

МНОГОЭЛЕКТРОННАЯ ИОНИЗАЦИЯ ТЯЖЕЛЫХ И СВЕРХТЯЖЕЛЫХ АТОМОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ С МНОГОЗАРЯДНЫМИ ИОНАМИ

*И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько**

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 августа 2025 г.,
после переработки 12 сентября 2025 г.
Принята к публикации 12 сентября 2025 г.

В модели независимых частиц выполнены расчеты сечений многоэлектронной ионизации σ_m тяжелых и сверхтяжелых атомов многозарядными ионами с зарядами $q = 20\text{--}91$ с одновременным отрывом m , $1 \leq m < 60$, электронов при энергиях ионов $E \approx 100$ кэВ/н–20 ГэВ/н. Одноэлектронные вероятности ионизации вычислялись с помощью сечений ионизации электронов всех оболочек атомов в релятивистском борновском приближении. Численные результаты сечений σ_m представлены для атомов Ne ($Z = 10$), Ar ($Z = 18$), Kr ($Z = 36$), Xe ($Z = 54$), U ($Z = 92$), Lr ($Z = 103$), Nh ($Z = 113$) и Og ($Z = 118$) при столкновении с ионами Fe^{20+} , Au^{24+} , Bi^{67+} , U^{91+} , $q = 44\text{--}91$, в сравнении с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов. На основе экспериментальных данных и полученных результатов в модели независимых частиц предложен закон масштабирования сечений σ_m по заряду налетающего иона q .

DOI: 10.7868/S3034641X25110037

3) $q' < q$, безызлучательная перезарядка:

$$X^{q+} + A \rightarrow X^{(q-m)+} + A^{m+}, \quad m \geq 1. \quad (4)$$

1. ВВЕДЕНИЕ

Наиболее общим атомным процессом, возникающим при столкновении многозарядного иона с тяжелым атомом, является многоэлектронная ионизация с перезарядкой (transfer ionization), сопровождающаяся одновременным захватом и ионизацией электронов сталкивающихся частиц:

$$X^{q+} + A \rightarrow X^{q'+} + A^{r+} + (q' - q + r)e^-, \quad r \geq 1, \quad (1)$$

где q и q' — заряды налетающего иона X^{q+} до и после столкновения, r — заряд иона мишени после столкновения.

Различают три основных процесса, являющихся частными случаями (1):

1) $q' = q$, прямая ионизация атомов ионами:

$$X^{q+} + A \rightarrow X^{q+} + A^{m+} + me^-, \quad m \geq 1, \quad (2)$$

2) $q' > q$, ионизация ионов атомами (обдирка):

$$X^{q+} + A \rightarrow X^{q'+} + A + me^-, \quad m \geq 1, \quad (3)$$

Многоэлектронные процессы (1)–(4) представляют значительный интерес как в теории атомных столкновений для понимания фундаментальных проблем многочастичных процессов, так и для различных приложений: при моделировании плазменных процессов, оценке времени жизни ионного пучка в ускорительных системах, ионной терапии опухолей и др., поскольку они могут вносить вклад более 50% в полное сечение ионизации или перезарядки в зависимости от энергии ионов и атомной структуры сталкивающихся частиц [1–4].

Экспериментальные данные для сечений σ_m атомов ионами (2) получены в основном на ускорителях BEVALAC (Беркли), UNILAC (Дармштадт) и RIKEN (Токио) с использованием атомов-мишеней благородных газов He, Ne, Ar, Kr, I и Xe для налетающих ионов от протонов до ядер урана в диапазоне энергий $E = 1\text{--}420$ МэВ/н (см. [5–8]).

Определение эффективных сечений многоэлектронной ионизации (2) экспериментально представляет довольно сложную задачу, связанную с ис-

* E-mail: shevelkovp@lebedev.ru

пользованием специальной техники тройных совпадений (triple-coincidence technique) для одновременного детектирования налетающего и образующегося ионов и свободных электронов, а теоретически связано с проблемой многоэлектронных переходов с использованием нетрадиционных подходов и полумпирических методов. Экспериментально показано, что образующиеся многозарядные ионы мишени A^{m+} обладают очень низкой кинетической энергией (~ 10 эВ) и поэтому представляют большой интерес для их использования в спектроскопии многозарядных ионов [6, 7]. Из-за экспериментальных трудностей общая точность измеренных сечений σ_m составляет ~ 30 –50%, а в некоторых случаях — порядка множителя 2–4 (см. [5–8]). Для атомов Ne, Ar, Kr, I и Xe измеренные сечения представлены для ионизации $m \leq 10$ электронов. В отдельных случаях получены сечения σ_m с максимальными значениями m , которые составляют $m(\text{Ne})=10$, $m(\text{Ar})=18$, $m(\text{Kr})=12$, $m(\text{I})=27$, $m(\text{Xe})=32$. Экспериментальные сечения σ_m для сверхтяжелых атомов отсутствуют.

Основной теоретической проблемой для исследования процессов многоэлектронной ионизации является многочастичный характер взаимодействия многозарядного иона с многоэлектронным атомом-мишенью и учет электрон-электронных корреляций. В дополнение к прямой кулоновской ионизации m электронов атома-мишени, оже-процессы, связанные с ионизацией электронов внутренних оболочек, их возбуждением в автоионизационные состояния, и другие процессы вносят значительный вклад в полное экспериментальное сечение, что затрудняет сравнение вычисленных сечений σ_m с экспериментально полученными из-за большой сложности учета вклада автоионизационных процессов (см. [2, 5]). В настоящее время предсказать достаточно точно вклад процессов автоионизации в полное сечение пока не представляется возможным ни экспериментально, ни теоретически. Сравнение имеющихся экспериментальных данных и теоретических расчетов показывает, что вклад автоионизации растет с ростом числа выбитых электронов m : при отрыве $m = 1$ –6 электронов он составляет 20–50%, а при $m > 6$ превышает вклад прямой ионизации в 5–10 раз.

Существует несколько основных подходов для интерпретации экспериментальных данных σ_m : модель независимых частиц (independent particle model, IPM), метод классических траекторий Монте-Карло для n частиц (nCTMC), классическая модель передачи энергии (energy deposition model, EDM) и полуклассический метод (semi-classical approximation,

SCA). Кратко методы можно охарактеризовать следующим образом.

В модели IPM (см. [9–12]) ионизация каждого электрона мишени происходит независимо от других электронов, а вероятности многоэлектронной ионизации для фиксированного параметра удара определяются биномиальным или мультиполиномиальным распределением, выраженным через одноэлектронные вероятности ионизации, которые обычно вычисляются с помощью борновских матричных элементов или сечений одноэлектронной ионизации атома-мишени налетающим ионом. IPM является относительно простым методом расчета сечений, позволяющим избежать громоздких (но более строгих) вычислений для многоэлектронных переходов.

В методе nCTMC [9, 13] описание ион-атомных столкновений проводится методом Монте-Карло путем решения классических $6(N+2)$ уравнений Ньютона (2 ядра и N электронов системы ион+атом), при этом начальное распределение импульсов атома рассчитывается квантовомеханическим путем. Метод nCTMC является достаточно эффективным, поскольку может включать также процессы перезарядки и автоионизации, однако для получения хорошей статистики требует использования мощных компьютеров, что ограничивает его применение для ионизации тяжелых мишеней многоэлектронными ионами.

Метод EDM [14] основан на использовании классической модели передачи энергии электронам мишени налетающим ионом [15] и статистической модели многоэлектронной ионизации [16]. Зная полную энергию, переданную электронам мишени ионом, как функцию прицельного параметра b , можно вычислить вероятности m -электронной ионизации $P_m(b, v)$ атома как функции заряда и скорости налетающего иона. Преимуществом метода EDM является то обстоятельство, что сумма всех вероятностей $P_m(b, v)$ нормирована на единицу при всех значениях b и v . Метод EDM также используется для процессов ионизации *ионов* атомами (3) (см. [17]).

Метод SCA [18, 19] предназначен для расчета сечений многоэлектронной ионизации и перезарядки, носит статистический характер и основан на решении временного классического уравнения Власова методом CTMC для многоэлектронной плотности при фиксированном заряде налетающего иона для нескольких тысяч прицельных параметров. В этой модели взаимодействие между электронами не рассматривается, а средний заряд атомного остатка, в котором находится активный электрон, является ре-

гулируемым (подгоночным) параметром. Вероятности одноэлектронной ионизации p_i , перезарядки p_{ec} и вероятность электрона не покидать атом $1 - p_i - p_{ec}$ находятся по асимптотике численных решений уравнения Власова при больших расстояниях от ядра мишени, а вероятности m -электронной ионизации определяются по тринomialной формуле для трех вероятностей.

Несмотря на значительное количество экспериментальных данных и теоретических подходов по исследованию процессов многоэлектронной ионизации, многие вопросы изучены пока недостаточно полно, например, зависимости сечений σ_m от энергии и заряда налетающих ионов, числа выбитых электронов и т. д. В настоящей работе эти вопросы исследовались на основе численных расчетов сечений σ_m , выполненных в модели независимых частиц с одноэлектронными вероятностями, зависящими от сечений одноэлектронной ионизации $\sigma(nl)$ атома-мишени многозарядным ионом, где nl — главное и орбитальное квантовые числа электронов мишени.

Численные расчеты сечений σ_m выполнены для атомов Ne ($Z = 10$), Ar ($Z = 18$), Kr ($Z = 36$), Xe ($Z = 54$), U ($Z = 92$) и сверхтяжелых элементов Lr ($Z = 103$), Nh ($Z = 113$) и Og ($Z = 118$) при столкновении с ионами с зарядами $q \geq 20$ и энергиями $E = 100$ кэВ/н–20 ГэВ/н с одновременным отрывом до $m \approx 60$ электронов. На основе численных расчетов исследована зависимость сечений σ_m от энергии и заряда налетающих ионов, числа выбитых электронов m , энергий связи оболочек атома-мишени и др. Представлен закон масштабирования сечений σ_m по заряду q налетающих ионов. Результаты расчетов сечений σ_m сравниваются с экспериментальными данными и расчетами других авторов.

2. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ СЕЧЕНИЙ МНОГОЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ, СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

В настоящей работе сечения многоэлектронной ионизации σ_m вычислены в приближении ИРМ, в котором вероятность $P_m(b)$ одновременной ионизации m электронов атома-мишени представлена в виде [10]

$$P_m(b, v) = \sum_{\gamma} \prod_{i=1}^T \binom{k_i}{m_i} p_i^{m_i} (1 - p_i)^{k_i - m_i}, \quad (5)$$

$$\sum_{i=1}^T m_i = m, \quad \sum_{i=1}^T k_i = N, \quad \binom{k}{m} = \frac{k!}{m!(k-m)!},$$

где b и v — прицельный параметр и скорость иона соответственно, $p_i(b, v)$ — одноэлектронные вероятности ионизации электронов из оболочек атома nl^k , n и l — главное и орбитальное квантовые числа, k — число эквивалентных электронов в оболочке, N — полное число электронов, T — число оболочек мишени. Суммирование в (5) проводится по всем оболочкам мишени γ . Сечение σ_m и полное (суммарное по m) сечение σ_{tot} имеют вид

$$\sigma_m(v) = 2\pi \int_0^{\infty} b db P_m(b, v), \quad \sigma_{tot}(v) = \sum_{m=1}^N \sigma_m(v). \quad (6)$$

Одноэлектронные вероятности $p_{nl}(b, v)$ вычислялись в приближении нормированных экспонент, предложенном в [11], где показатели экспонент определяются через парциальные сечения одноэлектронной ионизации на один электрон $\sigma(nl)/k$:

$$p_{nl}(b) = p_{nl}(0) \exp(-\alpha_{nl} b), \quad (7)$$

$$\alpha_{nl} = \left[\frac{2p_{nl}(0)}{\sigma_{nl}(v)/k\pi a_0^2} \right]^{1/2}.$$

Вероятности $p_{nl}(0)$ при $b = 0$ вычислялись в геометрической квазиклассической модели [20], в которой $p_{nl}(0)$ зависят от заряда q и скорости иона v , энергии связи оболочки I_{nl} нейтрального атома и определяются с помощью аналитической безразмерной функции, представленной в [11]. Парциальные сечения σ_{nl}/k рассчитывались в релятивистском борновском приближении с релятивистским оператором взаимодействия и волновыми функциями электронов в связанном и непрерывном спектрах. В методе ИРМ с функциями (7) выполняются условия нормировки вероятностей:

$$p_{nl}(0) \leq 1, \quad p_{nl}(b, v) \leq 1, \quad P_m(b, v) \leq 1. \quad (8)$$

Расчет сечений σ_m методом ИРМ с вероятностями одноэлектронной ионизации (7) реализован в программе MIT (Multiple Ionization Transitions), описанной в работе [11]. В настоящей работе численные расчеты сечений σ_m по программе MIT выполнены для атомов Ne, Ar, Kr, Xe, U, Lr, Nh и Og при столкновении с ионами с зарядами $q \geq 20$ при энергиях $E \approx 100$ кэВ/н–20 ГэВ/н, т. е. включая релятивистскую область. Парциальные сечения σ_{nl}/k вычислялись по программе RICODE-M [21] для всех оболочек атомов-мишеней с учетом атомной структуры налетающих ионов. Потенциалы ионизации и энергии связи исследуемых атомов взяты из работы [22].

На рис. 1 приведены парциальные сечения $\sigma(nl)/k$ ионизации электронов всех оболочек

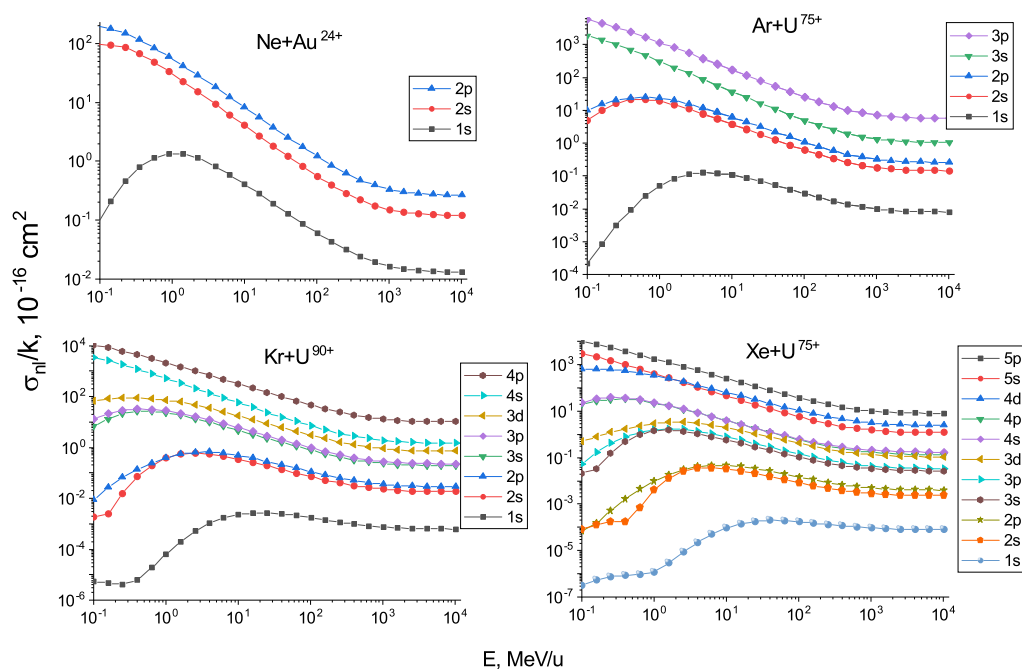


Рис. 1. Парциальные сечения ионизации $\sigma(nl)/k$ электронов из оболочек nl^k (указаны на рисунке) атомов Ne, Ar, Kr и Xe при столкновении с ионами золота и урана как функции энергии ионов — расчет по программе RICODE-M

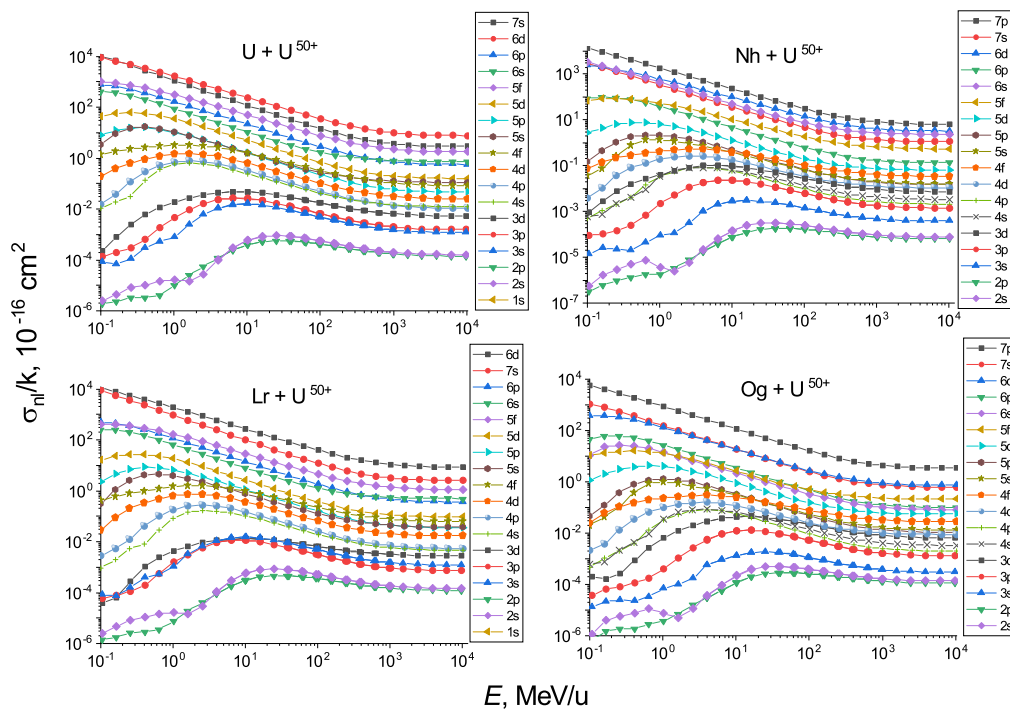


Рис. 2. Парциальные сечения ионизации $\sigma(nl)/k$ электронов из оболочек nl^k (указаны на рисунке) атомов U, Lr, Nh и Og при столкновении с ионами U^{50+} как функции энергии ионов — расчет по программе RICODE-M

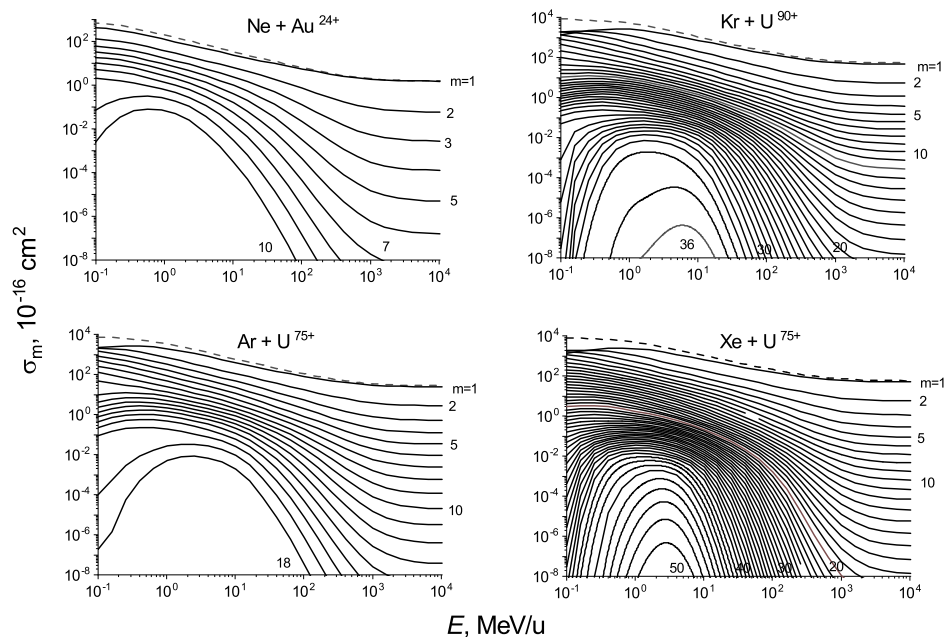


Рис. 3. Сечения многоэлектронной ионизации σ_m атомов Ne, Ar, Kr и Xe при столкновении с многозарядными ионами золота и урана при разных значениях m как функции энергии ионов — расчет по программе MIT. Штриховые кривые — полные сечения (6)

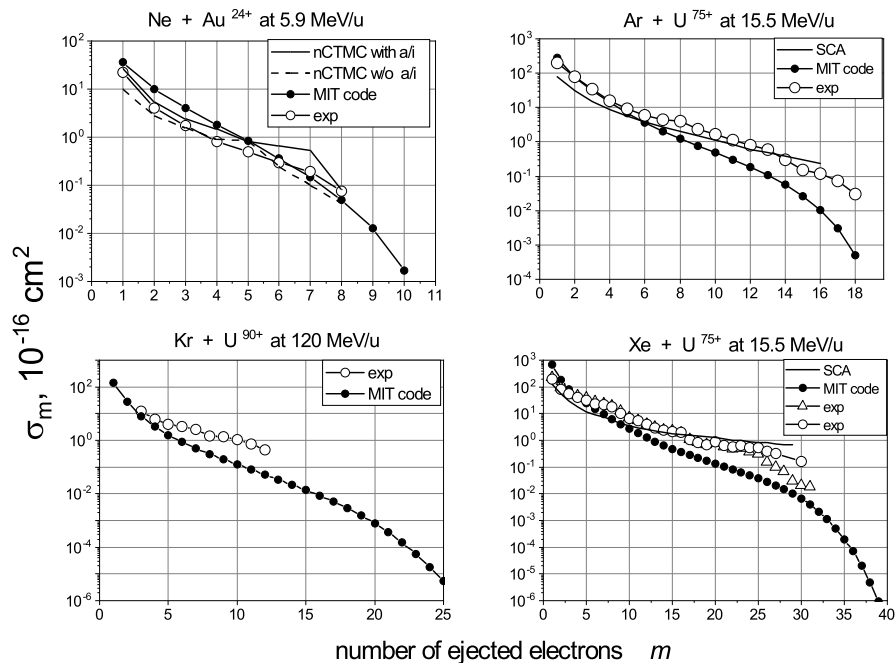


Рис. 4. Сечения σ_m атомов Ne, Ar, Kr и Xe многозарядными ионами как функции числа выбитых электронов m . Ne + Au\$^{24+}\$ при $E = 5.9$ МэВ/н: сплошная и штриховая кривые — расчет в приближении nCTMC с учетом (with) и без учета (w/o) автоионизации (a/i) соответственно из работы [8], кривая с темными кружками — код MIT, кривая со светлыми кружками — эксперимент [8]. Ar + U\$^{75+}\$ при $E = 15.5$ МэВ/н: кривая со светлыми кружками — эксперимент, сплошная кривая — расчет методом SCA из работы [5], кривая с темными кружками — код MIT. Kr + U\$^{90+}\$ при $E = 120$ МэВ/н: кривая со светлыми кружками — эксперимент [6], кривая с темными кружками — код MIT. Xe + U\$^{75+}\$ при $E = 15.5$ МэВ/н: кривая со светлыми треугольниками — эксперимент [23], кривая со светлыми кружками — эксперимент, сплошная кривая — расчет методом SCA из работы [5], кривая с темными кружками — результат кода MIT

атомов Ne, Ar, Kr и Xe при столкновении с многозарядными ионами золота и урана, а на рис. 2 — атомов U, Lr, Nh и Og при столкновении с ионами U^{50+} . На рис. 1 и 2 видно, что с ростом атомного номера мишени все большую роль начинают играть электроны внутренних оболочек, для которых парциальные сечения ионизации больше, чем для внешних оболочек (например, $\sigma(3d)/10 > \sigma(4s)/2$ в столкновениях $Xe + U^{75+}$). Эта тенденция особенно проявляется в случае ионизации сверхтяжелых атомов (рис. 2). При релятивистских энергиях $E > 500$ МэВ/н парциальные сечения $\sigma(nl)/k$ становятся квазипостоянными величинами из-за влияния релятивистских эффектов (см. [1, 21]).

Вычисленные по коду МПТ сечения многоэлектронной ионизации σ_m атомов Ne, Ar, Kr и Xe при столкновении с ионами золота и урана приведены на рис. 3. В качестве входных данных в уравнениях (5)–(7) использовались одноэлектронные сечения $\sigma(nl)/k$, приведенные на рис. 1. Как видно на рис. 3, сечения m -электронной ионизации довольно велики, например, сечение образования Ne-подобного иона Kr^{34+} при столкновении $Kr + U^{90+}$ составляет $\sigma_{34} \approx 2 \cdot 10^{-19}$ см² при $E \approx 2$ МэВ/н, а при столкновении $Xe + U^{75+}$ сечение образования Ar-подобного иона Xe^{36+} равно $\sigma_{36} \approx 6 \cdot 10^{-18}$ см² при $E \approx 1$ МэВ/н. С ростом m и энергии E сечения убывают и при $E > 5$ ГэВ/н выходят на квазипостоянный режим из-за влияния релятивистских эффектов. С ростом m максимумы сечений сдвигаются вправо в зависимости от энергии связи внутренней оболочки мишени (см. разд. 5).

На рис. 4 приведено сравнение вычисленных с помощью кода МПТ сечений σ_m атомов Ne, Ar, Kr и Xe теми же ионами, что и на рис. 1 и 3, с экспериментальными данными и расчетами других авторов. Из рис. 4 видно, что метод ИРМ с одноэлектронными вероятностями (7) описывает экспериментальные данные для $m = 1$ –6 с точностью до множителя 2–3, а при $m > 6$ дает заниженные по сравнению с экспериментом значения из-за дополнительного вклада в полное сечение процессов автоионизации. Роль этих процессов из-за своей сложности требует особого рассмотрения (см., например, [5, 12]) и здесь не обсуждается.

Расчеты, выполненные в настоящей работе в рамках ИРМ, выявили ряд особенностей сечений σ_m — зависимость от заряда и энергии иона, потенциалов ионизации мишени, числа выбитых электронов, которые приблизительно описаны ниже. Ввиду сложности задачи дать более точные оценки не представляется возможным.

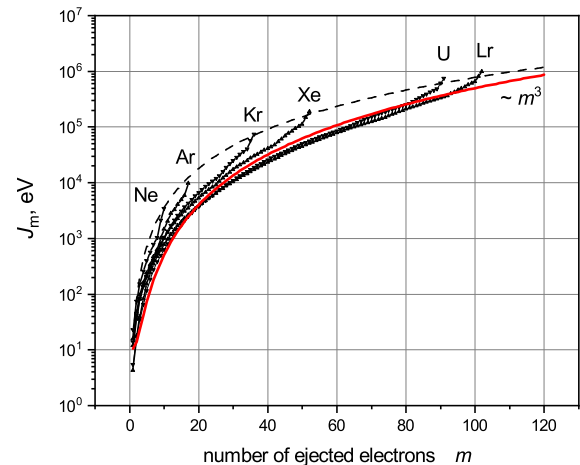


Рис. 5. Зависимости потенциалов ионизации J_m атомов (12) от числа выбитых электронов m . Символы — величины, полученные с помощью данных работы [26], штриховая кривая — оценка J_m по модели Томаса–Ферми (13), сплошная кривая — полуэмпирическая формула (14), согласно которой $J_m \approx m^3$

3. УБЫВАНИЕ СЕЧЕНИЙ С РОСТОМ ЭНЕРГИИ

Расчеты, выполненные в настоящей работе, показали, что в борновской (нерелятивистской) области энергий асимптотика сечений по энергии ионов $\sigma_m \propto 1/E^a$ сильно зависит от числа выбитых электронов m , например, при ионизации Ar ионами U^{50+} показатель a равен

m	1	2	4	6	8	10	14	18
a	0.7	0.85	1.1	1.6	2.6	3.5	5.8	7.8

(9)

и $a \approx 8$ при $m > 20$. Как видно из (9), при малых значениях m сечения σ_m убывают медленнее, чем по закону $\sigma \propto 1/E$ в теории возмущений. Такое поведение сечений наблюдалось экспериментально в [24] при ионизации Ar многозарядными ионами железа и урана и связано с многочастичным характером процесса ионизации. В работе [25] в рамках теории Бете предсказан более сильный закон убывания по m при малых m : $\sigma_m \propto 1/E^m$. В релятивистской области энергий $E > 5$ ГэВ/н сечения σ_m выходят на квазипостоянный режим из-за влияния релятивистских эффектов и резко убывают с ростом m как $\sigma_m(E_{rel}) \propto \text{const}/m^a$, $a \approx 4$ при $m \lesssim 5$ и $a \approx 20$ при $m > 8$, где const — константа, зависящая от заряда иона и атомной структуры атома (количества внутренних электронов и их энергий связи), но не зависящая от энергии иона E .

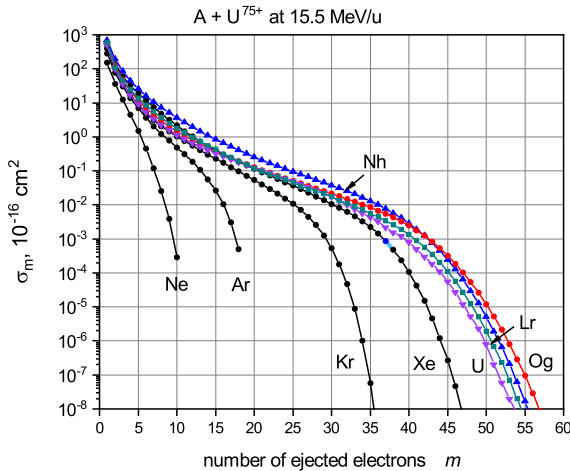


Рис. 6. Сечения многоэлектронной ионизации σ_m тяжелых и сверхтяжелых атомов ионами U^{75+} при энергии $E = 15.5 \text{ МэВ/н}$ в зависимости от числа выбитых электронов m , результат кода MIT

4. СЕЧЕНИЕ МНОГОЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ В МАКСИМУМЕ

Анализ свойств сечений, вычисленных по программе MIT, показал, что сечение σ_m^{max} в максимуме для атомов тяжелее Ag можно представить в виде

$$\sigma_m^{max} [\text{см}^2] \approx \frac{10^{-9} q}{(J_m [\text{эВ}])^{5/2}}, \quad (10)$$

$$m \geq 10, \quad q \geq 20, \quad Z \geq 18,$$

$$E_m^{max} [\text{кэВ/н}] \approx 10^{-3} \cdot 1836 \cdot 0.245 q^{1/4} I_{nl} [\text{эВ}] \approx 0.45 q^{1/4} I_{nl} [\text{эВ}], \quad (11)$$

где q — заряд иона, J_m — потенциал m -электронной ионизации атома, I_{nl} — энергия связи внутренней оболочки nl^s атома ($s = N - m$, N — полное число электронов атома). Например, для ионизации $m = 10$ электронов атома аргона $N = 18$ величина $s = 8$, что соответствует внутренней оболочке $\text{Ar}(2p^4)$ и, следовательно, в (11) надо использовать $I_{2p}(\text{Ar}) \approx 248 \text{ эВ}$. Близкая к (11) оценка значения E_m^{max} дана в работе [6]. Величина J_m равна сумме потенциалов ионизации I_s атома-мишени:

$$J_m = \sum_{s=1}^m I_s, \quad (12)$$

где $I_1, I_2, \dots, I_s$ — первый, второй и т. д. потенциалы ионизации атома-мишени. Например, для атома Xe при $m = 3$ потенциал J_3 согласно [26] равен

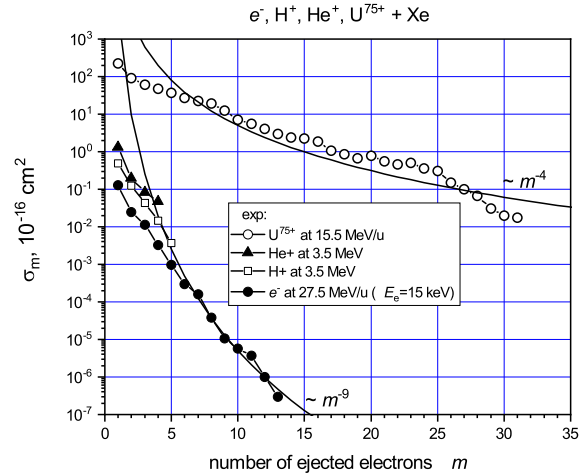


Рис. 7. Зависимости экспериментальных сечений σ_m атомов Xe от числа выбитых электронов m при столкновении с электронами, ионами H^+ , He^+ и U^{75+} . Темные кружки — сечения ионизации электронами при $E_e = 15 \text{ кэВ}$ (эквивалентная энергия $E_{eq} = 27.5 \text{ МэВ/н}$) [30], треугольники — ионами He^+ при $E = 3.5 \text{ МэВ/н}$ [31], квадраты — протонами H^+ при $E = 1 \text{ МэВ}$ [32], светлые кружки — ионами U^{75+} при $E = 15.5 \text{ МэВ/н}$ [5]. Сплошные кривые показывают законы убывания сечений по m

$$J_3 = I_1 + I_2 + I_3 = I(\text{Xe}^{0+}) + I(\text{Xe}^{1+}) + I(\text{Xe}^{2+}) \approx (12.0 + 23.54 + 35.11) \text{ эВ} = 70.65 \text{ эВ}.$$

При $m = N$, т. е. при отрыве всех N электронов атома-мишени, величины J_N хорошо описываются в модели Томаса–Ферми [27]:

$$J_m = 16.7 N^{7/3} \text{ эВ}, \quad m = N. \quad (13)$$

Согласно (10) и (11), с ростом заряда иона q сечение σ_m растет в максимуме как $\sigma_m^{max} \propto q$, а величина энергии иона в максимуме сдвигается в сторону больших значений: $E_m^{max} \propto q^{1/4}$.

В таблице приведены примеры величин σ_m^{max} и E_m^{max} для столкновений атомов Ag, Kr и Xe с многозарядными ионами висмута и урана, полученные по программе MIT и с помощью формул (10), (11). Видно, что формулы (10), (11) описывают численные расчеты с точностью до множителя 2–3.

Зависимости потенциалов J_m некоторых атомов от числа выбитых электронов m , полученные с помощью данных [26], приведены на рис. 5. Данные в модели Томаса–Ферми (13), штриховая кривая, хорошо описывают величины J_m при отрыве всех электронов мишени, $m = N$, но немного ниже данных [26] для тяжелых и сверхтяжелых атомов, так как в [26] величины J_m вычислены в релятивистском приближении. Данные J_m для Nh и Og на

Таблица. Максимумы сечений σ_m^{max} , соответствующие энергии налетающих ионов E_m^{max} , потенциалы m -электронной ионизации J_m и энергии связи внутренних оболочек атомов I_{nl} при столкновении атомов инертных газов с многозарядными ионами

Реакция	m	σ_m^{max} (MIT), 10^{-16} см ²	σ_m^{max} (11), 10^{-16} см ²	E_m^{max} (MIT), МэВ/н	E_m^{max} (12), МэВ/н	J_m , кэВ	I_{nl} , эВ	nl
Ar + U ⁴⁴⁺	10	2.32	5.13	0.16	0.29	1.49	248	2p
Ar + U ⁵⁰⁺	10	3.91	5.83	0.25	0.31	1.49	248	2p
Ar + U ⁵⁰⁺	17	0.019	0.052	1.61	3.84	9.85	3206	1s
Ar + Bi ⁶⁷⁺	10	5.56	7.82	0.4	0.32	1.49	248	2p
Ar + U ⁷⁵⁺	17	0.027	0.078	1.5	4.21	9.85	3206	1s
Ar + U ⁹¹⁺	15	0.85	0.52	0.4	0.45	4.97	326	2s
Ar + U ⁹¹⁺	17	0.048	0.095	2.56	4.45	9.85	3206	1s
Kr + U ⁵⁰⁺	12	4.61	4.1	0.25	0.12	1.72	100	3d
Kr + U ⁵⁰⁺	20	0.56	0.138	0.25	0.28	6.66	231	3p
Kr + U ⁵⁰⁺	30	0.012	0.0051	1.61	2.07	25	1731	2p
Xe + U ⁵⁰⁺	15	2.2	1.37	0.07	0.081	2.66	68	4d
Xe + U ⁵⁰⁺	20	0.56	0.234	0.16	0.18	5.35	152	4p
Xe + U ⁵⁰⁺	30	0.019	0.013	1.1	0.84	17.2	700	3d

рис. 5 не приведены, так как потенциалы ионизации I_m для них в литературе отсутствуют. В области значений m , где потенциалы J_m не растут резко вверх из-за вклада потенциалов ионизации K - и L -оболочек, величины J_m для U и Lr близки друг другу и аппроксимируются с точностью до множителя 2 формулой

$$J_m [\text{эВ}] \approx 100.0 + 0.45m^3, \quad 18 < m < N, \quad (14)$$

т.е. $J_m [\text{эВ}] \approx 0.45m^3$ при $m > 18$. Например, согласно [26], $J_{20}(\text{U}) = 3.77$ кэВ, $J_{20}(\text{Lr}) = 3.87$ кэВ, $J_{50}(\text{U}) = 50.0$ кэВ, $J_{50}(\text{Lr}) = 45.4$ кэВ, $J_{70}(\text{U}) = 250.3$ кэВ, $J_{70}(\text{Lr}) = 209.5$ кэВ; формула (14) соответственно дает $J_{20} = 3.70$ кэВ, $J_{50} = 56.4$ кэВ и $J_{70} = 154.5$ кэВ.

5. ЗАВИСИМОСТЬ СЕЧЕНИЙ ОТ ЧИСЛА ВЫБИТЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

На рис. 6 приведены зависимости сечений σ_m от числа выбитых электронов m для исследуемых атомов, полученные с помощью программы MIT, для столкновений с ионами U⁷⁵⁺ при $E = 15.5$ МэВ/н. Для ионизации $m = 1-3$ электронов сечения довольно велики, $\sigma_m \sim 10^{-14}-10^{-13}$ см², затем для Ne и Ar при $m < 10$ сечения убывают как $\sigma_m \propto m^{-2.2}$, и значительно быстрее для атомов тяжелее Kr: $\sigma_m \propto m^{-4}$, $10 \leq m \leq 40$. При $m > 40$ сечения резко убывают практически по экспоненциальному закону $\propto e^{-m}$, а при $m > 60$ сечения становятся очень

малыми величинами, $\sigma_m < 10^{-24}$ см², и поэтому на рисунке не приведены.

Сравнение сечений многоэлектронной ионизации атомов электронами и ионами показало, что сечение ионизации σ_m^{el} электронным ударом убывает с ростом m значительно быстрее, чем многозарядными ионами σ_m^{HCI} . Согласно полуэмпирической зависимости сечение σ_m^{el} убывает с ростом m как (см. [28])

$$\sigma_m^{el} \propto 1/(m^{5.7} J_m) \propto m^{-9}, \quad J_m \propto m^3, \quad 5 < m < N, \quad (15)$$

а зависимость сечений σ_m^{HCI} от потенциала J_m и m , полученная в настоящей работе, имеет вид

$$\sigma_m^{HCI} \propto 1/(m J_m) \propto m^{-4}, \quad J_m \propto m^3, \quad 5 < m < N. \quad (16)$$

Таким образом, сечения ионизации атомов многозарядными ионами убывают в m^5 раз медленнее, чем электронным ударом: $\sigma_m^{HCI}/\sigma_m^{el} \propto m^5$. Зависимость $\sigma_m^{HCI} \propto m^{-4}$ получена в работе [29] в приближении ИРМ с использованием метода внезапных возмущений. Имеющиеся экспериментальные данные по сечениям σ_m ионизации атомов однозарядными ионами H⁺ и He⁺ для $m = 1-5$ показывают зависимость от m , близкую к зависимости $\propto m^{-9}$. На рис. 7 приведены зависимости экспериментальных сечений σ_m атомов Xe при столкновении с электронами, ионами H⁺, He⁺ и U⁷⁵⁺ от числа выбитых электронов m . Из рисунка видно, что сечение ионизации Xe электронами убывает намного быстрее ($\propto m^{-9}$), чем ионами U⁷⁵⁺ ($\propto m^{-4}$), а закон убывания сечений ионизации

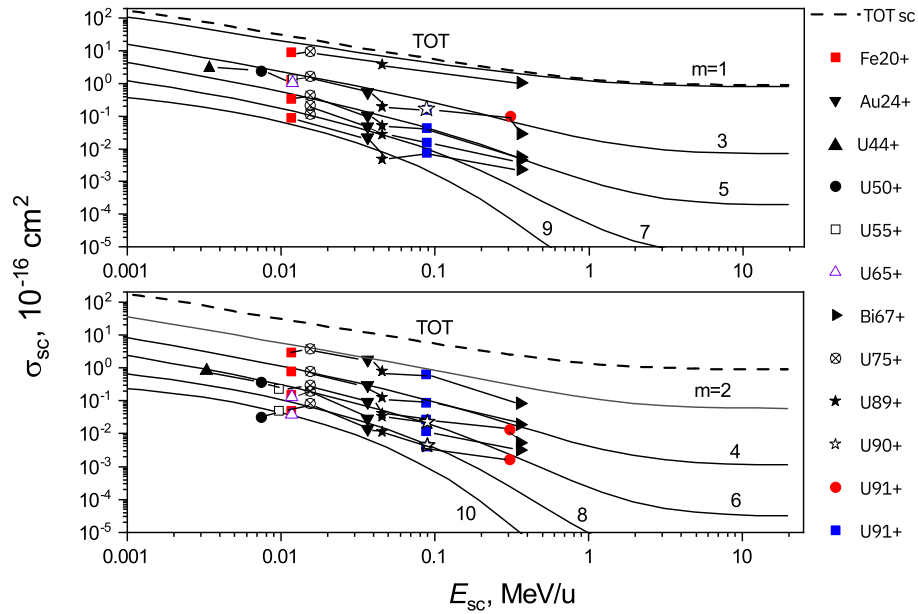


Рис. 8. Масштабированные сечения (20) отрыва $m \leq 10$ электронов атомов Ar ионами с зарядами $q = 20-91$. Сплошные кривые — масштабированные сечения ионизации атомов Ar ионами U^{50+} , вычисленные по программе MIT, настоящая работа. Символы — данные эксперимента. Данные с фиксированными значениями m соединены прямыми линиями. Эксперимент: красные квадраты — Fe^{20+} , $m = 1-8$, $E = 1.4$ МэВ/н [24], $\blacktriangledown$ — Au^{24+} , $m = 2-10$, $E = 5.9$ МэВ/н [8], $\blacktriangle$ — U^{44+} , $m = 3, 6$, $E = 1.4$ МэВ/н [6], $\bullet$ — U^{50+} , $m = 3, 6, 10$, $E = 3.9$ МэВ/н [6], $\square$ — U^{55+} , $m = 3, 6, 10$, $E = 5.9$ МэВ/н [6], $\triangle$ — U^{65+} , $m = 3, 6, 10$, $E = 9.4$ МэВ/н [6], $\blacktriangleright$ — Bi^{67+} , $m = 1-9$, $E = 300$ МэВ/н [8], $\otimes$ — U^{75+} , $m = 1-10$, $E = 15.5$ МэВ/н [6], темные звезды — U^{89+} , $m = 1-10$, $E = 60$ МэВ/н [8], светлые звезды — U^{90+} , $m = 3, 6, 10$, $E = 120$ МэВ/н [6], красные кружки — U^{91+} , $m = 3, 6, 10$, $E = 240$ МэВ/н [8], синие квадраты — U^{91+} , $m = 1-10$, $E = 420$ МэВ/н [6]

H^+ и He^+ близок к зависимости $\propto m^{-9}$. Указанное различие законов убывания по m для электронов, одно- и многозарядных ионов можно объяснить тем обстоятельством, что ионизация m электронов сильным кулоновским полем (притяжения) многозарядных ионов с зарядом $q \gg 1$ происходит с гораздо большей вероятностью, чем ионизация (отталкивающим) полем налетающих электронов или полем ионов H^+ и He^+ с зарядом $q = 1$.

6. МАСШТАБИРОВАНИЕ СЕЧЕНИЙ ПО ЗАРЯДУ НАЛЕТАЮЩЕГО ИОНА

Сечения σ_m многоэлектронной ионизации получают, как правило, с помощью нормировки ионной фракции зарядового состояния $m+$ к сечению чистой ионизации σ_{net} (net ionization), которая определяется суммой

$$\sigma_{net} = \sum_m m \sigma_m. \quad (17)$$

В области средних и больших энергий закон масштабирования для сечений σ_{net} , полученный на основе метода СТМС, имеет вид [33]

$$\sigma_{sc} = \sigma_{net}(E)/q, \quad E_{sc} = E/q, \quad (18)$$

где q и E — заряд и энергия налетающего иона, σ_{sc} и E_{sc} — масштабированные сечения и энергии соответственно. Сечения ионизации σ_m для не очень тяжелых атомов с $Z \leq 30$ малозарядными ионами (H^+ , He^{2+}) масштабируются по закону, основанному на борновском приближении [34]:

$$\sigma_{sc} = \sigma_m(E)/q^2, \quad E_{sc} = E. \quad (19)$$

Закон (19) иногда используют для сечений ионизации σ_m атомов многозарядными ионами (например, ионами U^{q+} в [8]), но в целом закон масштабирования для σ_m атомов многозарядными ионами до сих пор не принят из-за отсутствия достаточного объема экспериментальных данных и адекватной теории. В настоящей работе на основании экспериментальных данных и расчетов в приближении ИРМ предложен закон масштабирования в виде (см. также [35])

$$\sigma_{sc} = \sigma_m(E)/q^{0.7}, \quad E_{sc} = E/q^{1.6}. \quad (20)$$

На рис. 8 приведены масштабированные сечения (20) ионизации отрыва $m \leq 10$ электронов атомов Ag, для которых сечения σ_m исследованы наиболее полно, при масштабированных энергиях ионов $E_{sc} = E/q^{1.6} = 1$ кэВ/н–2.5 МэВ/н. Экспериментальные данные представлены для налетающих ионов с зарядами $q = 20$ –91 в виде символов, соединенных прямыми при фиксированном значении m . Вычисленные сечения σ_m , показанные сплошными кривыми, получены с помощью кода МПТ для столкновений атомов Ag с ионами U^{50+} . Штриховая кривая — масштабированное полное (суммарное) сечение многоэлектронной ионизации. Данные для четных и нечетных значений m разделены на два рисунка для более четкого отображения результатов.

На рис. 8 видно, что экспериментальные данные для ионизации атомов Ag ионами с зарядами $q = 20$ –91 получены в основном для диапазона энергий $E/q^{1.6} \approx 0.004$ –0.4 МэВ/н, что относится и к данным для остальных атомов Ne, Kr, I и Xe. Масштабированные экспериментальные данные σ_m для Ag хорошо согласуются между собой для $m \leq 10$, т.е. закон масштабирования (20) может быть использован по крайней мере для ионизации $m \leq 10$ электронов. Расчетные сечения описывают экспериментальные данные с точностью до множителя 2–3 при $m \leq 6$. При $m > 6$ расхождение теории с экспериментом становится больше из-за большого вклада в экспериментальные сечения процессов автоионизации, которые в настоящей работе не учитывались. Аналогичная ситуация имеет место и для ионизации атомов Ne, для которой имеется достаточное количество экспериментальных данных. Сечения σ_m для атомов Kr, I и Xe весьма малочисленны и не позволяют сделать какой-то определенный вывод о правомерности использования закона масштабирования (20). В целом применимость закона (20) может быть исследована более детально при получении дополнительных экспериментальных данных и создании более адекватной теории многоэлектронной ионизации нейтральных атомов многозарядными ионами.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены расчеты сечений m -электронной ионизации, $1 \leq m < 60$, тяжелых и сверхтяжелых атомов с $Z = 10$ –118 многозарядными ионами с зарядами $q = 20$ –91 и энергиями $E \approx 100$ кэВ/н–20 ГэВ/н, т.е. включая релятивистскую область. Расчеты проводились в модели независимых частиц с одноэлектронными вероятностями в приближении

нормированных экспонент, полученных с помощью парциальных сечений ионизации электронных оболочек атома-мишени. Вклад процессов автоионизации не учитывался. На основании полученных результатов рассмотрены зависимости сечений σ_m от энергии E , заряда иона q налетающего иона и числа выбитых электронов m . Предложен метод масштабирования сечений σ_m по заряду q . Получена формула для оценки сечений σ_m в максимуме с точностью до множителя 2–3. Показано, что при больших энергиях сечения ионизации σ_m атомов многозарядными ионами убывают как $\sigma_m \propto m^{-4}$, т.е. значительно медленнее, чем электронами и однозарядными ионами H^+ и He^+ ($\sigma_m \propto m^{-9}$) из-за сильного влияния кулоновского поля налетающих многозарядных ионов. Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных и предсказания сечений многоэлектронной ионизации тяжелых и сверхтяжелых атомов в широкой области энергий ионов, включая релятивистскую область.

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Tolstikhina, M. Imai, N. Winckler, and V. P. Shevelko, *Basic Atomic Interactions of Accelerated Heavy Ions in Matter*, Springer Int. Publ. AG, Cham, Switzerland (2018).
2. C. L. Cocke and R. E. Olson, *Phys. Rep.* **205**, 153 (1991).
3. J. H. McGuire, *Introduction to Dynamic Correlation: Multiple Electron Transitions in Atomic Collisions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1997).
4. V. Shevelko and H. Tawara, *Atomic Multielectron Processes*, Springer, Berlin (1998).
5. J. Ullrich, H. Schmidt-Böking, S. Kelbch et al., *Nucl. Instrum. Methods B* **23**, 131 (1987).
6. H. Berg, R. Dorner, C. Kelbch et al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 3929 (1988).
7. R. E. Olson, J. Ullrich, and H. Schmidt-Böking, *Phys. Rev. A* **39**, 5572 (1989).
8. H. Berg, PhD Thesis, Report GSI-93-12, Darmstadt, Germany (1993).
9. J. H. McGuire and L. Weaver, *Phys. Rev. A* **16**, 41 (1977).
10. T. Kirchner, L. Gulyas, H. J. Ludde et al., *Phys. Rev. A* **58**, 2063 (1998).

11. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, Phys. Scr. **90**, 074033 (2015).
12. C. C. Montanari and J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 105201 (2012).
13. R. E. Olson, *Electronic and Atomic Collisions*, ed. by H. B. Gilbody, W. R. Newell, F. H. Read, and A. C. H. Smith, Elsevier Science, New York (1988).
14. C. L. Cocke, Phys. Rev. A **20**, 749 (1979).
15. R. D. Evans, *The Atomic Nucleus*, McGraw Hill, Bombay–New Delhi (1955).
16. A. Russek and J. Meli, Physica **46**, 222 (1970).
17. V. P. Shevelko, D. Kato, M. S. Litsarev, and H. Tawara, J. Phys. B **43**, 215202 (2010).
18. M. Horbatsch and R. M. Dreizler, Z. Phys. D **2**, 183 (1986).
19. M. Horbatsch, J. Phys. B **25**, 3797 (1992).
20. B. Sulik, I. Kadar, S. Ricz, D. Varga, J. Vegh, G. Hock, and D. Berenyi, Nucl. Instrum. Methods B **28**, 509 (1987).
21. I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, JETP **119**, 1 (2014).
22. J. P. Desclaux, At. Data Nucl. Data Tables **12**, 311 (1973).
23. P. Richard, J. Ullrich, S. Kelbch, H. Schmidt-Bocking, R. Mann, and C. L. Cocke, Nucl. Instrum. Methods A **240**, 532 (1985).
24. A. Muller, B. Schuch, W. Groh, E. Salzborn, H. F. Beyer, P. H. Mokler, and R. E. Olson, Phys. Rev. A **33**, 3010 (1986).
25. M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971).
26. T. A. Carlson, C. W. Nestor, Jr., N. Wasserman, and J. D. McDowell, At. Data Nucl. Data Tables **2**, 63 (1970).
27. E. A. Milne, Proc. Cambridge Phil. Soc. **23**, 794 (1927).
28. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, Phys.-Uspekhi **66**, 1177 (2023).
29. A. B. Voitkiv and A. V. Pazderskii, Opt. Spectrosc. **39**, 384 (1996).
30. B. L. Schram, Physica **32**, 197 (1966).
31. A. C. F. Santos, W. S. Melo, M. M. Sant’Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A **63**, 062717 (2001).
32. E. G. Cavalcanti, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, and H. Schmidt-Bocking, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, 3087 (2003).
33. A. S. Schlachter, K. H. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle, P. J. Schneider, K. R. Stalder, J. W. Stearns, J. A. Tanis, and R. E. Olson, Phys. Rev. A **23**, 2331 (1981).
34. C. J. Patton, M. B. Shah, M. A. Bolorizadeh, J. Geddes, and H. B. Gilbody, J. Phys. B **28**, 3889 (1995).
35. V. P. Shevelko, D. B. Uskov, and H. Tawara, *Book of Abstracts of XX ICPEAC*, Vienna 1997, p. WE164, Tech. Univ., Vienna (1997).