ЖЭТФ, 2000, том 118, вып. 4 (10), стр. 764–776

О ВОЗБУЖДЕНИИ И ПОТЕРЕ ЭЛЕКТРОНА НАЛЕТАЮЩИМИ ИОНАМИ В РЕЛЯТИВИСТСКИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ С АТОМАМИ

А. Б. Войткив[ab*], *Н. Грюн*[a**], *В. Шайд*[a**]

[a] *Институт теоретической физики D-35392, Гиссен, Германия*

[b] *Институт электроники им. У. А. Арифова Академии наук Республики Узбекистан 700143, Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 23 июля 1999 г.

В рамках первого порядка теории возмущений рассматриваются возбуждение и потеря электрона ионами при релятивистских столкновениях с атомами. Получены общие выражения для сечений возбуждения и потери электрона. В пределе нерелятивистских скоростей столкновений эти выражения переходят в известные нерелятивистские результаты. Показано, что, в противоположность нерелятивистским столкновениям, в ультрарелятивистских столкновениях эффекты экранировки ядра атома-мишени атомными электронами являются очень важными для процессов возбуждения и потери электрона ионами даже для столкновений тяжелых ионов с легкими атомами. Результаты наших расчетов для сечения потери электрона находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными.

PACS: 34.10.+x, 43.50.Fa

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы возбуждения и потери электронов налетающими частицами в нерелятивистских столкновениях с атомными мишенями довольно интенсивно изучались в течение нескольких последних десятилетий (см., например, [1–3] и цитируемую там литературу). Это изучение привело к неплохому пониманию этих процессов, в особенности тех из них, которые могут быть описаны в рамках первого порядка теории возмущений по взаимодействию сталкивающихся структурных частиц. Кроме того, в последнее время для исследования этих процессов использовались также некоторые подходы, лежащие вне рамок первого порядка теории возмущений (см., например, [4] и цитированную там литературу).

При рассмотрении в первом порядке теории возмущений процесс возбуждения (потери) электрона налетающей частицы в столкновении с атомом традиционно разбивается на так называемые процессы экранировки и антиэкранировки (для первого процесса используются также термины «упругая» (для атома), «когерентная» мода, для второго — «неупругая», «некогерентная» мода, см., например, [1]). В первом случае процесс перехода электрона между состояниями налетающей частицы происходит за счет взаимодействия этого электрона с ядром атома-мишени, экранированного «пассивными» атомными электронами, остающимися в своем исходном атомном состоянии. Во втором случае процесс возбуждения (потери) электрона налетающей частицы идет благодаря «прямому» взаимодействию этого электрона с электронами атома, совершающими вследствие этого переходы в возбужденные состояния (в том числе и континуум) атома.

В резком контрасте с состоянием теории нерелятивистских столкновений теория релятивистских столкновений двух составных атомных частиц, каждая из которых несет электрон(ы), не была сформулирована даже в первом порядке теории возму-

*E-mail: Alexander.Voitkiv@theo.physik.uni-giessen.de

**N. Grün and W. Scheid, Institute for Theoretical Physics (Theorie II) at the Justus–Liebig–University Giessen, Heinrich–Buff–Ring 16, D-35392 Giessen, Germany.

щений (см., например, дискуссию в монографии [2, с. 133–135]). Можно отметить лишь считанные попытки дать описание процесса потери электрона ионом в релятивистских столкновениях с атомами. Одна из них была сделана в работах [5, 6], где, по существу, оценивался лишь вклад в сечение потери электрона от упругой моды. Метод, использованный в этих работах, базируется на результатах первого порядка теории возмущений для ионизации и возбуждения электронов K-оболочки в релятивистских столкновениях с бесструктурными точечными зарядами [7, 8]. Для того чтобы учесть фундаментальное различие между столкновениями с точечным зарядом и нейтральным атомом, авторы работ [5, 6] использовали известные результаты для потери электронов ионами в нерелятивистских столкновениях с нейтральными атомами, введя при этом некоторые интуитивные предположения для адаптации этого нерелятивистского случая для релятивистских столкновений. Наиболее полный набор результатов для сечений потери электронов, полученных этим путем, был представлен в работе [6], где были рассчитаны сечения потери электрона налетающими ионами для различных пар ион-снаряд–атом-мишень вплоть до очень высоких энергий столкновения, соответствующих $\gamma \leq 1000$, где γ — лоренцевский фактор.

В эксперименте [9] изучались захват и потеря электрона ионами Pb, проходящими через различные твердотельные мишени (от Be до Au) при энергии столкновения $E = 160$ ГэВ/ат. ед. Результаты этого эксперимента для сечений потери электрона существенно отличаются от теоретических предсказаний [6].

В работе [10] в рамках первого порядка теории возмущений было дано простое полукачественное рассмотрение для вклада в полное сечение потери электрона от процесса экранировки. В рамках подхода, использованного в [10], эта часть полного сечения потери разбивается на вклады от «близких» и «дальних» столкновений. Вклад в сечение от «близких» столкновений рассчитывался в приближении «бинарного» столкновения между электроном налетающего иона и ядром нейтрального атома-мишени. Вклад в сечение от дальних столкновений оценивался с помощью метода эквивалентных фотонов. Поскольку вклад в сечение потери электрона от процесса антиэкранировки в принципе не может рассматриваться подобным образом, эта часть сечения потери оценивалась в [10] с помощью соотношения между сечениями экранировки и антиэкранировки, следующего из так называемого приближения свободных столкновений, введенного впервые Бором (см., например, [1, 2]). Оценки для сечения потери, полученные в [10], находятся в разумном согласии с экспериментом [9].

Настоящая работа является попыткой дать в рамках первого борновского приближения более строгое и общее описание процессов возбуждения и потери электронов ионами в релятивистских столкновениях с атомами. Наше рассмотрение ограничено в основном ионами, несущими лишь один электрон. Критерии применимости первого порядка теории возмущений для анализа переходов электрона между уровнями иона из-за взаимодействия с атомом могут быть сформулированы как

1) $Z_I < Z_A$, где Z_I — заряд иона, Z_A — заряд ядра атома и

2) $Z_A < v$, где v — скорость столкновения. Условие 2) применимо при любых соотношениях между Z_I и Z_A и в релятивистских столкновениях выполняется для любых возможных значений Z_A.

Данная работа построена следующим образом. В разд. 2 дано общее рассмотрение возбуждения и потери электронов ионами в релятивистских столкновениях с атомами. В разд. 3 вводится приближение нерелятивистского атома и в его рамках рассчитываются вклады в сечения возбуждения и потери электрона от упругой и неупругой мод столкновения. Результаты численных расчетов приведены в разд. 4, где они сравниваются с имеющимися экспериментальными данными [9, 11] и результатами расчетов [6, 10].

В статье используется четырехмерная метрика, определяемая метрическим тензором $g_{\mu\nu}(\mu, \nu = 0, 3)$ с компонентами $g_{00} = -g_{11} = -g_{22} = -g_{33} = 1$; $g_{\mu\nu} = 0$, $\mu \neq \nu$. Если особо не указано иное, используются атомные единицы.

2. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ

Поскольку столкновения, при которых ядра сталкивающихся атомных частиц (иона и атома) проникают друг в друга, вносят пренебрежимо малый вклад в сечения атомных процессов, такими столкновениями и, соответственно, неэлектромагнитными силами в данной задаче можно пренебречь. Тогда в рамках первого порядка теории возмущений S-матричный элемент перехода имеет вид (см., например, [12])

$$S_{fi} = -\frac{i}{c} \int d^4x \, J_\mu^I(x) A_A^\mu(x), \tag{1}$$

где $J_\mu^I(x)$ — четырехмерный электромагнитный ток перехода иона в пространственно-временной точке x, $A_A^\mu(x)$ — четырехмерный потенциал электромагнитного поля, создаваемого атомом в той же точке x, и c — скорость света в вакууме. В (1) и ниже по повторяющимся греческим индексам подразумевается суммирование. Потенциал рассчитывается из уравнения Максвелла

$$\Box A_A^\mu(x) = -\frac{4\pi}{c} J_A^\mu(x), \tag{2}$$

где $J_A^\mu(x)$ — четырехмерный ток перехода атома.

Так как ядерные и атомные масштабы энергий сильно различаются, вкладом в процессы возбуждения и потери электронов от кулоновских столкновений между ионом и атомом, сопровождающихся возбуждением и развалом ядер, можно пренебречь. Поэтому ядра сталкивающихся частиц можно рассматривать как бесструктурные точечные заряды. Кроме того, простые оценки показывают, что в системе отсчета, где ядро одной из сталкивающихся частиц исходно покоилось, его типичная скорость после столкновения гораздо меньше характерной атомной скорости $v_0 \sim 1$ ат. ед. С учетом этих замечаний удобный способ расчета (1) следующий. Во-первых, рассчитаем ток $J_\mu^I(x)$ в системе отсчета K_I, где ион исходно покоится. Во-вторых, определим ток $J_A^\mu(x_A)$ в системе отсчета K_A, где атом исходно покоился, и найдем в этой системе значение 4-потенциала $A_A^\mu(x_A)$. Затем, используя трансформационные свойства потенциала, преобразуем этот потенциал в систему отсчета K_I и рассчитаем там матричные элементы перехода и соответствующие сечения.

В предположении, что ион несет только один электрон, ионный ток перехода в системе отсчета K_I можно записать следующим образом:

$$J_\mu^I(x) = \int d^3R_I \times \\ \times \int d^3r\, \overline{\Psi}_f(\mathbf{R}_I, \mathbf{r}, t) j_\mu^I \Psi_i(\mathbf{R}_I, \mathbf{r}, t), \tag{3}$$

где j_μ^I — оператор плотности тока. Поскольку этот оператор является локальным, то (в формализме первичного квантования) он может быть записан как

$$j_\mu^I = Z_I v_\mu^I \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{R}_I) - c\gamma_\mu \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{R}_I - \mathbf{r}), \tag{4}$$

где Z_I — атомный номер иона, $\mathbf{R}_I$ — координата ядра иона, $\mathbf{r}$ — координата электрона иона по отношению к ядру этого иона, γ_μ — дираковские γ-матрицы для электрона, $\delta^{(3)}$ — трехмерная дельта-функция. Поскольку в системе отсчета K_I трехмерная скорость иона равна нулю в его исходном состоянии и пренебрежимо мала в конечном состоянии, четырехкомпонентная величина v_μ^I, входящая в (4), может быть записана как $v_\mu^I = (c, 0, 0, 0)$. В (4) мы пренебрегли спином ядра в ядерной части оператора тока. Оправдание этого шага лежит в чрезвычайно большом различии между массами электронов и ядер (см., например, обсуждение метода эквивалентных фотонов [13]).

В уравнении (3) волновая функция исходного и конечного состояний иона имеет вид

$$\Psi_{i,f}(\mathbf{R}_I, \mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V_I}} \times \\ \times \exp(i\mathbf{p}_{i,f} \cdot \mathbf{R}_I - i\varepsilon_{i,f} t)\psi_{0,n}(\mathbf{r}). \tag{5}$$

В (5) индексы i и f обозначают соответственно исходное и конечное состояния иона, $\mathbf{p}_{i,f}$ — полный трехмерный импульс ($\mathbf{p}_i = 0$), $\varepsilon_{i,f}$ — полная энергия (включая энергию покоя) иона, $\psi_{0,n}$ — релятивистские дираковские биспиноры, описывающие исходное и конечное внутренние состояния иона, V_I — нормировочный объем для плоской волны, описывающей свободное движение иона до и после столкновения. Ниже нас будут интересовать лишь столкновения, в процессе которых внутреннее состояние иона изменяется: $n \neq 0$. Для процесса электронного возбуждения конечное состояние ψ_n является дискретным состоянием иона. В противном случае состояние ψ_n является состоянием непрерывного спектра иона, соответствующим образом нормированным, и описывает процесс потери электрона ионом.

Анзатц (5) представляет обычную форму волновой функции для свободной атомной системы, двигающейся с нерелятивистской скоростью[1)] (см., например, [14]), где мы пренебрегли несущественным для рассматриваемой задачи различием между координатой ядра иона и координатой центра масс иона.

Подставляя (4) и (5) в (3) и выполняя элементарное интегрирование по координате $\mathbf{R}_I$, получаем (для $n \neq 0$)

$$J_\mu^I(x) = c\frac{F_\mu^I(n0; \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f)}{V_I} \times \\ \times \exp\left[i(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \cdot \mathbf{x} - i(\varepsilon_i - \varepsilon_f)t\right]. \tag{6}$$

1) Поскольку плоская волна $\exp(kx)$ имеет лоренц-ковариантную форму, выражение (5) может быть также использовано для описания свободной атомной системы, двигающейся с релятивистской скоростью в случае, если величина спина ядра атомной системы не важна для процесса столкновения.

Мы будем называть четырехкомпонентную величину

$$F_\mu^I(n0;\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)=-\int d^3r\,\overline{\psi}_n(\mathbf{r})\times \times\exp\left[-i(\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)\cdot\mathbf{r}\right]\gamma_\mu\psi_0(\mathbf{r}) \quad (7)$$

с компонентами

$$\begin{gathered}F_0^I(n0;\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)=-\int d^3r\,\psi_n^\dagger(\mathbf{r})\times\\ \times\exp\left[-i(\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)\cdot\mathbf{r}\right]\psi_0(\mathbf{r}),\quad \mu=0,\\ F_l^I(n0;\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)=-\int d^3r\,\psi_n^\dagger(\mathbf{r})\times\\ \times\exp\left[-i(\mathbf{p}_i-\mathbf{p}_f)\cdot\mathbf{r}\right]\alpha_l\psi_0(\mathbf{r}),\quad \mu=l=1,2,3,\end{gathered}\quad (8)$$

(неупругим) формфактором иона. В (7) α_l — дираковские α-матрицы. Легко видеть из (7), что хотя величина F_μ^I сама по себе не обладает трансформационными свойствами релятивистского 4-вектора, величина F_μ^I/V_I формирует такой вектор.

Перейдем к расчету потенциала, создаваемого атомом. Мы найдем атомный ток $J_A^{'\mu}(x_A)$ в системе отсчета K_A и получим в этой системе потенциал $A_A^{'\mu}(x_A)$, где $x_A=(ct_A,\mathbf{x}_A)$ — пространственно-временная координата в системе K_A. Способом, полностью аналогичным использованному выше для получения ионного тока, для атомного 4-тока перехода находим

$$J_A^{'\mu}(x_A)=c\frac{F_A^\mu(m0;\mathbf{P}'_i-\mathbf{P}'_f)}{V'_A}\times \times\exp\left[i(\mathbf{P}'_i-\mathbf{P}'_f)\cdot\mathbf{x}_A-i(E'_i-E'_f)t_A\right], \quad (9)$$

где $\mathbf{P}'_{i,f}$ — трехмерные импульсы, а $E'_{i,f}$ — полные энергии (включая энергии покоя) атома соответственно в исходном и конечном состояниях, V'_A — нормировочный объем для атома в системе отсчета K_A. Компоненты атомного формфактора F_A^μ определяются следующим образом:

$$\begin{gathered}F_A^0(m0;\mathbf{Q})=Z_A\delta_{m0}-\\ -\int\prod_{i=1}^{N_A}d^3\xi_i u_m^\dagger(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})u_0(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})\times\\ \times\sum_{i=1}^{N_A}\exp(-i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\xi}_i),\\ F_A^l(m0;\mathbf{Q})=-\int\prod_{i=1}^{N_A}d^3\xi_i u_m^\dagger(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})\times\\ \times\sum_{i=1}^{N_A}\alpha_{l(i)}\exp(-i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\xi}_i)\times\\ \times u_0(\boldsymbol{\xi}_1,\ldots,\boldsymbol{\xi}_{N_A}),\quad l=1,2,3.\end{gathered}\quad (10)$$

Здесь Z_A — атомный номер, N_A — число электронов атома (для нейтрального атома $N_A=Z_A$), $\alpha_{l(i)}$ — α-матрицы Дирака для i-го атомного электрона, $u_{0,m}$ — волновые функции, описывающие исходное и конечное внутренние состояния атома, $\boldsymbol{\xi}_i$ — координата i-го атомного электрона по отношению к атомному ядру. Так как внутриатомное движение самых внутренних электронов в тяжелых атомах является релятивистским, то в общем случае предполагается, что $u_{0,m}$ — релятивистские волновые функции.

Уравнения (9) и (10) получены в тех же приближениях, что и уравнения (6) и (7). Единственное существенное различие между формфакторами (7) и (10) заключается в том, что для атома мы учитываем также возможность оставаться после столкновения в исходном внутреннем состоянии u_0. Нулевые компоненты выражений (7) и (10) имеют знакомый вид формфакторов, появляющихся при описании возбуждения и потери электрона ионами в нерелятивистских столкновениях (см., например, [1]). Три другие компоненты этих формфакторов не имеют аналогов в нерелятивистской теории. Отметим, что величина F_A^μ/V'_A является 4-вектором.

Для решения уравнения (2) удобно использовать четырехмерное преобразование Фурье:

$$A_A^{'\mu}(x_A)=\frac{1}{(2\pi)^2}\int d^4k\,B_A^\mu(k)\exp(-ikx_A),$$

$$J_A^{'\mu}(x_A)=\frac{c}{V'_A}\int d^4k\exp(-ikx_A)\times \times\delta^{(4)}(k+P_f-P_i)F_A^\mu(m0;\mathbf{k}). \quad (11)$$

В (11) kx_A — скалярное произведение двух четырехмерных векторов k и x_A, а $\mathbf{k}$ — «пространственная» часть k. Подставляя (11) в уравнение для фурье-образа $B_A^\mu(k)$,

$$\Box' A_A^{'\mu}(x_A)=-\frac{4\pi}{c}J_A^{'\mu}(x_A),$$

находим

$$B_A^\mu(k)=4\pi\frac{(2\pi)^2\delta^{(4)}(k+P_f-P_i)}{k^2-i0}\,\frac{F_A^\mu(m0;\mathbf{k})}{V'_A}. \quad (12)$$

Соответственно, для 4-потенциала получаем

$$A_A^{'\mu}(x_A)=4\pi\frac{\exp\left[-i(P'_i-P'_f)x_A\right]}{\left(P'_i-P'_f\right)^2-i0}\times \times\frac{F_A^\mu(m0;\mathbf{P}'_i-\mathbf{P}'_f)}{V'_A}. \quad (13)$$

В уравнении (13) член $-i0$ дает правило обхода (см., например, [12]) сингулярности в знаменателе. Эта сингулярность появляется, если

$$(P_i' - P_f')^2 = (\mathbf{P}_i' - \mathbf{P}_f')^2 - (E_i' - E_f')^2/c^2 = 0.$$

Пусть $a_{\mu\nu}$ является матрицей лоренцевского преобразования из системы отсчета K_A в систему отсчета K_I. Тогда для потенциала, создаваемого атомом в системе отсчета K_I, имеем

$$A_A^\mu(x) = a_\nu^\mu A_A^{'\nu}(a^{-1}x) = \\ = 4\pi \frac{\exp\left[-i(P_i - P_f)x\right]}{(P_i - P_f)^2 - i0} a_\nu^\mu \frac{F_A^\nu(m0;\mathbf{Q})}{\gamma V_A}. \quad (14)$$

В (14) $P_{i(f)}$ — исходный (конечный) 4-импульс атома в системе K_I, $V_A = V_A'/\gamma$ — нормировочный объем атома в этой системе, $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ — лоренцевский фактор, $\mathbf{v}$ — скорость налетающего атома в системе отсчета K_I (скорость столкновения).

Передача импульса $\mathbf{Q} = \mathbf{P}_i' - \mathbf{P}_f'$, входящая (14), может быть переписана как

$$\mathbf{Q} = \left(\mathbf{P}_{i\perp} - \mathbf{P}_{f\perp}, \frac{1}{\gamma}(\mathbf{P}_{i\parallel} - \mathbf{P}_{f\parallel}) + \frac{v}{c^2}(E_f' - E_i')\right) \approx \\ \approx \left(\mathbf{P}_{i\perp} - \mathbf{P}_{f\perp}, \frac{1}{\gamma}(\mathbf{P}_{i\parallel} - \mathbf{P}_{f\parallel}) + \frac{v}{c^2}(\epsilon_m - \epsilon_0)\right), \quad (15)$$

где $\mathbf{P}_\perp$ — поперечная (перпендикулярная скорости столкновения), а $\mathbf{P}_\parallel$ — продольная (параллельная скорости столкновения) компоненты трехмерного импульса $\mathbf{P}$ атома в системе K_I, ϵ_0 и ϵ_m — энергии электронов атома в исходном (0) и конечном (m) его (внутренних) состояниях, данные в системе отсчета K_A. Отметим, что поперечная и продольная компоненты передачи импульса $\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f$ по-разному входят в атомный формфактор в (14), что приводит к появлению важных особенностей в компенсации поля атомного ядра полями атомных электронов в ультрарелятивистских столкновениях.

Подставляя правые стороны уравнений (6) и (14) в (1) и интегрируя по d^4x, получаем

$$S_{fi} = i\frac{4\pi}{V_I V_A}(2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_i + P_i - p_f - P_f) G_{fi}, \quad (16)$$

где

$$G_{fi} = \frac{F_\mu^I(n0;\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)\gamma^{-1} a_\nu^\mu F_A^\nu(m0;\mathbf{Q})}{(P_i - P_f)^2 - i0}. \quad (17)$$

Напомним, что формфакторы F_μ^I и F_A^ν, даваемые выражениями (7) и (10), определены соответственно в системах отсчета K_I и K_A.

Используя стандартную технику (см., например, [12]) получения сечения процесса по известному S-матричному элементу перехода, для сечения процесса, в котором ион и атом совершают соответственно переходы $\psi_0 \to \psi_n$ и $u_0 \to u_m$, получаем

$$\sigma_{0\to n}^{0\to m} = \frac{4}{v^2}\frac{E_i + \varepsilon_i - \varepsilon_f}{E_i} \times \\ \times \sum_{s_I}\sum_{s_A}\int d^2q_\perp |G_{fi}|^2 = \frac{4}{v^2}\frac{E_i + \varepsilon_i - \varepsilon_f}{E_i} \times \\ \times \sum_{s_I}\sum_{s_A}\int d^2q_\perp \left| F_\mu^I(n0; -\mathbf{q}_\perp, -q_{min}) \times \right. \\ \left. \times\, \gamma^{-1} a_\nu^\mu F_A^\nu\left(m0;\mathbf{q}_\perp, \frac{q_{min}}{\gamma} + \frac{v}{c^2}(\epsilon_m - \epsilon_0)\right)\right|^2 \times \\ \times \left[q_\perp^2 + q_{min}^2 - \frac{(\varepsilon_f - \varepsilon_i)^2}{c^2}\right]^{-2}, \quad (18)$$

где E_i и $E_f = E_i + \varepsilon_i - \varepsilon_f$ — полные исходная и конечная энергии атома в системе отсчета K_I. Суммирование в (18) означает суммирование по спинам электронов иона и атома. Это суммирование подразумевает усреднение по проекциям спинов электронов в исходном состоянии и суммирование по проекциям спинов в конечном состоянии. В (18) интегрирование по абсолютному значению поперечной компоненты $\mathbf{q}_\perp$ передачи импульса проводится от нуля до некоторой максимальной величины $q_\perp^{max}$, которую в нашем случае, как обычно, можно положить равной бесконечности (см., например, [2]). С той же точностью множитель $(E_i + \varepsilon_i - \varepsilon_f)/E_i$ в (18) может быть заменен единицей. Минимальное значение передачи импульса $q_{min} = |\mathbf{P}_i| - |\mathbf{P}_f|$, входящее в (18), может быть определено из закона сохранения энергии для рассматриваемых столкновений:

$$\varepsilon_i + \sqrt{c^2\mathbf{P}_i^2 + M_{Ai}^2c^4} = \varepsilon_f + \sqrt{c^2\mathbf{P}_f^2 + M_{Af}^2c^4}, \quad (19)$$

где M_{Ai} и M_{Af} — массы покоя атома, находящегося соответственно в исходном (u_0) и конечном (u_m) состояниях. В силу большого различия в массах электрона и иона энергией отдачи иона в системе отсчета K_I можно пренебречь, и для разности полных энергий иона до и после столкновения имеем $\varepsilon_f - \varepsilon_i \approx \varepsilon_n - \varepsilon_0$, где $\varepsilon_{0(n)}$ — энергия ионного электрона (иона) в исходном (конечном) внутреннем состоянии $\psi_{0(n)}$ иона. Принимая во внимание, что 1) изменение абсолютного значения трехмерного импульса атома мало́ в сравнении с его исходной величиной, $P_i + P_f \approx 2P_i$, 2) разность в массах покоя атома мала в сравнении с его исходной массой покоя, $M_{Ai} + M_{Af} \approx 2M_{Ai}$, и 3) полная энергия атома в системе отсчета K_I гораздо больше, чем разность между конечной и исходной энергиями иона в этой системе, уравнение (19) легко решается. В результате имеем

$$q_{min} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v} + \frac{(M_{Af} - M_{Ai})c^2}{v\gamma} = \\ = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v} + \frac{\epsilon_m - \epsilon_0}{v\gamma}, \quad (20)$$

где $(M_{Af} - M_{Ai})c^2 = \epsilon_m - \epsilon_0$ — разность между конечной и начальной энергией атома в системе отсчета K_A.

Удобно также ввести величину

$$Q_{min} = \frac{q_{min}}{\gamma} + \frac{v}{c^2}(\epsilon_m - \epsilon_0) = \\ = \frac{\epsilon_m - \epsilon_0}{v} + \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_0}{v\gamma}, \quad (21)$$

играющую для атома ту же роль, что величина q_{min} играет для иона.

Принимая во внимание выражения (20) и (21), выражение для сечения (18) может быть переписано в виде, ясно подчеркивающем симметрию параметров иона и атома, входящих в это выражение:

$$\sigma_{0\to n}^{0\to m} = \frac{4}{v^2} \sum_{s_I} \sum_{s_A} \int d^2 q_\perp \times \\ \times \left| F_\mu^I \left(n0; -\mathbf{q}_\perp, -\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v} - \frac{\epsilon_m - \epsilon_0}{v\gamma} \right) \times \right. \\ \left. \times\, a_\nu^\mu F_A^\nu \left(m0; \mathbf{q}_\perp, \frac{\epsilon_m - \epsilon_0}{v} + \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v\gamma} \right) \right|^2 \times \\ \times \left[q_\perp^2 + \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0 + \epsilon_m - \epsilon_0)^2}{v^2\gamma^2} + \right. \\ \left. + 2(\gamma - 1) \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)(\epsilon_m - \epsilon_0)}{v^2\gamma^2} \right]^{-2}. \quad (22)$$

Выражения (18) и (22) являются первым основным результатом данной работы. Если ион и атом исходно находятся в основных состояниях, то из уравнения (22) следует, что сингулярность в (13), (14) и последующих выражениях не возникает. Имея целью рассмотрение именно таких столкновений, в (18) и последующих выражениях мы опустили член $-i0$.

Используя явный вид матрицы a_μ^ν (см., например, [2]), связь между формфакторами в (22) можем записать в следующей симметричной форме:

$$F_\mu^I \gamma^{-1} a_\mu^\nu F_A^\nu = \left(F_0^I - \frac{v}{c} F_3^I \right) \left(F_A^0 - \frac{v}{c} F_A^3 \right) + \\ + \frac{F_3^I F_A^3}{\gamma^2} + \frac{F_1^I F_A^1 + F_2^I F_A^2}{\gamma}. \quad (23)$$

В сравнении с известным видом сечений возбуждения и потери электрона ионом в нерелятивистских столкновениях с атомами выражения (22) и (23) содержат два типа релятивистских эффектов. Первый из них связан с величиной скорости столкновения v и исчезает при $v/c \ll 1$. Этот тип включает эффект запаздывания электромагнитного поля, описываемый членом $(\varepsilon_f - \varepsilon_i)^2/c^2 \approx (\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2/c^2$ в знаменателях подынтегральных выражений в (18) и (22), разную зависимость формфакторов иона и атома от энергий переходов $\varepsilon_n - \varepsilon_0$ и $\epsilon_m - \epsilon_0$, а также связь между нулевой и третьей компонентами формфакторов в выражении (23). Второй тип релятивистских эффектов связан с возможным релятивистским движением электронов внутри иона и атома, поэтому он не исчезает в пределе $v/c \ll 1$. Он включает связь между пространственными компонентами соответствующих формфакторов в (23). В пределе $c \to \infty$ оба типа релятивистских эффектов исчезают и выражение (22) воспроизводит известный вид (см., например, [1, 3] и цитируемую там литературу) соответствующих нерелятивистских сечений.

Если после столкновения внутреннее состояние атома не детектируется, то следует просуммировать по всему возможному набору этих состояний. Выражение (18) тогда дает

$$\sigma_{0\to n} = \frac{4}{v^2} \sum_{s_I} \sum_{m} \int d^2 q_\perp \times \\ \times \left| F_\mu^I (n0; -\mathbf{q}_\perp, -q_{min}) \gamma^{-1} a_\nu^\mu F_A^\nu (m0; \mathbf{q}_\perp, Q_{min}) \right|^2 \times \\ \times \left[q_\perp^2 + q_{min}^2 - \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2}{c^2} \right]^{-2}. \quad (24)$$

Знак суммирования по атомным состояниям в (24) подразумевает также суммирование по спинам атомных электронов. Сечение (24) может быть представлено как сумма вкладов от упругой ($m = 0$) и неупругой (все $m \neq 0$) мод. Принимая во внимание (20), для вклада в сечение от упругой моды (сечение экранировки) получаем

$$\sigma_{0\to n}^s = \frac{4}{v^2} \sum_{s_I} \int d^2 q_\perp \times \\ \times \left| F_\mu^I (n0; -\mathbf{q}_\perp, -q_{min}) \gamma^{-1} a_\nu^\mu F_A^\nu (00; \mathbf{q}_\perp, q_{min}/\gamma) \right|^2 \times \\ \times \left[q_\perp^2 + \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)^2}{v^2\gamma^2} \right]^{-2}. \quad (25)$$

Соответственно для вклада в сечение от неупругой моды (сечение антиэкранировки) имеем

$$\sigma^a_{0\to n} = \frac{4}{v^2}\sum_{s_I}\sum_{m\neq 0}\int d^2q_\perp \times$$
$$\times \left|F^I_\mu(n0; -\mathbf{q}_\perp, -q_{min})\gamma^{-1}a^\mu_\nu F^\nu_A(m0; \mathbf{q}_\perp, Q_{min})\right|^2 \times$$
$$\times \left[q^2_\perp + \frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0 + \epsilon_m - \epsilon_0)^2}{v^2\gamma^2} + \right.$$
$$\left. +2(\gamma-1)\frac{(\varepsilon_n - \varepsilon_0)(\epsilon_m - \epsilon_0)}{v^2\gamma^2}\right]^{-2}. \quad (26)$$

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ «НЕРЕЛЯТИВИСТСКОГО» АТОМА

Комбинация (23), в которой формфакторы иона и атома входят в выражения для сечения, довольно сложна. Поэтому для того чтобы получить менее сложные выражения для сечений, мы введем следующее приближение: будем пренебрегать всеми пространственными компонентами атомного формфактора. Ниже даны некоторые полукачественные соображения в его обоснование.

Рассмотрим атомный формфактор (10) более подробно. Компонента $F^0_A(m0; \mathbf{Q})$ этого формфактора связана со статическим распределением заряда внутри атома. В противоположность, компоненты $F^l_A(m0; \mathbf{Q})$ связаны с током, создаваемым атомом в системе покоя атома. В этой системе отсчета такой ток связан с движением электронов внутри атома. Можно грубо оценить величину $F^l_A(m0; \mathbf{Q})$ как

$$F^l_A(m0; \mathbf{Q}) \sim \frac{v_e}{c}F^0_A(m0; \mathbf{Q}),$$

где v_e — характерная скорость атомных электронов. Для легких и средних атомов $v_e \ll c$ для всех атомных электронов, и можно пренебречь в (10) всеми тремя компонентами $F^l_A(m0; \mathbf{Q})$ по сравнению с $F^0_A(m0; \mathbf{Q})$. В тяжелых атомах наиболее сильно связанные электроны могут иметь скорости, сравнимые по порядку величины со скоростью света. Однако, поскольку относительное число таких электронов мало, можно ожидать, что они заметно не увеличивают значения $F^l_A(m0; \mathbf{Q})$. Поэтому пренебрежение величинами $F^l_A(m0; \mathbf{Q})$ представляется достаточно разумным приближением и для описания столкновений с тяжелыми атомами. Ниже мы используем это приближение: $F^l_A(m0; \mathbf{Q}) \approx 0$.

Будем называть это приближение приближением нерелятивистского атома (ПНА). ПНА нарушает симметрию, в которой формфакторы атома и иона входят в выражение для сечения. Поэтому в общем случае можно ожидать, что это приближение более пригодно для упругой моды, когда электрон иона совершает переходы, а электроны атома нет, и, соответственно, симметрия между ионом и атомом уже в определенной степени нарушена. Действительно, проведенный анализ для упругого атомного формфактора показывает, что ПНА может использоваться для расчета вклада в сечение от упругой моды для любых возможных энергий столкновения и пар ион–атом.

Ситуация становится более сложной при использовании ПНА для расчета неупругой моды. В аргументации, приведенной выше во втором абзаце, рассматривалась характерная скорость электронов в основном состоянии атома. В столкновениях с тяжелыми ионами минимальная передача импульса,

$$Q_{min} = \frac{\epsilon_m - \epsilon_0}{v} + \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_0}{v\gamma},$$

может быть велика в сравнении с типичными значениями импульса электронов в атоме. В таких столкновениях (в неупругой моде) скорости атомных электронов в конечном состоянии могут быть существенно выше их типичных скоростей в основном состоянии атома. Поскольку мы предположили, что атомные электроны в процессе столкновения являются нерелятивистскими (в системе отсчета K_A), то это значит, что необходимо выполнение условия $Q_{min} \ll m_e c^2$, где $m_e = 1$ — масса покоя электрона. Если положить $\varepsilon_n - \varepsilon_0 \approx Z^2_I$, то получаем следующее ограничение на использование ПНА для расчета вклада в сечение от неупругой моды:

$$\gamma \gg \frac{Z^2_I}{vc}.$$

Это условие определенно выполняется для столкновения с любым сколь угодно тяжелым ионом при, скажем, $\gamma > 4$.

Имеется также другое важное ограничение на применение ПНА для неупругой моды. Проведенный нами анализ поведения неупругого атомного формфактора в пределе малых передач импульса показывает, что должно выполняться также условие

$$\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{\gamma} \gg \epsilon_m - \epsilon_0$$

для всех переходов атомных электронов, которые вносят заметный вклад в неупругую моду. Это условие накладывает верхний предел на энергии столкновений, для которых неупругая мода может быть рассмотрена в рамках ПНА. В данной работе мы в первую очередь заинтересованы процессами возбуждения и потери электрона тяжелыми ионами. Для столкновения таких ионов с легкими атомами, когда вклад в сечение от неупругой моды является относительно важным, приведенное выше условие выполняется для очень широкой области энергий столкновения. При столкновениях же с тяжелыми, содержащими большое количество электронов атомами, когда приведенное выше условие может не выполняться уже для относительно небольших γ, можно ожидать по аналогии с нерелятивистскими столкновениями, что неупругая мода не дает заметного вклада в сечение возбуждения и потери электрона ионом.

Помня, что данная выше аргументация в пользу ПНА является скорее качественной, чем количественной, мы используем ниже это приближение в наших расчетах.

Пренебрегая всеми пространственными компонентами, $F_A^l(m0;\mathbf{Q}) \approx 0$, для сечения (25) получаем

$$\sigma^s_{0\to n} = \frac{4}{v^2}\sum_{s_I}\int d^2q_\perp Z^2_{A,eff}(\mathbf{Q}^s_0) \times \times \left|\langle\psi_n(\mathbf{r})|\left(1-\frac{v}{c}\alpha_z\right)\exp(i\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r})|\psi_0(\mathbf{r})\rangle\right|^2 \times \times\left[q_\perp^2+\frac{(\varepsilon_n-\varepsilon_0)^2}{v^2\gamma^2}\right]^{-2}. \quad (27)$$

Здесь $\mathbf{q}_0 = (\mathbf{q}_\perp, q_{min})$, $\mathbf{Q}^s_0 = (\mathbf{q}_\perp, q_{min}/\gamma)$, α_z — дираковские α-матрицы, и мы используем дираковские обозначения для векторов электронных состояний. В уравнении (27) величина

$$Z_{A,eff}(\mathbf{Q}) = Z_A - \langle u_0(\boldsymbol{\xi}_1,\dots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})| \times \times\sum_{j=1}^{N_A}\exp(-i\mathbf{Q}\cdot\boldsymbol{\xi}_j)|u_0(\boldsymbol{\xi}_1,\dots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})\rangle \quad (28)$$

представляет собой так называемый эффективный заряд атома, находящегося в основном состоянии. В отличие от столкновений с голым атомным ядром, этот заряд является функцией передачи импульса и изменяется в пределах $(0, Z_A)$.

Аналогично для сечения (26) имеем

$$\sigma^a_{0\to n} = \frac{4}{v^2}\sum_{s_I}\sum_{m\neq 0}\int d^2q_\perp\,|\langle u_m(\boldsymbol{\xi}_1,\dots,\boldsymbol{\xi}_{N_A})| \times \times\sum_{j=1}^{N_A}\exp(-i\mathbf{Q}^a_0\cdot\boldsymbol{\xi}_j)\,|u_0(\boldsymbol{\xi}_1,\dots,\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{N_A}})\rangle|^2 \times \times\left|\langle\psi_n(\mathbf{r})|\left(1-\frac{v}{c}\alpha_z\right)\exp(i\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r})|\psi_0(\mathbf{r})\rangle\right|^2 \times \times\left[q_\perp^2+\frac{(\varepsilon_n-\varepsilon_0+\epsilon_m-\epsilon_0)^2}{v^2\gamma^2}+ + 2(\gamma-1)\frac{(\varepsilon_n-\varepsilon_0)(\epsilon_m-\epsilon_0)}{v^2\gamma^2}\right]^{-2}, \quad (29)$$

где $\mathbf{Q}^a_0 = (\mathbf{q}_\perp, Q_{min})$.

В соответствии с выражением (13) приближение $F_A^l(m0;\mathbf{Q}) \approx 0$, использованное для получения сечений (27) и (29), в действительности означает, что мы пренебрегли векторным потенциалом, создаваемым атомом в системе отсчета K_A, по сравнению с его скалярным потенциалом в этой системе. Тогда скалярный A^0 и векторный $\mathbf{A}$ потенциалы атома в системе отсчета K_I связаны простым соотношением, $\mathbf{A} = (\mathbf{v}/c)A^0$, и уравнения (24) и (26) сводятся к (27) и (29). Последние уравнения представляют собой второй основной результат данной работы.

3.1. Вклад в сечение от упругой моды

В этом пункте мы рассмотрим более детально вклад (27) в полное сечение возбуждения (потери) электрона.

Эффективный заряд (28) может быть переписан как

$$Z_{A,eff}(\mathbf{Q}^s_0) = Z_A - \int d\boldsymbol{\xi}\,\rho_{el}(\boldsymbol{\xi})\exp(-i\mathbf{Q}^s_0\cdot\boldsymbol{\xi}), \quad (30)$$

где $\rho_{el}(\boldsymbol{\xi})$ — заряда электронов в атоме. Подчеркнем, что величина $\rho_{el}(\boldsymbol{\xi})$ в уравнении (30) — это плотность, рассчитываемая в собственной системе отсчета налетающего атома. Согласно [15], эта плотность может быть аппроксимирована в виде

$$\rho_{el}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{Z_A}{4\pi\xi}\sum_{i=1}^{3}A_i\kappa_i^2\exp(-\kappa_i\xi). \quad (31)$$

В этом выражении A_i и κ_i являются константами для данного атома, табулированными для всех атомных элементов в работе [15]. Подставляя (31) в (30) и выполняя там интегрирование по $\boldsymbol{\xi}$, эффективный заряд $Z_{A,eff}(\mathbf{Q}^s_0)$ можем переписать как

$$Z_{A,eff}(\mathbf{Q}^s_0) = Z_A\left(1-\sum_{i=1}^{3}\frac{A_i\kappa_i^2}{\kappa_i^2+q_\perp^2+q^2_{min}/\gamma^2}\right) = = Z_A\left(q_\perp^2+\frac{q^2_{min}}{\gamma^2}\right)\sum_{i=1}^{3}\frac{A_i}{\kappa_i^2+q_\perp^2+q^2_{min}/\gamma^2}. \quad (32)$$

Отметим, что при получении последнего равенства в (32) было использовано условие $\sum_i A_i = 1$ [15] .

Подставив (32) в (27), получаем

$$\sigma^s_{0\to n} = \frac{4Z_A^2}{v^2}\sum_{s_I}\sum_{i,j} A_i A_j \int d^2 q_\perp \times$$
$$\times \left|\langle\psi_n(\mathbf{r})|\exp(i\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r})\left(1-\frac{\mathbf{v}}{c}\cdot\boldsymbol{\alpha}\right)|\psi_0(\mathbf{r})\rangle\right|^2 \times$$
$$\times\left[\left(\mathbf{q}_\perp^2+\frac{\omega_{n0}^2}{v^2\gamma^2}+\kappa_i^2\right)\left(\mathbf{q}_\perp^2+\frac{\omega_{n0}^2}{v^2\gamma^2}+\kappa_j^2\right)\right]^{-1}, \quad (33)$$

где обозначено $\omega_{n0} = \varepsilon_n - \varepsilon_0$.

Если положить в (33) все κ_i равными нулю (т. е. атом полностью лишен электронов), то это выражение воспроизводит хорошо известный вид сечений возбуждения и ионизации в столкновениях с голыми ядрами (см., например, [2]). В столкновениях с голыми ядрами основной вклад в эти сечения дается областью малых $q_\perp$ $(0 \le q_\perp \lesssim \omega_{n0}/v\gamma)$, что приводит к логарифмическому росту этих сечений с ростом γ: $\sigma_{0n} \sim \ln\gamma$ (см., например, [2]).

Для столкновений с нейтральными атомами уравнение (33) описывает важную общую особенность в процессе экранировки атомными электронами атомного ядра в релятивистских столкновениях, которая не имеет места в нерелятивистских столкновениях. Стоит подчеркнуть, что эта особенность следует непосредственно из уравнения (15) и, соответственно, не является привнесенной частной моделью (31), выбранной для описания этой экранировки по соображениям удобства. В нерелятивистских столкновениях, если ион, несущий электрон, является тяжелым ионом ($Z_I \gg 1$), а атом является легким атомом (со всеми экранировочными постоянными κ_i порядка единицы), то экранировка не важна, поскольку член $\omega_{n0}^2/v^2 \sim Z_I^4/v^2$ доминирует над всеми κ_i^2 в знаменателе подынтегрального выражения в (33). Однако для ультрарелятивистских столкновений, когда $\gamma \gg 1$, ситуация существенно меняется. В этом случае уже члены κ_i^2 могут быть больше чем $\omega_{n0}^2/v^2\gamma^2 \sim Z_I^4/v^2\gamma^2$, что приводит к существенному уменьшению величины сечения. Наши расчеты (см. ниже) подтверждают, что в противоположность нерелятивистским столкновениям в ультрарелятивистских столкновениях экранировка атомными электронами атомного ядра является важной даже для столкновительных пар тяжелый ион–легкий атом.

Анализ выражения (33) показывает, что в столкновениях с нейтральными атомами при больших γ сечение $\sigma^s_{0\to n}$ стремится к постоянной величине. Так, даже для наиболее тяжелых ионов сечение $\sigma^s_{0\to n}$ становится практически постоянной величиной при $\gamma \gtrsim 100$; для менее тяжелых ионов это происходит при меньших значениях γ. Это находится в противоречии с результатами работы [6], которая предсказывает, что для любой пары ион–атом $\sigma^s_{0\to n} \sim \ln\gamma$ по меньшей мере для значений $\gamma < 1000$.

3.2. Вклад в сечение от неупругой моды

Уравнение (29) может быть существенно упрощено путем использования так называемого метода полноты (см., например, [3] и цитированную там литературу). В рамках этого метода одна и та же средняя энергия $\Delta\epsilon$ приписывается всем возможным переходам атомных электронов. Известно, что это приближение дает хорошие результаты при описании быстрых (но нерелятивистских) столкновений при скоростях, заметно превышающих пороговую скорость, начиная с которой становится энергетически возможен процесс потери электрона ионом при столкновении со свободным электроном. По аналогии с нерелятивистскими столкновениями можно ожидать, что этот метод дает разумные результаты и при $v \approx c$, когда кинетическая энергия T налетающего свободного электрона в системе покоя иона заметно превышает энергию связи электрона в ионе:

$$T = m_e c^2(\gamma - 1) \gg |\varepsilon_0|.$$

Это условие выполняется для любого тяжелого иона, начиная, скажем, с $\gamma \ge 3$–4, что довольно близко к нижнему пределу области возможных значений γ, накладываемому использованием приближения нерелятивистского атома. Использование метода полноты позволяет применить условие полноты электронных состояний атома,

$$\sum_m |u_m\rangle\langle u_m| = \boldsymbol{I}, \quad (34)$$

для того чтобы выполнить суммирование по конечным состояниям атома в уравнении (29). Это дает

$$\sigma^a_{0\to n} = \frac{4}{v^2}\sum_{s_I}\int d^2 q_\perp \times$$
$$\times \left|\langle\psi_n(\mathbf{r})|\exp(i\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{r})\left(1-\frac{\mathbf{v}}{c}\cdot\boldsymbol{\alpha}\right)|\psi_0(\mathbf{r})\rangle\right|^2 \times$$
$$\times\left[q_\perp^2+\frac{(\omega_{n0}+\Delta\epsilon)^2}{v^2\gamma^2}+2(\gamma-1)\frac{\omega_{n0}\Delta\epsilon}{v^2\gamma^2}\right]^{-2} \times$$

$$\times \left(\langle u_0 | \sum_{i,j} \exp\left[-i\mathbf{Q}_0^a \cdot (\boldsymbol{\xi}_j - \boldsymbol{\xi}_i) \right] | u_0 \rangle - \right.$$
$$\left. - \left| \langle u_0 | \sum_j \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}_j) | u_0 \rangle \right|^2 \right), \quad (35)$$

где мы переопределили $\mathbf{Q}_0^a$ как

$$\mathbf{Q}_0^a = \left(\mathbf{q}_\perp, \frac{\Delta\epsilon}{v} + \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_0}{v\gamma} \right).$$

Если область больших (по атомной шкале) переданных импульсов Q_0^a дает основной вклад в интеграл в правой части (35), то лишь диагональные члены ($i = j$) в двойной сумме в множителе в больших круглых скобках в (35) дают заметный вклад. Численное значение этого множителя сводится в этом случае просто к количеству атомных электронов Z_A, и сечение (35) описывает переходы электрона иона вследствие некогерентного электромагнитного взаимодействия с Z_A «свободными» электронами.

Как и в случае нерелятивистских столкновений, уравнение (35) может быть далее упрощено, если игнорировать асимметрию основного состояния атома и записать волновую функцию этого состояния в приближенном виде:

$$u_0 = \prod_\lambda \phi_\lambda(\boldsymbol{\xi}), \quad (36)$$

где $\phi_\lambda(\boldsymbol{\xi})$ — одноэлектронные орбитали. В работе [5] (см. также [16]) было показано, что при таких условиях имеет место соотношение (для нейтральных атомов)

$$\langle u_0 | \sum_{i,j} \exp\left[-i\mathbf{Q}_0^a \cdot (\boldsymbol{\xi}_j - \boldsymbol{\xi}_i) \right] | u_0 \rangle -$$
$$- \left| \langle u_0 | \sum_j \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}_j) | u_0 \rangle \right|^2 =$$
$$= Z_A - \sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2. \quad (37)$$

Подставляя правую часть уравнения (37) в выражение (35), получаем

$$\sigma_{0\to n}^a = \frac{4}{v^2} \sum_{s_I} \int d^2 q_\perp \times$$
$$\times \left| \langle \psi_n(\mathbf{r}) | \exp(i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}) \left(1 - \frac{\mathbf{v}}{c} \cdot \boldsymbol{\alpha} \right) | \psi_0(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \times$$
$$\times \left[q_\perp^2 + \frac{(\omega_{n0} + \Delta\epsilon)^2}{v^2\gamma^2} + 2(\gamma - 1)\frac{\omega_{n0}\Delta\epsilon}{v^2\gamma^2} \right]^{-2} \times$$
$$\times \left(Z_A - \sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2 \right). \quad (38)$$

Анхольт [5] обратил внимание на то, что имеет место следующее соотношение:

$$\sum_\lambda \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \le$$
$$\le \sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2 \le$$
$$\le \frac{1}{Z_A} \left| \sum_\lambda \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2. \quad (39)$$

Он проделал вычисления [5], используя две замены:

$$\sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2 \to$$
$$\to \sum_\lambda \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle,$$

$$\sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2 \to$$
$$\to \frac{1}{Z_A} \left| \sum_\lambda \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2,$$

и нашел, что различие между результатами этих расчетов очень мало. Поэтому мы просто положим

$$Z_A - \sum_\lambda \left| \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle \right|^2 \to$$
$$\to Z_A - \sum_\lambda \langle \phi_\lambda | \exp(-i\mathbf{Q}_0^a \cdot \boldsymbol{\xi}) | \phi_\lambda \rangle =$$
$$= Z_{A,eff}(\mathbf{Q}_0^a), \quad (40)$$

где $Z_{A,eff}(\mathbf{Q}_0^a)$ определяется уравнением (28). Тогда для сечения антиэкранировки мы окончательно имеем

$$\sigma_{0\to n}^a = \frac{4}{v^2} \sum_{s_I} \int d^2 q_\perp Z_{A,eff}(\mathbf{Q}_0^a) \times$$
$$\times \left| \langle \psi_n(\mathbf{r}) | \exp(i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}) \left(1 - \frac{\mathbf{v}}{c} \cdot \boldsymbol{\alpha} \right) | \psi_0(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \times$$
$$\times \left[q_\perp^2 + \frac{(\omega_{n0} + \Delta\epsilon)^2}{v^2\gamma^2} + 2(\gamma - 1)\frac{\omega_{n0}\Delta\epsilon}{v^2\gamma^2} \right]^{-2}. \quad (41)$$

Метод полноты и приближения (36) и (40) широко используются при рассмотрении процесса потери электрона ионом в нерелятивистских столкновениях с атомом. Легко видеть, что использование этих приближений при $v \sim c$ не затрагивает релятивистских особенностей в сечении антиэкранировки.

Таблица 1. Экспериментальные и теоретические сечения потери (в кб) электрона ионами Au^{78+}, имеющими энергии 10.8 ГэВ/ат. ед., при прохождении различных мишеней. Ионы исходно находятся в основном состоянии

Атом	Z_A	Эксп. [11]	Теор. [6]	Теор. [10]	Данная работа
C	6	0.31	0.31	0.27	0.31
Al	13	1.18	1.28	1.15	1.2
Cu	29	5.26	5.8	5.37	5.65
Ag	47	16.2	14.4	13.7	14.7
Au	79	38.2	38.8	38.0	38.5

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1 приведено сравнение экспериментальных данных из работы [11] с теоретическими результатами Анхольта и Беккера [6], Соренсена [10] и нашим расчетом. В эксперименте [11] были измерены сечения потери электрона ионами Au^{78+} при прохождении этими ионами различных твердотельных мишеней при энергии столкновения 10.8 ГэВ/ат. ед., соответствующей $\gamma = 12.6$. Наши численные расчеты основываются на уравнениях (33) и (41), где конечные состояния электрона являются состояниями непрерывного спектра иона и где проводится суммирование по всем этим состояниям. Для описания электронных состояний иона мы использовали приближенные релятивистские волновые функции, применявшиеся ранее в [8, 17] для расчета ионизации K-оболочки в релятивистских столкновениях с точечными зарядами. Как и в этих работах, нами учитывались электронные переходы как без изменения, так и с изменением спина электрона. Известно (см., например, [7, 8, 17]), что эти приближенные волновые функции дают хорошие результаты даже для описания таких тяжелых одноэлектронных ионов, как свинец и золото.

Для расчета сечения (41), вообще говоря, необходимо знание параметров $\Delta\epsilon$. Насколько нам известно, не существует достаточно строгих, но простых, рецептов для выбора этих параметров для многоэлектронных атомов [1, 3]. В данной работе в качестве этого параметра была взята средняя энергия возбуждения атома, которая используется при расчете потерь энергии быстрыми заряженными частицами (см., например, [18]). Отметим, что на самом деле точность в определении значений параметра $\Delta\epsilon$ не является критичной для настоящего расчета. Для процесса потери электрона такими многозарядными ионами, как Au^{78+} и Pb^{81+}, в столкновениях с легкими мишенями, такими как Be, C и Al, рассматриваемыми здесь, члены с $\Delta\epsilon$ в выражении (41) являются несущественными даже при ультрарелятивистских столкновениях, изучавшихся экспериментально в работе [9] и рассматриваемых ниже (см. табл. 2). При столкновениях Au^{78+} и Pb^{81+} с более тяжелыми мишенями (Cu и т. д., см. табл. 1 и 2) сечение антиэкранировки уже является лишь очень маленькой поправкой (около 1–3%) к величине сечения экранировки. Поскольку точность нашего расчета сечения экранировки с учетом сделанных приближений оценивается как 15–20%, то более точное определение параметра $\Delta\epsilon$ для рассматриваемых здесь столкновений попросту не имеет смысла.

Как следует из табл. 1, при энергии столкновения 10.8 ГэВ/ат. ед. нет никакого заметного различия между экспериментом и расчетами, так же как и между различными расчетами. Согласие результатов расчета работы [6], предсказывающей для сечения потери зависимость вида $\sigma \sim \ln\gamma$, с результатами эксперимента при $\gamma \sim 10$ связано с тем фактом, что в этом эксперименте использовались такие очень тяжелые ионы, как Au^{78+}. В этом случае энергия, необходимая для отрыва электрона от иона, настолько велика, что член $\omega_{n0}^2/v^2\gamma^2 \sim Z_I^4/v^2\gamma^2$ доминирует над всеми экранировочными постоянными κ_i^2 даже при $\gamma \sim 10$, и величина эффективного атомного заряда $Z_{A,eff}$, входящего в сечения (27) и (41), мало отличается от заряда атомного ядра.

Ситуация существенно меняется для ультрарелятивистских столкновений, изучавшихся экспериментально в [9], где были измерены сечения потери электрона ионами Pb^{81+} при энергии столкновения 160 ГэВ/ат. ед.. В этом случае значение параметра $\gamma = 170$ является уже очень высоким, и для рассматриваемых пар ион–атом становятся важны ультрарелятивистские особенности экранировки атомного

Таблица 2. Экспериментальные и теоретические сечения потери (в кб) электрона ионами Pb^{81+}, имеющими энергии 160 ГэВ/ат. ед., при прохождении различных мишеней. Ионы исходно находятся в основном состоянии

Атом	Z_A	Эксп. [9]	Теор. [6]	Теор. [10]		Данная работа	
			Атом	Ядро	Атом	Ядро	Атом
Be	4	0.14	0.24	0.15	0.14	0.2	0.17
C	6	0.31	0.49	0.33	0.28	0.45	0.35
Al	13	1.3	2.0	1.6	1.1	2.14	1.4
Cu	29	6.9	9.0	7.8	5.2	10.6	6.5
Sn	50	15	25	23	15	31.5	17.6
Au	79	42	60	58	35	78.7	40.1

ядра атомными электронами. Сравнение между экспериментальными данными из работы [9] и различными теоретическими расчетами дано в табл. 2, куда нами включены результаты для сечения потери, измеренные в так называемом ионизационном эксперименте и являющиеся более точными [19]. По сравнению с табл. 1 мы добавили несколько новых колонок с результатами расчетов. Данные из работы [10], приведенные теперь в двух столбцах, показывают результаты расчета ее автором сечения потерь в столкновениях с голыми атомными ядрами и соответствующими нейтральными атомами. Результаты нашего расчета также даны в двух столбцах. Первый из них представляет сечения потери электрона в столкновениях в голыми атомными ядрами, когда это сечение пропорционально Z_A^2. Второй столбец дает результаты расчета для столкновений с нейтральными атомами с помощью уравнений (33) и (41).

Наши результаты для столкновений с нейтральными атомами являются заметно меньшими, чем результаты работы [6], и находятся в достаточно хорошем согласии с экспериментальными данными. В сравнении с расчетом работы [10] наши результаты для сечений заметно выше, особенно для столкновений с голыми атомными ядрами, где различие достигает около 30%.

Сравнительно небольшое различие между нашими результатами для сечения потери электрона в столкновениях с нейтральными атомами Be и ионами Be^{4+} есть следствие вклада в полное сечение потери от сечения антиэкранировки. Для столкновения с легкими атомами неупругая мода дает существенный вклад в полное сечение потери, достигающий около 20% от полного сечения в столкновениях с атомами Be. Наш расчет показывает, что при энергии столкновения 160 ГэВ/ат. ед. эффекты компенсации поля атомного ядра полями атомных электронов в процессах экранировки и антиэкранировки сокращают величину полного сечения приблизительно на 35% для столкновений ионов Pb^{81+} с атомами Be и приблизительно на 50% для столкновений Pb^{81+} с атомами Au.

В заключение отметим, что общее неплохое согласие данных нашего расчета с экспериментом дает еще один, правда косвенный, аргумент в оправдание использования приближения нерелятивистского атома.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучается процесс возбуждения (потери) электрона ионом в релятивистских столкновениях с атомами. Рассмотрение этого процесса основано на первом порядке теории возмущения для релятивистского электромагнитного взаимодействия между двумя структурными частицами, ионом и атомом. Для сечений возбуждения (потери) получены выражения, которые в пределе $c \to \infty$ переходят в хорошо известные нерелятивистские результаты. Для (ультра)релятивистских столкновений полученные выражения описывают важную особенность в процессе экранировки атомными электронами поля атомного ядра, отсутствующую в нерелятивистских столкновениях. Результаты численного расчета, основанного на полученных выражениях для сечений, находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. H. McGuire, *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions*, Cambridge University Press (1997).

2. J. Eichler and W. E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Academic Press, New-York (1995).

3. E. C. Montenegro, W. E. Meyerhof, and J. H. McGuire, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **34**, 249 (1994).

4. A. B. Voitkiv, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A **59**, 2794 (1999).

5. R. Anholt, Phys. Rev. A **31**, 3579 (1985).

6. R. Anholt and U. Becker, Phys. Rev. A **36**, 4628 (1987).

7. D. M. Davidovic, B. L. Moiseiwitsch, and P. H. Norrington, J. Phys. B **11**, 847 (1978).

8. R. Anholt, Phys. Rev. A **19**, 1004 (1979).

9. H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 1190 (1998).

10. A. H. Sørensen, Phys. Rev. A **58**, 2895 (1998).

11. N. Claytor, A. Belkacem, T. Dinneen et al., Phys. Rev. A **55**, R842 (1997).

12. J. D. Bjorken and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1964).

13. V. B. Berestetsky, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevsky, *Relativistic Quantum Theory*, Pergamon Press, London (1971).

14. M. R. C. McDowell and J. P. Coleman, *Introduction to the Theory of Ion–Atom Collisions*, North-Holland, Amsterdam (1970).

15. F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, Phys. Rev. A **36**, 467 (1987).

16. E. C. Montenegro and W. E. Meyerhof, Phys. Rev. A **46**, 5506 (1992).

17. B. L. Moiseiwitsch, Phys. Rep. **118**, 133 (1985).

18. U. Fano, Annual Rev. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963).

19. R. H. Schuch, private communication.