$$

$$\lambda_{1s}^n = \frac{256}{3} \frac{n^7}{(n^2 - 1)^5} \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^{2n}. \quad (13)$$

В этом случае для коэффициентов из формулы (10) получим значения

$$a = 3, \quad k_0 = 1, \quad B_0 = 1 - \frac{1}{n^2}, \quad B_1 = 3, \\ C = \left(\frac{n-1}{n} \right)^2, \quad D = \left(\frac{n+1}{n} \right)^2.$$

Подставляя эти значения в выражение (39), можно получить общую формулу для расчета α_{1s}^n при любом n . Так, первые десять коэффициентов α_{1s}^n равны

$$\alpha_{1s}^2 = 0.2646, \quad \alpha_{1s}^3 = 0.3879, \quad \alpha_{1s}^4 = 0.4425, \\ \alpha_{1s}^5 = 0.4702, \quad \alpha_{1s}^6 = 0.4860, \quad \alpha_{1s}^7 = 0.4957, \\ \alpha_{1s}^8 = 0.5022, \quad \alpha_{1s}^9 = 0.5066, \quad \alpha_{1s}^{10} = 0.5099, \\ \alpha_{1s}^{11} = 0.5122.$$

Можно заметить, что при $n \rightarrow \infty$ коэффициент α_{1s}^n стремится к определенному значению. Действительно, из формул (12) и (13) видно, что при $n \rightarrow \infty$

$$f_{1s}^n(q) \rightarrow \frac{256 q^2}{3 n^3} \frac{3q^2 + 1}{(q^2 + 1)^6} \exp \left(-\frac{4}{q^2 + 1} \right), \quad (14)$$

$$\lambda_{1s}^n \rightarrow \frac{256}{3 n^3} e^{-4}. \quad (15)$$

Подставляя (14) и (15) в выражение (9), получим

$$\alpha_{1s}^\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_{1s}^n = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \times \\ \times \exp \left\{ e^4 \int_{q_0}^{\infty} \frac{3q^2 + 1}{(q^2 + 1)^6} \exp \left(-\frac{4}{q^2 + 1} \right) \frac{dq}{q} \right\}. \quad (16)$$

Выполнив интегрирование в (16) и устремив q_0 к 0, где это возможно, имеем

$$\alpha_{1s}^\infty = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{11 + 41 e^4}{256} + \frac{1}{2} [\text{Ei}(4) - \text{Ei}(4 q_0^2)] \right\},$$

где $\text{Ei}(z)$ — интегральная показательная функция [15]. Учитывая, что при $z \rightarrow 0$ функция $\text{Ei}(z) \rightarrow \gamma_e + \ln z$, для α_{1s}^∞ окончательно получим

$$\alpha_{1s}^\infty = \frac{1}{4} \exp \left\{ -\frac{11 + 41 e^4}{256} + \frac{1}{2} (\text{Ei}(4) - \gamma_e) \right\} = \\ = 0.523788. \quad (17)$$

Используя формулу (17), можно рассчитать сечение перехода атома водорода в высоковозбужденные состояния ($n \gg 1$):

$$\sigma_{1s}^n \approx A_0 \frac{Z^2}{v^2} n^{-3} \left(\ln \frac{\mu v^2 \gamma}{Z} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (18)$$

где

$$A_0 = \frac{2^{11} \pi}{3e^4} = 39.28, \quad \mu = \frac{2\alpha_{1s}^\infty}{\eta\Omega_1^\infty} = 1.176.$$

3.2. Переходы из состояния 2s

Теперь рассмотрим переходы в атоме водорода из состояния 2s. В этом случае, используя выражение для неупругого формфактора $f_{2s}^n(q)$, приведенное в работе [13], и действуя аналогично предыдущему пункту, получим

$$\begin{aligned} a &= 5, \quad k_0 = 5, \\ B_0 &= \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)^4 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right), \\ B_1 &= \left(\frac{47}{320} + \frac{47}{80n^2} - \frac{7}{4n^4} + \frac{1}{n^6} \right) \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \\ B_2 &= \frac{5}{16} + \frac{31}{8n^2} - \frac{10}{n^4} + \frac{6}{n^6}, \quad B_3 = \frac{41}{8} - \frac{18}{n^2} + \frac{14}{n^4}, \\ B_4 &= - \left(8 - \frac{11}{n^2} \right), \quad B_5 = 3, \\ C &= \left(\frac{n-2}{2n} \right)^2, \quad D = \left(\frac{n+2}{2n} \right)^2. \end{aligned}$$

Подставляя эти значения в выражение (39), для десяти первых значений α_{2s}^n получим

$$\begin{aligned} \alpha_{2s}^3 &= 0.1608, \quad \alpha_{2s}^4 = 0.2487, \quad \alpha_{2s}^5 = 0.3044, \\ \alpha_{2s}^6 &= 0.3396, \quad \alpha_{2s}^7 = 0.3628, \quad \alpha_{2s}^8 = 0.3787, \\ \alpha_{2s}^9 &= 0.3899, \quad \alpha_{2s}^{10} = 0.3982, \quad \alpha_{2s}^{11} = 0.4045, \\ \alpha_{2s}^{12} &= 0.4093. \end{aligned}$$

Следует заметить, что при $n = 1$ переход $2s \rightarrow 1s$ дипольно запрещен. Это означает, что при расчете сечения такого перехода необходимость в применении метода шивки отпадает и сечение может быть вычислено непосредственно по формуле (4), в которой интегрирование должно быть распространено на всю область параметра удара $0 < b < \infty$ (см. также формулу (20)).

При больших же n для σ_{2s}^n опять получаем формулу (18), но с коэффициентами

$$A_0 = \frac{2^{20} \pi}{3e^8} = 368.4, \quad \mu = \frac{2\alpha_{2s}^\infty}{\eta\Omega_2^\infty} = 3.912,$$

$$\alpha_{2s}^\infty = \frac{1}{8\sqrt{2}} \exp \left\{ \frac{15941 - 3005 e^8}{40960} + \frac{1}{2} (\text{Ei}(8) - \gamma_e) \right\} = 0.435501.$$

3.3. Переходы из состояния 2p

Теперь опишем переходы в атоме водорода из любого состояния, соответствующего подоболочке $2p$, т. е. будем рассматривать переходы из состояния $2p$ с любым значением проекции момента m' , по которому в дальнейшем будет проведено усреднение. В этом случае, используя данные работы [13] для формфактора $f_{2p}^n(q)$, усредненного по проекциям начального момента m' , имеем

$$\begin{aligned} a &= 5, \quad k_0 = 4, \\ B_0 &= \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)^3 \left(\frac{11}{3} - \frac{4}{n^2} \right), \\ B_1 &= \left(\frac{107}{15} - \frac{392}{15n^2} + \frac{16}{n^4} \right) \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \\ B_2 &= \frac{19}{2} + \frac{12}{n^2} - \frac{8}{n^4}, \quad B_3 = -48 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right), \\ B_4 &= 36, \quad C = \left(\frac{n-2}{2n} \right)^2, \quad D = \left(\frac{n+2}{2n} \right)^2. \end{aligned}$$

Подставляя эти коэффициенты в формулу (39), для α_{2p}^n получим следующие значения:

$$\begin{aligned} \alpha_{2p}^1 &= 0.2395, \quad \alpha_{2p}^3 = 0.1117, \quad \alpha_{2p}^4 = 0.2700, \\ \alpha_{2p}^5 &= 0.4125, \quad \alpha_{2p}^6 = 0.5228, \quad \alpha_{2p}^7 = 0.6045, \\ \alpha_{2p}^8 &= 0.6650, \quad \alpha_{2p}^9 = 0.7103, \quad \alpha_{2p}^{10} = 0.7448, \\ \alpha_{2p}^{11} &= 0.7715. \end{aligned}$$

При больших n для σ_{2p}^n имеем формулу (18) с коэффициентами

$$A_0 = 11 \frac{2^{18} \pi}{9e^8} = 337.7, \quad \mu = \frac{2\alpha_{2p}^\infty}{\eta\Omega_2^\infty} = 8.209,$$

$$\alpha_{2p}^\infty = \frac{1}{8\sqrt{2}} \exp \left\{ -\frac{18001 + 8215e^8}{112640} + \frac{1}{2} (\text{Ei}(8) - \gamma_e) \right\} = 0.913830.$$

В заключение отметим, что обобщение формул (8) и (18) на случай столкновения иона с водородоподобным атомом с зарядом ядра Z_a проводится путем выполнения в этих формулах следующих замен:

$$\lambda_{n'l'}^n \rightarrow \frac{\lambda_{n'l'}^n}{Z_a^2}, \quad \alpha_{n'l'}^n \rightarrow \alpha_{n'l'}^n Z_a, \quad \Omega_{n'}^n \rightarrow \Omega_{n'}^n Z_a^2$$

для формулы (8);

$$A_0 \rightarrow \frac{A_0}{Z_a^2}, \quad \mu \rightarrow \frac{\mu}{Z_a}$$

для формулы (18).

4. ПЕРЕХОДЫ $n', l' \rightarrow n, l$

Рассмотрим теперь переход атома водорода из состояния $|n', l', m'\rangle \equiv |n_i, l_i, m_i\rangle$ в состояние $|n, l, m\rangle \equiv |n_f, l_f, m_f\rangle$, где n_p, l_p, m_p — главное, орбитальное и магнитное квантовые числа для начального ($p = i$) и конечного ($p = f$) состояний. Сечение $\sigma_{n'l'm'}^{nlm}$ такого перехода зависит от выбора оси квантования, поэтому далее рассчитаем сечение

$$\sigma_{n'l'}^{nl} = \frac{1}{2l'+1} \sum_{m, m'} \sigma_{n'l'm'}^{nlm},$$

просуммированное по конечным и усредненное по начальным проекциям момента, которое уже не зависит от выбора этой оси:

$$\begin{aligned} \sigma_{n'l'}^{nl} &= \frac{1}{2l'+1} \sum_{m, m'} \int |G(\mathbf{b})|^2 d\mathbf{b} = \\ &= \frac{1}{2l'+1} \frac{4Z^2}{v^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \sum_{m, m'} |G(\mathbf{q})|^2 \frac{dq d\varphi_q}{q^3}, \end{aligned} \quad (19)$$

где $G(\mathbf{q}) = \langle n, l, m | \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | n', l', m'\rangle$. Формула (19) имеет общий характер, ниже мы рассмотрим ее частные случаи. Дальнейший расчет и конечный вид сечения $\sigma_{n'l'}^{nl}$ зависит от $|l - l'|$. Рассмотрим разные случаи.

1) $l' = l$.

В этом случае интеграл в формуле (19) может быть взят непосредственно и необходимость в применении метода шивки, рассмотренного ранее, отпадает. Так, в частности, для перехода $1s \rightarrow 2s$ (так же, как и для $2s \rightarrow 1s$) после подстановки явного вида формфактора $G(\mathbf{q})$ [14] и интегрирования в (19) получим

$$\sigma_{1s}^{2s} = A_0 \frac{Z^2}{v^2}, \quad A_0 = \frac{131072}{295245} \pi = 1.395, \quad (20)$$

а для перехода $2s \rightarrow 3s$ —

$$\sigma_{2s}^{3s} = A_0 \frac{Z^2}{v^2}, \quad A_0 = \frac{227125886976}{42724609375} \pi = 16.70. \quad (21)$$

2) $|l - l'| = 1$.

В этом случае переход $n', l' \rightarrow n, l$ дипольно разрешен, поэтому использовать для расчета сечения

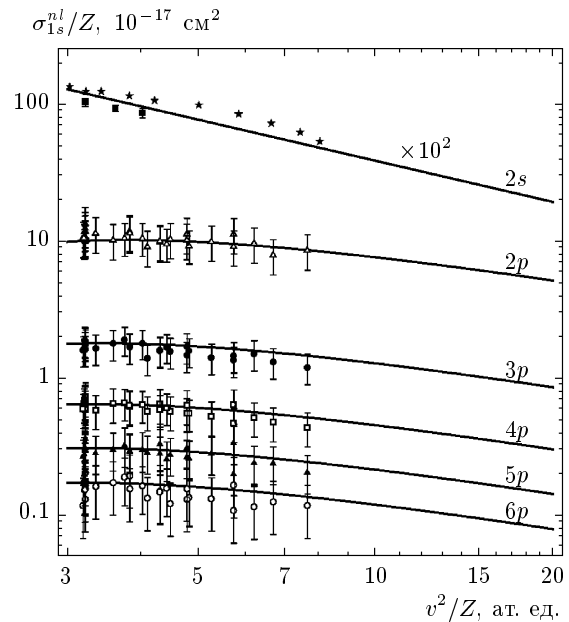


Рис. 1. Зависимости удельных сечений σ_{1s}^{nl}/Z возбуждения атома водорода для переходов $1s \rightarrow nl$ от параметра v^2/Z для нерелятивистских столкновений. Сплошные линии — расчет по формуле (19). Символы — экспериментальные данные: \blacksquare — $p + \text{H}$ ($1s \rightarrow 2s$) [16], \star — $p + \text{H}$ ($1s \rightarrow 2s$) [17] (экспериментальные и расчетные сечения для перехода $1s \rightarrow 2s$ для удобства представления на графике умножены на 10^2), \triangle — $\text{He}^{2+}, \text{Si}^{(2-9)+} + \text{H}$ ($1s \rightarrow 2p$) [18], \bullet — $\text{He}^{2+}, \text{Si}^{(2-9)+} + \text{H}$ ($1s \rightarrow 3p$) [18], \square — $\text{He}^{2+}, \text{Si}^{(2-9)+} + \text{H}$ ($1s \rightarrow 4p$) [18], \blacktriangle — $\text{He}^{2+}, \text{Si}^{(2-9)+} + \text{H}$ ($1s \rightarrow 5p$) [18], \circ — $\text{He}^{2+}, \text{Si}^{(2-9)+} + \text{H}$ ($1s \rightarrow 6p$) [18]

$\sigma_{n'l'}^{nl}$ формулу (19) напрямую нельзя ввиду расходимости в ней интеграла. Для устранения этой расходимости приходится применять рассмотренный выше метод шивки. В результате, например, сечение перехода $1s \rightarrow 2p$ примет вид

$$\sigma_{1s}^{2p} = A_0 \frac{Z^2}{v^2} \left(\ln \frac{\mu v^2 \gamma}{Z} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (22)$$

$$A_0 = \frac{262144}{59049} \pi = 13.95,$$

$$\mu = \frac{2 \alpha_{1s}^{2p}}{\eta \Omega_1^2} = \frac{4 \exp\left(-\frac{137}{120}\right)}{\eta} = 0.7171,$$

а для перехода $2s \rightarrow 3p$ получим

$$\sigma_{2s}^{3p} = A_0 \frac{Z^2}{v^2} \left(\ln \frac{\mu v^2 \gamma}{Z} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (23)$$

$$A_0 = \frac{6115295232}{244140625} \pi = 78.69,$$

$$\mu = \frac{2 \alpha_{2s}^{3p}}{\eta \Omega_{2s}^3} = \frac{12 \exp\left(-\frac{367}{200}\right)}{\eta} = 1.075.$$

3) $|l - l'| \geq 2$.

Теперь переход $n', l' \rightarrow n, l$ дипольно запрещен, поэтому необходимость в применении метода шивки опять отпадает. Так, используя (19), для перехода $2s \rightarrow 3d$ имеем

$$\sigma_{2s}^{3d} = A_0 \frac{Z^2}{v^2}, \quad A_0 = \frac{717527973888}{42724609375} \pi = 52.76. \quad (24)$$

Используя формулу (19), мы рассчитали зависимости удельных сечений $\sigma_{1s}^{n'l}/Z$ (сечений, приходящихся на единицу заряда иона) возбуждения атома водорода из основного состояния в состояния $2s, 2p, 3p, 4p, 5p$ и $6p$ от параметра v^2/Z для нерелятивистских столкновений с многозарядными ионами. Такие зависимости оказываются универсальными для каждого перехода $1s \rightarrow n'l$ и независимыми от заряда Z и скорости v бомбардирующих ионов. В соответствии с общими условиями применимости приближения эйконала на рис. 1 приведены графики указанных выше зависимостей в сравнении лишь с высокоэнергетической частью доступных экспериментальных данных [16–18]. Сечения перехода $1s \rightarrow 2s$ измерены лишь для протонов и представлены нами на рис. 1 для полноты картины, так как, несмотря на формальное нарушение условий применимости нашего подхода $Z \gg 1$, согласие расчетов с экспериментом для них получается неплохое. Энергии ионов в экспериментах принимали значения от 75 до 714 кэВ/нуклон. Найти эксперименты с участием ионов больших энергий и зарядов, к сожалению, не удалось.

Формулы (20)–(24) легко обобщаются на случай столкновения иона с водородоподобным атомом с зарядом ядра Z_a с помощью следующих замен:

$$A_0 \rightarrow \frac{A_0}{Z_a^2}$$

для формул (20), (21), (24);

$$A_0 \rightarrow \frac{A_0}{Z_a^2}, \quad \mu \rightarrow \frac{\mu}{Z_a}$$

для формул (22), (23).

5. ИОНИЗАЦИЯ

Теперь рассмотрим ионизацию атома водорода из связанного состояния с n' и l' (по m' подразумевается усреднение) при столкновении с голым релятивистским многозарядным ионом. Формфактор, соответствующий такому процессу, равен

$$f_{n'l'}^i(q) = \frac{1}{2l'+1} \times \sum_{m'=-l'}^{l'} \int |\langle \mathbf{k} | \exp\{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}\} | n', l', m' \rangle|^2 d\mathbf{k} = \int_0^\infty f_{n'l'}^k(q) k^2 dk,$$

где $|\mathbf{k}\rangle$ — состояние непрерывного спектра с импульсом \mathbf{k} . В этом случае для расчета сечения ионизации опять приходится применять метод шивки, поэтому выражение для сечения примет такой же вид, как и формула (8), а именно [4, 6–9]

$$\sigma_{n'l'}^i = 8\pi \frac{Z^2}{v^2} \lambda_{n'l'}^i \left(\ln \frac{2 \alpha_{n'l'}^i v^2 \gamma}{\eta Z \Omega_{n'l'}^i} - \frac{\beta^2}{2} \right), \quad (25)$$

где

$$\lambda_{n'l'}^i = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{f_{n'l'}^i(q)}{q^2} = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \int_0^\infty f_{n'l'}^k(q) k^2 dk = \int_0^\infty \lambda_{n'l'}^k k^2 dk, \quad (26)$$

$$\alpha_{n'l'}^i = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_{n'l'}^i} \int_{q_0}^\infty f_{n'l'}^i(q) \frac{dq}{q^3} \right\}, \quad (27)$$

$$\Omega_{n'l'}^i = \exp \left\{ \frac{1}{\lambda_{n'l'}^i} \int_0^\infty \lambda_{n'l'}^k \ln \Omega_{n'l'}^k k^2 dk \right\}, \quad (28)$$

$$\Omega_{n'}^k = \frac{k^2}{2} + \frac{1}{2n'^2}. \quad (29)$$

Так, в качестве примера, используя формулы (25)–(29), рассчитаем сечения ионизации атома водорода из состояний $1s, 2s, 2p$. При ионизации из $1s$ -состояния, согласно работам [1, 12, 13], имеем

$$f_{1s}^k(q) = \frac{256q^2}{3k} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{k}\right)} \times \frac{3q^2 + k^2 + 1}{\left[(q^2 + 1 - k^2)^2 + 4k^2\right]^3} \times \exp \left\{ -\frac{2}{k} \arctg \frac{2k}{q^2 + 1 - k^2} \right\}.$$

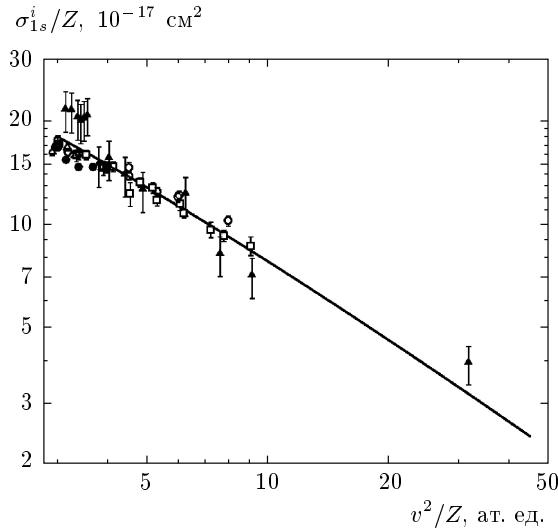


Рис. 2. Зависимость удельного сечения σ_{1s}^i/Z ионизации атома водорода из основного состояния от параметра v^2/Z для нерелятивистских столкновений. Сплошная линия — расчет по формуле (25). Символы — экспериментальные данные: Δ — $C^{2+}, N^{2+}, O^{2+} + H$ [19]; \square — $Li^{(2-3)+} + H$ [20]; \circ — $C^{(2-5)+}, O^{(2-4)+} + H$ [21]; \blacktriangle — $C^{(5-6)+}, Nb^{(23-36)+}, Pb^{(52-59)+} + H_2$ [22]; \bullet — $Fe^{(11-14)+} + H_2$ [23]

Здесь главные значения $\arctg \epsilon \in [0, \pi)$,

$$\lambda_{1s}^k = \frac{256}{3k} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{k}\right)} (k^2 + 1)^{-5} \times \exp\left(-\frac{4}{k} \arctg k\right).$$

В результате сечение ионизации σ_{1s}^i представится формулой (25) с коэффициентами

$$\lambda_{1s}^i = 0.2834, \quad \alpha_{1s}^i = 3.264, \quad \Omega_{1s}^i = 0.7113. \quad (30)$$

Поступая аналогично и подставляя соответствующие формфакторы [13], для ионизации из $2s$ - и $2p$ -состояний получим для коэффициентов в формуле (25) следующие значения:

$$\lambda_{2s}^i = 0.8232, \quad \alpha_{2s}^i = 2.938, \quad \Omega_{2s}^i = 0.1913,$$

$$\lambda_{2p}^i = 0.5312, \quad \alpha_{2p}^i = 41.38, \quad \Omega_{2p}^i = 0.1699.$$

Используя формулу (25) с коэффициентами (30), мы рассчитали зависимость удельного сечения ионизации σ_{1s}^i/Z атома водорода из основного состояния от параметра v^2/Z для нерелятивистских столкновений с многозарядными ионами. Так же, как для

случая возбуждения, эта зависимость оказывается одинаковой для любых бомбардирующих водород ионов. На рис. 2 построен график этой зависимости в сравнении с данными экспериментов, в которых в качестве снарядов использовались ионы: C^{2+}, N^{2+}, O^{2+} [19]; $Li^{(2-3)+}$ [20]; $C^{(2-5)+}, O^{(2-4)+}$ [21]; а также $C^{(5-6)+}, Nb^{(23-36)+}, Pb^{(52-59)+}$ [22] и $Fe^{(11-14)+}$ [23] для столкновений с молекулами H_2 (в этом случае экспериментальное сечение делилось на два — число атомов в молекуле). Энергии ионов в экспериментах менялись от 145 до 4750 кэВ/нуклон. Как видно из рис. 2, наши расчеты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В заключение следует отметить, что формула (25) легко обобщается на случай ионизации водородоподобного атома с помощью замен

$$\lambda_{n'l'}^i \rightarrow \frac{\lambda_{n'l'}^i}{Z_a^2}, \quad \alpha_{n'l'}^i \rightarrow \alpha_{n'l'}^i Z_a, \quad \Omega_{n'l'}^i \rightarrow \Omega_{n'l'}^i Z_a.$$

Результаты, полученные в данной работе, могут использоваться не только для расчетов в случае водородоподобных атомов, но и, например, для оценки сечений возбуждения и ионизации K -, L - и других оболочек легких многоэлектронных атомов при столкновениях с голыми релятивистскими многозарядными ионами.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда ИНТАС «GSI-INTAS Call 2006» (грант № 06-1000012-8530) и РФФИ (грант № 08-02-98801-р_север_а).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для получения коэффициентов $\alpha_{n'l'}^i$ необходимо вычислить интеграл, стоящий в формуле (9) под знаком экспоненты. Для этого, используя выражение (10), запишем интеграл в виде

$$\int_{q_0}^{\infty} f_{n'l'}^i(q) \frac{dq}{q^3} = A \sum_{k=0}^{k_0} B_k I_k, \quad (31)$$

где

$$I_k = \int_{q_0}^{\infty} \frac{(q^2 + C)^{n-a}}{(q^2 + D)^{n+a}} q^{2k-1} dq. \quad (32)$$

Переходя в интеграле (32) к новой переменной $y = q^2 / (q^2 + D)$, для I_k получим

$$I_k = \frac{1}{2} D^{k-2a} (1-r)^{n-a} \times \int_{y_0}^1 y^{k-1} (1-y)^{2a-k-1} (y+u)^{n-a} dy, \quad (33)$$

где

$$r = \frac{C}{D}, \quad u = \frac{r}{1-r}, \quad y_0 = \frac{q_0^2}{q_0^2 + D}.$$

1. Рассмотрим случай $k > 0$.

В этом случае интеграл в правой части (33) сходится на нижнем пределе $y_0 \rightarrow 0$ (при $q_0 \rightarrow 0$), поэтому имеем [24]

$$\lim_{q_0 \rightarrow 0} I_k = \frac{1}{2} D^{k-2a} (1-r)^{n-a} \times \int_0^1 y^{k-1} (1-y)^{2a-k-1} (y+u)^{n-a} dy = \frac{1}{2} D^{k-2a} (1-r)^{n-a} B(k, 2a-k) \times {}_2F_1\left(k, a-n; 2a; -\frac{1}{u}\right), \quad (34)$$

где ${}_2F_1(a_1, a_2; b_1; z)$ — гипергеометрическая функция, $B(x, y)$ — бета-функция Эйлера.

2. Рассмотрим случай $k = 0$.

В этом случае интеграл в правой части (33) логарифмически расходится на нижнем пределе $y_0 \rightarrow 0$ (при $q_0 \rightarrow 0$), поэтому имеем

$$I_0 = \frac{1}{2} D^{-2a} (1-r)^{n-a} \times \int_{y_0}^1 (y+u)^{n-a} (1-y)^{2a-1} \frac{dy}{y} = \frac{1}{2} D^{-2a} r^{n-a} \times \left[\frac{n-a}{2au} {}_3F_2\left(1, 1, 1+a-n; 2, 1+2a; -\frac{1}{u}\right) - H_{2a-1} + \ln D - 2 \ln q_0 \right]. \quad (35)$$

Здесь H_p — гармонические числа [25], ${}_3F_2(a_1, a_2, a_3; b_1, b_2; z)$ — обобщенная гипергеометрическая функция, которая при имеющихся у нас параметрах (a и n — целые числа) может быть выражена в виде рациональной функции от полиномов и логарифмов [26]. Поэтому в каждом конкретном случае ${}_3F_2$ может быть сравнительно несложно найдена численно без процедуры суммирования медленно сходящихся рядов.

Таким образом, формулы (9), (11), (31), (34) и (35) позволяют представить величины $\alpha_{n'l'}^n$ в аналитическом виде. Действительно, согласно (9) и (31) имеем

$$\alpha_{n'l'}^n = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \exp\left\{ \frac{A}{\lambda_{n'l'}^n} \sum_{k=0}^{k_0} B_k I_k \right\} = \lim_{q_0 \rightarrow 0} \frac{q_0}{2} \exp\left\{ \sum_{k=0}^{k_0} J_k \right\}, \quad (36)$$

где для дальнейшего удобства мы ввели величину

$$J_k = AB_k I_k / \lambda_{n'l'}^n.$$

Подставляя сюда $\lambda_{n'l'}^n$ из (11) и I_k из (34) и (35), получим

$$J_k = \frac{D^k}{2} \frac{B_k}{B_0} B(k, 2a-k) \times {}_2F_1\left(k, a-n; 2a; -\frac{1}{u}\right) \quad \text{при } k > 0, \quad (37)$$

$$J_0 = \frac{1}{2} \left[\frac{n-a}{2au} {}_3F_2\left(1, 1, 1+a-n; 2, 1+2a; -\frac{1}{u}\right) - H_{2a-1} \right] + \ln \sqrt{D} - \ln q_0. \quad (38)$$

Подставляя (37) и (38) в выражение (36) и беря предел, окончательно имеем

$$\alpha_{n'l'}^n = \frac{\sqrt{D}}{2} \exp\left\{ \sum_{k=1}^{k_0} J_k + \frac{1}{2} \left[\frac{n-a}{2au} \times {}_3F_2\left(1, 1, 1+a-n; 2, 1+2a; -\frac{1}{u}\right) - H_{2a-1} \right] \right\}. \quad (39)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
2. J. Eichler and W. E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Acad. Press, New York (1995).
3. J. Eichler, Phys. Rep. **193**, 165 (1990).
4. V. I. Matveev, Kh. Yu. Rakhimov, and D. U. Matrasulov, J. Phys. B **32**, 3849 (1999).
5. В. И. Матвеев, ЭЧАЯ **26**, 780 (1995).
6. В. И. Матвеев, Х. Ю. Рахимов, ЖЭТФ **114**, 1646 (1998).
7. P. K. Khabibullaev, V. I. Matveev, and D. U. Matrasulov, J. Phys. B **31**, L607 (1998).

8. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, Письма в ЖТФ **28**, 19 (2002).
9. В. И. Матвеев, Е. С. Гусаревич, ЖЭТФ **123**, 42 (2003).
10. С. А. Bertulani and G. Baur, Phys. Rep. **163**, 299 (1988).
11. В. Л. Moiseiwitsch, Phys. Rep. **118**, 133 (1985).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лившиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
13. А. Р. Holt, J. Phys. B **2**, 1209 (1969).
14. D. P. Dewangan, J. Phys. B **38**, S107 (2005).
15. К. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1979).
16. D. P. Higgins, J. Geddes, and H. B. Gilbody, J. Phys. B **29**, 1219 (1996).
17. J. T. Park, Adv. Atom. Mol. Phys. **19**, 67 (1983).
18. D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner et al., J. Phys. B **27**, 4195 (1994).
19. M. B. Shah and H. B. Gilbody, J. Phys. B **14**, 2831 (1981).
20. M. B. Shah and H. B. Gilbody, J. Phys. B **15**, 413 (1982).
21. M. B. Shah and H. B. Gilbody, J. Phys. B **16**, 4395 (1983).
22. A. S. Schlachter, K. H. Berkner, W. G. Graham et al., Phys. Rev. A **24**, 1110 (1981).
23. К. Н. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle et al., J. Phys. B **11**, 875 (1978).
24. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Элементарные функции*, Наука, Москва (1981).
25. Р. Грэхем, Д. Кнут, О. Паташник, *Конкретная математика*, Мир, Москва (1998).
26. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).