

Процессы ионизации и перезарядки при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов

И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько¹⁾

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 октября 2024 г.

После переработки 1 ноября 2024 г.

Принята к публикации 2 ноября 2024 г.

Выполнены расчеты сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов Nh ($Z = 113$), Fl ($Z = 114$), Mc ($Z = 115$), Lv ($Z = 116$), Ts ($Z = 117$), и Og ($Z = 118$) при энергиях протонов $E > 0.01$ кэВ–10 МэВ. При $E \approx 0.01$ –100 кэВ сечения вычислялись в адиабатическом приближении, а при больших энергиях $E \approx 100$ кэВ – в борновском приближении с нормировкой сечений. Поскольку данные для рассматриваемых сечений сверхтяжелых элементов отсутствуют, в настоящей работе расчеты сечений выполнены также для атомов тяжелых элементов Xe ($Z = 54$) и U ($Z = 92$), которые сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами. По результатам работы выявлены отличительные свойства сечений перезарядки и ионизации с участием атомов сверхтяжелых элементов.

DOI: 10.31857/S0370274X24120057, EDN: QNXCXV

1. Введение. В последние годы значительно возрос интерес к исследованию атомов и ионов сверхтяжелых элементов (СТЭ) с зарядом ядра $Z > 100$, представляющих фундаментальный интерес в области атомной, ядерной физики, астрофизики и химии [1–4]. Экспериментальное получение атомов СТЭ представляет весьма трудоемкую задачу, поэтому теоретические исследования приобретают особое значение, так как они могут быть использованы для прогнозирования атомных, ядерных и химических свойств СТЭ и планирования будущих экспериментов с их участием.

В области атомной физики большинство теоретических исследований направлено на изучение спектроскопических свойств СТЭ, таких как потенциалы ионизации атомов и ионов, электронные средства к электрону, поляризуемости и сечения фотоионизации с учетом электронных корреляций, релятивистских и КЭД эффектов (см., например, [5–10]).

Расчеты столкновительных характеристик СТЭ (эффективных сечений и скоростей атомных процессов, ионных фракций, средних зарядовых состояний ионного пучка и др.) сильно ограничены (см., например, [11, 12]). В работе [11] вычислены сечения перезарядки, ионизации и средние заряды $\langle q \rangle$ пучков тяжелых и сверхтяжелых ионов с зарядами ядра $Z = 80$ –120 и энергией $E \approx 250$ кэВ/н при столкновении с газом Не при давлении 0.8 мбар. В недав-

ней работе [12] выполнены аналогичные расчеты сечений и средних зарядов $\langle q \rangle$ для сверхтяжелых атомов и ионов с $Z = 114$ –117 при столкновении с газом Не при давлении 0.8 мбар и энергиях ионов $E = 0.25$ –300 кэВ/н. Вычисленные в [11, 12] средние заряды $\langle q \rangle$ находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными.

Информация об эффективных сечениях атомных процессов при взаимодействии элементарных частиц (электронов и протонов) с тяжелыми частицами (атомами, ионами, молекулами и т.д.) представляет несомненный интерес, так как она содержит базовые (эталонные) данные о столкновительных свойствах атомных систем. К таким элементарным процессам относятся прежде всего ионизация, возбуждение, перезарядка и рекомбинация.

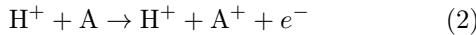
В настоящей работе исследованы свойства сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами Nh ($Z = 113$), Fl ($Z = 114$), Mc ($Z = 115$), Lv ($Z = 116$), Ts ($Z = 117$), и Og ($Z = 118$) при энергиях протонов $E \approx 0.01$ кэВ–10 МэВ. Эти атомы имеют электронную конфигурацию $6d^{10}7s^27p^m$ внешних оболочек с числом эквивалентных электронов $m = 1$ –6 соответственно для атомов с зарядом ядра $Z = 113$ –118.

Сечения перезарядки (ЕС)



вычислены с помощью программ ARSENY и CAPTURE, а сечения ионизации (ION)

¹⁾e-mail: shevelkovp@lebedev.ru



– по программам ARSENY и RICODE-M. Здесь A – атом СТЭ, n – главное квантовое число. Подробное описание программ и области их применения приведены в [13, 14]. Кратко программы можно описать следующим образом.

Код CAPTURE [15] предназначен для расчета нормализованных вероятностей и сечений одноэлектронного захвата при относительно больших энергиях столкновения $E \gtrsim 25 \text{ кэВ/н}$ в борновском приближении (приближение Бринкмана–Крамерса). RICODE-M [16] производит расчет сечений одноэлектронной ионизации (обдирки) в ион-атомных столкновениях при $E \gtrsim 25 \text{ кэВ/н}$ в релятивистском борновском приближении с использованием релятивистского (магнитного) взаимодействия между сталкивающимися частицами и релятивистских волновых функций. Код ARSENY [17] вычисляет сечения перезарядки, возбуждения и ионизации при низких и средних энергиях $0.01 \text{ кэВ/н} \lesssim E \lesssim 100 \text{ кэВ/н}$ в адиабатическом приближении, в котором вероятности процессов рассчитываются методом скрытых пересечений электронных (квазимолекулярных) потенциальных кривых, которые являются собственными значениями двух-центровой кулоновской задачи (переходы типа Ландау–Зинера). При близких столкновениях переходы обусловлены вращательной связью и не являются ландау–зинеровскими. В настоящей работе для расчета сечений (1) и (2) в качестве потенциалов ионизации атомов СТЭ использовались рекомендуемые значения из работы [10], а энергии связи электронов внутренних оболочек атомов – из [18].

2. Сечения перезарядки протонов на атомах СТЭ. Вычисленные сечения перезарядки (1) протонов на атомах СТЭ приведены на рис. 1. В адиабатической области $0.03 \text{ кэВ} \lesssim E \lesssim 100 \text{ кэВ}$ использовался код ARSENY, а при больших энергиях $E \gtrsim 100 \text{ кэВ}$ – код CAPTURE. В области пересечения сечений $E \sim 60–200 \text{ кэВ}$ они плавно соединялись методом сплайн-интерполяции. В адиабатической области свойства сечений перезарядки определяются захватом протоном электрона внешней $7p^m$ -оболочки и максимальны для атомов Mc и Lv. В этой области энергий сечения зависят от потенциала ионизации I атома мишени: чем меньше значение I , тем больше сечение. Согласно [10], атомы имеют потенциалы ионизации: $I(\text{Mc}) = 5.57$, $I(\text{Lv}) = 6.8$, $I(\text{Nh}) = 7.49$, $I(\text{Ts}) = 7.6$, $I(\text{Fl}) = 8.65$ и $I(\text{Og}) = 8.9 \text{ эВ}$, и сечения ЕС убывают от атома Mc к атому Og соответственно. Такую зависимость сечений от I можно кратко объяснить следующим образом.

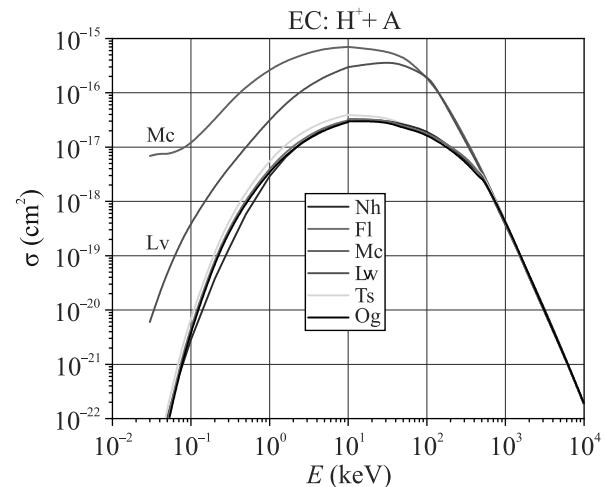


Рис. 1. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки (1) протонов на атомах СТЭ как функции энергии протонов – расчет по программам ARSENY и CAPTURE. Для Mc и Lv атомов основной вклад дает перезарядка в возбужденное состояние $\text{H}^*(n = 2)$ (см. текст)

В методе скрытых пересечений потенциальная энергия активного электрона как функция межъядерного расстояния рассчитывается как собственное значение трехчастичной кулоновской задачи – электрон в поле двух зарядов: $Z_1 = n_0(I/\text{Ry})^{1/2}$ эффективного начального состояния электрона в атоме ($n_0l = 7p$) и заряда $Z_2 = 1$ конечного состояния в атоме водорода, где I – потенциал ионизации атома, $1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ эВ}$. Положение терма энергии начального состояния электрона относительно потенциальных кривых конечных состояний на протоне зависит от эффективного заряда Z_1 и находится между термами конечных состояний: с уменьшением Z_1 энергия начального состояния увеличивается и терм удаляется от конечного терма с $n = 1$ и приближается к терму с $n = 2$. Соответствующее изменение положений скрытых пересечений потенциальных кривых изменяет вклады сечений в конечные состояния на протоне с $n = 1$ и $n = 2$ в полное сечение перезарядки и приводит к описанной зависимости сечений от потенциала ионизации в адиабатической области: чем меньше значение I , тем больше сечение.

Сечения перезарядки протонов в адиабатической области энергий на атомах Mc и Lv с образованием атомов H в основном $n = 1$ и возбужденном $n = 2$ состояниях приведены на рис. 2. Видно, что основной вклад для этих атомов определяется перезарядкой протонов в возбужденное состояние $\text{H}^*(n = 2)$, где сечения на три порядка больше сечений перезарядки в основное состояние. Для остальных атомов сечения близки друг к другу и определяются перезарядкой с

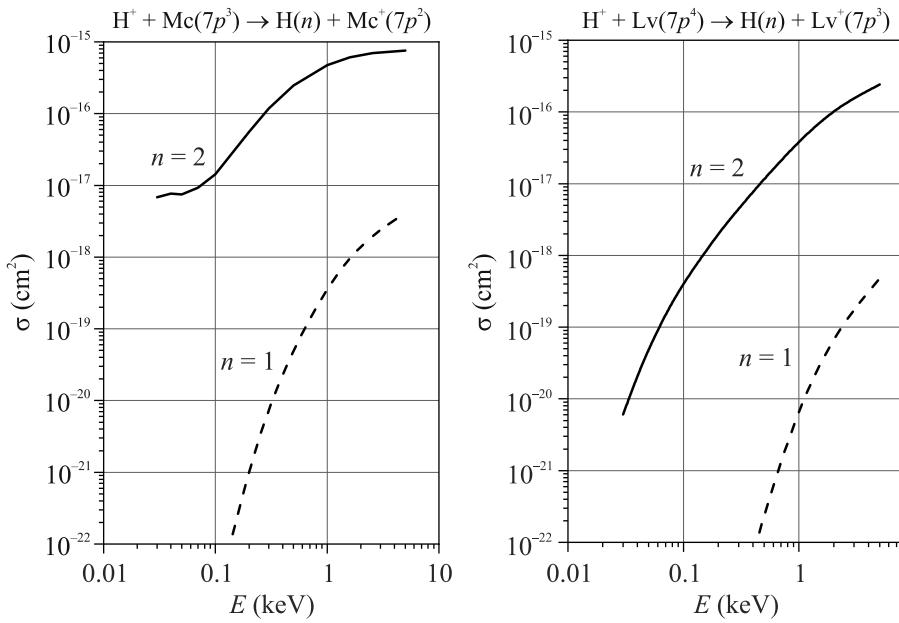


Рис. 2. Сечения перезарядки протонов на атомах Mc и Lv как функции энергии протонов с образованием атомов H в основном $n = 1$ (пунктир) и возбужденном $n = 2$ (сплошные кривые) состояниях – расчет по программе ARSENY

образованием атомов H только в основном состоянии $n = 1$.

При больших энергиях протонов $E \gtrsim 300$ кэВ сечения перезарядки (результат расчетов по программе CAPTURE с $n_{\max} \approx 300$) для всех атомов с точностью 10–15 % одинаковы, так как определяются преимущественным захватом электронов внутренних оболочек атомов СТЭ, имеющих близкие значения энергий связи (см. [18]). Например, при $E \gtrsim 1$ МэВ отношение сечений перезарядки $\sigma(\text{Og})/\sigma(\text{Mc}) \approx 1.1$.

На рисунке 3 приведены сечения перезарядки протонов на атомах тяжелых элементов Xe ($Z = 54$) и U ($Z = 92$). На рисунке 3а сечения для атомов Xe, полученные в настоящей работе (сплошная кривая), сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и расчетами методом Монте-Карло (СТМС) [19] (пунктирная кривая). При малых энергиях сечение имеет квази-резонансный характер с малым дефектом резонанса (разность потенциалов ионизации атомов Xe и H): $\Delta\omega = |I(\text{Xe}) - I(\text{H})| \approx \approx 1.5$ эВ, поэтому оно возрастает с уменьшением энергии при $E \rightarrow 0.01$ эВ. Экспериментальные данные хорошо согласуются с результатами настоящей работы, а сечение, вычисленное методом СТМС, имеет максимум при $E \approx 10$ кэВ и убывает при $E \rightarrow 0.01$ кэВ.

Сечения ЕС для атомов Xe и U в более широкой области энергий протонов приведены на рис. 3б. При энергии $E > 1$ кэВ СТМС-сечения и вычислен-

ные по программе CAPTURE близки друг к другу. Для атомов U дефект резонанса довольно большой, $\Delta\omega \approx 7.4$ эВ, что приводит к убыванию сечения при $E < 100$ кэВ. При $E > 500$ кэВ отношение сечений $\sigma(\text{Xe, СТМС})/\sigma(\text{Xe, CAPTURE}) \approx 1.3$, $\sigma(\text{U, CAPTURE})/\sigma(\text{Xe, CAPTURE}) \approx 1.8$, т.е. в этой области энергий сечение перезарядки протонов на атомах U примерно в 2 раза больше, чем на атомах Xe.

3. Сечения ионизации атомов СТЭ протонами. Сечения ионизации протонами атомов СТЭ, полученные с помощью программ ARSENY и RICODE-M, приведены на рис. 4. В адиабатической области 0.03 кэВ $\lesssim E \lesssim 100$ кэВ сечения, вычисленные по программе ARSENY, зависят от потенциала ионизации атома-мишени I аналогично сечениям перезарядки – чем меньше I , тем больше сечение. В области потенциального рассеяния $E > 1$ МэВ сечения ионизации атомов СТЭ в пределах 25 % примерно одинаковы, что также связано с близкими значениями энергий связи внутренних электронов. Следует отметить, что вклад автоионизации (возбуждение внутренних электронов атома мишени в возбужденные автоионизационные состояния, сопровождающееся распадом состояний с испусканием электрона) в сечения ионизации атомов СТЭ не учитывался из-за отсутствия информации об энергиях автоионизационных состояний. По оценкам вклада автоионизационных переходов для тяжелых атомов (Xe, Bi, U) вклад в

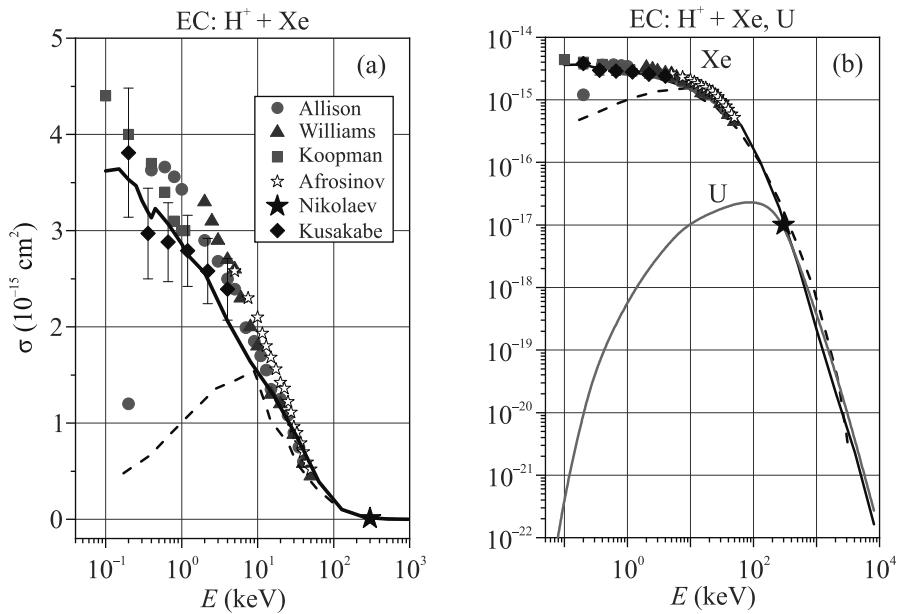


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки (1) протонов на атомах Xe ($Z = 54$) и U ($Z = 92$) как функции энергии протонов. (а) – Сечения EC на атомах Xe при $E \approx 0.01$ –300 кэВ: сплошная кривая – расчет по программам ARSENY и CAPTURE, пунктирная кривая – расчет [19] методом Монте-Карло (СТМС); эксперимент: Allison [20], Williams [21], Koopman [22], Афросимов [23], Николаев [24], Kusakabe [25]. (б) – Сечения EC на атомах Xe и U при $E \approx 0.01$ кэВ–10 МэВ: сплошные кривые – расчет по программам ARSENY и CAPTURE, пунктирная кривая – расчет СТМС [19]

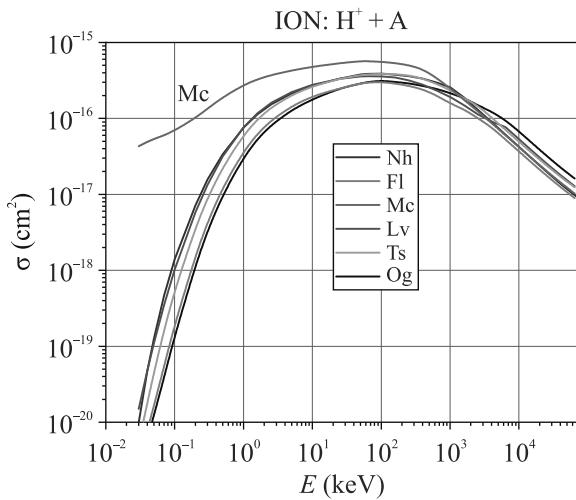


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечения ионизации протонами атомов СТЭ как функции энергии протонов – расчет по программам ARSENY и RICODE-M

ионизацию атомов СТЭ оценивается на уровне 1–2 %.

На рисунке 5 представлены сечения ионизации протонами атомов Xe и U. Настоящие расчеты показали, что вклад автоионизационных переходов в сечение ионизации этих атомов составляет 1–3 %, что является стандартным для сечений ионизацииproto-

нами тяжелых атомов, для которых основной вклад вносит ионизация внешнего электрона и электронов внутренних оболочек (см., например, [13, 14]).

Сечения атомов ксенона (рис. 5а), вычисленные методом Монте-Карло и по программе RICODE-M с учетом ионизации электронов внутренних оболочек в области $E \approx 1$ –50 МэВ практически совпадают, но оба расчета завышают имеющиеся экспериментальные данные при $E \approx 0.8$ –4 МэВ примерно в 1.4 раза. В адиабатической области энергий сечения, полученные с помощью кода ARSENY, значительно превышают СТМС-сечения.

Полное сечение ионизации протонами атомов U, вычисленное по программе ARSENY, приведено на рис. 5б, а отношение сечений ионизации протонами и α -частицами электронов внутренних $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ оболочек урана – на рис. 5с. Расчеты сечений по программе RICODE-M, учитывающей релятивистские эффекты, хорошо согласуются с экспериментом, в то время как нерелятивистское борновское приближение и полуклассическая модель [28] приводят к сильному отличию от экспериментальных данных и расчетам в релятивистском приближении.

4. Заключение. Исследованы свойства сечений перезарядки и ионизации при столкновении протонов с атомами сверхтяжелых элементов с зарядом

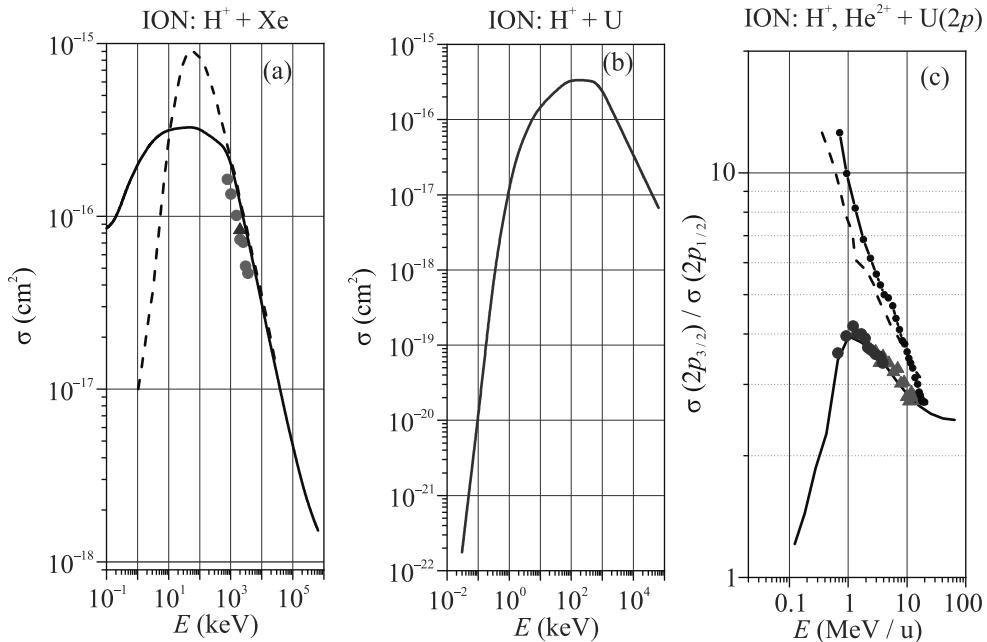


Рис. 5. (Цветной онлайн) Сечения ионизации протонами атомов Xe и U как функции энергии протонов. (а) – Сечения ионизации протонами атомов Xe: пунктир – СТМС расчет [19], сплошная кривая – результат программ ARSENY и RICODE-M. Эксперимент: треугольник [26], кружки [27]. (б) – Сечения ионизации протонами атомов U, расчет по программам ARSENY и RICODE-M. (с) – Отношения сечений ионизации $\sigma(2p_{3/2})/\sigma(2p_{1/2})$ протонами и α -частицами внутренних $2p_{3/2}$ и $2p_{1/2}$ электронов атомов U: пунктирная кривая и кривая с кружками – расчет в борновском (PWBA) и полуклассическом (SCA) приближениях соответственно [28], сплошная кривая – результат программы RICODE-M. Эксперимент: отношения сечений протонами H^+ (треугольники) и α -частицами He^{2+} (кружки) [28]

ядра $Z = 113\text{--}118$ в области энергий $E \approx 0.01$ кэВ–10 МэВ с помощью имеющихся программ ARSENY, CAPTURE и RICODE-M. В адиабатической области сечения зависят от значений потенциалов ионизации атомов: чем больше потенциал, тем меньше сечения. При больших энергиях сечения перезарядки и ионизации атомов близки друг к другу в пределах 25 %.

Выполненные в настоящей работе расчеты обнаружили ряд характерных свойств, присущих атомам СТЭ: вклад в сечение перезарядки протонов на атомах Mc и Lv в адиабатической области энергий с образованием атомов H в возбужденном состоянии $n = 2$, а также примерное равенство сечений перезарядки и ионизации при больших энергиях для всех атомов с $Z = 113\text{--}118$.

Данные для сечений перезарядки и ионизации указанных атомов отсутствуют, поэтому в работе выполнены также расчеты сечений для тяжелых атомов Xe и U, которые сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами. Показано, что при малых энергиях удовлетворительные результаты дает использование адиабатического приближения, а при больших энергиях – необходимо учитывать релятивистские эффекты.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. O. R. Smits, Ch. E. Düllmann, P. Indelicato, W. Nazarewicz, and P. Schwerdtfeger, *Nat. Rev. Phys.* **6**, 86 (2024).
2. Y. Ts. Oganessian and S. N. Dmitriev, *Russ. Chem. Rev.* **85**, 901 (2016).
3. Yu. Oganessian, *Radiochim. Acta* **99**, 429 (2011).
4. B. Lommel, Ch. E. Düllmann, B. Kindler, and D. Renisch, *Eur. Phys. J. A* **59**, 14 (2023).
5. V. Pershina, *J. Nucl. Phys.* **916**, 1 (2013).
6. V. A. Dzuba, M. S. Safronova, and U. I. Safronova, *Phys. Rev. A* **90**, 012504 (2014).
7. E. Eliav, A. Borschevsky, and U. Kaldor, *Nucl. Phys. News* **29**(1), 16 (2019).
8. A. K. Razavi, R. K. Hosseini, D. A. Keating, P. C. Deshmukh, and S. T. Manson, *J. Phys. B* **53**, 205203 (2020).

9. I. M. Savel'yev, M. Y. Kaygorodov, Y. S. Kozhedub, A. V. Malyshev, I. I. Tupitsyn, and V. M. Shabaev, arXiv:2301.01740v1 [physics.atom-ph], Jan 2023.
10. O. R. Smits, P. Indelicato, W. Nazarewicz, M. Piibeleht, and P. Schwerdtfeger, Phys. Rep. **1035**, 1 (2023).
11. J. Khuyagbaatar, V. P. Shevelko, A. Borschhevsky, Ch. E. Düllmann, I. Yu. Tolstikhina, and A. Yakushev, Phys. Rev. A **88**, 042703 (2013).
12. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, Nucl. Instrum. Methods B **554**, 165418 (2024).
13. I. Yu. Tolstikhina and V. P. Shevelko, Phys.-Uspekhi **61**, 247 (2018).
14. I. Tolstikhina, M. Imai, N. Winckler, and V. P. Shevelko, *Basic Atomic Interactions of Accelerated Heavy Ions in Matter*, Springer International Publishing AG, Cham, Switzerland (2018).
15. V. P. Shevelko, O. N. Rosmej, H. Tawara, and I. Yu. Tolstikhina, J. Phys. B **37**, 201 (2004).
16. I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, JETP **119**, 1 (2014).
17. A. A. Gusev, E. A. Solov'ev, and S. I. Vinit'sky, Comput. Phys. Commun. **286**, 108662 (2023).
18. J. P. Desclaux, At. Data Nucl. Data Tables **12**, 311 (1973).
19. M. Al-Ajaleen and K. Tokesi, Atoms **12**, 28 (2024).
20. S. K. Allison, Rev. Mod. Phys. **30**, 1137 (1958).
21. J. F. Williams and D. N. F. Dunbar, Phys. Rev. **149**, 62 (1966).
22. D. W. Koopman, Phys. Rev. **154**, 79 (1967).
23. V. Afrosimov, Y. A. Mamaev, M. Panov, and N. Fedorenko, Sov. Phys. JETP **28**, 97 (1969).
24. V. S. Nikolaev, I. S. Dmitriev, Ya. A. Teplova, and Yu. A. Fainberg, Moscow University Physics Bulletin **49**, 80 (1994).
25. T. Kusakabe, H. A. Sakaue, and H. Tawara, Plasma and Fusion Research: Regular Articles **6**, 2401102 (2011).
26. W. S. Melo, A. C. F. Santos, M. M. Sant'Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, L187(2002).
27. E. G. Cavalcanti, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, H. Schmidt-Böcking, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, 3087 (2003).
28. T. K. Li, D. L. Clark, and G. W. Greenlees, Phys. Rev. A **14**, 2016 (1976).