

На правах рукописи

АНДРЕЕВ Олег Юрьевич

КВАНТОВОЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КОНТУРА
СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЯ К ИЗУЧЕНИЮ
АТОМНЫХ СИСТЕМ

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2018

Работа выполнена в ФГБОУ ВО
«Санкт-Петербургский государственный университет»

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
профессор ЛАБЗОВСКИЙ Леонтий Нахимович

Официальные оппоненты: ИВАНОВ Вадим Константинович,
доктор физико-математических наук, профессор,
Санкт-Петербургский Политехнический Университет
Петра Великого, профессор

КЛИМЧИЦКАЯ Галина Леонидовна,
доктор физико-математических наук, профессор,
Главная (Пулковская) астрономическая
обсерватория РАН, ведущий научный сотрудник

ШЕВЕЛЬКО Вячеслав Петрович,
доктор физико-математических наук, с.н.с.,
Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН,
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Санкт-Петербургский государственный
электротехнический университет «ЛЭТИ»
им. В.И. Ульянова (Ленина)

Защита состоится « » июня 2018 г. в 15-00 на заседании диссертационного
совета Д 212.232.24, созданного на базе Санкт-Петербургского государственного
университета, по адресу: Санкт-Петербург, Средний пр. В. О., д. 41/43, ауд. 304.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. М. Горького
СПбГУ и на сайте <https://dissert.spbu.ru/>

Автореферат разослан «_____» _____ 2018 г.

Учёный секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Аксёнова Елена Валентиновна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

В последние годы был достигнут значительный прогресс в развитии как теоретических, так и экспериментальных методов изучения структуры и динамических свойств атомных систем с небольшим числом электронов. Оказалось, что исследование этих систем, предоставляет уникальный инструмент для исследования фундаментальных взаимодействий в области низких энергий. Благодаря небольшому числу электронов, многозарядные ионы представляют собой относительно простую систему, позволяющую точное теоретическое описание. Связанные электроны движутся во внешнем электромагнитном поле ядра, которое может быть очень сильным при большом заряде ядра. Если суммарный заряд электронов мал по сравнению с зарядом ядра, то эффект экранирования тоже мал. В частности, в тяжёлых ионах, таких как уран, электрическое поле ядра превосходит по силе другие искусственные электрические поля, доступные в лабораториях. Соответственно, многозарядные ионы представляет собой природную систему для изучения квантовой электродинамики (КЭД) в очень сильных внешних полях. Наиболее точное и строгое теоретическое описание многозарядных ионов разработано в рамках КЭД. В тяжелых многозарядных ионах все обычные КЭД эффекты значительно усиливаются и могут заметно превышать экспериментальную точность. Для теоретического описания многозарядных ионов используется ряд методов; все они основаны на КЭД теории возмущений. Теоретическое и экспериментальное исследование многозарядных ионов постоянно требует дальнейшего развития и уточнение КЭД методов, используемых в расчётах, вместе с соответствующими тестами и оценками точности используемых приближений. Применение различных КЭД методов для вычисления определённых эффектов может стать довольно сложным, и, соответственно, появляется необходимость либо разрабатывать новые техники в рамках существующих методов, либо разрабатывать альтернативные подходы. Метод, развитию которого посвящена настоящая диссертация, наиболее тесно связан с теорией контура спектральной линии в КЭД.

Цель работы

Основной целью данной работы является разработка метода (метода контура линии) для описания структуры и динамических свойств многозарядных ионов в рамках КЭД.

Точные вычисления свойств многозарядных ионов необходимо проводить в рамках КЭД. Методы расчёта свойств многозарядных ионов основываются на КЭД теории возмущений и сводятся к вычислению различных поправок. Для вычисления различных КЭД поправок необходимо развитие соответствующих методов. Уже во втором порядке теории возмущений поправки к энергии выводятся нетривиальным образом. Особое внимание надо уделять вычислению приводимых частей фейнмановских графиков, вкладам ссылочных состояний. Относительно большой вклад дают приводимые части поправок в третьем порядке теории возмущений. Применение метода контура линии позволяет получать выражения для различных поправок в виде, пригодном для численного расчёта.

В случае квазивырожденных уровней для вычисления поправок к энергии необходимо развивать квазивырожденную теорию возмущений. Это было сделано в рамках метода контура линии. В частности, при расчётах учитывались вклады брейтовских ширин и, где необходимо, вклады оже-ширин.

Метод контура линии был обобщён для вычисления вероятностей перехода в многозарядных ионах, при этом учитывался вклад всего спектра уравнения Дирака, включая отрицательно частотные состояния и эффект запаздывания. Для вычисления вероятностей перехода между квазивырожденными уровнями, необходимо было применять квазивырожденную теорию возмущений.

При исследовании процесса диэлектронной рекомбинации электронов с H -подобными ионами метод контура линии, изначально сформулированный только для описания связанных состояний, необходимо было обобщить на случай присутствия свободных электронов в начальном состоянии системы. Для описания этих автоионизационных состояний, ответственных за процесс диэлектронной рекомбинации, надо было применять квазивырожденную теорию возмущений.

При исследовании процесса рекомбинации электронов с He -подобными ионами и рассмотрении резонансного канала, диэлектронной рекомбинации, необходимо точно описывать трёхэлектронные автоионизационные состояния, ответственные за процесс диэлектронной рекомбинации. В работе было обнаружено, что для трёхэлектронных автоионизационных состояний важную роль играют брейтовские ширины. Для их учёта метод контура линии был обобщён на случай квазивырожденных трёхэлектронных состояний.

При исследовании процесса потери электрона многозарядными ионами в столкновениях с атомными частицами особый интерес представляет резонансный канал этого процесса. В этом резонансном канале потеря электронов идёт через возбуждение иона в одно из автоионизационных состояний и последующий оже-распад

этого состояния. При теоретическом описании этого процесса возникают две сложности. Во-первых, это необходимость точного учёта оже-ширин для автоионизационных состояний, которые, как правило, являются квазивырожденными состояниями, и их описание требует квазивырожденной теории возмущений. Во-вторых, описание образования автоионизационных состояний в результате взаимодействия многозарядного иона с атомной частицей, рассматриваемого как возмущение, требует учёта как первого, так и второго порядков теории возмущений. Для теоретического исследования такого процесса в рамках КЭД необходимо развитие соответствующих методов.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработан метод контура линии, применяемый для описания многозарядных ионов в рамках КЭД теории. Метод контура линии может применяться для исследования уровней энергии и вероятностей перехода в многозарядных ионах. Также продемонстрирована возможность применения метода контура для описания процессов электронной рекомбинации с многозарядными ионами и процессов потери электронов многозарядными ионами в столкновениях с атомными частицами.
2. В рамках метода контура линии произведён КЭД расчёт уровней энергии двух и трёхэлектронных ионов. Рассматривались, в частности, квазивырожденные состояния. При расчёте энергий дважды возбуждённых состояний были исследованы вклады брейтовских ширин и оже-ширин.
3. Произведён строгий КЭД расчёт вероятностей перехода в He-подобных ионах. В частности, были изучены вероятности переходов между квазивырожденными уровнями. Исследовано значение брейтовского взаимодействия для вероятностей перехода.
4. В рамках метода контура линии произведён точный КЭД расчёт дифференциального сечения диэлектронной рекомбинации с H-подобными ионами урана. Отдельно исследовался вклад брейтовского взаимодействия и вклады высших мультиполей излучённого фотона. Исследованы поляризационные свойства излучённого фотона.
5. Произведён строгий КЭД расчёт сечения процесса диэлектронной рекомбинации с He-подобными ионами урана. Исследован вклад брейтовского взаимодействия и брейтовских ширин на сечение рекомбинации. Исследовано вли-

яние поляризации налетающего электрона на сечение рекомбинации с поляризованными ионами. Исследованы поляризационные свойства излучённого фотона.

6. Исследован процесс потери электрона He-подобными ионами Ca и Zn в столкновениях (100 MeV/u) с голыми ядрами Ne и с атомами Ne. Особое внимание было уделено резонансному каналу потери электрона, в котором ион сначала возбуждается в автоионизационное состояние и затем происходит оже-распад. Исследована резонансная структура полного и дифференциального сечения потери электрона. Также исследована возможность экспериментального изучения данного процесса.

Научная новизна и практическая значимость работы

Разработан метод контура линии – метод для описания структуры и динамических свойств многозарядных ионов в рамках КЭД. В рамках метода контура линии разработана квазивырожденная теория возмущений. Продемонстрировано применение метода контура линии для КЭД расчётов энергий, включая квазивырожденные уровни, и вероятностей перехода. Метод контура линии применялся для описания процесса электронной рекомбинации, включая диэлектронную рекомбинацию, и процесса потери электронов многозарядными ионами, в частности описывался резонансный канал.

Метод контура линии применялся для расчёта уровней энергии многозарядных ионов. При расчёте энергий дважды возбуждённых состояний были исследованы вклады брейтовских ширин и оже-ширин. Было обнаружено, что брейтовские ширин оказывают значительное влияние на смешивание уровней и, тем самым, дают большой вклад в значения уровней энергии. Для случая многозарядных ионов со средними значениями заряда ядра оже-ширины оказываются важными для расчётов уровней энергии. Коэффициенты смешивания конфигураций и оже-ширины влияют друг на друга, поэтому для их вычисления необходим самосогласованный метод.

В рамках метода контура произведён строгий КЭД расчёт вероятностей перехода в He-подобных ионах. В частности, были изучены вероятности переходов между квазивырожденными уровнями. Исследовано значение брейтовского взаимодействия для вероятностей перехода.

В рамках метода контура линии произведён точный КЭД расчёт полного и дифференциального сечения диэлектронной рекомбинации с H-подобными иона-

ми урана. Отдельно исследовался вклад брейтовского взаимодействия и вклады высших мультиполей излучённого фотона.

Исследован процесс диэлектронной рекомбинации с He-подобными ионами урана в рамках КЭД. Особое внимание было уделено изучению влияния брейтовского взаимодействия и брейтовских ширин на сечение рекомбинации. Также исследовано влияние поляризации налетающего электрона на сечение рекомбинации с поляризованными ионами и поляризационные свойства излучённого фотона.

Впервые исследован процесс потери электронов многозарядными ионами в столкновениях с атомными частицами. Также показана возможность экспериментального изучения данного процесса, например в GSI, Германия. В работе исследовался процесс потери электрона He-подобными ионами Ca и Zn в столкновениях (100 MeV/u) с голыми ядрами Ne и с атомами Ne. Особое внимание было уделено резонансному каналу потери электрона, в котором ион сначала возбуждается в автоионизационное состояние и затем происходит оже-распад. Подробно исследована резонансная структура сечения потери электрона. Процесс исследовался как в системе покоя многозарядного иона, так и в системе покоя атома Ne.

Достоверность и апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались автором на международных конференциях (перечислены только устные и приглашённые доклады):

1. Mini-workshop on X-ray Spectroscopy at LEAF, 24-25th August 2017, Lanzhou, China
2. XXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (XXIX ICPEAC), July 22-28, 2015, Toledo, Spain
3. 24th International Symposium on Ion Atom Collisions (24th ISIAC), July 19-21, 2015, Barcelona, Spain
4. 46th Conference of the European Group on Atomic Systems (46th EGAS), July 1-4, 2014, Lille, France.
5. 21st International Conference on Spectral Line Shapes (21th ICSLS), June 3–9, 2012, St. Petersburg, Russia
6. Workshop on Precision Physics and Fundamental Physical Constants (FFK 2011), 5-9 December, 2011, Dubna, Russia.

7. 15th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI2010), 30th August-3rd September, 2010, Shanghai, China
8. 14th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI2008), 1st-5th September, 2008, Chofu, Tokyo, Japan.

Также результаты диссертации докладывались на семинарах кафедры квантовой механики СПбГУ.

Список работ, опубликованных по теме диссертации

1. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff,
Evaluation of the low-lying energy levels of two- and three-electron configurations for highly charged ions
- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **205**, 25-29, (2003).
2. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff,
Calculation of quasidegenerate energy levels of two-electron ions
- Physical Review A, **69**, 062505(1-17), (2004).
3. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff,
Testing the time dependence of fundamental constants in the spectra of multicharged ions
- Physical Review Letters, **94**, 243002(1-4), (2005).
4. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien, G. Soff,
Evaluation of quasidegenerate energy levels of two-electron configurations for multicharged ions
- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **235**, 51-54, (2005).
5. L.N. Labzowsky, D.A. Solovyev, G. Plunien, O.Yu. Andreev, and G. Schedrin,
Intensity distribution shift in multiple nonresonant photon scattering on the hydrogen atom
- Journal of Physics B, **40**, 525-535, (2007).
6. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien, D. A. Solovyev,
QED theory of the spectral line profile and its applications to atoms and ions
- Physics Reports, **455**, 135–246, (2008).

7. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien,
QED calculation of transition probabilities in two-electron ions
- Physical Review A, **79**, 032515(1-28), (2009).
8. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky,
Line-profile approach to the description of the electron-recombination process for the highly charged ions
- Physical Review A, **80**, 042514(1-14), (2009).
9. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, G. Plunien,
QED calculation of interelectron interaction corrections for transition probabilities in two-electron ions
- Journal of Physics: Conference Series, **163**, 012014(1-4), (2009)
10. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky,
Evaluation of the electron capture by the H-like Gd ion within line-profile approach
- Physical Review A, **83**, 064501(1-4), (2011).
11. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky,
QED theory of highly charged ions
– “*Handbook for Highly Charged Ion Spectroscopic Research*” (Chapter 14), Edited by Siegbert Hagmann; Taylor & Francis (2011); Print ISBN: 9781420079043; eBook ISBN: 9781420079050; DOI: 10.1201/b1131915.
12. O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky, A.V. Prigorovsky,
Dielectronic recombination with one-electron highly charged ions
- Physica Scripta, **T144**, 014008(1-3), (2011).
13. E.A. Chernovskaya, O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky,
Radiative double-electron capture by bare nucleus with emission of one photon
- Physical Review A, **84**, 062515(1-12), (2011).
14. E.A. Chernovskaya, O.Yu. Andreev, L.N. Labzowsky,
Cross section of double electron capture by bare nucleus
- Journal of Physics: Conference Series, **388**, 062030(1), (2012)
15. O.Yu. Andreev,
QED calculation of cross section for resonant electron scattering on H-like ions
- Journal of Physics: Conference Series, **388**, 062002(1), (2012)

16. O.Yu. Andreev,
QED theory of the spectral line profile for few-electron atoms and ions
- Journal of Physics: Conference Series, **397**, 012001(1-7), (2012).
17. E.A. Mistonova, O.Yu. Andreev,
Calculation of the cross section of radiative double-electron capture by a bare nucleus with emission of one photon
- Physical Review A, **87**, 034702(1-5), (2013).
18. O.Yu. Andreev, E.A. Mistonova, A.B. Voitkiv,
Relativistic transfer ionization and the Breit interaction
- Physical Review Letters, **112**, 103202(1-5), (2014).
19. A. Bondarevskaya, E.A. Mistonova, K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev, A. Surzhykov, L. N. Labzowsky, G. Plunien, D. Liesen, F. Bosch, Th. Stöhlker,
Method for the production of highly charged ions with polarized nuclei and zero total electron angular momentum
- Physical Review A, **90**, 064701(1-4), (2014).
20. K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev,
Importance of the Breit interaction for calculation of the differential cross section for dielectronic recombination with one-electron uranium
- Physical Review A, **91**, 012511(1-9), (2015).
21. A.A. Bondarevskaya, D.V. Chubukov, O.Yu. Andreev, E.A. Mistonova, L.N. Labzowsky, G. Plunien, D. Liesen, F. Bosch,
On the electric dipole moment of the electron and the P, T -odd electron–nucleus interaction in highly-charged heavy ions
- Journal of Physics B, **48**, 144007(1-11), (2015).
22. K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev,
Calculation of differential cross section for dielectronic recombination with one-electron uranium
- Journal of Physics: Conference Series, **583**, 012005(1-4), (2015).
23. K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev,
Calculation of differential cross section for dielectronic recombination with one-electron uranium
- Journal of Physics: Conference Series, **635**, 052036(1), (2015).

24. O.Yu. Andreev, E.A. Mistonova, A.B. Voitkiv,
Correlated transfer ionization in relativistic collisions of highly charged nuclei with light atoms
- Journal of Physics: Conference Series, **635**, 052076(1), (2015).
25. K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev,
Calculation of differential cross section for dielectronic recombination with two-electron uranium
- Physical Review A, **94**, 042513 (1-12), (2016).
26. K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev, A.B. Voitkiv,
Effects of autoionization in electron loss from heliumlike highly charged ions in fast collisions with atomic particles
- Physical Review A, **96**, 052702 (1-14), (2017)
27. A.A. Bondarevskaya, D.V. Chubukov, E.A. Mistonova, K.N. Lyashchenko, O.Yu. Andreev, A. Surzhykov, L.N. Labzowsky, G. Plunien, D. Liesen, F. Bosch,
Considerations towards the possibility of the observation of parity nonconservation in highly charged ions in storage rings
- Physica Scripta, **93**, 025401 (1-16), (2018)

Личный вклад автора

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причём вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены автором лично или совместно с его учениками.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и содержит 223 страницы, 82 рисунка и 9 таблиц. Список литературы включает 120 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Глава 1. Метод контура линии

В первой главе диссертации представлены основные идеи метода контура линии. Метод контура линии был впервые сформулирован как метод для вычисления КЭД поправок для многоэлектронных систем в работе [1]. Проблема естественного контура спектральной линии в атомной физике в терминах квантовой механики была впервые рассмотрена Вайскопфом и Вигнером [2]. Его первая формулировка в терминах современной КЭД теории была сделана в [3], где было описано появление лоренцевского контура в резонансном приближении в рамках квантовой электродинамики и исследовалось появление нерезонансных поправок (выход за резонансное приближение). В [1] было показано, что метод контура линии представляет собой удобный инструмент для вычисления КЭД поправок для атомов и ионов, в частности, для вычисления поправок на ссылочные состояния в многозарядных ионах. Метод контура линии, в принципе, обладает всеми преимуществами, которыми обладают альтернативные методы для описания многозарядных ионов в рамках КЭД теории, такие как метод адиабатической S -матрицы [4–6], метод оператора эволюции [7], метод двухвременной функции Грина [8] и метод ковариантного оператора эволюции [9]. Метод контура линии напрямую связан с такими величинами как энергия и ширина электронного уровня. Более того он явно указывает на существование предела (резонансное приближение), при котором понятие энергии возбуждённого состояния имеет физический смысл. Так как мы рассматриваем атомные электроны взаимодействующими с квантованными полями (электромагнитное поле, электрон-позитронное поле), полная система (ядро и набор электронов) в строгом смысле не является замкнутой системой. Следовательно, мы должны объяснить что же мы будем называть энергией уровня. В рамках метода адиабатической S -матрицы энергия уровней определяется посредством адиабатического предела, в котором выключается взаимодействие электронов с квантованными полями. В рамках метода двухвременной функции Грина энергия определяется через положение полюсов функции Грина в комплексной плоскости. В рамках метода контура линии уровень энергии ассоциируется с позицией резонанса в конкретном процессе рассеяния, т.е. с контуром линии. Вообще говоря, для конкретного процесса контур линии является очень сложной функцией различных параметров, характеризующих процесс рассеяния, и естественно контур линии зависит от рассматриваемого процесса рассеяния. Обычно мы хотим описывать уровень энергии только двумя параметрами: энергией (E) и шириной

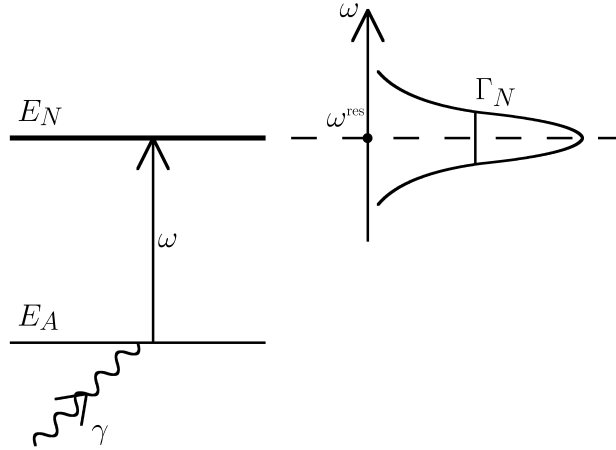


Рис. 1: Применение резонансного приближения в методе контура линии. Электронная конфигурация, находящаяся в связанном состоянии A поглощает фотон с частотой ω и переходит в возбуждённое состояние N . Контур линии, отвечающий этому процессу, изображён как функция частоты ω . Контур линии может быть интерполирован лоренцевским контуром, определяемым двумя параметрами: положением максимума (ω^{res}) и его шириной. Энергия (E_N) и ширина (Γ_N) уровня N определяются положением максимума и шириной лоренцевского контура, соответственно.

(Г). Для этого мы можем интерполировать контур линии лоренцевским контуром, который характеризуется позицией его максимума и шириной. Соответственно, энергия уровня может быть ассоциирована с позицией максимума контура линии, а его ширина с шириной соответствующего контура Лоренца. Эта процедура называется резонансным приближением, она схематично показана на Рис. 1. В рамках резонансного приближения энергия и ширина уровня не зависят от деталей процесса рассеяния. При выходе за резонансное приближение вычисление энергии E и ширины Γ должно быть заменено на вычисление контура спектральной линии для конкретного процесса рассеяния.

КЭД теория контура линии также рассматривалась в работах [10, 11] и применялась для изучения перекрывающихся резонансов в двухэлектронных многозарядных ионах в [12, 13]. Другие приложения теории контура линии были сделаны при изучении нерезонансных поправок в многозарядных ионах [14, 15] и в атоме водорода. Обычно нерезонансные поправки очень малы и по порядку величины меньше точности эксперимента. Однако, недавнее прецизионное измерение энергии перехода $2^3S - 2^3P$ в ^4He показало, что нерезонансные поправки начинают влиять на точность эксперимента [16].

Глава 2. Энергии

Во второй главе обсуждается применение метода контура линии для вычисления

уровней энергии многозарядных ионов в рамках КЭД теории.

Для описания уровней энергии электронной конфигурации мы рассматриваем процесс рассеяния фотона на ионе (атоме)

$$a_0 \xrightarrow{\omega} a \xrightarrow{\omega'} a_0, \quad (1)$$

где ион, изначально находящийся в основном состоянии (a_0), поглощает фотон ω , возбуждается в возбуждённое состояние a и затем излучая фотон, распадается в основное состояние a_0 . Здесь мы рассматриваем простейший процесс резонансного рассеяния ($\omega = \omega'$). Амплитуда (или вероятность) этого процесса рассеяния как функция частоты фотона (ω) имеет максимумы, которые описывают резонансы, отвечающие соответствующим уровням энергии электронной конфигурации Рис. 1. Ставя перед собой цель описывать уровень энергии только двумя параметрами, мы определяем энергию и ширину уровня через позицию и ширину соответствующего резонанса. В диссертации рассматриваются только уровни энергии, для которых понятие энергии и ширины имеет смысл.

В принципе, энергия уровня может быть рассмотрена в произвольном процессе рассеяния, т.е. мы можем рассматривать различные многофотонные переходы или рассеяние других частиц. В общем случае амплитуда перехода является сложной функцией, зависящей от природы и конкретных свойств процесса рассеяния. В частности, положение максимума зависит от деталей процесса рассеяния.

В рамках наиболее простого подхода энергетический уровень электронной оболочки иона (или атома) характеризуется только двумя параметрами: энергией и шириной. Поэтому мы должны сформулировать и применить приближение, где энергия и ширина уровня не зависят от деталей процесса рассеяния, в котором они определяются. Тогда энергия и ширина уровня будут являться характеристикой исключительно иона (атома), т.е. не зависящими от метода их исследования (измерения).

В рамках метода контура линии мы применяем резонансное приближение. В рамках этого приближения мы будем рассматривать только резонансные вклады в амплитуду, пренебрегая нерезонансными. Затем мы интерполируем контур линии лоренцевским контуром, который характеризуется двумя параметрами: положением резонанса ($E_a - E_{a_0}$) и шириной Γ_a

$$W^L(\omega) = \frac{N}{(\omega + E_{a_0} - E_a)^2 + \frac{1}{4}\Gamma_a^2}, \quad (2)$$

где N – нормировочная константа. В следующих параграфах этой главы продемонстрировано применение метода контура линии для вычисления уровней энергии

многозарядных ионов посредством вычисления позиций соответствующих резонансов.

В параграфе 2.1. рассматриваются одноэлектронные ионы. Продемонстрировано применение метода контура линии для учёта поправок к энергии на собственную энергию электрона. Показано, что учёт множества вставок собственной энергии электрона в электронный пропагатор [3] (см. Рис. 2) приводит к сдвигу положения резонанса (ΔE_a) и появлению лоренцевского контура линии

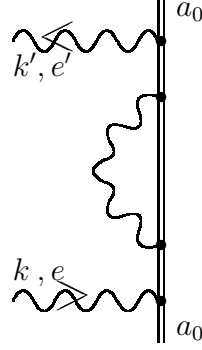


Рис. 2: Фейнмановский график, описывающий рассеяние фотона на атомном электроне с вставкой одной собственной энергии электрона в электронный пропагатор. Волнистые линии со стрелками описывают поглощение и испускание фотона с импульсами k, k' и поляризациями e, e' , соответственно. Двойные непрерывные линии обозначают электрон в поле ядра, a_0 обозначает основное состояние.

$$\Delta E_a = \hat{\Sigma}_{aa}(\varepsilon_a) = L_a - \frac{i}{2}\Gamma_a, \quad (3)$$

где $\hat{\Sigma}_{aa}(\varepsilon_a)$ – матричный элемент оператора перенормированной собственной энергии электрона, L_a – поправка на собственную энергию электрона к энергии возбуждённого уровня a (лэмбовский сдвиг), а Γ_a – ширина этого уровня.

Также показано, что учёт вставок собственной энергии электрона во внешние электронные линии приводит к сдвигу (уточнению) энергии начального состояния (a_0).

В параграфе 2.2. рассматриваются многозарядные ионы с двумя и более электронами, рассматривается случай невырожденных состояний. На основе процедуры, описанной в предыдущем параграфе для учёта поправок на собственную энергию электрона, произведён учёт поправок на межэлектронное взаимодействие. Получены формулы для поправок к энергии с учётом обмена одним (см. Рис. 3) и двумя (см. Рис. 4, 5) фотонами. Также рассматривались поправки на обмен тремя фотонами в брейтовском приближении.

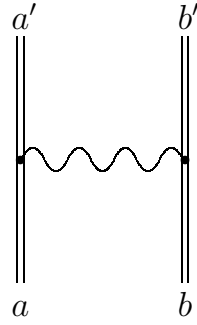


Рис. 3: Двухэлектронные фейнмановские графики, описывающие первый порядок межэлектронного взаимодействия. Двойные прямые линии отвечают связанным электронам в поле ядра, волнистая линия отвечает сумме кулоновского и брейтовского (поперечного) фотона. Если $a' = a$ и $b' = b$ график называется “прямой”, в случае $a' = b, b' = a$ он называется “обменным”.

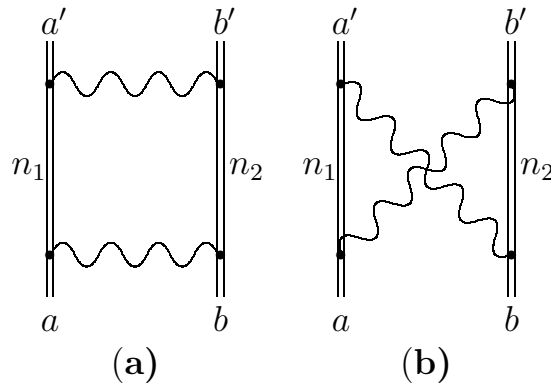


Рис. 4: Двухэлектронные фейнмановские графики, описывающие второй порядок межэлектронного взаимодействия. График (a) называется “box”, график (b) называется “cross” графиком. Обозначения совпадают с обозначениями Рис. 3. Индексы n_1, n_2 обозначают суммирование по промежуточным состояниям.

В параграфе 2.3. рассматривается случай квазивырожденных состояний. В параграфе 2.4. рассматривается применение метода контура линии для двухэлектронных конфигураций. В параграфе 2.5. рассматривается применение метода контура линии для трёхэлектронных конфигураций. В параграфе 2.6. рассматриваются квазивырожденные двухэлектронные конфигурации.

Глава 3. Вероятности переходов

В третьей главе обсуждается применение метода контура линии для вычисления вероятностей переходов в рамках КЭД теории.

Мы будем рассматривать вероятность перехода для процесса

$$I \xrightarrow{\omega_0} F, \quad (4)$$

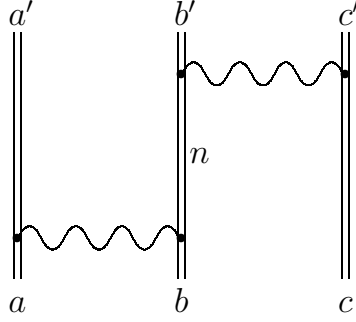


Рис. 5: Трёхэлектронные фейнмановские графики второго порядка, описывающие второй порядок межэлектронного взаимодействия (“step” – графики). Обозначения совпадают с обозначениями Рис. 3.

где I – начальное двухэлектронное состояние, распадающееся в конечное состояние F с испусканием фотона ω_0 . В рамках метода контура линии состояния иона ассоциируется с позицией резонанса. Поэтому мы будем рассматривать более общий процесс, который включает в себя переход (4):

$$A_0 \xrightarrow{\omega} I \xrightarrow{\omega_0} F \xrightarrow{\omega'} A_0, \quad (5)$$

т.е., переход из состояния A_0 (положим, что A_0 – основное состояние) в состояние I с поглощением фотона ω . Затем состояние I распадается в состояние F с испусканием фотона ω_0 и, наконец, состояние F распадается назад в основное состояние A_0 с испусканием фотона ω' . Начальное состояние (I) ассоциируется с резонансом около $\omega = -E_{A_0} + E_I^{(0)}$, где $E_I^{(0)}$ – энергия (в нулевом порядке теории возмущений, т.е. сумма дираковских энергий) состояния I . Конечное состояние (F) определяется резонансом около $\omega' = -E_{A_0} + E_F^{(0)}$. Энергия основного состояния A_0 даётся как E_{A_0} .

В диссертации показано, что в резонансном приближении амплитуда процесса рассеяния (5) может быть записана как

$$U = T^+ \frac{1}{D(\omega') - \Delta V(\omega')} \Xi(\omega_0) \frac{1}{D(\omega) - \Delta V(\omega)} T. \quad (6)$$

Матрица T описывает поглощение фотона ω основным состоянием A_0 . Матрица T^+ описывает излучение фотона ω' с переходом в основное состояние A_0 . Матрица $D(\omega) = E_{A_0} + \omega - V^{(0)}$, где E_{A_0} – энергия состояния A_0 , $V^{(0)}$ – сумма дираковских энергий электронов, принадлежащих состоянию I . Матрица D – диагональная матрица в базисе двухэлектронных функций в j - j связи. Матрица оператора взаимодействия $\Delta V(\omega)$ подробно исследована в диссертации, она включает в себя межэлектронное взаимодействие (обмен одним и двумя фотонами Рис. 3-5) и радиационные поправки.

Правый знаменатель отвечает резонансу, ассоциирующемуся с состоянием I , а левый знаменатель определяет резонанс для состояния F . Функция $\Xi(\omega_0)$ – сложная вершина, которая описывает излучение фотона ω_0 состоянием I с переходом в состояние F . Матричный элемент вершины $\Xi(\omega_0)$, посчитанный на собственных векторах Φ_I, Φ_F матриц $D(\omega) - \Delta V(\omega)$ и $D(\omega') - \Delta V(\omega')$, отвечающих состояниям I и F , соответственно, представляет амплитуду перехода (4)

$$U_{I \rightarrow F} = (\Xi(\omega_0))_{\Phi_F \Phi_I}. \quad (7)$$

Собственные вектора Φ_I, Φ_F и вершина $\Xi(\omega_0)$ могут быть построены в каждом порядке КЭД теории возмущений. Процедура их построения рассматривается в диссертации.

В параграфе 3.1. рассматриваются одноэлектронные ионы.

В параграфе 3.2. рассматриваются двухэлектронные ионы, нулевой порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию (см. Рис. 6).

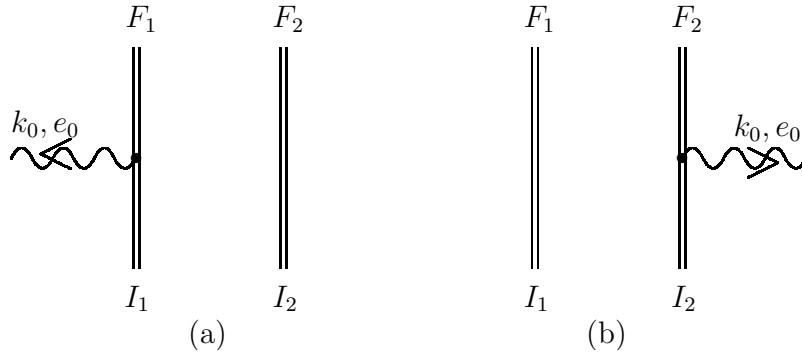


Рис. 6: Фейнмановские графики, представляющие однофотонный переход в двухэлектронном ионе в низшем порядке по α . I_i ($i = 1, 2$) и F_i ($i = 1, 2$) обозначают начальное и конечное состояния двухэлектронного иона.

В параграфе 3.3. рассматриваются двухэлектронные ионы, первый порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию (однофотонный обмен) (см. Рис. 7). Показано, что матричные элементы оператора Ξ имеют вид

$$\Xi = \Xi^{(0)} + \Xi^{(1)} + e \mathcal{O}(\alpha^2), \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \Xi_{u_1 u_2 d_1 d_2}^{(0)} &= 2e A_{u_1 d_1}^{(k_0, \lambda_0)*} \delta_{u_2 d_2}, \\ \Xi_{u_1 u_2 d_1 d_2}^{(1)} &= \sum_{n, \varepsilon n + \varepsilon u_2 = \varepsilon d_1 + \varepsilon d_2} e^3 A_{u_1 n}^{(k_0, \lambda_0)*} \frac{\partial}{\partial x} I_{n u_2 d_1 d_2}(|x|) \Big|_{x = \varepsilon u_2 - \varepsilon d_2} \end{aligned} \quad (9)$$

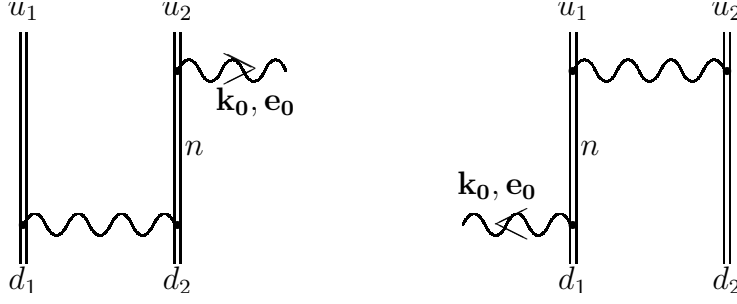


Рис. 7: Фейнмановские графики, представляющие однофотонный переход в двухэлектронном ионе в первом порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию.

$$+ \sum_{\substack{n \\ \varepsilon_n + \varepsilon_{d_2} = \varepsilon_{u_1} + \varepsilon_{u_2}}} e^3 \frac{\partial}{\partial x} I_{u_1 u_2 n d_2}(|x|) \Big|_{x = \varepsilon_{d_2} - \varepsilon_{u_2}} A_{nd_1}^{(k_0, \lambda_0)*}. \quad (10)$$

$A_{ud}^{(k_0, \lambda_0)*}$ описывает излучение фотона электроном в состоянии d с переходом в состояние u . $I_{u_1 u_2 d_1 d_2}(\Omega)$ описывает однофотонный обмен. Уравнение (10) представляет собой приводимую часть поправок первого порядка, т.е. вклад ссылочных состояний.

В параграфе 3.4. представлено вычисление вероятности переходов для двухэлектронных ионов, в частности, для квазивырожденных уровней.

В параграфе 3.5. обсуждаются результаты расчётов.

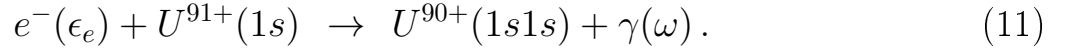
Глава 4. Рекомбинация

В параграфе 4.1. обсуждается процесс рекомбинации электронов с многозарядными ионами, в частности, рассматривается процесс диэлектронной рекомбинации. Диэлектронная рекомбинация играет фундаментальную роль в определении заселенности уровней, ионизационного баланса высокотемпературной лабораторной и астрофизической плазмы. Развитие ускорителей ионов, ловушек (ЕВИТ) и накопительных колец сделало возможным наблюдать более детальные и сложные спектры. Из экспериментов по диэлектронной рекомбинации можно получить точные значения резонансных энергий дважды возбуждённых состояний и динамику столкновений. Парциальные ширины процессов захвата и затухания стали также объектом экспериментального исследования. Измерения формы линий резонансов в многозарядных ионах предоставляют информацию о скорости распространения охлаждающего электронного пучка и естественных ширинах.

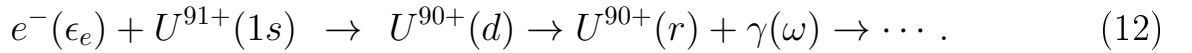
В настоящем исследовании процесс диэлектронной рекомбинации с помощью метода контура линии рассматривается строго в рамках КЭД. В рамках этого метода межэлектронное взаимодействие частично учтено во всех порядках теории

возмущений, также учитываются радиационные поправки к процессу диэлектронной рекомбинации.

В параграфе 4.2. рассматривается процесс рекомбинации электронов с Н-подобными ионами. В качестве примера рассматривается рекомбинация с Н-подобным ионом урана

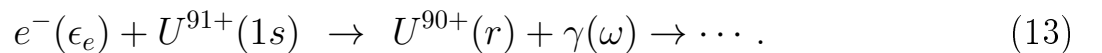


В этом процессе начальное состояние системы представлено одноэлектронным ионом урана ($U^{91+}(1s)$) в основном состоянии и налетающим электроном ($e(\epsilon_e)$) с энергией ϵ_e . Конечное состояние – это двухэлектронный ион урана ($U^{90+}(1s1s)$) в основном состоянии и излучённый фотон или несколько фотонов $\gamma(\omega)$ с полной энергией (ω), определяемой законом сохранения энергии. Сечение рассеяния этого процесса как функция энергии налетающего электрона (ϵ_e) обнаруживает резонансы в области, где сумма энергий налетающего электрона и связанного $1s$ -электрона ($\epsilon_e + \epsilon_{1s}$) близка к энергиям дважды возбуждённых двухэлектронных конфигураций ($2s2s$), ($2s2p$), ($2p2p$) и т.д. В диссертации рассмотрены только дважды возбуждённые конфигурации с $2s$ и $2p$ -электронами. Доминирующим процессом, дающим вклад в резонансы, является процесс



Этот процесс называется диэлектронной рекомбинацией. Здесь дважды возбуждённая двухэлектронная конфигурация (d) – это одна из ($2s2s$), ($2s2p$) ($2p2p$) конфигураций. Однократно возбуждённая двухэлектронная конфигурация (r) – это одна из ($1s2s$), ($1s2p$) конфигураций. Частота ω излучённого фотона $\gamma(\omega)$ определяется законом сохранения энергии. Если энергия начального состояния равна энергии возбуждённой двухэлектронной конфигурации (только дважды возбуждённая конфигурация может удовлетворять этому условию), сечение рассеяния показывает резонанс.

Процесс диэлектронной рекомбинации, даваемый уравнением (12), всегда идёт вместе с процессом



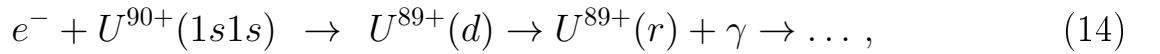
Этот процесс (13) называется радиационной рекомбинацией. Процесс радиационной рекомбинации – нерезонансный процесс, и его вклад в сечение рассеяния в нерезонансной области является доминирующим.

Таким образом, процесс электронной рекомбинации – это резонансный процесс и в резонансной области сечение рассеяния определяется (с высокой точностью)

процессами радиационной рекомбинации и диэлектронной рекомбинации. Вклады этих процессов в полное сечение рассеяния неразделимо смешаны. В низшем порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию только процесс радиационной рекомбинации даёт вклад (см. Рис. 6). В следующих порядках теории возмущений оба процесса дают вклад (см. Рис. 7).

Диэлектронная рекомбинация с одноэлектронным ураном исследовалась экспериментально и теоретически [17].

В параграфе 4.3. рассматривается процесс рекомбинации электронов с Неподобными ионами. В качестве примера рассматривается рекомбинация с Неподобным ионом урана



где d – дважды возбуждённое состояние: $(1s2s2s)$, $(1s2s2p)$ или $(1s2p2p)$, r – однократно возбуждённое состояние: $(1s1s2s)$ или $(1s1s2p)$.

Диэлектронная рекомбинация с многозарядными ионами представляет собой инструмент для исследования брейтовского взаимодействия. В диссертации показано, что брейтовское взаимодействие может давать важный и даже доминирующий вклад в сечение диэлектронной рекомбинации с многозарядными ионами с небольшим числом электронов.

В параграфе 4.4. показано применение метода контура линии для описания взаимодействия многозарядных ионов со свободными электронами.

Применение метода контура линии к расчёту вероятностей перехода представлено в главе 3. Техника, разработанная в главе 3, применима только для систем со связанными электронами. Так как в случае электронной рекомбинации начальное состояние содержит электрон из непрерывного спектра, было предложено рассматривать вспомогательную систему связанных электронов, свойства которых ясно связаны со свойствами настоящей системы.

Обозначим волновую функцию электрона из непрерывного спектра как $\psi_e(\mathbf{r})$ и введём функцию

$$\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r}) = \psi_e(\mathbf{r}) \theta(R - |\mathbf{r}|), \quad (15)$$

где $\theta(R - |\mathbf{r}|)$ – ступенчатая функция Хэвисайда. Функция $\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})$ совпадает с функцией $\psi_e(\mathbf{r})$ при $|\mathbf{r}| < R$ и равна нулю при $|\mathbf{r}| > R$. Функция $\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})$ может быть нормирована на единицу. Соответствующая нормировочная константа N_R и нормированная функция $\psi_{e_R}(\mathbf{r})$ имеют вид

$$N_R = \left[\int d^3\mathbf{r} |\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})|^2 \right]^{1/2}, \quad \psi_{e_R}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_{e_R}^{(\text{aux})}(\mathbf{r})}{N_R}. \quad (16)$$

Заметим, что при больших значениях R нормировочная константа N_R пропорциональна \sqrt{R} [18] и, соответственно,

$$\psi_{e_R}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{\sqrt{R}}. \quad (17)$$

Мы можем ввести искусственное связанное электронное состояние e_R , описываемое волновой функцией ψ_{e_R} . Энергия и угловые квантовые числа электрона непрерывного спектра ψ_e и связанного электрона ψ_{e_R} одинаковые. Рассмотрим два процесса, описываемые уравнениями (13) и (14), которые различаются начальными состояниями. Первое начальное состояние – ион в основном состоянии и электрон непрерывного спектра e . Второе начальное состояние – ион в основном состоянии и искусственный связанный электрон e_R . Амплитуду первого процесса обозначим как U , амплитуду второго процесса как U_R , тогда эти амплитуды связаны через

$$U = \lim_{R \rightarrow \infty} N_R U_R. \quad (18)$$

Согласно вышесказанному, метод контура линии может быть обобщён на случай расчёта амплитуды процесса электронной рекомбинации. Мы вводим искусственное связанное электронное состояние e_R и используем метод контура линии для расчёта амплитуды перехода (U_R), т. е., для системы, где электрон непрерывного спектра заменён на связанный e_R электрон. Амплитуда процесса электронной рекомбинации даётся уравнением (18). Предел $R \rightarrow \infty$ может быть легко взят численно.

В параграфе 4.5. приведены формулы для вычисления сечения рекомбинации.

В параграфе 4.6. описываются применённые численные методы.

В параграфе 4.7. обсуждаются результаты расчётов полного и дифференциального сечения диэлектронной рекомбинации с Н-подобными ионами урана. На Рис. 8 представлено полное сечение диэлектронной рекомбинации и отдельно показаны вклады в сечение различных полных угловых моментов налетающего электрона. Максимумы этих сечений отвечают энергиям дважды возбуждённых конфигураций, однако максимумы полного сечения могут отличаться от соответствующих энергий.

В диссертации приведены результаты расчёта полного сечения диэлектронной рекомбинации с одноэлектронным ураном как с учётом брейтовского взаимодействия, так и без его учёта. Сравнение результатов этих расчётов показывает, что учёт брейтовского взаимодействия качественно и количественно меняет сечение рекомбинации.

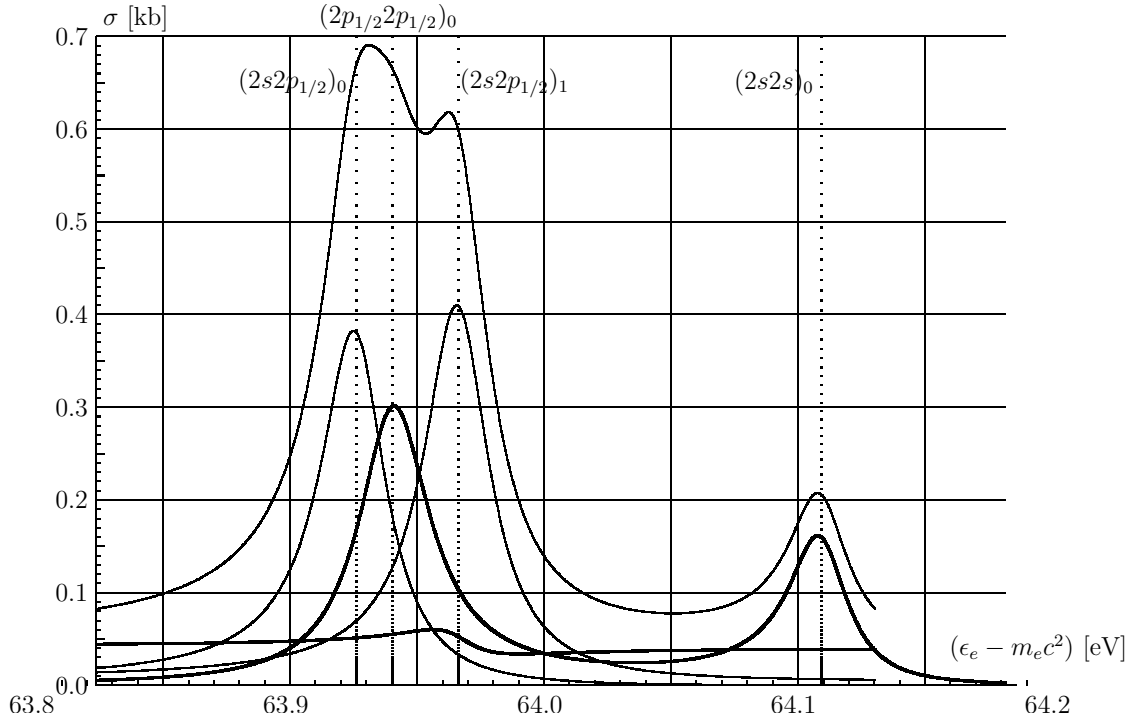


Рис. 8: Полное сечение диэлектронной рекомбинации (в kb) с одноэлектронным ионом урана, представленное как функция энергии налетающего электрона. Верхняя кривая показывает полное сечение. Пунктирные вертикальные линии показывают энергии $(2s2p_{1/2})_0$, $(2p_{1/2}2p_{1/2})_0$, $(2s2p_{1/2})_1$, $(2s2s)_0$ конфигураций слева направо, соответственно. Остальные кривые представляют вклады различных угловых моментов налетающего электрона. Жирная кривая с максимумами у $(2p_{1/2}2p_{1/2})_0$, $(2s2s)_0$ конфигураций отвечает s -электрону. Кривые с максимумами у $(2s2p_{1/2})_0$, $(2s2p_{1/2})_1$ конфигураций отвечают $p_{1/2}$ -электронам. Жирная кривая с невыраженными максимумами представляет все оставшиеся вклады.

Был исследован вклад высших мультиполей разложения волновой функции фотона в сечение рекомбинации. Результаты показывают, что высшие мультиполи могут давать значительный вклад в дифференциальное сечение, в частности, они могут достигать 30% в области между пиками.

Также исследовалась роль поляризации начального состояния системы и излученного фотона. Для описания роли поляризации фотона представлены параметры Стокса. Показано, что параметры Стокса чувствительны к брейтовскому взаимодействию.

Была также исследована асимметрия вылетевших фотонов. Параметр асимметрии определяется как

$$A = \frac{\sigma'(\theta = 90^\circ)}{\sigma'(\theta = 0^\circ)}, \quad (19)$$

где $\sigma'(\theta)$ – дифференциальное сечение вылета фотона под углом θ . Параметр асимметрии может быть измерен с высокой точностью для радиационной рекомби-

нации электронов с многозарядными ионами. Полученные результаты показывают сильную чувствительность параметра асимметрии к брейтовскому взаимодействию.

В параграфе 4.8. обсуждаются результаты расчётов сечения процесса диэлектронной рекомбинации с He-подобными ионами урана. Исследуется вклад брейтовского взаимодействия и брейтовских ширин на сечение рекомбинации. Вклад брейтовского взаимодействия и, в частности, брейтовских ширин оказывается очень значительным.

Относительный вклад брейтовского межэлектронного взаимодействия в сечение диэлектронной рекомбинации с двухэлектронными ионами урана намного больше, чем в случае диэлектронной рекомбинации с одноэлектронными ионами. Важность брейтовского взаимодействия объясняется большой чувствительностью ширин трёхэлектронных состояний к брейтовскому взаимодействию. В рамках стандартной КЭД теории энергетический сдвиг уровней энергии (благодаря взаимодействию с квантованными электромагнитным и электрон-позитронными полями) обычно записывается как $\Delta E = \text{Re}\{\Delta E\} - i\frac{\Gamma}{2}$, где $\text{Re}\{\Delta E\}$ – поправка к энергии, Γ – ширина энергетического уровня. Для одно- и двухэлектронных конфигураций основной вклад в Γ обычно дается фейнмановским графиком собственной энергии электрона. Однако, для трёхэлектронных конфигураций вклад графика собственной энергии электрона может в значительной степени сокращаться с вкладом брейтовской части графика однофотонного обмена. Например, конфигурация $(1s1s2s)$ является основным состоянием трёхэлектронного иона, поэтому вклад мнимой части диаграммы собственной энергии $2s$ -электрона полностью сокращается с вкладом брейтовской части графика однофотонного обмена. Это можно называть реализацией принципа Паули [10]. Отметим, что в случае рассмотренных трёхэлектронных дважды возбуждённых состояний мы учитываем межэлектронное взаимодействие между $1s$ -электроном и возбуждёнными электронами L-оболочки. Однако, в случае рекомбинации с одноэлектронным ионом двухэлектронные дважды возбуждённые состояния [такие как $(2s, 2s)$, $(2s, 2p)$, $(2p, 2p)$] не содержат $1s$ -электрон. Эффект запаздывания более значительный для взаимодействия между электронами сильно разных энергий, следовательно запаздывание должно быть более важным для рекомбинации с двухэлектронными ионами.

Также, как и в случае рекомбинации с H-подобным ионом урана, было исследовано влияние поляризации налетающего электрона на сечение рекомбинации с поляризованными ионами. Обсуждаются поляризационные свойства излучённого фотона.

Глава 5. Ионизация

В пятой главе метод контура линии обобщается и применяется для описания процесса ионизации двухэлектронных многозарядных ионов. Особое внимание уделяется резонансному каналу ионизации, в котором ионизация происходит через формирование дважды возбуждённых (автоионизационных) состояний, т.е. рассматривается применение метода контура линии для описания процесса ионизации с участием дважды возбуждённых состояний.

Атомные системы с более чем одним электроном имеют состояния, которые могут спонтанно распадаться, излучая электрон. Они называются автоионизационными состояниями и могут быть хорошо видны во многих атомных процессах, например, таких как фотоионизация и ионизация электронным ударом. В частности, это особенно часто происходит, когда энергия, передаваемая в систему, близка к разности между энергиями автоионизационного состояния и начального состояния системы. В таких случаях исходная система может осуществить переход к континууму, не только непосредственно, но и через возбуждение в автоионизационное состояние с его последующим оже-распадом (так называемый канал возбуждения-автоионизации (excitation-autoionization), EA канал).

В этой главе рассматривается потеря одного электрона гелиеподобными многозарядными ионами, возникающая при столкновениях ионов с атомными частицами (ядрами, атомами). Предполагается, что столкновения достаточно быстрые, чтобы межэлектронное взаимодействие в ионе и взаимодействие электронов иона с атомной частицей было значительно слабее, чем взаимодействие этих электронов с ядром иона и поэтому эти взаимодействия можно рассматривать как возмущение. Основное внимание в этом исследовании посвящено роли автоионизации в этом процессе, которая может быть значительной, когда энергия испускаемого электрона близка к разнице между энергией автоионизационного состояния Неподобного иона и энергией конечного состояния получающегося Н-подобного иона. В этом случае автоионизационное состояние может участвовать в процессе через соответствующий EA канал.

В параграфе 5.1. обсуждается теоретический подход для описания потери электронов многозарядными ионами. Описание свободного Неподобного иона в рамках КЭД теории основано на методе контура линии. Используется картина Фарри, в которой кулоновское взаимодействие электронов иона с его ядром полностью учитывается с самого начала. Уравнение Дирака используется для описания невзаимодействующих как связанных электронов, так и излучённого электрона. Взаимодействие этих электронов с квантованными электромагнитным и электрон-

позитронными полями описывается с помощью стандартной КЭД теории возмущений. Это взаимодействие учитывается в нулевом и первом порядке теории возмущений. Используя метод контура линии, высшие поправки на межэлектронное взаимодействие также частично учитываются.

Поскольку взаимодействие электронов с полем налетающей атомной частицы считается относительно слабым, оно будет описываться с использованием минимально возможных порядков теории возмущений. Прямой канал потери электронов, по существу, является одноэлектронным процессом. Поэтому для его описания достаточно использовать первый порядок теории возмущений по взаимодействию с налетающей частицей.

Ситуация с описанием EA канала потери электронов несколько сложнее. Этот канал включает в себя два качественно разных механизма образования автоионизационных (дважды возбуждённого, например, $(2s, 2p)_1$) состояний, в которых налетающая атомная частица взаимодействует либо только с одним из двух электронов (EA₁ канал) или с каждым из них (EA₂ канал). Описание EA₂ канала требует рассмотрения второго порядка теории возмущений по взаимодействию с налетающей атомной частицей, тогда как для описания EA₁ канала достаточно использовать только первый порядок.

На Рис. 9 представлены основные графики Фейнмана, описывающие процесс потери электрона ионом в столкновении с атомной частицей. График (а) описывает процесс прямой потери электрона, в котором один из электронов иона через поглощение виртуального фотона, переходит в континуум, тогда как другой электрон остается просто наблюдателем. Графики (b) и (c) описывают основной вклад в EA₁ канал. Графики (d) и (e) соответствуют EA₂ каналу. Взаимодействие с полем налетающей атомной частицы обозначено волнистой линией с крестиком на конце. Для каждого канала потери электрона соответствующие графики изображают только ведущие вклады в электрон-электронное взаимодействие. Отметим, что графики (b)-(e) также включают в себя частично прямой канал ионизации.

В параграфе 5.2. обсуждается построение волновых функций, описывающих начальное и конечное состояния.

В параграфе 5.3. представлена потеря электрона в столкновениях с голыми ядрами. Процесс потери электрона ионом в столкновении с голым ядром рассматривается в системе покоя иона. Удобно считать, что ядро иона находится в начале координат, а электроны имеют координаты \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Также предполагается, что энергия налетающей частицы настолько велика, что её изменение в процессе столкновения незначительно по сравнению с её начальным значением. Это позволяет

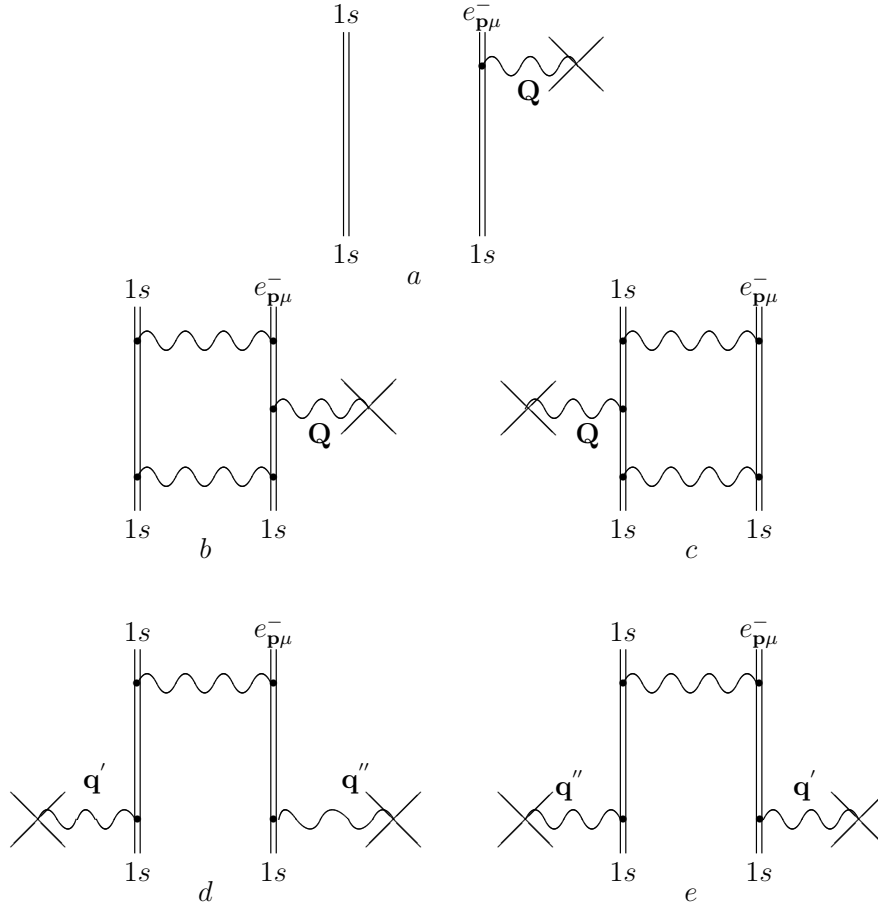


Рис. 9: Фейнмановские графики, описывающие потерю электрона He-подобным многозарядным ионом, изначально находящимся в основном состоянии, при столкновении с атомной частицей. Взаимодействие с полем налетающей атомной частицы обозначено волнистой линией с крестиком на конце. (а) – ведущий (по межэлектронному взаимодействию) вклад в прямой канал. [(b), (c)] – ведущие вклады в EA_1 канал. [(d), (e)] – ведущие вклады в EA_2 канал. Векторы \mathbf{Q} , \mathbf{q}' и \mathbf{q}'' обозначают переданный от внешнего поля (поля налетающей атомной частицы) импульс многозарядному иону.

описывать частицу как движущуюся по прямолинейной классической траектории $\mathbf{R}(t) = (\mathbf{b}, vt)$, где $\mathbf{b} = (b_x, b_y)$ – прицельный параметр, $\mathbf{v} = (0, 0, v)$ – скорость частицы и t обозначает время.

Поле налетающей частицы представляет для электронов иона довольно слабое возмущение, если заряд ядра частицы Z_A и скорость столкновения v удовлетворяют условию $\frac{\alpha Z_A}{v} \ll 1$, где α – постоянная тонкой структуры, используются релятивистские единицы. Предполагается, что это условие выполнено, что позволяет ограничиться в рассмотрении только первым и вторым порядком теории возмущений по взаимодействию электронов иона с налетающей частицей.

Взаимодействие многозарядного иона с налетающим голым ядром описывается

с помощью потенциала Лиенара-Вихерта. Такой же результат получается при описании налетающего ядра соответствующей волновой функцией и учётом обмена виртуальным фотоном между голым ядром и электронами иона.

В параграфе 5.4. рассматривается потеря электрона в столкновениях с атомами. Когда ион сталкивается с нейтральным атомом, взаимодействие электронов иона как с ядром атома, так и с электронами атома может приводить к потере электронов ионом. Рассматривая взаимодействия между ионом и атомом в первом порядке, роль атомных электронов в процессе потери электронов ионом может быть двужначной.

Во-первых, в столкновениях, в которых атом остаётся в своём начальном состоянии (упругое столкновение), электроны атома экранируют (полностью или частично) заряд атомной частицы (см. [19]). Эффект экранирования уменьшает вероятность того, что электроны иона перейдут в непрерывный спектр, в сравнении с вероятностью перехода в столкновении с голым ядром. Во-вторых, в столкновениях, которые являются неупругими также для атома, потеря электронов ионом может происходить благодаря взаимодействию с электронами атома (см. [19]). В этом случае присутствие атомных электронов увеличивает вероятность потери электронов ионом, поэтому этот эффект называют антискринингом.

В столкновениях, которые характеризуются передачей импульса атому, значительно превышающего типичные импульсы атомных электронов, вклад упругой и неупругой атомных мод в сечение возбуждения (потери электрона) иона масштабируется как $\sim Z_A^2$ и $\sim Z_A$, соответственно, где Z_A – заряд ядра атома (см., например, [19]). В диссертации рассматриваются только столкновения ионов с многоэлектронными атомами ($Z_A \gg 1$), где относительный вклад неупругой моды мал. Поэтому в настоящем исследовании можно пренебрегать неупругой модой. Для первого порядка по отношению к взаимодействию электронов иона с налетающим атомом, вклад от упругой атомной моды может быть получен из выражения для случая столкновения с голым ядром с зарядом Z_A , если заменить Z_A на эффективный заряд атома как функцию переданного импульса, приведённого в [19]

$$Z_{A,\text{eff}} = Z(\mathbf{Q}), \quad Z(\mathbf{Q}) = Z_A \left(Q_{\perp}^2 + \frac{Q_{\min}^2}{\gamma^2} \right) \sum_{i=1}^3 \frac{A_i}{k_i^2 + Q_{\perp}^2 + \frac{Q_{\min}^2}{\gamma^2}}, \quad (20)$$

где Q_{\min} – минимальный переданный импульс. Параметры A_i и k_i ($i = 1, 2, 3$) для различных атомов представлены в [20].

В параграфе 5.5 обсуждаются результаты расчёта сечения потери электрона He-подобными ионами Ca^{18+} и Zn^{28+} в столкновениях (100 MeV/u) с голыми ядра-

ми Ne^{10+} и с атомами Ne. Особое внимание уделяется резонансному каналу потери электрона, в котором ион сначала возбуждается в автоионизационное состояние и затем происходит оже-распад. Исследуется резонансная структура полного и дифференциального сечения потери электрона.

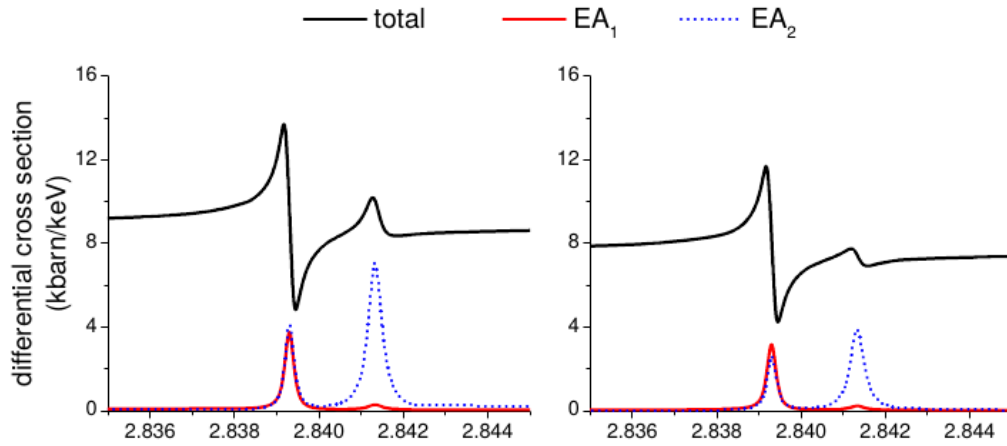


Рис. 10: Сечение потери электрона ионом Ca^{18+} ($1s^2$) при 100 MeV/u столкновении с голым ядром Ne (левый график) и атомом Ne (правый график) представлено как функция кинетической энергии вылетевшего электрона. Сечения даны в системе покоя иона Ca для интервала энергии электрона, где автоионизационные состояния $(2s, 2p_{3/2})_1$ и $(2p_{3/2}, 2p_{3/2})_2$ дают значительный вклад.

На Рис. 10 показаны результаты расчётов для потери электронов ионом Ca^{18+} ($1s^2$) в столкновениях с голыми ядрами неона и нейтральными атомами неона при энергии столкновения 100 MeV/u , соответствующая этому столкновению скорость равна $v = 0.428 \text{ r.u.}$ ($\gamma = 1.106$). Состояние $(2s, 2p_{3/2})_1$ отвечает самому сильному резонансу. На рисунке видно, что в этом случае оба подканала EA_1 и EA_2 канала EA одинаково важны.

При анализе полученных результатов эффект потери электронов многозарядными ионами в столкновениях с атомными частицами сравнивается с эффектом фотоионизации. Спектры излучения для потери электрона при фотопоглощении и взаимодействии с заряженной частицей могут быть очень похожи, если энергия налетающей частицы достаточно высока.

В диссертации также исследуется возможность экспериментального изучения данного процесса. Была рассмотрена ситуация, при которой быстро движущиеся многозарядные ионы теряют электроны при столкновениях с атомами (с голым атомными ядрами). Такая ситуация может быть экспериментально реализована в ускорителях тяжелых ионов, когда пучок быстрых Ne-подобных многозарядных ионов проникает в газовую мишень, которая находится в лабораторной системе.

В конце диссертации приводятся **основные результаты и выводы**.

Список литературы

- [1] L. Labzowsky, V. Karasiev, I. Lindgren, H. Persson, and S. Salomonson, *Phys. Scr.* **T46**, 150 (1993).
- [2] V. Weisskopf and E. Wigner, *Z. Phys.* **63**, 54 (1930).
- [3] F. Low, *Phys. Rev.* **88**, 53 (1952).
- [4] M. Gell-Mann and F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
- [5] J. Sucher, *Phys. Rev.* **107**, 1448 (1957).
- [6] L. N. Labzowsky, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **59**, 167 (1970).
- [7] S. Zapryagaev, N. Manakov, and V. Palchikov, *Theory of One- and Two-Electron Multicharged Ions* (Energoatomizdat, Moscow, 1985).
- [8] V. M. Shabaev, *Phys. Rep.* **356**, 119 (2002).
- [9] I. Lindgren, S. Salomonson, and B. Åsén, *Phys. Rep.* **389**, 161 (2004).
- [10] L. Labzowsky, G. Klimchitskaya, and Yu. Dmitriev, *Relativistic Effects in the Spectra of Atomic Systems* (Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1993).
- [11] L. N. Labzowsky, *J. Phys. B* **26**, 1039 (1993).
- [12] V. G. Gorshkov, L. N. Labzowsky, et al., *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **96**, 53 (1989).
- [13] V. V. Karasiev, L. N. Labzowsky, *Physica Scripta* **46**, 225 (1992).
- [14] L. Labzowsky, V. Karasiev, and I. Goidenko, *J. Phys. B* **27**, L439 (1994).
- [15] L. N. Labzowsky, I. A. Goidenko, and D. Liesen, *Physica Scripta* **56**, 271 (1997).
- [16] X. Zheng, Y. R. Sun, et al., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 263002 (2017).
- [17] D. Bernhardt, C. Brandau, *et al.*, *Phys. Rev. A* **83**, 020701 (2011).
- [18] A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Quantum Electrodynamics* (Wiley Interscience, New York, 1965).
- [19] A. Voitkiv and J. Ullrich, *Relativistic Collisions of Structured Atomic Particles* (Springer, 2008).
- [20] F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol, and J. Parellada, *Phys. Rev. A* **36**, 467 (1987).