

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ**  
**ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ**  
**DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**  

---

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ**

**РАХИМОВ ХАМДАМ ЮЛДАШЕВИЧ**

**ИОН-АТОМ ТЎҚНАШУВЛАРИДАГИ ЭЛЕКТРОН ЖАРАЁНЛАР ВА**  
**УЛАРНИНГ УГЛЕРОД НАНОСТРУКТУРАЛАРИ ФИЗИКАСИДА**  
**ҚЎЛЛАНИЛИШИ**

**01.04.04 – Физик электроника**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)**  
**ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**ТОШКЕНТ – 2022**

**Докторлик (DSc) диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата докторской (DSc) диссертации**

**Contents of the Doctoral (DSc) Dissertation Abstract**

**Рахимов Хамдам Юлдашевич**

Ион-атом тўқнашувларидаги электрон жараёнлар ва уларнинг  
углерод наноструктуралари физикасида қўлланилиши ..... 3

**Рахимов Хамдам Юлдашевич**

Электронные процессы при ион-атомных столкновениях и их  
применение в физике углеродных наноструктур ..... 29

**Rakhimov Khamdam Yuldashevich**

Electron processes at ion-atomic collisions and their application in the  
physics of carbon nanostructures ..... 55

**Эълон қилинган ишлар рўйхати**

Список опубликованных работ  
List of published works..... 59

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ  
ХУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ  
DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

---

**ИОН-ПЛАЗМА ВА ЛАЗЕР ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ ИНСТИТУТИ**

**РАХИМОВ ХАМДАМ ЮЛДАШЕВИЧ**

**ИОН-АТОМ ТЎҚНАШУВЛАРИДАГИ ЭЛЕКТРОН ЖАРАЁНЛАР ВА  
УЛАРНИНГ УГЛЕРОД НАНОСТРУКТУРАЛАРИ ФИЗИКАСИДА  
ҚЎЛЛАНИЛИШИ**

**01.04.04 – Физик электроника**

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ДОКТОРИ (DSc)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

**ТОШКЕНТ – 2022**

**Фан доктори (DSc) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2021.2DSc/FM172 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертация ион-плазма ва лазер технологиялари институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (<http://iplt.uz/>) ҳамда «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)) жойлаштирилган.

<b>Илмий маслаҳатчи:</b>	<b>Матвеев Виктор Иванович</b> физика-математика фанлари доктори, профессор
<b>Расмий оппонентлар:</b>	<b>Оксенгендлер Борис Леонидович</b> физика-математика фанлари доктори, профессор <b>Умирзаков Болтахўжа Ерматович</b> физика-математика фанлари доктори, профессор <b>Умаров Фарид Фахриевич</b> физика-математика фанлари доктори, профессор
<b>Етакчи ташкилот:</b>	<b>Фарғона политехника институти</b>

Диссертация ҳимояси Ион-плазма ва лазер технологиялари институти ҳузуридаги DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 рақамли Илмий кенгашнинг 2022 йил «9» 03 соат 14<sup>30</sup> даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: +998 71 262-32-54, e-mail: info@iplt.uz, Ион-плазма ва лазер технологиялари институти мажлислар зали).

Диссертация билан Ион-плазма ва лазер технологиялари институтининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (3 рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100125, Тошкент ш., Дўрмон йўли кўчаси, 33-уй. Тел./факс: +998 71 262-31-69.

Диссертация автореферати 2022 йил «23» феврал кuni тарқатилди.

(2022 йил «23» февралдаги 3 рақамли реестр баённомаси).



**Х.Б. Ашуров**

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш раиси, т.ф.д., профессор

**И.Д. Ядгаров**

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш илмий қотиби, ф.-м.ф.д.

**Б.Е. Умирзаков**

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш қошидаги илмий семинар раиси, ф.-м.ф.д., профессор

## КИРИШ (докторлик (DSc) диссертациясининг аннотацияси)

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Сўнгги йилларда, жаҳонда нозластик электрон жараёнларни ўрганишда атом ва молекулаларнинг кучли майдонлар билан ўзаро таъсирида юзага келадиган квант эффектларни ҳисобга олган ҳолда ўрганишга қаратилган қизиқиш, бу йўналишнинг амалий ва фундаментал жиҳатдан долзарблигини билдиради. Бундай жараёнларни ўрганишнинг фундаментал аҳамияти шундаки, кучли ташқи майдондаги кўп электронли жараёнларнинг моҳияти ҳали тўлиқ ўрганилмаганлигида. Амалий нуқтаи назардан, ушбу муаммо тўғридан-тўғри модданинг кучли майдонларда ва агрессив муҳитда хусусиятлари, ўта мустаҳкам материаллар яратишда, барқарор ва узоқ яшовчи юқори зарядли тез ионларни олишда, кенг қамровли амалий аҳамияти, квант ҳолатларни бошқариш муаммоси, кучли ташқи майдон таъсирида электрон транспорти масаласи, ва бошқа бир қатор масалаларни ўрганиш билан боғлиқ. Масалан, юқори энергияли ионларни олишда, уларни газлардан иборат муҳитдан ўтказиш орқали уларни ташқи электронларини сидириб олиш жараёнларини ўрганишда, юқори зарядланган тезкор ионлар дастасини яратишнинг асосий усули ҳисобланади. Шу билан бирга, бундай тажрибаларни самарали режалаштириш ва бажариш учун, кесим юзаларининг юқори аниқликда ҳисоблаш талаб қилинади, улар Борннинг яқинлашиши услубини қўллаб бўлмайдиган ҳолатларда ишлатиладиган нопертурбатив усул деб аталадиган қийматлар доирасида ҳисоблаб чиқилиши керак (ион зарядларининг юқори қиймати туфайли ушбу жараёнларда айнан шундай). Шунинг учун юқори энергияли ионларнинг электронларини сидириб ташлаш жараёнини назарий ўрганиш айнан нопертурбатив ёндашувларни ишлаб чиқишни ва қўллашни талаб қилади. Нишондан уни бомбордимон қилувчи снарядни йўналишини ўзгартиришга имкон берадиган объект сифатида фойдаланиш имкониятлари ҳозирги пайтда тажрибаларда фаол ўрганилмоқда, масалан, Германияда оғир ион тезлатгичларида (GSI – Darmstadt, TSR – Heidelberg), Европа иттифоқжи ядро тадқиқотлари марказида, АҚШ (RHIC – BNL), Канада (TRIUMF), Хитой (IMP – Lanzhou), Швеция (CRYRING – Stockholm), Япония (RIKEN – Saitama), Франция (GANIL – Caen) ва Россия (Бирлашган Ядро Тадқиқот Институти – Дубна). Бундан ташқари, кўп амалий тадқиқлар учун ионизация энергия йўқотишларини кесим юзасини ҳатто бир неча фоизга ошириш имконияти ҳам жуда муҳимдир. Ҳолбуки, ушбу диссертация ишида молекуляр нишонларнинг тузилиши ва йўналишини танлаш орқали снарядларнинг сидириш кесимларини сезиларли даражада ошириш механизми таклиф қилинган. Ушбу диссертациянинг яна бир долзарб томони – кўп зарядли ионларни юқори энергияли фотонлар билан тўқнашувда электрон-позитрон жуфтларини пайдо бўлиши билан бирга ион ёки атомдан электронларни сидириб ташлаш жараёнлари қаралган. Бундан ташқари, учиб чиққан электронлар энергиясини етарлича кенг соҳасида ётувчи, ионнинг сидиришни дифференциал ва интеграл кесим юзалари олиш масаласини аналитик баҳолаш ҳам долзарб масала ҳисобланади.

Бугунги кунда жаҳонда юқори зарядланган оғир ионлар муҳим амалий аҳамият касб этади, жумладан ионларни қайта ишлаш, металллар ва қаттиқ жисмли тузилмаларни имплантация қилиш, юпқа плёнкаларда нанопорларни ҳосил қилиш, маълум хусусиятларга, ўлчамларга эга бўлган нанозарралар ва кластерларни ҳосил қилиш, шунингдек саратонни эрта ташҳис қилишда.

Ўзбекистон Республикасида бугунги кунда физик электроникани ҳам назарий, ҳам экспериментал жиҳатдан ўрганишга алоҳида эътибор берилмоқда. Шу сабабли, сўнгги йилларда ион-молекуляр тўқнашуви ва турли хил ташқи майдонлардаги ноэластик электрон жараёнларни ўрганиш ҳам жуда долзарбдир. Мамлакатимизда фундаментал фанни муваффақиятли ривожлантириш ва уларни амалиётда қўллашда муҳим аҳамиятга эга бўлган фундаментал тадқиқотларнинг асосий йўналишлари 2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегиясида ўз ифодасини топган.

Мазкур диссертация иши Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017-йил 07-февралдаги “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида”ги ПФ-4947-сон Фармонида назарда тутилган вазифаларга маълум даражада мос келади. Шунингдек, мазкур диссертация тадқиқоти Ўзбекистон Республикаси Президентининг “2011-2015-йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида”ги ПҚ-1442-сонли қарорларида назарда тутилган вазифаларни бажаришга хизмат қилмоқда. 2015-йил 15-декабрдаги ПФ-4947-сон “2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегиясини янада амалга ошириш чора-тадбирлари тўғрисида” 2017-йил 7-февралдаги ПҚ-2789-сон<sup>1</sup>. Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот фаолиятини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги 2017-йил 17-февралдаги, шунингдек, сўнгги йилларда республикада бу борада қабул қилинган бошқа меъёрий ҳужжатларда.

**Тадқиқотларнинг республика фан ва технологияларини ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослиги.** Ушбу илмий тадқиқот ишлари Ўзбекистон Республикаси Фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мувофиқ амалга оширилди: II «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик», III «Энергетика, энергоресурс тежамкорлик, транспорт, машиносозлик ва асбобсозлик, замонавий электроника, микроэлектроника, фотоника, электрон асбобсозликнинг ривожланиши».

**Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи<sup>2</sup>.** Нишондан уни бомбордимон қилувчи снарядни йўналишини ўзгартириш имконини берадиган объект сифатида фойдаланиб, ҳозирги пайтда бир қатор

<sup>1</sup> 2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси // Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017-йил 7-февралдаги ПФ-4947-сон Фармонига 1-илова, 3.2-б.

<sup>2</sup> Диссертация мавзуси бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳига бир қатор интернет манбаларни санаш мумкин, жумладан, [www.nature.com](http://www.nature.com), [www.gsi.de](http://www.gsi.de), [www.ufn.ru](http://www.ufn.ru), [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com), [www.springerlink.com](http://www.springerlink.com), [www.scopus.com](http://www.scopus.com), [www.elsevier.com](http://www.elsevier.com), Springer, ResearchGate ва бошқа кўплаб манбаларда кейинги йиллардаги олинган натижалар билан танишиш мумкин.

етакчи илмий марказларда фаол илмий изланишлар олиб борилмоқда, жумладан Германия, Швейцария, АҚШ, Канада, Хитой, Швеция, Япония, Франция ва Россия (Бирлашган Ядро тадқиқотлари институти - Дубна) тажрибаларида фаол равишда илмий изланиш олиб борилмоқда.

Жаҳон миқёсида замонавий физик электроникада, хусусан, юқори зарядланган ионлар дасталарини ишлаб чиқариш ва ноэластик электрон жараёнларни, углерод наноструктурали материалларда заррачаларнинг сочилиши каби бир қатор долзарб муаммолар ҳал қилинди.

Ҳозирда дунёнинг кўпгина мамлакатларида замонавий илмий тадқиқотларнинг муҳим қисми олдиндан белгиланган юқори зарядли ионлар манбаларини лойиҳалаш ва яратишга бағишланган бўлиб, бу кўп жиҳатдан экспериментал физиканинг ривожланиш даражасини белгилайди, чунки кўплаб замонавий тадқиқотлар ион дасталарининг характеристикасига борган сари юқори талабларга эга юқори зарядли ионлар манбалари талаб қилинади.

Бундан ташқари, ҳозирги вақтда илмий тадқиқотларнинг салмоқли қисми углерод наноструктуралари асосида янги авлод материалларини олишга, графен физикасининг фундаментал муаммоларини ўрганишга ва уларни саноат ва технологияда самарали қўллашга, хусусан, углерод наноструктурасини ривожлантиришга бағишланган. углерод наноструктураларини синтез қилиш усуллари. Графен бўйича илмий тадқиқотлар ҳозирда назарий ва экспериментал йўналишларда фаол изланиш олиб борилмоқда. Шундай қилиб, жаҳон даражасида тақдим этилган юқоридаги тадқиқотлар замонавий физик электроника, унинг фундаментал ва амалий муаммолари учун муҳим аҳамият касб этади.

**Муаммонинг ўрганилганлик даражаси.** Юқори зарядли ионлар дастасини олишнинг асосий босқичи, кўп электронли ионларнинг газли муҳит билан бир неча маротаба кетма-кет тўқнаштириш орқали амалга оширилади. Бундай жараённи муваффақиятли амалга ошириш назарий тавсифи, бу ионларни (сидириш) электрон йўқотиши кесим юзаси максимал даражада аниқ ҳисоблашга имкон беради. Европа иттифоқи ядро тадқиқотлар марказдаги Катта Адрон Коллайдери (LHC), Брукхавендаги Релятивистик Оғир Ион Коллайдери (RHIC) ва Дармштадтдаги (GSI) FAIR тезлатгич тизими каби замонавий тезлаткичларда юқори зарядли (масалан,  $U^{92+}$ ,  $Au^{79+}$ ,  $Pb^{82+}$ , ва ҳоказолар) ионлар ишлатилинади, кейин тезлаткичлар учун зарур бўлган дасталарни олишда ионларни сидириб олиш жараёнлари нопертурбатив хусусиятга эга. Бошқача қилиб айтадиган бўлсак, ионларни молекулалар билан тўқнашуви пайтида юзага келадиган ноэластик электрон ўтишларда ионларнинг ҳолатини ғалаён назарияси доирасида тўғри ифодалаб бўлмайди. Шунинг учун, ғалаёнланиш кичиклиги тўғрисида тахмин қилмасдан амалга оширишга имкон берадиган нопертурбатив усул ишлаб чиқиш ва тадбиқ қилиб ҳисоблашларни амалга ошириш керак. Ҳозирги вақтда бундай бир нечта усуллар мавжуд: Монте-Карлонинг классик траекторияси усули, молекуляр динамика усули, шунингдек бир қатор мураккаб дастурий тўпламлардан ташкил топган "Loss code". Бироқ, бу усулларнинг барчаси кучли компьютер ресурсларини талаб қилишидан ташқари, ядровий

зарядларни экранланиши эффектини, электронлар корреляциялари каби квант эффектларини тўлиқ ифодалаш имконини бермайди.

Шунинг учун, кўп электронли ионларни атомлар тизими ёки фотонлар билан тўқнашганида ионларни сидириш жараёнини тавсифлашда, бундай эффектларни ҳисобга олишга имкон берадиган ва мураккаб ҳисобларни талаб қилмайдиган усулдан фойдаланиш зарурати туғилади. Ушбу диссертация ишида, молекулаларнинг тез (шу жумладан релятивистик) оғир ионлари билан тўқнашувида ионланиши эҳтимоллиги ва кесимини ҳисоблаш, шунингдек юқори энергияли фотонларни атомлари ва молекулалари билан тўқнашувида тез оғир таркибий ионларни сидириш жараёнларини ҳисоблаш учун айнан шундай услуб ишлаб чиқилди.

Ушбу диссертация иши Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги "Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар Стратегияси тўғрисида"ги ПФ-4947-сонли Фармонида белгиланган вазифаларга мос келади<sup>1</sup>. Диссертация бўйича олиб борилган тадқиқотлар 2015-йил 15-декабрда қабул қилинган "2011-2015 йилларда Ўзбекистон Республикаси саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари тўғрисида"ги ПП-1442 сонли Президент Фармонини, 2017 йил 17 февралдаги "2017-2021-йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожланишининг бешта устувор йўналишидаги ҳаракат Стратегиясини амалга ошириш бўйича кейинги чора-тадбирлар тўғрисида"ги ва 2017 йил 17 февралдаги "Фанлар академияси фаолиятини янада такомиллаштириш, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштириш тўғрисида"ги П-2789-сонли қарорини, шунингдек, ушбу соҳада қабул қилинган бошқа ҳуқуқий ҳужжатларга киритилган вазифаларни бажаришда маълум даражада хизмат қилади.

**Диссертация мавзусининг илмий иш бажарилган илмий-тадқиқот муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.** Тадқиқоти Ўзбекистон Фанлари Академиясининг қуйидаги лойиҳалари доирасида бажарилди: ФА-Ф2-Ф084; ФПФИ АН РУз – 33-02 (24 ой); ФПФИ АН РУз – 58-04 (24 ой); ФПФИ АН РУз – 66-06 (24 ой).

**Тадқиқотнинг мақсади** – Ушбу диссертация ишининг мақсади нопертурбатив ёндашувлар доирасида атомли тизимлар ва юқори энергияли фотонлар билан тўқнашган таркибий ионларнинг электронларини сидириш жараёнида ноэластик электрон ўтишларни ўрганиш, шунингдек ташқи майдон таъсирида кўп сатҳли атомларда электрон ўтишларни ўрганиш, ҳамда углерод наноструктураларида (фуллерен, нанонай, графен) электрон жараёнлар ёки трансپори масаласини ўрганишга бағишланган.

#### **Тадқиқотнинг вазифалари:**

Ушбу мақсадни амалга ошириш учун қуйидаги масалалар ечилади:

- Кўп электронли ионларнинг атомли тизимлар ва фотонлар билан юқори энергияли тўқнашувларида ионларни сидириш (электрон йўқотиш)

---

<sup>1</sup>2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича ҳаракатлар стратегияси / Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сонли Фармонига 1-илова, п. 3.2.

жараёнларини тавсифлаш учун ғалёнланиш назарияси доирасида ифодалаш мумкин бўлмаган энергия оралиғида ва заряд холати учун нопертурбатив усул ишлаб чиқиш;

- кўп электронли тез ионларнинг молекуляр нишонлар билан тўқнашувларида дифференциал ва интеграл сидириш кесимларини ҳисоблаш;
- бир вақтнинг ўзида электрон-позитрон жуфтларини пайдо бўлиши кузатиладиган, атом ёки ионларни юқори энергияли фотонлар билан тўқнашувида сидириш кесимларини баҳолаш;
- марказий  $s$  майдон учун релятивистик фотоэффект жараёнини ўрганиш;
- кўп сатҳли атомларда электрон ўтиш эҳтимоллигини ҳисоблаш. Ташқи майдон таъсирида бундай ўтишни бошқариш имкониятини ўрганиш;
- оғир ионларни углерод наноструктуралари билан тўқнашганида энергия йўқотиши жараёнини ўрганиш;
- юқори энергияли фотонларни сферик бўлмаган (эллипсоид) шаклдаги фуллерен билан ўзаро таъсирини ўрганиш;
- ташқи электр ёки магнит майдонлари таъсирида икки ўлчамли углерод наноструктурасидаги тўлқин уюми эволюцияси ва транспортини ўрганиш;
- графенни букиш натижасида юзага келадиган псевдомагнит майдонлари таъсирида остида тўлқин уюми эволюцияси ва транспортини ўрганиш;
- дефектли графенларда тўлқин уюми эволюцияси ва ўтиш коэффициенти ўрганиш.

**Тадқиқот объектлари,** тезкор оғир ионларни молекулалар ва наноструктуралар билан юқори энергияларда тўқнашуви. Атомлар билан ўзаро таъсирлашувчи юқори энергияли фотонлар. Ташқи электр майдонидаги кўп сатҳли атомлар. Углерод наноструктуралари (фуллерен, графен, наноай) билан тезкор зарядланган ионлар ёки фотонларни ўзаро таъсири.

**Тадқиқот предмети** юқори энергияли фотонлар билан атомлар таъсири, ташқи майдон таъсирида атом сатҳларида электрон ўтишлар, ташқи майдон таъсирида графенларда тўлқин уюмини сочилиши, дефектли графенларда тўлқин уюмини сочилиши.

**Тадқиқот усуллари.** Тўсатдан ғалёнланиш яқинлашиши, Глаубер яқинлашиши, Шрёдингер ва Дирак тенгламаларининг аналитик, асимптотик ва компьютер ёрдамида ечиш.

**Тадқиқотнинг илмий янгилиги** қуйидагилардан иборат:

- тезкор юқори зарядли ионларнинг атомли тизимлар билан тўқнашувида сидириш жараёни тизимли ўрганилган, ионларнинг молекуляр нишонлар билан тўқнашувида электрон йўқотишларни ўрганиш имконини берувчи нопертурбатив усул ишлаб чиқилган;
- молекуляр нишонларда тезкор юқори зарядли ионларни сидириш бўйича илк тадқиқотлар ўтказилди. Ион-снаряднинг электрон йўқотиши кесим юзаси ва унинг абсолют қийматлари, молекула ўқининг ион ҳаракати йўналишига нисбатан жойлашишига қараб 50%-100% гача ўзгариши аниқланган;
- илк бор тўқнашув карралиги ва молекуланинг ўқи холатини ионнинг сидириш жараёнидаги роли аниқланган. Тўқнашувлар карралигининг таъсири, нишон

ўқининг ион тезлиги йўналишига параллел ёки перпендикуляр бўлишига қараб ионни сидириш кесим юзаси орасида сезиларли фарқга олиб келиши, молекула ўқини тасодифий йўналтирилганда эса, аҳамиятсиз эканлиги аниқланган;

- илк бор атом ёки таркибли ионларни юқори энергияли фотонлар ёрдамида сидиришда ва бир вақтда электрон-позитрон жуфтани пайдо бўлиши жараёни кесими юзаси аниқланган. Ушбу жараённинг кесим юзаси асимптотик қиймати тушувчи фотон энергиясига боғлиқ бўлмаслиги аниқланган;

- илк бор релятивистик фотоэлектронга мос келадиган марказий майдонда  $s$  ҳолат учун релятивистик фотоэффект кесими, ҳамда, тўлқин тенгламасини ечмасдан фотоионизация кесим юзасининг энергияга боғлиқлиги аниқланган;

- илк бор ташқи монохроматик майдон ёрдамида атомларнинг квант сатҳларида жойлашини назорат қилиш усули таклиф қилинган;

- илк бор юқори энергияли фотонлар ёрдамида носферик (эллипсоид) фуллерен молекуласини фотоионизацияси дифференциал кесими ифодаси аниқланган;

- тез юқори зарядли ионларнинг углерод нанонайи билан тўқнашганда энергия йўқотишининг тўқнашув қарралиги боғлиқлиги аниқланган;

- илк бор, графенда Клейн туннели жараёнига содир бўлишига қарамасдан, графендаги потенциал устунчаларни мавжудлиги электронни тўсиқдан ўтиши эҳтимоллигини сезиларли даражада камайиши, сочувчи тўсиқларнинг юқори концентрацияси ва устунчаларни юқори қийматларида юз бериши аниқланган;

- илк бор, графенни букиш натижасида юзага келадиган псевдомагнит майдонда электронни тебрама ҳаракати (*zitterbewegung*) аниқланган;

- илк бор, доимий ташқи майдон ёки азот атомларини киритиш натижасида графенда вужудга келган нуқсонли соҳадан электронни ўтиш давомийлиги нуқсонлар ҳисобига ортиши аниқланган.

**Тадқиқотларнинг амалий натижалари** қуйидагилардан иборат:

юқори зарядли тез ионларнинг атомли тизимлар ва фотонлар билан юқори энергияли тўқнашувларида ионларни сидириш (электрон йўқотиш) жараёнларини тавсифлаш учун ғалёнланиш назарияси доирасида ифодалаш мумкин бўлмаган энергия оралиғида ва заряд ҳолатлари учун нопертурбатив усул ишлаб чиқиш;

молекуляр нишоннинг тузилиши ва йўналишини танлаш орқали снаряднинг электронини сидириш кесимлари сезиларли даражада ортириш механизми таклиф қилинди;

марказий майдон  $s$  ҳолати учун релятивистик фотоэффект кесими учун аналитик ифода таклиф қилинди;

атомдаги айниган сатҳларда электрон популяциясини назоратини механизми ишлаб чиқилди ва аналитик ифода таклиф қилинди;

тўлқин уюмини графенда эволюциясини ўрганиш усули ишлаб чиқилди, бунда турли хил ташқи майдонлар таъсирида остида электронни тўсиқдан сочилиши эҳтимоллиги топилди.

графенни букиш ҳисобига юзага келадиган псевдомагнит майдонда таъсирида тўлқин уюми эволюциясини ўрганиш усули ишлаб чиқилди.

нуқсонли графенда тўлқин уюми эволюциясини ўрганиш усули ишлаб чиқилди, бунда икки тур нуқсон мисолида қаралди, жумладан доимий майдон ва азот атомлари киритилган графенда юзага келган нуқсонлар мисолида қаралди, электронни тўсиқдан сочилиши эҳтимоллиги ва ўтиши коэффициентлари топилди.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** уларнинг замонавий усулларини қўлланилганлигида, ҳамда Дирак ва Шрёдингер тенгламаларини ечишда hozirга қадар юқори аниқликга эга бўлган компьютерда ҳисоблаш усулларидан фойдаланилганлиги, шунингдек, олинган натижалар бошқа муаллифлар томонидан турли усуллар ёрдамида олинган натижалар билан мослиги билан ўз тасдиқини топганлигида. Бундан ташқари, докторлик иши натижаларини ўзида мужассам қилган мақолалар бир қатор юқори импакт факторли илмий нашрларда чоп этилган ва етакчи экспертлар томонидан тақриз қилинган.

**Тадқиқотлар натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Диссертацияда олинган натижалари асосан фундаментал аҳамиятга эга. Амалий жиҳатдан, олинган натижалар ёрдамида замонавий тезлатгичларда барқарор оғир ионлар дастасини олишда қўлланилиши мумкин, масалан Европа Иттифоқи Ядро Тадқиқотлари марказидаги Катта Адрон Коллайдериди, Брукхавендаги релятивистик оғир ион коллайдериди ва Дармштадтдаги FAIR тезлатгич комплексида.

**Тадқиқотлар натижаларининг жорий қилиниши.** Тезкор юқори зарядли ионларни молекуляр нишондан иборат тизимлар билан тўқнашиши натижасида ноэластик электрон жараёнлар ёки ташқи майдон таъсири остида электрон ўтишлари бўйича олинган илмий натижалар Web of Science илмий маълумотлар базасига кирувчи юқори импакт факторли (ИФ)ли журналларда чоп этилган 190 илмий ишларнинг тажриба ва ҳисоблаш натижаларини шарҳлаш ёки тавсифлаш, шунингдек таҳлилий ишларда иқтибос келтириш орқали жорий қилинган, жумладан:

Атомларда ташқи майдон таъсирида электрон ўтишлар эҳтимоллиги учун олинган назарий натижаларнинг аналитик ифодалари қуйидагиларда хорижий журналларда (J. Phys. A 2005; 38:8589, IF=2,110, J. Phys. B 2004; 37:4259, 2008;41:235503, IF=2,125, Phys. Rev. A 2004; 69:023405, 2004; 69: 043406, IF=2.777, Phys. Rev. B 2007; 75:195310, IF=3,575, ва бошқалар) ташқи майдонда жойлашган атом сатҳларидаги электронни топилиши эҳтимоллигини ташқи майдон частотасини ёрдамида манипуляция қилишда фойдаланилди. Илмий натижалардан фойдаланиш электронлар популяциясини назоратини яхшилашга имкон берди;

этилган графенда тўлқин уюми вақтга боғлиқ эволюциясига доир олинган назарий натижалар қуйидаги хорижий журналларда (Phys. Rev. Lett. 2016; 117:276801, IF=8,385, Phys. Rev. B 2012, 85: 155415, IF=3,575, New J. Phys. 2011; 13:083029, IF=3,539, ва бошқалар) тўлқин уюми ҳаракатига магнит майдон таъсирини ўрганишда фойдаланилди. Илмий натижалардан фойдаланиш тўлқин уюмини тўсиқдан ўтиш эҳтимоллигини, майдон кучланганлигининг турли қийматларида ҳисоблаш имконини берди;

турли хил тўсиқлар мавжуд бўлган графенда электрон транспортига оид олинган назарий натижалар қуйидаги хорижий журналларда (Phys. Rev. A 2017, 95: 042102, IF=2.777, Phys. Rev. B 2015, 91: 045420, IF=3,575, J. App. Phys. 2013, 114: 084314, IF=2,546, ва бошқалар) электронни тўсиқдан ўтиш коэффициентларини ҳисоблашда фойдаланилди. Илмий натижалардан фойдаланиш ўтиш эҳтимоллигини, турли тўсиқлар орқали ўтиш коэффициентларини ҳисоблашда ҳисоб-китоблар самарадорлигини ошириш имконини берди.

**Тадқиқотлар натижаларининг апробацияси.** Мазкур тадқиқот ишининг асосий натижалари 20 та халқаро ва республика илмий анжуманларда муҳокама қилинди.

**Тадқиқотлар натижаларининг чоп этилганлиги.** Диссертация мавзуси бўйича асосий натижалар 42 та илмий нашрда чоп этилган, жумладан 2 та муаллифларнинг коллетив монографияси, Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсиф этилган халқаро ва маҳаллий илмий журналларда 14 та мақола, 2 та боб ва 2 та мақола халқаро конференциялар тўпламида чоп қилинган, 21 та халқаро илмий конференциялар, симпозиумлар ва семинарларда маърузалар тезислари чоп этилди.

Муаллифнинг шахсий ҳиссаси бевосита у томонидан, шунингдек, унинг раҳбарлигидаги бир гуруҳ тадқиқотчилар томонидан олиб борилган тадқиқот натижаларини умумлаштириш бўлди. Муаллиф тақдим этилган барча натижаларни олиш ва муҳокама қилишнинг барча босқичларида иштирок этди, унинг иштироки хулоса ва хулосаларни шакллантиришда ҳал қилувчи аҳамиятга эга эди. Бир қатор тадқиқотлар учун вазифаларни шакллантириш профессорлар В.И. Матвеев ва Д.У. Матрасулов иштирокида амалга оширилди.

**Диссертациянинг структураси ва ҳажми.** Диссертация иши кириш қисми, олти боб, хулоса ва 340 та адабиётлар рўйхатидан иборат. Ишларнинг умумий ҳажми 217 варақли ёзилган матндан иборат бўлиб, асосий материаллар - 186 саҳифа, шу жумладан 41 та расм ва 3 жадвалларни ўз ичига олади.

## ДИССЕРТАЦИЯ ИШИНING АСОСИЙ МАЗМУНИ

**Кириш қисмида** диссертация иши мавзусининг долзарблиги ва муҳимлиги келтирилган, тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари, ҳамда объекти, предмети ва усуллари аниқланган, тадқиқотнинг Ўзбекистон Республикасида илм-фан ва технологияларини ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг илмий-амалий муҳимлиги, ишончлиги кўрсатилган, амалиётда тадбиқи ҳақида маълумотлар, олинган натижаларнинг апробацияси, диссертациянинг шакли ва ҳажми каби маълумотлар келтирилган. Бундан ташқари бу бобда диссертация иши доирасида қаралган муаммонинг долзарблигини, ишнинг мақсади ва олинган натижаларни янгилиги келтирилган. Диссертация ишининг **биринчи боби** мавзуга доир илмий адабиётлар шарҳи, ушбу соҳадаги илгари олиб борилган тадқиқотларнинг ҳозирги ҳолати тавсифи,

шунингдек ишнинг услубий асослари тақдимоти келтирилган. **Иккинчи боб** тезкор таркибий оғир ионларнинг турли нишонларда сочилиши натижасида электрон йўқотишини ўрганишга бағишланган. Хусусан, ушбу бобда тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашуви асосида тезкор оғир ионларни молекулалар билан тўқнашувида уларнинг электрон йўқотиш кесими нопертурбатив ҳисоблаш усули ривожлантирилган.

Оғир ионлар дастасини ҳосил қилишда уларни (снарядни) муҳит билан тўқнашишида электрон йўқотишлар, тажрибалардаги аҳамияти туфайли тобора кўпроқ эътиборни жалб қилмоқда. Юқори зарядли онларнинг бундай дасталарини олиш учун оғир ионларни газ муҳити орқали ўтишида сидириб олиш натижасида ҳосил қилинади. Бундай тадқиқотлар FAIR лойиҳасини ишга туширгандан сўнг амалга оширилган ишлар натижасида алоҳида аҳамият касб этди, унинг доирасида турли хил зарядлар, массалар ва энергияларга эга бўлган ион тезлатгичлар комплексида атомлар, молекулалар ва наноструктураларни қамраб олувчи тўқнашув тажрибаларини ўтказишга имкон беради. Тезкор оғир ионларни газли муҳит билан тўқнашув натижасида сидириш бўйича тажрибаларнинг асосий назарий муаммоси уларнинг ионланиш кесимларини (электрон йўқотишларини) баҳолашдир. Бундай ҳолда, бу каби жараёнларни тавсифлашда юзага келадиган асосий қийинчилик ионнинг юқори заряди туфайли ионизация кесимини ҳисоблашда ғалаёнланиш назариясини қўллаш мумкин бўлмаслигида. Шу сабабли, тезкор тузилишли оғир ионларнинг молекулалар билан тўқнашувида ноэластик жарёнларни ион-снаряднинг электрон йўқотишни ҳисобга олган ҳолда ҳаққоний тавсифлашга имкон берадиган нопертурбатив усулларни ишлаб чиқиш ва қўллаш талаб қилинади. Тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашишга асосланган бундай усуллардан бири бўлган тезкор атомларнинг ионлар билан тўқнашувда бир ва кўп марталик ионланиши жараёнлари илгари ишлаб чиқилган ва муваффақиятли қўлланилган. Усул тўқнашув энергиялари ва зарядларининг кенг соҳасига нисбатан қўлланилиши мумкин. Ушбу ёндашувга асосланган тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашиши тўқнашув вақтининг давомийлиги ядролар атрофида электронларнинг характерли айланиш даври билан таққослаганда сезиларли даражада қисқа деб қаралади. Бундай яқинлашишда ноэластик электрон ўтишларнинг амплитудларини ҳисоблаш учун ностационар Шредингер ёки Дирак тенгламаларини ечишга ҳожат йўқ. Бундай ҳолда, электрон ўтиш жараёнларининг миқдорий тавсифи, айниқса юқори тўқнашув энергиялари учун этарлича юқори аниқликка эга.

Тезкор оғир ионни  $N$  та электронларининг ионланишини миқдорий тавсифлаш учун (қуйида, "ионланиш" атамасининг ўрнига "электрон йўқотиш" атамасини ишлатамиз),  $Z_p$  зарядли тез ион тўқнашувдан олдин  $N_p (\geq N)$  электронга эга бўлиб  $Z_a$  зарядли ва  $N_a$  электрондан иборат нейтрал нишон (атомлар ёки молекулалар) билан тўқнашув тизимини кўрилади. Бундай ҳолда, биз ион ва нишонни электронларининг координаталарини мос равишда  $\vec{r}_p (p = 1, 2, \dots, N_p)$  ва  $\vec{r}_a (a = 1, 2, \dots, N_a)$ , орқали белгилаймиз. Тезлиги  $\vec{v}$  билан ҳаракатланадиган ва  $\vec{b}$

тўқнашув параметрлари учун ионнинг нишон билан ўзаро таъсири потенциални қуйидаги шаклда ёзиш мумкин

$$V = -\sum_{a=1}^{N_a} \frac{Z_p}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_a|} - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p|} + \sum_{p,a=1}^{N_p, N_a} \frac{1}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p-\vec{r}_a|} \quad (1)$$

Бу ерда  $\vec{R} = \vec{b} + \vec{v}t$  – атом бирликлар тизимидаги ион ядролари ва нишин ядролари орасидаги масофа (вақтга боғлиқлиги). Ушбу потенциалда, биринчи ҳад нишон электронларининг тушаётган иони ядроси билан ўзаро таъсирга, иккинчи ҳад ион электронларининг нишон ядроси билан ўзаро таъсирга мос келади, учинчи ҳад эса ион электронларининг нишон электронлари билан ўзаро таъсирини тавсифлайди.

Тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашишини тўқнашув тизимига нисбатан қўлланилиши мумкин бўлиши учун қуйидаги шарт бажарилиши керак, яъни

$$t_c \ll t_s,$$

Бунда  $t_c$  – тўқнашув вақти,  $t_s$  – бу ўз орбитасида энг тезкор (ички) ионлаштириладиган электроннинг айланиш даври.

Тўқнашув вақтини тахминан  $t_c \approx a/v$  деб баҳолаш мумкин, бу ерда  $a \approx 1$  (атом бирликларида) тўқнашув шерикларининг характерли катталиги (яъни ион ва нишон) ва  $v = |\vec{v}|$  – уларнинг нисбий тезлиги, барча электрон орбиталари учун барча мусбат ионларнинг  $t_s \leq 1$  учун шарт (1)  $t_c \approx 1/v \ll 1$  ёки шунга ўхшаш тарзда қайта ёзилиши мумкин.

$$v \gg 1. \quad (2)$$

Шундай қилиб, тўқнашув тезлиги ионланган электронларнинг тезлигидан анча юқори бўлган тақдирдагина, тезкор оғир ион ва нейтрал нишондан иборат тўқнашув тизимига нисбатан тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашишини қўлланилиши мумкин.

Ион ва нишон бир-биридан етарлича узоқ бўлганида, уларнинг тўлқин функциялари бир-биридан мустақил. Ион ва нишон электронларининг тўлқин функцияларини мос равишда  $\psi_k \approx \psi_k(\{\vec{r}_p\}) \equiv \psi_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_p})$  ва  $\phi_n \approx \phi_n(\{\vec{r}_a\}) \equiv \phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_a})$  деб белгилаймиз, ҳамда мос равишда бошланғич (ғалаёнланмаган) ҳолат тўлқин функциялари  $\psi_0$  ва  $\phi_0$ . Нишонни  $\phi_0$  ҳолатидан  $\phi_n$ , ҳолатига ўтиш, ҳамда ионни  $\psi_0$  ҳолатидан  $\psi_k$  ҳолатига ўтиши эҳтимоллиги қуйидагича ифодаланади

$$w_{0 \rightarrow k}^{0 \rightarrow n} = \left| \langle \phi_n \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} V dt\right) | \psi_0 \phi_0 \rangle \right|^2. \quad (3)$$

Бизнинг мақсадимиз нишонини эмас, балки снаряд-иондаги электронларни ноэластик ўтишдир, шунинг учун биз нишоннинг барча мумкин бўлган якуний ҳолатларини йиғиб, ионнинг бошланғич ҳолатидан  $\psi_0$  ҳолатидан баъзи бир (ионланган ёки ғалаёнланган)  $\psi_k$  ҳолатига ўтишда, нишонни ихтиёрий тақдирида

$$W_{0 \rightarrow k} = \sum_n w_{0 \rightarrow k}^{0 \rightarrow n}. \quad (4)$$

Бу эҳтимолликни  $\vec{b}$  нишон параметрининг функцияси сифатида қуйидагича жуда содда кўринишида ифодалаш мумкин:

$$W_{0 \rightarrow k} = \langle \phi_0 | \left| \langle \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} U_a dt\right) | \psi_0 \rangle \right|^2 | \phi_0 \rangle, \quad (5)$$

Агар тўсатдан ғалаёнланиш назариясининг қўлланилиши шarti бажарилса ва ионнинг нишон билан ўзаро таъсири потенциалига эга бўлса

$$U_a = -\sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p|} + \sum_{p,a=1}^{N_p, N_a} \frac{1}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p-\vec{r}_a|} \quad (6)$$

бу ерда  $\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}t$ .

Юқорида келтирилган ноэластик ўтиш эҳтимоллиги ифодаси, (5) формула содда бўлишига қарамасдан, ҳисоблаш учун қулай эмас. Шунинг учун янада соддалаштириш керак. Бунинг учун тўқнашув пайтида ион электронларининг координаталари нишон ядросига нисбатан ўзгармайди деб тахмин қиламиз. Бундай ҳолда, ион электронлари ва нишон ядроси ўртасидаги ўзаро таъсир потенциалини нишон электронларнинг ҳолатларига нисбатан ўртачалаш мумкин бўлади. Шунингдек, нишон электронларининг ҳолатини Дирак-Хартри-Фок моделининг битта электронли тўлқин функциялари билан тавсифланган деб ҳисоблаб ўртачалаш бажаргандан сўнг қуйидаги натижага эришамиз:

$$W_{0 \rightarrow k} = \left| \langle \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}_a dt\right) | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (7)$$

бу ерда ўртачалаштирилган потенциал ифодаси ионнинг электронлари ва нишонни ядроси орасидаги ўзаро қуйидагича ифодаланади:

$$\bar{U}_a = \langle \phi_0(\{\vec{r}_a\}) | U_a | \phi_0(\{\vec{r}_a\}) \rangle = - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t) - \vec{r}_p|} \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i |\vec{R}(t) - \vec{r}_p|). \quad (8)$$

Шуни тақидлаш муҳимки, ушбу ифода кўриниши жихатдан, илгари олинган Глаубер яқинлашуви доирасидаги ўтиши эҳтимоли ифодаси билан мос келади. Охирги формуладан кўриниб турибдики, ўртача  $\bar{U}_a$  потенциали ифодаси атомдаги электронларининг координаталарига боғлиқ эмас,  $\{\vec{r}_a\}$ , фақат  $A_i$  ва  $\alpha_i$  жадвалга келтирилган доимий катталикларга боғлиқ. Аслида, бундай ўртача қиймат нишоннинг электрон зичлиги қуйидагича ифодаланишини билдиради

$$\rho_a(r) = \frac{Z_a}{4\pi|\vec{r}|} \sum_{i=1}^3 A_i \alpha_i^2 e^{-\alpha_i |\vec{r}|}. \quad (9)$$

Охирги формуладан фойдаланиб (7) формуладаги интегрални, ионнинг электронларини эйконал фазалари йиғиндиси сифатида содда ёзишимиз мумкин:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}_a dt = \sum_{p=1}^{N_p} \chi(\vec{b}, \vec{r}_p), \quad (10)$$

бунда  $\chi(\vec{b}, \vec{r}_p)$  функции қуйидагича ифодаланади

$$\chi(\vec{b}, \vec{r}_p) = - \frac{2Z_a}{v} \sum_{i=1}^3 A_i K_0(\alpha_i |\vec{b} - \vec{s}_p|). \quad (11)$$

Бу ифодада  $\vec{s}_p$  вектори бу  $\vec{r}_p$  векторнинг тезлик йўналишига перпендикуляр бўлган проекциясини билдиради ва  $K_0$  – Макдональд функцияси. Ушбу яқинлашиш доирасида, тушувчи ион тўлиқ ионланиш кесими юзи мўлжал параметрининг барча мумкин бўлган қийматлари бўйича интеграллаганда, қуйидаги ифодани олиш мумкин.

$$\sigma = \int d^2\vec{b} W(b) = \int d^2\vec{b} \sum_{[k]} W_{0 \rightarrow k}, \quad (12)$$

Бу ерда йиғинди ва интеграллаш  $[k]$ га нисбатан снаряднинг  $N$  – каррали ионлашишига мос келадиган (ионнинг электронларини) барча якуний ҳолатлар бўйича амалга оширилади.

Кесим юзасини ҳисоблаш учун ишлатилган (12) формулани қулай шаклга келтириш учун қуйидаги соддалаштириш киритишимиз керак: ионлаштириладиган электронлар сони, ионлашиш юз беришидан олдин ион таркибидаги электронларнинг умумий сонидан сезиларли даражада кам бўлади, яъни,  $N < N_p$ , ва бундан ташқари, мустақил электронлар яқинлашишидан ҳам фойдаланамиз, яъни ионнинг тўлқин функцияси битта электронли водородсимон тўлқин функциялари кўпайтмаси деб оламиз. Берилган  $\vec{b}$  нишон параметри учун ионнинг  $N$  та электронни йўқотиш эҳтимолиги  $W^{N+}(\vec{b})$  учун бу ифодани оламиз:

$$W^{N+}(\vec{b}) = \frac{N_p}{(N-N_p)!N!} \prod_{i=1}^{N_p-N} p_i(\vec{b}) \prod_{i=N_p-N+1}^{N_p} (1 - p_j(\vec{b})), \quad (13)$$

бу ерда  $p_i(\vec{b})$  – бир электронли ноэластик формфактор:

$$p_i(\vec{b}) = \int d^3 k_i \left| \int d^3 r_i \psi_{\vec{k}_i}^*(\vec{r}_i) \exp\{-i\chi_i(\vec{b}, \vec{r}_i)\} \phi_i(\vec{r}_i) \right|^2. \quad (14)$$

Бундан ташқари, берилган асосий  $n$  квант сони учун ноэластик формфакторни,  $l$  ва  $m$ , орбитал ва магнит квант сонларига нисбатан ўртачалаштириб, қуйидаги ифодага эга бўламиз

$$p(b) = \frac{1}{n_0} \sum_{n=1}^{n_0} \frac{1}{n^2} \sum_{l,m} \int d^3 k \left| \int d^3 r \psi_k^*(\vec{r}) \exp\{-i\chi(\vec{b}, \vec{r})\} \phi_{n,l,m}(\vec{r}) \right|^2, \quad (15)$$

маълумки,  $p(b)$  фақат нишон параметрининг модулига боғлиқликни ўз ичига олади,  $b$ . Ушбу ифодадан фойдаланиб, ион снаряди ва нейтрал атом тўқнашганда ионнинг  $N$  электронини йўқотишининг  $W^{N+}(\vec{b})$  эҳтимоли қуйидаги шаклда ифодаланиши мумкин

$$W^{N+}(b) = \frac{N_p}{(N_p-N)!N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \frac{N!}{(N-m)!m!} \{p(b)\}^{N_p-N-m} \quad (16)$$

нишон параметри бўйича интеграллаш натижасида  $N$  сонли электронлар йўқотиш мос кесими юзаси учун қуйидаги ифодага келади:

$$\sigma^{N+} = \frac{N_p! \sigma^{N_p+}}{(N_p-N)!N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \left( \frac{Z_p+N_p}{Z_p+N+m} \right)^2 \frac{(N_p-N)!}{(N_p-N-m)!m!} \left( \frac{N_p}{N+m} \right)^k \{p(b_0, E)\}^{N_p-N+m}. \quad (17)$$

Ушбу ифодада  $b_0$  нишон параметри бўлиб, ноэластик формфакторининг максимал қийматига эришгандаги қийматини билдиради, бунда  $k$  ихтиёрий катталиқ бўлиб  $p(b)$  функцияни берилган максимал қийматини характерловчи,  $\sigma^{N_p+}$  ионни тўлиқ сидириб ташлаш кесим юзаси.

Ушбу метод ёрдамида нейтрал нишонлар билан тезкор оғир ионларнинг тўқнашувида электронларини йўқотиши қаралган. Ушбу муаммо оғир ионлар тезлатгичларидаги жорий тажрибаларда жуда катта қизиқиш уйғотади. Аниқроғи, ионларни сидириш жараёни уларнинг тезлашуvidан олдин содир бўлади, аксарият ҳолларда уларни нисбатан паст зарядли ионларни газли муҳит орқали ўтказиш орқали амалга оширилади. Ион-атом тўқнашуvidан фарқли ўлароқ, учувчи ион молекуляр нишонлар билан тўқнашганда, сидириш кесим юзасини аниқ ҳисоб-китобларини олиш учун эътиборга олиниши керак бўлган бир қатор қўшимча жараёнлар юзага келади. Буларга энг аввало, тўқнашувларнинг карралиги таъсирини (яъни, ионни молекуланинг ҳар бир атоми билан тўқнашуviдаги ҳиссаси), шунингдек молекула ўқнинг йўналиши таъсири каби эффектларни айтиш мумкин.

Аниқроғи, тўқнашувларнинг карралиги таъсири деганда, молекуланинг биринчи атоми билан тўқнашгандан сўнг ион ғалаёнланиб (турғун ҳолатга қайтиб улгирмасдан), молекуланинг иккинчи атом билан тўқнашади. Тезкор таркибий ионларни диатомик молекулалар билан тўқнашуviда энергия ва электрон йўқотиш жараёнларидаги кўп сонли тўқнашувлар таъсирининг салмоқли ҳиссаси илгари бир қатор муаллифлар томонидан, кўп атомли молекулалар ва нанозарралар билан тўқнашувлар учун кўрсатиб берилган. Ушбу турдаги таъсирлар молекулаларнинг бирон бир йўналишда "тартиблашиши" мавжуд бўлган тақдирда ўринли ва кетма-кет иккита тўқнашув орасидаги вақт ионнинг электрон қопламасининг турғунлашиш вақтидан кам ёки яқин.

Тўқнашувларнинг карралиги таъсирини сифат жиҳатидан қуйидагича тушуниш мумкин. Агар снаряднинг ҳаракат йўналиши молекула ўқиға яқин бўлса, у ҳолда снаряднинг ғалаёнланиш ва ионланиши кесим юзаси учун ҳиссани молекуланинг бир қисми бўлган атом ядролари билан ионнинг кетма-кет тўқнашувини ҳисобга олган ҳолда сезиларли даражада ҳисса бериши мумкин. Дарҳақиқат, релятивистик тезлик билан ҳаракатланувчи снарядлар учун бундай иккита кетма-кет тўқнашувлар орасидаги вақт  $10^{-19}$  *сек* атрофида. Маълумки, радиацион ва оже- парчаланишлар вақтига нисбатан структуравий ионнинг (снаряд) ғалаёнланиш ҳолатларининг ўртача умри анча қисқа. Бу ҳолда, снаряднинг ғалаёнланиш ва ионланиши кесимини ҳисоблашда, молекуланинг биринчи ядроси билан тўқнашиши натижасида ион ғалаёнланган ҳолатида (турғун ҳолатиға ўтиб улгирмасдан) молекуланинг иккинчи ядроси билан тўқнашганида, икки босқичли жараёнларнинг ҳиссасини ҳисобга олиш керак. Бундан ташқари, ғалаёнланган ҳолатларнинг таъсири асосий ҳолатидан каттароқ бўлганлиги сабабли, ғалаёнланган ҳолатларнинг ғалаёнланиш ва ионлашиш кесим юзаси асосий ҳолатларнинг ғалаёнланиш ва ионлашиш кесим юзасидан каттароқ бўлиб, кетма-кет тўқнашувларни ҳисобига катта ҳисса қўшилишини кутилади. Тўқнашувларнинг карралиги самараси фақат снаряднинг электрон қобиғини ғалаёнлаш ёки ионлаштириш кесими юзасиға тегишли эканлигини таъкидлаймиз, нишондаги электронларнинг ғалаёнланиши ва ионланишида тўқнашувнинг карралиги ҳисса бермайди. Дарҳақиқат, бу ҳолда, молекуланинг иккила атомининг ҳар бири билан кетма-кет тўқнашганда турли хил атомларнинг ғалаёнланиши ёки ионланиши содир бўлади. Бу каби асослар, етарлича тезкор таркибий ионлар билан икки ёки ундан ортиқ атомлардан иборат молекулалар тўқнашуви учун ўринлидир.

Ушбу диссертация ишида, тезкор оғир структурали ионларни кўп атомли молекулалар билан тўқнашувида, снаряд шунингдек нишон учун барча мумкин бўлган ғалаёнланишлар ва ионланишларни ҳам ҳисобга олган ҳолда электрон йўқотиши кесимини ҳисоблаш учун нопертурбатив усул ишлаб чиқилди. Муаммонинг сезиларли даражада содаллашишиға юқори зарядли ионлар ва кўп электронлар нишонларни кўриб чиқиш орқали эришилди.

Снаряднинг бир, икки ва уч каррали сидириш кесим юзаларини ҳисоблашда, нишон ўқи билан снаряднинг ҳаракат йўналиши орасидаги боғлиқликлар қаралди. Тўқнашувларнинг карралик таъсири асосан нишон йўналишни снаряд ҳаракати йўналишиға параллел ва перпендикуляр бўлганда снарядни сидириш кесим юзаси орасидаги сезиларли фарқға олиб келишини кўрсатмоқда, аммо нишон ўқини снаряд ҳаракати йўналишиға нисбатан тартибсиз жойлашган холи учун бу таъсирни аҳамияти сезиларсиз бўлади.

Биз текшираётган тўқнашув тизимида, тезкор структурали ион ва кўп электронли атомлардан ( $N_A \gg 1$  электронлар сони) ташкил топган молекула тўқнашади. Бундай ҳолда,  $\sim 1/N_A$  кичик хатоликларда, нишон электронларини ихтиёрий тақдирида (яъни, электронни барча сўнги ҳолатлари бўйича йиғинди оламиз) снаряднинг электронларини  $|0\rangle$  ҳолатдан  $|k\rangle$  ҳолатға ўтиши кесим юзаси эйконал яқинлашиш усули билан топиш мумкин:

$$\sigma = \int \left| \langle k | \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX \right\} | 0 \rangle \right|^2 d^2 b, \quad (18)$$

бу эрда  $\vec{v}$  – снаряднинг тезлиги,  $x$  ўқи  $\vec{v}$  томон йўналтирилган, молекула (нишон) ҳаракатсиз ва ядролардан бирига координаталар бошида бириктирилган,  $\vec{b}$  – нишон параметридир, снаряд ядросининг координаталари  $\vec{R} = (X, \vec{b})$ , ҳамма жойда атом бирликлари ишлатилди. Юқорида (18) формулада,  $U$  – снаряд электронларини молекуляр нишон билан ўзаро таъсири потенциали бўлиб кенгайтирилган заряд сифатида тавсифланади. Бошқача айтганда, (18) кесим юзаси формуласи молекуланинг электрон зичлиги орқали ифодаланган. Кўп электронли атомлардан ташкил топган молекулада электрон зичлиги (асосий ҳолатида) яққаланган атомларнинг электрон зичлигидан жуда кам фарқ қилади. Шунинг учун, молекуладаги атомлар ўзаро мувозанатда жойлашган бўлиб, ўзаро изоляцияланган ва ўзаро таъсирлашмайдиган атомлардан ташкил топган деб қараймиз. Ҳар бир нишон атомининг электрон зичлигини Дирак-Хартри-Фок-Слэтер моделида тавсифлаймиз, унга кўра атомдаги электрон зарядининг фазовий зичлиги қуйидагича ифодага эга бўлади,

$$\rho_m(r) = -\frac{Z_m}{4\pi r} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \alpha_{m,i}^2 \exp(-\alpha_{m,i} r), \quad \sum_{i=1}^3 A_{m,i} = 1, \quad (19)$$

Бу ерда  $Z_m$  – бу  $m$  рақамли атом ядроси,  $A_{m,i}$  ва  $\alpha_{m,i}$  – доимий бўлиб ва ( $Z_m = 1, 2, \dots, 92$ ) элементлар учун жадвалда келтирилган.

Молекулани  $\vec{r}$  кузатиш нуқтасида ҳосил қилган потенциали барча алоҳида атомлар ҳосил қилган потенциаллар йиғиндиси деб қаралади, бунда электрон зичлиги (19) формуладан олинади:

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N \frac{Z_m}{d_m} \Phi_m(d_m), \quad (20)$$

бу ерда  $N$  – нишондаги атомлар сони,  $d_m$  –  $m$  рақамли атом ядросидан  $\vec{r}$  кузатиш нуқтасигача масофа,  $\Phi_m(\vec{r})$  –  $m$  рақамли атомнинг экранловчи функцияси. Дирак-Хартри-Фок-Слэтер экранловчи  $\Phi_m$  функция (20) формула (19) дан фойдаланиб қуйидагича ифодалаш мумкин:

$$\Phi_m(r) = \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \exp(-\alpha_{m,i} r). \quad (21)$$

айтайлик,  $\vec{r}_p$  – структурали ион–снаряд электронларини снаряд ядросига нисбатан координаталари бўлсин, ( $p = 1, 2, \dots, N_p$ ),  $N_p$  – иондаги тўлиқ электронлар сони,  $\vec{R}_m = (X_m, \vec{b}_m)$  – нишондаги  $m$  – атом ядросига нисбатан снаряд ядроси координаталари,  $\vec{b}_m$  – нишон параметри бўлиб  $m$ - атомга нисбатан олинган, унда  $\vec{d}_m = |\vec{R}_m + \vec{r}_p|$ .

Снаряд электронларини нишон билан ўзаро таъсир потенциали

$$U = -\sum_{p=1}^{N_p} \phi(r_p) = -\sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_m}{|\vec{R}_m + \vec{r}_p|} \Phi_m(|\vec{R}_m + \vec{r}_p|). \quad (22)$$

Энди (22) ифодани эътиборга олиб (18) эйконал фаза учун ифода оламиз

$$\chi = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX = \sum_{m=1}^N \frac{2Z_m}{v} \sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} K_0(\alpha_{m,i} |\vec{b}_m + \vec{s}_p|), \quad (23)$$

бу ерда  $K_0(z)$  – Макдональд функцияси,  $\vec{s}_p$  бу  $\vec{r}_p$  катталиқни нишон параметрининг текислигига проекцияси. Бундан ташқари (18) формуласи эйконал фазаси (23) билан релятивистик тўқнашувларда ҳам қўлланилади ва нишон электронларининг ихтиёрий тақдирида иондаги электронларнинг  $|0\rangle$  ҳолатидан  $|k\rangle$  ҳолатига ўтиш кесим юзасини тақрибан  $\sim 1/N_A$ , кичик нисбий хатоликларда ифодалаш мумкин, бунда  $N_A$  нишондаги барча электронлар сони, кўп электронли нишон учун  $N_A \gg 1$ .

Ушбу ишда биз таркибий оғир ионларни кўриб чиқдик, уларнинг  $Z_p$  зарядлари бирдан етарлича катта (масалан,  $Fe^{10+}$  темир иони учун кўринадиган

заряд  $Z_p = 10$ , ядро заряди  $Z = 26$ ), кейин ионнинг электрон қопламсининг характеристик катталиги нишон таркибидаги нейтрал атом ўлчамидан анча кам бўлади ва ион катталигидаги атомларнинг ўртача майдони бир жинсли деб ҳисоблаш мумкин, бу (23) эйконал фазани  $s_p/b$  кичик катталик бўйича тўғри келади, натижада ортогонал  $|0\rangle$  и  $|k\rangle$  учун (18) формула қуйидаги шаклни олади

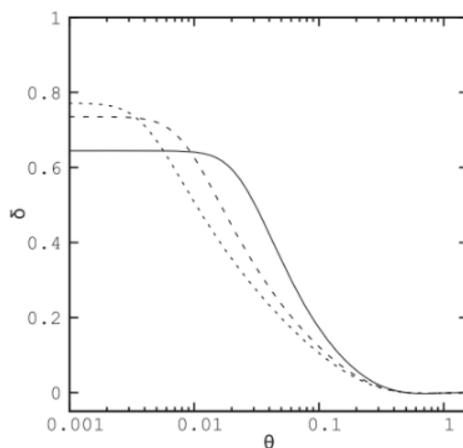
$$\sigma = \int |\langle k | \exp(-i \sum_{m=1}^N q_m \sum_{p=1}^{N_p} r_p) | 0 \rangle|^2 d^2 b, \quad (24)$$

бунда

$$\vec{q}_m = \frac{2Z_m}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_{m,i} A_{m,i} K_1(\alpha_{m,i} b_m) \frac{\vec{b}_m}{b_m}, \quad (25)$$

шубҳасиз, бу  $m$  – атомни иондаги хар бир электронга узатадиган импульси,  $K_1(z)$  бу Макдональд функцияси.

Услубни қўлланиш шартларини келтирамиз. Бу услуб юқори зарядли ионлар  $Z_p \gg 1$  ва кўп электронли нейтрал нишондан иборат бўлиб  $Z_t \gg 1$ , тенгсизлик бажарилиши талаб қилинади, нишон  $N$  та атомдан иборат деб қаралган, бу ерда  $t = 1, 2, \dots, N$  атомлар рақами. Кесим юзаларини ҳисоблаш эйконал яқинлашишга асосланган бўлиб, унинг қўлланилиш шартлари қуйидагича:  $E$  снаряд кинетик энергияси жуда катта деб қаралади,  $E \gg U$  ва  $kL \gg 1$  бунда  $U$  – снаряд ва нишон орасидаги ўзаро таъсир энергия,  $k$  снаряд импульси,  $L$  бу  $U$  ни ўзаро таъсир радиуси. Нишоннинг характеристик ўлчамлари  $L$  катталикни, снаряд ўлчамларига нисбатан етарлича катта деб қараймиз. Бизнинг шароитимизда, яъни  $v \gg 1$  тез ҳаракат қиладиган ионлар учун бу шартлар бажарилади. Бундан ташқари, мураккаб тизимларнинг тўқнашуви учун тўқнашув вақтида давомида, снаряднинг электронлари снаряд ядросига нисбатан ҳолатини сезиларли даражада ўзгартиради деб қараймиз, шунингдек нишон электронлари ҳам нисбатан тинч турган нишонга нисбатан холатларини ўзгартирмайди, бошқача қилиб айтганда, тўқнашув вақти  $\tau_c \sim L/v$  хар бир тўқнашувчи тизимни тинч саноқ системасидаги электронарни характерловчи  $\tau_e$  давридан жуда кичик бўлиши керак, ёки  $L/v \ll \tau_e$ . Бу шартни бажарилиши, масалан, нишондаки электронлар кўзгалмас қилинганда снаряд ҳаракатини ифодалаш имконини беради. Релятивистик  $v$  тезликларда бу шарт бундай ифодаланади:  $\sqrt{1 - v^2/c^2} L/v \ll \tau_e$ . Хар бир танланган тўқнашувчи тизимлар учун  $\tau_e$  характерловчи даврий вақт баҳоланиши мумкин. Агар мақсад юқори квант сонларига эга электронларнинг кўпчилик қисми юқори қобикда бўлган кўп электронли тизимларнинг тўқнашувларини кўриб чиқиш бўлса, у ҳолда  $\tau_e$  орбитада электронларнинг айланиш вақтини характерлашда  $\sim 1$  деб қараш мумкин. Бу  $\delta(\theta) = (\sigma(\theta) - \sigma_1)/\sigma_1$  миқдор (бунда  $\sigma_1 = \sigma(\pi/2)$ ) 1-расмда тўқнашув энергияси 10, 100, ва 1000 МэВ/нуклон бўлганида  $Fe^{25+} + N_2$  тўқнашув тизими учун молекула ориентациясига боғлиқлиги келтирилган. Расмдан кўриниб турибдики, сидириш кесим юзаси қиймати молекула ўқининг ўзгаришига жуда сезгир. Масалан, параллел ва перпендикуляр йўналишлар қаралганда, улар ўртасидаги фарқ 50% -100% гача.



**1-расм.** Кўп каррали тўқнашув таъсирида  $\text{Fe}^{25+}$  ионнинг бир каррали сидириш кесимини  $\delta(\theta)$  нисбий хатолигини ҳисоблаш натижалари келтирилган. Тўғри чизик –  $\delta(\theta)$  тузатма қийматлари 10 МэВ/нук. тўқнашув энергиясида молекуланинг йўналишига боғлиқлиги; узун пунктир – тузатма қийматлари 100 МэВ/нук. тўқнашув энергиясида, қисқа пунктир – кесим юзасига 1000 МэВ/нук. тўқнашув энергиясида тузатма қийматлари, бурчак  $\theta$  радианларда берилган.

Диссертациянинг **учинчи бобида** атомларнинг юқори энергияли фотонлар билан ўзаро таъсири натижасида ҳосил бўлган ноэластик электрон ўтишлар ўрганилади. Бунда, электрон-позитрон жуфтларини ҳосил бўлиши билан бир вақтда фотоионизация жараёни ҳам қаралди. Бундай жараёнлар замонавий квант физикасини атом электронлари иштирокида бир қатор асосларига тузатма учун катта қизиқишга эга.

Ушбу тадқиқот доирасида, юқори энергияли фотонларнинг атомлар билан ўзаро таъсирида ва бир вақтнинг ўзида электрон-позитрон жуфтларини пайдо бўлиши билан ионларни ҳосил қилиш учун  $\sigma$  кесимини ҳисобладик. Бундан ташқари,  $\varepsilon$  энергияли электронлар ҳосил бўлиши жараён учун  $d\sigma/d\varepsilon$  дифференциал кесимини ҳисобладик.

Биз бу катталикларни, қуйидаги шарт бажарилгандаги юқори энергияли асимптотикасини кўриб чиқдик

$$\omega \gg m$$

бу ерда  $m$  – электронни тинчликдаги массаси ( $\hbar = c = 1$  бирликда). Биз ҳисоблашларимизда қаторни фақат юқори бўлмаган тартибдаги  $\omega^{-1}$  ҳадларини олдик.

Атомларни ташқи майдонлар билан ўзаро таъсирлашганида ионлар ҳосил бўлишининг оддий механизмларидан бири бу фотоионизация бўлиб, унда яқиний ҳолатда фақат ион ва эркин электрон бўлади. Яқинда бир қатор муаллифлар томонидан фотоннинг етарли даражада юқори энергияларида электрон-позитрон жуфтларини пайдо бўлиш имкониятини намойиш этдилар. Атом ядроларининг жуда катта зарядлари учун ҳам ҳисоблашлар олиб борилди. Бирок, қуйидаги шарт бажарилганда, ушбу ишларда қўлланиладиган ёндошувлар, кичик ядровий зарядлар учун қўлланиб бўлмайди

$$(\alpha Z)^2 \ll 1, \tag{26}$$

ва  $(\alpha Z)^2$  миқдори кичик параметр сифатида қараш мумкин. Бундай ҳолда, ионланган электроннинг энергия диапазонини уч қисмга бўлиш мумкин,

уларнинг икки чеккадагиси учун ионланишнинг кесимини асимптоматик равишда ҳисоблаш мумкин, ва оралиқ соҳадаги учун иккита асимптотикани ўзаро бирлаштириш мумкин. Бошқача қилиб айтганда, биз юқори ва паст энергияли электрон чиқиши ҳолатлари учун кесимнинг асимптоматик топамиз ва оралиқ энергия учун кесимни иккита асимптотикасини бирлаштириб топамиз.

Шундай қилиб, биз юқори энергияли фотонларнинг атом билан ўзаро таъсири натижасида атомдаги электроннинг дискрет ҳолатдан узлуксиз спектрга ўтиш жараёнини кўриб чиқамиз. Қуйида биз атомдаги электронни узилиб континуум ҳолатига ўтиши жараёнларини кўриб чиқамиз. Бир вақтнинг ўзида ўхшаш жарёнларни эркин электронда кўриб чиқиш ҳам фойдалидир. Юқори энергияли фотон билан боғланган электронни ўзаро таъсирида жуфтликни пайдо бўлиши кесим юзаси ифодаси

$$d\sigma = \frac{\pi}{\omega} |F_{BH}(\omega, p_e, p_p, p_2)|^2 \delta(\omega - E_e - E_p - E_2 + m - I_b) d\Gamma_b, \quad (27)$$

бу ерда  $F$  – ўтиш амплитудаси,  $d\Gamma_b = d\Gamma \frac{d^3 p_2}{2E_2(2\pi)^3}$ , ва  $I_b$  ионланиш потенциали. Бу ерда қуйидаги белгилар қўлланилиди:  $p_{1,2}$  – боғланган электронларнинг тўрт импульси,  $p_{10} = m$  вақт ташкил килувчиси,  $\vec{p}_1 = 0$  фазо ташкил килувчиси. Фотон билан тўқнашганда ҳосил бўлган  $e^- e^+$  жуфтнинг тўрт импульси мос равишда  $p_e$  ва  $p_p$  билан белгиланади. Ҳар бир  $p_i$  ( $i = e, p, 1, 2$ ) импульс учун, тўлиқ энергия ифодаси  $E_i = \sqrt{m^2 + \vec{p}_i^2}$ , тегишли кинетик энергия эса  $\varepsilon_i = E_i - m$ . Хамда  $k$ – тушувчи фотоннинг 4-импульси бўлиб, унинг вектор ташкил килувчиси модули  $|\vec{k}| = \omega$ .

Энди қуйидаги шарт билан аниқланган ионланган электронларнинг юқори энергиялари чегарасини кўриб чиқамиз

$$\omega_2 \gg I, \quad (28)$$

бу эрда  $K$  қобиғни ионланиш потенциали  $I$  деб белгиланди. Бу ҳолда, жараённинг дифференциал кесими қуйидагича ифодаланади

$$d\sigma = \frac{\pi}{\omega} |F_0(\omega, p_e, p_p, p_2)|^2 \delta(\omega - E_e - E_p - E_2 + m - I_b) \frac{1}{2E_e} \frac{d^3 p_p}{2E_p(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{2E_2(2\pi)^3} |\psi(Q)|^2 \frac{d^3 Q}{(2\pi)^3}. \quad (29)$$

Бу ерда боғланган электронни битта заррали тўлқин функцияси  $\psi(r)$  билан тавсифланади деб оламиз ва боғланган электронда жуфт пайдо бўлиши жараённинг амплитудаси қуйидагича ифодаланиши мумкин

$$F(p_i, Q) = \psi_F(Q) F_0(p_i), \quad (30)$$

бунда  $\psi_F(Q) = \int d^3 r \psi(r) \exp(-i(\vec{Q}\vec{r}))$ , агар секин электронлар учун  $\varepsilon_2 \sim I$ , шарт бажарилса, қуйидагини оламиз

$$d\sigma = \frac{1}{Z^2} d\sigma_{BH} \sum_b |\Phi_b(p_2, q)|^2 \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3}, \quad (31)$$

бунда

$$\Phi_b(p_2, q) = \int d^3 r \psi_{\vec{p}_2}^*(r) \psi_b(r) \exp(-i(\vec{q}\vec{r})), \quad (32)$$

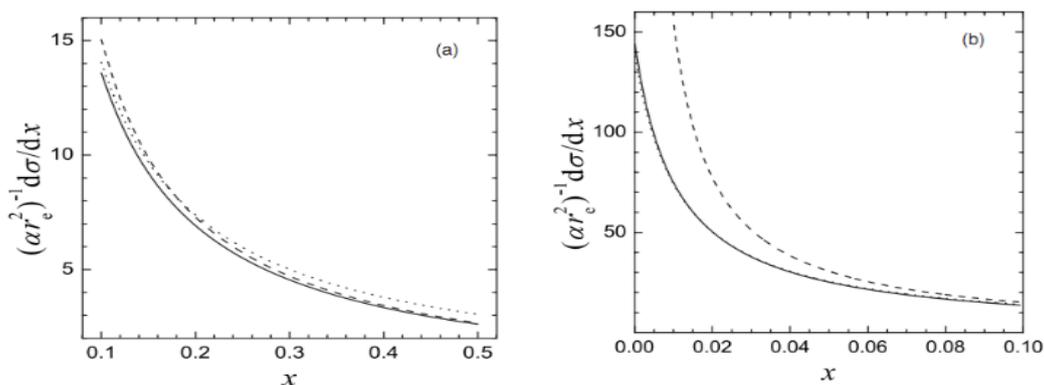
бу ерда  $\psi_{\vec{p}_2}$  – учиб чиққан электроннинг тўлқин функцияси.

Кесим юзасини асимптотик ифодалари иккита оралиқ соҳада бирлаштирилган

$$I \ll \varepsilon_2 \ll m,$$

натижада тўлиқ кесим юза учун қуйидаги ифодани оламиз:

$$\sigma = \frac{14}{9} \alpha r_e^2 \left( \ln \frac{m}{I} + C \right), \quad (33)$$



**2-расм.** Атом зарядини  $Z = 20$  характерли қиймати учун иккита (секин ва тез электронлар) энергия соҳаларида ионланиш кесимларини бирлаштирдик. (а) штрих чизик  $T_f(x)$  функцияга мос келади ва  $x = \varepsilon_2/m$  тез электронлар учун ҳисобланган, (б) спектрни қуйи қисми батафсил кўрсатилган.

бунда  $C = c_s + c_f$ . Бу яқинлашишда  $C$  катталик  $Z$  қийматига кучсиз боғлиқ бўлади. 2-расмда дифференциал кесим юзасини  $Z = 20$  параметр қийматида  $x = \varepsilon/m$  катталикка боғлиқлиги келтирилган.

Диссертация ишининг **тўртинчи боби** марказий майдонда  $s$  ҳолатлар учун релятивистик фотоэффекти жараёнини ўрганишга бағишланган.

Биз фақат битта боғланган заррача ҳолатларнинг орбитали моменти  $l = 0$  бўлган фотоионизациясини кўриб чиқамиз. Қайтиш моментлари тақсимоти ва тўлиқ кесими учун умумий ифодалар топилган. Квант механикаси пайдо бўлишида бошларида Кулон майдонида  $1s$  ҳолатнинг релятивистик фотоэффектнинг хусусиятлари боғланиш доимийсининг  $g = \alpha Z$  энг паст тартибда ( $\alpha \sim 1/137$  – нозик структура доимийси,  $Z$  – ядро заряди) топилган.

Кулон майдони учун  $\alpha Z$  катталикни юқори даражалардаги ҳадларини ҳисобга олган ҳолда қўшимча ютуқларга эришилди. Экранланган Кулон майдони учун ҳам ҳисоблашлар амалга оширилди. Шу билан бирга, фотоэлектронларнинг бурчак тақсимотлари ёки қайтарилиш моментлари ва тўлиқ кесим юзалари учун ифодаларни марказий потенциалларнинг кенг қўлами учун олиш мумкин.

Боғланган ҳолатдаги электроннинг фотоионизация кесим юзаси ифодаси

$$d\sigma = pE|F|^2 \frac{d\Omega}{4\pi}$$

бунда  $\Omega$  электроннинг фазовий бурчаги. Юқоридаги чизик амплитуда квадрат  $F^2$  бошланғич ҳолатидаги кутбланишлар бўйича ўртача ва якуний ҳолатдаги кутбланишлар бўйича йиғиндисини билдиради. Биз Кулон майдони учун маълум натижани келтириб чиқарамиз ва экранланган Кулон потенциали ва экспоненциал потенциал учун ифодаларни топамиз.

Ҳақиқий ўққа нисбатан чекли сакраш потенциалидаги энергияга боғлиқлик Кулон майдонига боғлиқлигига тўғри келишини аниқ кўрсатдик. Кесим юзаси уни фактор сифатида ўз ичига олган потенциалнинг квадратик сакрашига боғлиқ. Худди шу ёндашув ҳақиқий ўқда узлуксиз, лекин биринчи ёки ундан юқори даражадаги сакрашга эга бўлган майдонларда фотоионизацияни таҳлил қилиш учун қўлланилиши мумкинлигини кўрсатдик.

Диссертация ишининг **бешинчи бобида** ташқи даврий майдон таъсири остида кўп сатҳли атонинг айниган сатҳларида электрон ўтишларини ўрганишга бағишланган. Хусусан, ташқи майдон билан ўзаро таъсир натижасида атомни электронининг квант ҳолатида сатҳларни тўлиқ ёки қисман эгаллаш масаласини кўриб чиқамиз. Ушбу муаммо квант информатикаси соҳасидаги сўнгги ютуқлар нуқтаи назаридан алоҳида долзарблик касб этди, бу эрда битта бирлик маълумотни ёзиш учун кўп сатҳли квант тизимлари қўлланилади. Бундай ҳолда, муаммони муваффақиятли ҳал қилиш учун сатҳлар орасида ўтишларни бошқариш қобилияти талаб қилинади, ўзгаришлар айниган ҳолатларда квант сатҳни эгаллаганликлари ўзгаришларга боғлиқ. Ушбу муаммо квант информатикасидан ташқари, квант кимёси, квант оптикаси ва ўта совуқ атомлар физикасида ҳам долзарбдир. Диссертация ишида даврий ташқи майдон ёрдамида квант сатҳларни эгалланганлигини бошқариш имкониятини кўриб чиқади.

Хусусан, ташқи  $V_{ext}(\vec{r}, t)$  майдон билан таъсирлашувчи  $n$  сатҳли атом кўриб чиқилди. Бундай тизимнинг тўлиқ Гамильтониани қуйидагича ифодаланади,

$$H = H_0 + V_{ext}(\vec{r}, t). \quad (34)$$

Ғалаёнланмаган  $H_0$  системанинг  $\varphi_k$  хусусий функцияси ва  $E_k$  хусусий қийматларини билган ҳолда система учун тўлқин функцияни қуйидагича ифодалаймиз

$$\Psi(t) = a_1(t)\varphi_1 + a_2(t)\varphi_2 + \dots + a_n(t)\varphi_n. \quad (35)$$

Системанинг квант динамикаси Шрёдингер тенгламаси орқали ифодалаймиз

$$i\dot{\Psi} = (H_0 + V_{ext}(\vec{r}, t))\Psi, \quad (36)$$

бунда  $H_0\varphi_k = E_k\varphi_k$  ва  $\int \varphi_j^* \varphi_k d\vec{r} = \delta_{jk}$ .

Бундан эҳтимоллик амплитудаси учун тенгламалар системасини оламиз

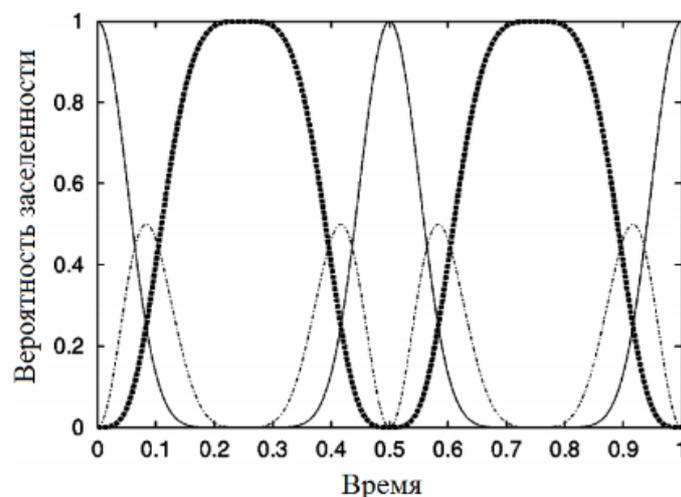
$$i\dot{a}_j(t) = E_j a_j(t) + \sum_{k=1}^n V_{jk}(t) a_k(t), \quad (37)$$

бу ерда  $V_{jk}(t) = \int \varphi_j^* V_{ext}(\vec{r}, t) \varphi_k d\vec{r}$ . Агар биз қараётган тизим айниган бўлса, яъни энергетик сатҳлар тенг ва нол қиймат эгаллаган бўлса,  $E_j = 0$ , у ҳолда эҳтимоллик амплитудаси учун тенгламалар қуйидаги шаклда ифодаланади:

$$i\dot{a}_j(t) = \sum_{k=1}^n V_{jk}(t) a_k(t), \quad (38)$$

Агар  $a_1(0) = 1$  ва  $a_j(0) = 0, j \neq 1$ , кўринишидаги бошланғич шартларни танлаб,  $V_{jk}(t)$  нинг бир хил вақтга боғлиқлигини ва  $V_{jk} = V_{kj}$  ҳақиқий қийматли бўлса, эҳтимоллик амплитудалари учун тенгламалар ечимини аналитик олишимиз мумкин. Содда ҳол мисолида, уч сатҳли атомни кўриб чиқамиз, бунда ўтиш эҳтимоллиги учун дифференциал тенгламалар тизимининг ечиб қуйидаги ифодаларни оламиз:

$$\begin{aligned} P_1(t) &= |a_1(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (x_2 y_3 - x_3 y_2)^2 + (x_3 y_1 - x_1 y_3)^2 + (x_3 y_1 - x_1 y_3)^2 + 2(x_2 y_3 - x_3 y_2)(x_3 y_1 - x_1 y_3) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right. \\ &\quad \left. + 2(x_2 y_3 - x_3 y_2)(x_1 y_2 - x_2 y_1) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(x_3 y_1 - x_1 y_3)(x_1 y_2 - x_2 y_1) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \right], \\ P_2(t) &= |a_2(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (y_2 - y_3)^2 + (y_3 - y_1)^2 + (y_1 - y_2)^2 + 2(y_2 - y_3)(y_3 - y_1) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right. \\ &\quad \left. + 2(y_2 - y_3)(y_1 - y_2) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(y_3 - y_1)(y_1 - y_2) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \right], \\ P_3(t) &= |a_3(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + 2(x_2 - x_3)(x_3 - x_1) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right. \\ &\quad \left. + 2(x_2 - x_3)(x_1 - x_2) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(x_3 - x_1)(x_1 - x_2) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \right], \\ \Delta &= x_1 y_2 + x_2 y_3 + x_3 y_1 - x_3 y_1 - x_1 y_3 + x_2 y_1. \end{aligned} \quad (39)$$



**3-расм.** Уч сатҳли литий атомининг сатҳлари тўлдирилиши эҳтимоллигини вақтга боғлиқлиги келтирилган.  $4p_0$  – қалин чизик бошланғич ҳолатнинг ўтишига тўғри келади,  $4d_0$  узун нуқта чизик – оралик ҳолат,  $4f_0$  – қисқа нуқта чизик якуний ҳолат.

Ушбу ёндашувдан фойдаланиб, ҳар қандай ихтиёрий кўп сатҳли тизим учун сатҳлар орасида ўтиш эҳтимоллигини топиш муаммосини ҳал қилиш мумкин. Уч сатҳли литий атоми мисолида, бошланғич сатҳдан кейинги сатҳга ўтиш эҳтимоллигини вақтга боғлиқлиги 3-расмда келтирилган. Ушбу расмдан кўриниб турибдики, ( $4p_0$ ) дастлабки ҳолатни тўлиш эҳтимоллиги 90% дан ошмайди, якуний ҳолат учун эса бу 100% га етади. Шунини такидлаш лозимки, у ёки бу квант сатҳнинг эгалланиши (ўтишини) вақти ташқи майдон (частота ва амплитуда) параметрларини ўзгартириш орқали бошқариш мумкин.

Диссертациянинг **олтинчи бобида** углерод наноструктурларини (фуллерен, нанонай, графен мисолида) юқори энергияли тез ионлар ёки ташқи майдон таъсирида электронлар ўтишлари қаралган

Юқори энергияли фотонлар ёрдамида сферик бўлмаган (эллипсоид) шаклдаги фуллерен (масалан,  $C_{70}$  ёки  $C_{80}$  фуллеренлар) молекуласини учун фотоионизация жараёни содир бўлиши эҳтимоллиги ва кесим юзаси ўрганилди.

Бундан ташқари тез структуравий ионларнинг углерод нанонайи билан тўқнашувида энергия йўқотишларини ўрганиб чиқдик. Тез структурали юқори зарядланган ионларни тушувчи снаряд ионлари сифатида ва нишон сифатида  $C_{60}$  углерод нанонайини қарадик. Бундай тизимда электрон зичлиги алоҳида атомларнинг электрон зичлигидан унчалик фарқ қилмайди, чунки улар ўхшаш тузилишда бирлашгандир, ташқи қобикдаги валент электронларнинг зичлиги катта ўзгаришларга учрайди, уларнинг сони атомларнинг сонига нисбатан катта эмас. Қолганларнинг катта қисми, яъни электронларининг зичлиги заиф тарзда бузилади. Шунинг учун нишоннинг электрон структурасининг “тўплами” кесими қийматига таъсирини эътиборсиз қолдириб, расмий равишда ажратилган атомлардан ташкил топган кўп атомли молекулалар шаклидаги нишонлар учун кесимини ҳисоблаш мумкин, уларнинг электрон қобикларини сақлаган ҳолда.

Бундан ташқари кучли магнит майдон таъсирида графен (углерод атомларининг икки ўлчовли кристалли)да заряд ташувчиларнинг (электрон ва тешиқлар) транспорти кўриб чиқилган. Графен углерод атомининг қалинлигидан иборат бўлган олти бурчакли кристалл панжараси ташкил топган икки ўлчовли

материалдир. Ушбу материал бир қатор ғайриоддий хусусиятларга эгадир, шунинг учун у келажакдаги наноэлектроника учун энг истиқболли материал ҳисобланади. Хусусан, у олмосдан кучлироқ, ўтказувчанлиги мисниқидан юқори, оптик жиҳатдан шаффоф ва графен нанотасмалари ҳам металл, ҳам ярим ўтказувчан хусусиятларга эга. Берилган материал учун энергия ташувчиларининг дисперсия қонуни чиқиқлидир. Графеннинг зонаси тузилиши ҳам ғайриоддий ва Дирак ёруғлик қонуслари шаклига эга ва чексиз графен варағида тақиқланган соҳа мавжуд эмас. Аммо, агар графен варағи қирраларини зигзаг шаклдаги нанотасмаларга кесилган бўлса, улар яримўтказгичларга айланади. Агар нанотасмаларнинг қирралари кресло деб аталадиган шаклда кессак, нанотасмалар металл электрон хусусиятларга эга бўлади, яъни тақиқланган соҳа бўлмайди. Кинетик энергияларнинг қуйи энергияли диапазонда графендаги квазизарралалар динамикаси массасиз ультрарелятивистик Дирак тенгламаси билан тавсифланади. Бунда, квазизарраларнинг тезлиги ёруғлик тезлигидан тахминан 300 баравар кам. Юқоридагиларга қўшимча равишда, графен бир қатор бошқа ғайриоддий хусусиятларга эга, бу эса уни ресурс тежамкорлик нуқтаи назаридан энг истиқболли материаллардан бирига айлантиради. Шу сабабли, ушбу материалдаги заряд ташувчиларнинг транспорт хусусиятларини ўрганиш катта фундаментал ва амалий аҳамиятга эга.

Ушбу диссертацияда, графен варағини буқиш натижасида келиб чиққан кучли псевдомагнит майдони таъсирида графендаги электроннинг транспортини қаралган. Маълумки, 2010 йилда бир қатор тажрибаларда, графен варағи буқилганида жуда кучли псевдомагнит майдон пайдо бўлиши аниқланди. Бунда, майдоннинг миқдори ва йўналиши варақни буқиш радиуси ва усулига боғлиқ. Биз бундай майдон таъсири остида электронларнинг узатилишини, потенциал тўсиқ орқали электронларнинг ўтиши, шунингдек электроннинг титроқли ҳаракатланиш имкониятини ўрганиб чиқдик (*Zitterbewegung*). Бунда, электроннинг тўлқин функциясининг дастлабки ҳолатини Гаусс тўлқин уюмлари шаклида танланган ва бу уюмларнинг эволюцияси ўрганилган. Тадқиқотимизнинг бошланиш нуқтаси икки ўлчовли ностационар Дирак тенгламасидир

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0 \psi, \text{ бунда } H_0 = i\alpha_x p_x + i\alpha_y p_y = \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (40)$$

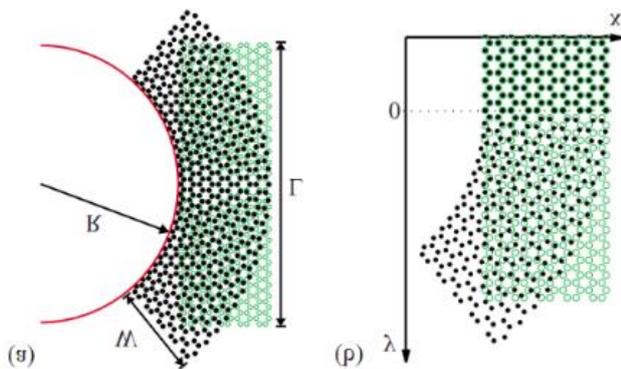
Бунинг ечими кичик вақт оралиқларида қуйидагича ифодаланади

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) \psi(\vec{r}, t), \quad (41)$$

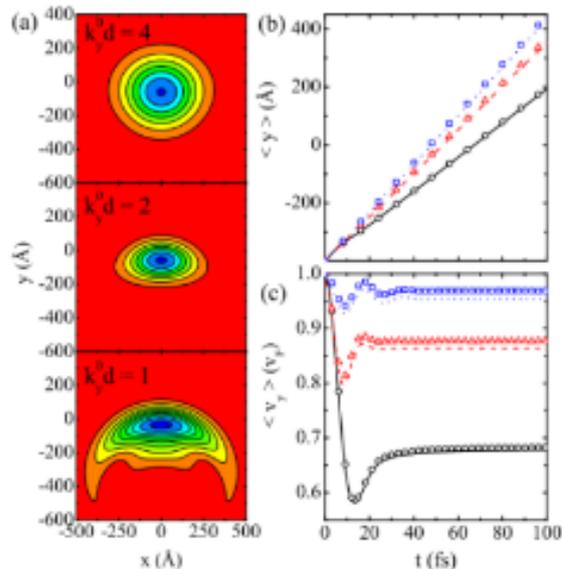
Бу ерда  $H$  – вақтга боғлиқ бўлмаган массасиз Дирак гамилтониани:

$$H_D = [v_F \vec{\sigma}(\vec{p} + e\vec{A}) + V(x, y)] e^{-i\varphi}. \quad (42)$$

Бошланғич шартида, Гаусс тўлқин уюми шаклида берилган турли хил (скалярлар, Лоренц-скаляр ва вектор) потенциаллар учун (42) тенгламани ечиб, ихтиёрий вақт ва координат учун электроннинг тўлқин функциясини топамиз.



**4-расм.** Эни  $W$  ва узунлиги  $L$ , эгрилик радиуси  $R$  графен нанотасмасини букиш усули.

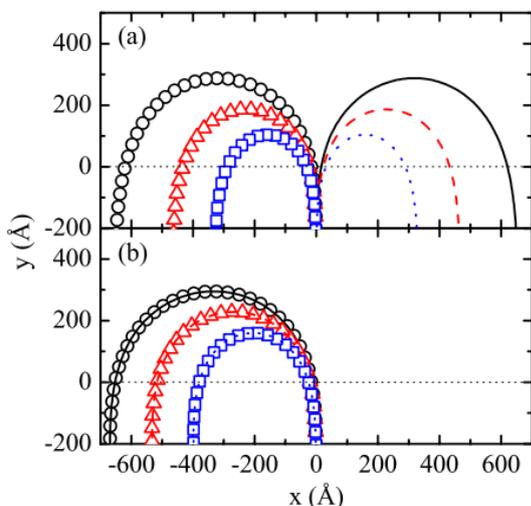


**5-расм.** Вақт  $t = 40$  фс бўлганда тўлқин функцияси модули квадрати контури,  $k_y^0 d$  нинг учта қиймати учун келтирилган.

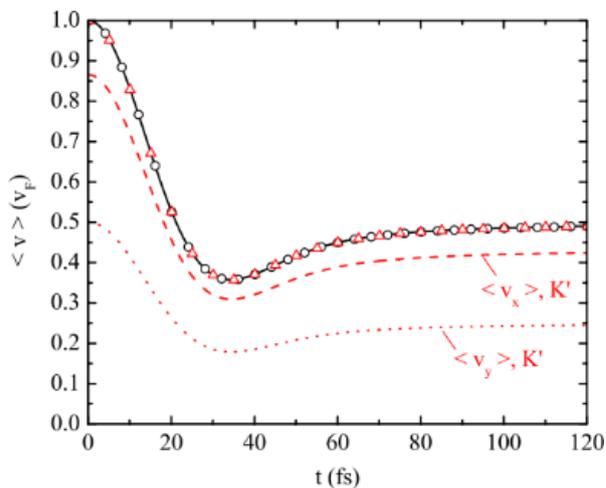
Барча ҳолатларда, 4-расмда келтирилгандек, букилган графендаги электроннинг ҳаракатини кўриб чиқамиз.

Ҳисоблашлар натижасида биз эҳтимоллик зичлиги, уюмнинг траекторияси, тезлиги ва потенциал тўсиқлар орқали уюмни ўтиши эҳтимолликларини оламиз. 5-расмда ҳаракат бошлангандан 40 фс вақт ўтгач  $k_y^0 d$  параметрнинг турли қийматлари учун тўлқин уюми эволюцияси келтирилган. Бу ҳолда, ташқи магнит майдоннинг қиймати нолга тенг деб, фақат графеннинг букилиши ҳисобига юзага келган псевдомагнит майдон мавжуд ҳол қаралди.

6-расмда импульснинг бошланғич қиймати  $k_y^0 = 0.02 \text{ \AA}^{-1}$  ва турли эгрилик радиуслари, яъни  $R = 1 \mu m, 0.8 \mu m$ , ва  $0.6 \mu m$  қийматларида тўлқин уюми траекторияси  $xu$  текисликда келтирилган. Бунда ташқи магнит майдон йўқ, фақат графени букиш ҳисобига пайдо бўлган псевдомагнит майдон мавжуд.



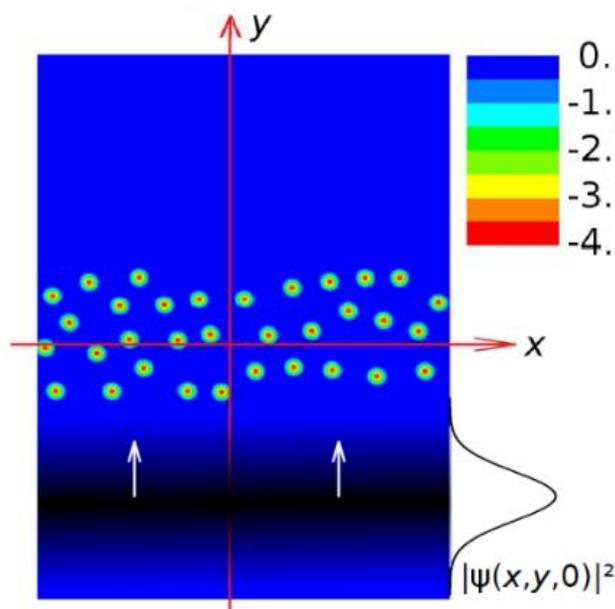
**6-расм.**  $xu$  – текисликда тўлқин уюми траекторияси.



**7-расм.** Ясси графенда тўлқин уюмнинг ўртача тезлигини ўзгариши.

7-расмда импульс ташкил қилувчиларнинг  $k_x^0 = k_y^0 = 0$  бошланғич қийматлари учун уюм тезлигининг ўртача қиймати псевдоспиннинг турли қийматлари учун  $[1,1]^T$  (оддий чизик) ва  $[1,i]^T$  (доира) келтирилган. Ушбу расмдан кўришиб турибдики, агар магнит майдони бўлмаса, турли хил псевдоспинлари учун уюмларнинг траекториялари бир хил бўлади, бу эса графен варағининг букилиши натижасида пайдо бўлган псевдомагнит майдон ҳисобига, турли псевдоспинлари ( $K$  ва  $K'$ ) тўғри келадиган тўлқин уюмлари ажралади. Яъни, агар  $K$  Дирак нуқтасига мос келадиган спин қиймати учун траектория тўғри чизикдан иборат бўлса, у ҳолда  $K'$  нуқтасига мос келадиган спин ҳолида траектория ярим доира шаклида бўлади. Шубҳасиз, бу графеннинг бу хусусиятлар орқали спин филтёрларини яратишга имкон беради.

Бундан ташқари, тасодифий тақсимланган думалоқ кадам потенциал тўсиқлар мавжуд бўлганда, ёки графенга азот атомлари киритилганда ҳосил бўладиган нуқсонли графен ҳолида тўлқин уюмининг тарқалиши масаласи алоҳида ўрганилди (8-расм), бу ерда тўлқин уюмининг вақт бўйича эволюцияси ажратиш оператори усулига асосланиб оддий компьютер ёрдамида амалга оширилади. Клейн туннелланиш содир бўлиши жараёнига қарамай, ушбу потенциал кадамларнинг мавжудлиги, айниқса тўсиқларнинг юқори концентрацияси ва потенциалнинг юқори қийматлари учун ўтиш эҳтимолини сезиларли даражада камайтиришини кўрсатдик.



8-расм. Масаланинг геометриясини тавсифловчи графен тасмасининг эскизи.

Континуум модели доирасида допантларни графен текислигида тасодифий локализация қилинган нуқталар атрофида тортишувчи потенциал ҳудудлари бўйича моделлаштирилди ва тўлқин уюми учун Дирак-Вайл ҳаракат тенгламаси бир қатор аралашмалар тўпламига қандай таъсир қилишини ўрганиш учун ҳисоблашлар олиб борилди. Азот атомларини графенга тасодифан киритилганда, графендаги ўтказувчанлик турли концентрацияларда ўрганилди. Олинган натижалар шуни кўрсатадики, азот аралашмалари концентрацияси ортиши билан ўтказувчанлик камайиши кузатилди.

## Хулосалар

Диссертацияда олинган асосий натижалар:

1. Тезкор кўп электронли ионларни атомли тизимлар билан ўзаро тўқнашувида ионларнинг электронини сидириб ташлаш жараёнини ўрганишни янги самарали ёндашуви ишлаб чиқилган бўлиб, бу ғалаёнланиш назарияси доирасидан ташқарида тавсифлаш имконини беради. Ушбу ёндашувга асосланиб, кўп электронли ионларни молекулалар, нанозарралар ва фотонлар билан юқори энергияли тўқнашувида электронларни сидириб ташлаш жараёни бўйича тизимли изланиш олиб борилди.
2. Тўсатдан ғалаёнланиш яқинлашув асосида тезкор ионларни кўп каррали сидириш кесими юзалари ҳисобланди, масалан,  $Fe^{25+}$ ,  $Fe^{24+}$ , ва  $Fe^{23+}$  ионларни  $N_2$  нишонлар билан турли тўқнашув энергия қийматлари қаралди. Кесим юзаларини баҳолаш ва ҳисоблаш натижалари тажрибаларда олинган мавжуд натижалар билан мос келди.
3. Ионларни молекуляр нишонлар билан тўқнашувида сидириш жараёнларини ўрганиш, тўқнашувлар карралигини аҳамияти ва молекула ўқининг йўналишига боғлиқлиги аниқланди. Тўқнашув карралиги ва молекула ўқининг йўналиши жараён кесим юзасига сезиларли ҳисса кўшиши аниқланди.
4. Тезкор оғир ионларнинг нанозарралар билан тўқнашувида энергия йўқотишлари ўрганилди. Оғир ионларнинг энергия йўқотишларини тўқнашувлар карралигига ва нанозарралар ориентациясини ион ҳаракати йўналишига боғлиқлигини ҳисоблаш ва баҳолаш амалга оширилади.
5. Юқори энергияли фотонларни атом ёки ион билан тўқнашувида ионланиш билан бирга электрон-позитрон жуфтларини пайдо бўлиши жараёни кесими учун аналитик формула таклиф қилинди.
6. Марказий  $s$  боғланган майдон ҳоли учун релятивистик фотоэффект жараёни кесими учун аналитик ифода таклиф қилинди.
7. Ташқи майдон таъсири остида бўлган уч ва кўп сатҳли тизимлардаги электрон жойлашиши учун аналитик ифода олинади. Аниқ ечимига асосланган кўп сатҳли атомларнинг квант сатҳларини эгалланишини назорат қилиш усули таклиф этилади.
8. Юқори энергияли фотонлар таъсирида носферик фуллерен фотоионизацияси жараёни кесими учун аналитик формула таклиф қилинди.
9. Ташқи доимий электр ёки магнит майдон таъсири остида графенда заряд ташувчилар траспорти учун назарий услуб батафсил ишлаб чиқилди ва ривожлантирилди.
10. Графен варағини букилган юзага келган псевдомагнит майдонида электрон траспорти назарий услуби батафсил ишлаб чиқилди ва ривожлантирилди.
11. Тўлқин уюмининг тасодифий тақсимланган думалоқ кадам потенциаллари бўлган графен соҳасидан ўтиши эҳтимоли ҳисобланади.
12. Графендаги азот атомлари тасодифий киритилган соҳадан электронларнинг ўтиши эҳтимолиги ва ўтказиш коэффицентининг азот атомларининг концентрациясига боғлиқлигини ҳисоблаш усули таклиф қилинган.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
ДОКТОРА НАУК DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ПРИ ИНСТИТУТЕ ИОННО-  
ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ АН РУз**  

---

**ИНСТИТУТ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

**РАХИМОВ ХАМДАМ ЮЛДАШЕВИЧ**

**ЭЛЕКТРОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ИОН-АТОМНЫХ  
СТОЛКНОВЕНИЯХ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ФИЗИКЕ УГЛЕРОДНЫХ  
НАНОСТРУКТУР**

**01.04.04 – Физическая электроника**

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ  
ДОКТОРА (DSc) ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

**ТАШКЕНТ–2022**

**Тема докторской (DSc) диссертации зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2021.2DSc/FM172**

Диссертация выполнена в Институте Ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме) размещён на веб-странице Научного совета (<http://iplt.uz/>) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)).

**Научные консультанты:**

**Матвеев Виктор Иванович**

доктор физико-математических наук, профессор

**Официальные оппоненты:**

**Оксенгендлер Борис Леонидович**

доктор физико-математических наук, профессор

**Умирзаков Болтахужа Ерматович**

доктор физико-математических наук, профессор

**Умаров Фарид Фахриевич**

доктор физико-математических наук, профессор

**Ведущая организация:**

**Ферганский политехнический институт**

Защита диссертации состоится « 9 » 03 2022 г. в 14<sup>30</sup> часов на заседании Научного совета DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 при Институте ионно-плазменных и лазерных технологий по адресу: 100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йўли 33. Тел./факс:(99871)262-32-54, e-mail: info@iplt.uz.

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Института ионно-плазменных и лазерных технологий (зарегистрирован за № 3), по адресу. 100125, г. Ташкент, ул. Дурмон йўли, 33. Тел:(+99871)262-31-69.

Автореферат диссертации разослан « 23 » февраля 2022 г.

(протокол реестра № 3 от « 23 » февраля 2022 г.).



**Х.Б. Ашуров**

Председатель научного совета по присуждению ученых степеней, д.т.н., профессор

**И.Д. Ядгаров**

Ученый секретарь научного совета по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., с.н.с

**Б.Е. Умирзаков**

Председатель научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

## ВВЕДЕНИЕ (аннотация докторской (DSc) диссертации)

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** Проявляемый в мире в последние годы интерес к изучению неупругих электронных процессов при взаимодействии атомов и молекул с сильными полями с учетом квантовых эффектов определяется бесспорной актуальностью этого направления как в практическом, так и в фундаментальном плане. Фундаментальное значение исследования подобных явлений обусловлено тем фактом, что природа многоэлектронных процессов в сильных внешних полях до сих пор еще до конца не изучена. С практической же точки зрения данная проблема напрямую связана с вопросами о поведении вещества в сильных полях и агрессивных средах, синтеза сверхстойких материалов, создания устойчивых и долгоживущих пучков высокозарядных быстрых ионов, имеющих широкий спектр практического применения, задачами, связанными с манипуляциями квантовыми состояниями и транспортом электронов под воздействием сильных внешних полей. Так, например, изучение процессов обдирки тяжелых высокоэнергетических ионов путем их пропускания через газовую среду, является основным методом создания пучков высокозарядных быстрых ионов. При этом для эффективного планирования и проведения подобных экспериментов требуются максимально точные оценки сечений обдирки, которые должны быть рассчитаны в рамках, так называемых непertурбативных методов, используемых в тех случаях, когда борновское приближение неприменимо (именно так обстоит дело в случае данных процессов из-за больших зарядов ионов). Поэтому теоретическое исследование процессов обдирки высокоэнергетических ионов требует разработки и применения именно непertурбативных подходов. Возможности использования мишеней в качестве объектов, позволяющих направленно изменять состояния бомбардирующих снарядов, активно исследуется в настоящее время в экспериментах на ускорителях тяжёлых ионов, например, в Германии (GSI, TSR), ЦЕРНе (Швейцария), Америке (RHIC – BNL), Канаде (TRIUMF), Китае (IMP – Lanzhou), Швеции (CRYRING), Японии (RIKEN), Франции (GANIL) и России в Объединенном институте ядерных исследований (Дубна). Кроме того, для многих практических применений крайне важна возможность увеличения сечений ионизационных потерь энергии даже на несколько процентов. Тогда как в данной диссертационной работе предложен механизм значительного увеличения сечений обдирки снарядов путем подбора структуры и ориентаций молекулярных мишеней. Другой актуальный аспект данной диссертации состоит в изучении процессов обдирки многоэлектронных ионов при их столкновениях с высокоэнергетическими фотонами, сопровождающихся рождением электрон-позитронных пар. Здесь также актуальным является вопрос о получении аналитических оценок для дифференциальных и интегральных сечений обдирки, справедливых в достаточно широком диапазоне энергий вылетевших электронов.

Сегодня в мире пучки тяжелых высокозарядных ионов имеют такие практические применения как ионная обработка, имплантация металлов и

твердотельные структуры, создание нанопор на тонких пленках, создание наночастиц и кластеров с заданными свойствами, размерами, а также при ранней диагностике раковых заболеваний.

В Республике Узбекистан на сегодняшний день уделяется особое внимание изучению физической электроники как в теоретическом, так и в экспериментальном плане. Поэтому исследования неупругих электронных процессов при ион-атомных столкновениях и различных внешних полях также является в высокой степени актуальными в последние годы. Основные направления фундаментальных исследований, имеющих огромное значения для успешного развития фундаментальной науки в нашей стране и их практические применения, отражены в Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан на 2017 – 2021 годы.

Данная диссертационная работа в определенной степени соответствует задачам, предусмотренным в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-4947 «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 07-февраля 2017 года<sup>1</sup>. Кроме того, данное диссертационное исследование служит выполнению задач, предусмотренных в Постановлениях Президента Республики Узбекистан ПП–1442 «О приоритетных направлениях развития индустрии Республики Узбекистан на 2011-2015 гг.» от 15 декабря 2015 года, № УП-4947 «О мерах по дальнейшей реализации Стратегии действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и №ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых документах, принятых в Республике за последние годы в данной сфере.

**Соответствие исследования основным приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан.** Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан: – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение». III. «Энергетика, энерго- ресурсосбережение, транспорт, машино- и приборостроение, электроника, микроэлектроника, фотоника» развитие электронной приборостроение».

**Обзор международных научных исследований по теме диссертации<sup>2</sup>.** Научные исследования по изучению физики пучков активно проводятся в настоящее время в экспериментах на ускорителях тяжёлых ионов, например, в Германии, Швейцарии (ЦЕРН), США, Канаде, Китае, Швеции, Японии, Франции и в России (Объединенном институте ядерных исследований – Дубна).

На мировом уровне в современной физической электронике, в частности по получению пучков высокозарядных ионов и изучению неупругих электронных

---

<sup>1</sup>Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах // приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № УП-4947, п. 3.2.

<sup>2</sup>Обзор международных научных исследований по теме диссертации проведен на основе: [www.nature.com](http://www.nature.com), [www.gsi.de](http://www.gsi.de), [www.ufn.ru](http://www.ufn.ru), [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com), [www.springerlink.com](http://www.springerlink.com), [www.scopus.com](http://www.scopus.com), [www.elsevier.com](http://www.elsevier.com), Springer, ResearchGate и из других литературных источников.

процессов, рассеяния частиц в углеродных наноструктурных материалах решен ряд актуальных проблем.

В настоящее время во многих странах мира значительная часть современных научных исследований посвящена проектированию и созданию источников высокозарядных ионов с заранее заданными зарядами, что в значительной степени определяет уровень развития экспериментальной физики, поскольку для многих современных исследований требуются источники высокозарядных ионов со все более высокими требованиями к характеристикам пучков.

Кроме того, в настоящее время значительная часть научных исследований посвящена получению нового поколения материалов на основе углеродных наноструктур, изучению фундаментальных проблем физики графена и их эффективному применению в промышленности и технике, в частности, развитию методов синтеза углеродных наноструктур. Научные исследования по графену активно проводятся в настоящее время как в теоретическом, так и в экспериментальном направлениях. Таким образом, проводящиеся на мировом уровне вышеперечисленные исследования представляют значительный интерес для современной физической электроники, ее фундаментальных и прикладных задач.

**Степень изученности проблемы.** Во многих ведущих научных центрах мира проводят исследования по созданию пучков высокозарядных ионов ввиду актуальности этого направления. Основным этапом при создании пучков высокозарядных ионов является многократная обдирка, которая осуществляется путем столкновений быстрых многоэлектронных ионов с атомарными или молекулярными мишенями. Успешное экспериментальное выполнение процесса подобной обдирки требует теоретического описания, позволяющего получить максимально точные оценки сечения процесса электронных потерь (обдирки) ионами. Поскольку большинство современных ускорителей, таких как Большой Адронный Коллайдер в Церне, Коллайдер релятивистских тяжелых ионов Брукхевена, а также ускорительный комплекс FAIR в Дармштадте используют высокозарядные (например,  $U^{92+}$ ,  $Au^{79+}$ ,  $Pb^{82+}$ , и т.д.) ионы, то процесс обдирки ионов при получении необходимых для данных ускорителей пучков имеет непертурбативный характер. Другими словами, неупругие электронные переходы в состояниях ионов при их столкновениях с молекулами не могут быть корректно описаны и рассчитаны в рамках теории возмущений. Поэтому требуется разработка и применение так называемых непертурбативных методов расчета, которые позволяют провести подобные вычисления без предположений о малости возмущений.

В настоящее время существует несколько методов, основанных на применениях: метода классических траекторий Монте Карло, метода молекулярной динамики, а также так называемый “Loss Code”, состоящей из набора сложных программных пакетов. Однако все эти методы требуют привлечения больших компьютерных ресурсов и не позволяют в полной мере охватывать квантовые эффекты, эффекты экранировки заряда ядра и межэлектронных корреляций.

В Республике Узбекистан профессором В.И. Матвеевым и его группой проводились исследования по изучению упругих и неупругих процессов при ион атомных/молекулярных столкновениях. В настоящее время выделяется фундаментальное и практическое значение описанию физических закономерностей неупругих электронных процессов при взаимодействиях быстрых высокозарядных ионов с различными мишенями.

Таким образом, для описания процесса обдирки многоэлектронных ионов при их столкновениях с атомными системами или фотонами, требуется применение метода, позволяющего учесть такие эффекты, а также не требующего сложных численных расчетов. Именно такой метод разработан и применен в данной диссертационной работе для вычисления вероятностей и сечений ионизации молекул при их столкновениях с быстрыми (в том числе релятивистскими) тяжелыми ионами, а также для расчета процессов обдирки быстрых тяжелых структурных ионов при их взаимодействиях с высокоэнергетическими фотонами, молекулами, и наночастицами.

Выбор структурных (имеющих один или более электронов) ионов в качестве снарядов и использование многоатомных мишеней приводят к качественно новой физической картине столкновений и к появлению эффектов, отсутствующих или пренебрежимо малых в случаях полностью ободранных ионов и одноатомных мишеней. Столкновения структурных тяжелых ионов с молекулами и наночастицами следует рассматривать как столкновение двух сложных систем, при котором происходит одновременное многократное возбуждение и ионизация (обдирка) электронных оболочек обеих сталкивающихся систем. Причем, вклад многоэлектронных переходов оказывается сравнимым по порядку величины с вкладом одноэлектронных возбуждений и ионизации. Непертурбативное квантовомеханическое рассмотрение сечений многократной обдирки снарядов и мишеней впервые было проведено в данной работе.

**Связь темы диссертации с планами научно-исследовательских работ организации, где выполнялась работа.** Диссертационная работа выполнена в рамках исследований следующих проектов Института ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук Республики Узбекистан: ФА-Ф2-Ф084; ФПФИ АН РУз – 33-02 (24 месяца); ФПФИ АН РУз – 58-04 (24 месяца); ФПФИ АН РУз – 66-06 (24 месяца).

**Целью диссертационного исследования** является исследование неупругих электронных переходов в процессах обдирки структурных ионов, сталкивающихся с атомными системами и высокоэнергетическими фотонами в рамках непертурбативных подходов, а также исследование электронных переходов в многоуровневых атомах, взаимодействующих с внешними полями. Изучение процессов электронных переходов в углеродных наноструктурах (фуллерен, графен, нанотрубка) при наличии внешних полей.

**Задачи диссертации.** Для реализации означенной цели решаются следующие задачи:

- Разработка непertурбативных методов, позволяющих описывать процесс обдирки (электронных потерь) многоэлектронных ионов при высокоэнергетических столкновениях с атомными системами и фотонами, применимых для тех диапазонов энергий и зарядовых состояний, которые не могут быть описаны в рамках теории возмущений;
- вычисление дифференциальных и интегральных сечений обдирки быстрых многоэлектронных ионов при их столкновениях с молекулярными мишенями;
- оценка сечений обдирки тяжелых ионов при столкновениях с высокоэнергетическими фотонами при одновременном рождении электронпозитронных пар;
- оценка сечений процесса релятивистского фотоэффекта с состояний в центральном поле;
- расчет вероятностей переходов заселенностей многоуровневых атомов во внешнем поле. Изучение возможности контролирования подобных переходов с помощью внешнего электромагнитного поля;
- исследование процесса фотоионизации фуллерена в форме (несферического) эллипсоида;
- исследование процесса обдирки тяжелых ионов при их столкновениях с углеродными наноструктурами;
- изучение эволюции волнового пакета и транспорта электронов в двухмерной углеродной наноструктуре, взаимодействующей с сильным магнитным полем.
- изучение эволюции волнового пакета и транспорта электронов в псевдомагнитном поле, которое появляется за счет изгиба графена.
- изучение эволюции волнового пакета и коэффициента прохождения электронов в двумерной углеродной наноструктуре с различными дефектами.

**Объектами исследования являются** быстрые тяжелые ионы, сталкивающиеся с молекулами и наноструктурами, высокоэнергетические фотоны, взаимодействующие с атомами, многоуровневые атомы в периодическом электрическом поле, углеродные наноструктуры (несферический фуллерен, графен, изогнутый графен, графен с различными дефектами) и углеродная нанотрубка.

**Предметы исследования:** взаимодействие высокэнергетических фотонов с атомами или молекулами, электронные переходы в твердых телах под действием внешнего поля, рассеяние или проводимость электронов в графене под действием внешнего поля.

**Методы исследования.** При проведении исследовательских работ по теме диссертации использовались следующие методы: приближение внезапных возмущений, приближение Глаубера, методы операторного расщепления, методы численного решения уравнений Шредингера и Дирака.

**Научная новизна исследования** заключается в следующем:

- проведено систематическое исследование процессов обдирки быстрых структурных ионов при их столкновениях с атомными системами, разработан непертурбативный метод, позволяющий изучать электронные потери быстрых структурных ионов при их столкновениях с молекулярными мишенями;
- проведены исследования по обдирке быстрых структурных ионов на молекулярных мишенях. Установлено, что сечение процесса обдирки налетающего иона-снаряда и его абсолютная величина изменяются на 50%-100% в зависимости от ориентации оси молекул относительно направления движения иона;
- впервые определена роль эффекта кратности столкновений и ориентации оси молекулы при обдирке налетающего иона-снаряда. Показано, что эффект кратности столкновений приводит к значительной разнице между сечениями обдирки снаряда при параллельной и перпендикулярной относительно скорости снаряда ориентации мишени, при хаотической же ориентации оси молекул-мишеней этот эффект малозначителен;
- впервые определены сечения процесса обдирки атома или структурных ионов при их столкновениях с высокоэнергетическими фотонами, сопровождающихся одновременным рождением электрон-позитронных пар; Установлено, что асимптотическое значение не зависит от энергии фотона;
- впервые предложен способ изучения релятивистского фотоэффекта с состояний в центральном поле, соответствующих релятивистским фотоэлектронам. Показано, что зависимость сечения фотоионизации от энергии может быть получена без решения волнового уравнения;
- впервые предложен метод контролирования заселенностей квантовых уровней атомов с помощью внешнего монохроматического поля;
- впервые получены аналитические выражения для оценок дифференциальных сечений процесса фотоионизации (несферического) фуллерена в форме эллипсоида;
- получены оценки для энергетических потерь быстрых многозарядных ионов при их столкновении с углеродной нанотрубкой;
- впервые выявлено, что, несмотря на туннельный эффект Клейна, наличие этих потенциальных ступеней значительно снижает вероятность перехода электрона через барьер, особенно для более высокой концентрации рассеивателей и более высоких потенциальных высот.
- впервые выявлено дрожащее движение электрона (*zitterbewegung*) в псевдомагнитном поле, которое появляется за счёт изгиба графена;
- впервые определено, что время пребывания электрона внутри области рассеяния значительно увеличивается из-за присутствия дефектов, которые появляется за счет внешнего поля или допирования атомами азота в графен.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

Разработаны непертурбативные методы, позволяющие описывать процесс обдирки (электронных потерь) многоэлектронных ионов при высокоэнергетических столкновениях с атомными системами и фотонами,

применимые для тех диапазонов энергий и зарядовых состояний, которые не могут быть описаны в рамках теории возмущений;

предложен механизм значительного увеличения сечений обдирки снарядов путем подбора структуры и ориентаций молекулярных мишеней;

получена аналитическая формула, позволяющая описывать процесс релятивистского фотоэффекта с состояний в центральном поле.

получено аналитическое выражение для процесса фотоионизации несферического фуллерена.

предложен механизм и разработана аналитическая формула для контроля популяции электрона в вырожденных атомных уровнях;

разработан метод исследования эволюции волнового пакета в графене, который позволяет изучить возможность рассеяния электронов под действием различных внешних полей, в том числе постоянного и магнитного, а также атомов азота их легированием в графен.

разработан метод исследования эволюции волнового пакета в графене с различными дефектами (таких как постоянное поле или допирование атомов азота в графен), который позволяет изучить возможность рассеяния электронов и зависимость коэффициента прохождения от концентрации атомов азота.

**Достоверность полученных результатов** обеспечивается применением широкоизвестных и доказавших свою надежность методов, таких как ионная обработка, имплантация металлов в твердотельные структуры, а также общепринятых теоретических и экспериментальных подходов, апробированных и используемых в физической электронике и физике конденсированного состояния.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Научная значимость диссертации заключается в разработке новых методов, позволяющих исследовать электронные потери быстрых структурных тяжелых ионов при их столкновениях с атомарными мишенями, изучать процессы электронных потерь быстрых структурных тяжелых ионов при их столкновениях с молекулярными мишенями, контролировать заселенности квантовых уровней атомов с помощью внешнего монохроматического поля

В практическом же плане результаты позволят в значительной мере стабилизировать процесс создания стабильных пучков тяжелых ионов в таких современных ускорителях как Большой Адронный Коллайдер в ЦЕРНе, Коллайдер релятивистских тяжелых ионов в Брукхевене, а также ускорительный комплекс FAIR в Дармштадте.

**Внедрение результатов исследования.** Полученные научные результаты по неупругим электронным процессам при столкновениях быстрых высокозарядных ионов с молекулярными системами-мишенями или электронных переходов под воздействием внешнего поля, их интерпретация и методы описания были цитированы в 190 журналах с высоким импакт фактором (ИФ), входящих в научно информационную базу Web of Science.

Теоретические результаты, полученные по электронным переходам в атомах под воздействием внешнего поля и представляющие собой

аналитические выражения для вероятностей электронных переходов, были использованы в следующих зарубежных научных журналах (J. Phys. A 2005; 38:8589, IF=2,110, J. Phys. B 2004; 37:4259, 2008;41: 235503, IF=2,125, Phys. Rev. A 2004; 69:023405, 2004; 69: 043406, IF=2.777, Phys. Rev. B 2007; 75:195310, IF=3,575, и т.д.). Использование научных результатов позволило манипулировать вероятностью обнаружения электрона с помощью частоты внешнего поля, что заметно улучшило контроль электронной популяции в атомных уровнях;

теоретические результаты по временной эволюции волновой пакета в согнутом графене в следующих зарубежных журналах (Phys. Rev. Lett. 2016; 117: 276801, IF = 8,385, Phys. Rev. B 2012, 85: 155415, IF = 3,575)., New J. Phys., 2011; 13: 083029, IF = 3,539 и др.) использовались для изучения влияния магнитного поля на движение волнового пакета. Использование научных результатов позволило рассчитать вероятность прохождения волнового пакета через барьера при различных значениях напряженности поля;

теоретические результаты по электронному транспорту графена с различными барьерами использовались при расчете коэффициентов прохождения электрона через барьер в следующих зарубежных журналах (Phys. Rev. A 2017, 95: 042102, IF = 2,777, Phys. Rev. B 2015, 91: 045420, IF = 3,575, J. App.Phys.2013, 114:084314, IF = 2,546 и др.). Использование научных результатов позволило повысить точность вычисления вероятности прохождения и эффективность расчетов при вычислении коэффициентов прохождения через различные барьеры.

**Апробация работы.** Основные результаты настоящей работы доложены и обсуждались на 20 международных и республиканских научных конференциях.

**Опубликованность результатов.** По теме диссертации опубликовано 42 печатных работ, из них 2 в коллективной монографии авторов, 14 статей в международных и отечественных научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов, 2 главы и 2 статьи в трудах международных конференций и в вестнике ВУЗа, 21 тезисов в докладах научных конференций, симпозиумов и семинаров.

Личный вклад автора заключался в обобщении результатов исследований, выполненных непосредственно автором, а также группой научных сотрудников под его руководством. Автор участвовал во всех этапах получения и обсуждения всех представленных результатов, его участие являлось определяющим в формулировании выводов и заключений. Постановка задач ряда исследований проведена с участием профессоров В.И. Матвеева и Д.У. Матрасулова.

**Объем и структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка цитируемой литературы. Общий объем работы составляет 218 страниц машинописного текста, включая основной материал – 186 страниц, из них 41 рисунков и 3 таблицы. Список литературы включает 340 наименования.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертация состоит из 6 глав, введения и списка литературы. Во введении дается обоснование актуальности проблемы, сформулирована цель работы и ее новизна. **Первая глава** посвящена обзору литературы, описанию современного состояния исследований в данной области, а также изложению методологических основ работы. **Вторая глава** посвящена к изучению электронных потерь быстрых структурных тяжелых ионов на молекулярных мишенях. В частности, в данной главе на основе приближения внезапных возмущений развит подход к непертурбативному расчету сечений электронных потерь быстрых тяжелых ионов при их столкновениях с атомарными мишенями.

Электронные потери (ионизация ионов-снарядов) при их столкновениях с нейтральными мишенями привлекает все больше внимания ввиду их важности для экспериментов по созданию пучков тяжелых ионов. Подобные пучки высокозарядных ионов создаются путем обдирки тяжелых ионов в среде из газов. Особую актуальность подобные исследования приобрели в свете работ после запуска проекта FAIR, в рамках которого комплекс ускорителей ионов широкого диапазона зарядов, масс и энергий позволяет провести широкий спектр столкновительных экспериментов с участием атомов, молекул и наноструктур. При этом главной трудностью, возникающей при описании таких процессов, является неприменимость теории возмущения к расчету сечений ионизации, обусловленная большими зарядами ионов. Поэтому требуется разработка и применение так называемых непертурбативных методов, позволяющих корректно описывать неупругие процессы, включая процессы потерь электронов ионами-снарядами, при столкновениях быстрых структурных тяжелых ионов с атомами и молекулами. Один из таких методов, основанный на приближении внезапных возмущений, был ранее развит и успешно применен к процессам одно- и многократной ионизации атомов при столкновениях с быстрыми многозарядными ионами. Метод применим к широкому спектру энергий столкновения и зарядов. Приближение внезапных возмущений, на которое опирается данный подход, предполагает значительную краткость времени столкновения по сравнению с характерным периодом вращения ионизуемых электронов вокруг ядер. При таком приближении для вычисления амплитуд неупругих электронных переходов нет необходимости в точном решении нестационарных уравнений Шредингера или Дирака. При этом количественное описание процессов электронных переходов имеет достаточно высокую точность, особенно для высоких энергий столкновения.

Для количественного описания ионизации  $N$  электронов быстрого тяжелого иона (ниже вместо термина «ионизация» мы используем термин «электронные потери» или «обдирка») рассмотрим столкновительную систему, состоящую из быстрого иона с зарядом  $Z_p$  имеющего до столкновения  $N_p (\geq N)$  электронов и сталкивающегося с нейтральной мишенью с зарядом ядра  $Z_a$  и имеющей  $N_a$  электронов. При этом мы будем обозначать координаты электронов иона и мишени через  $\vec{r}_p$  ( $p = 1, 2, \dots, N_p$ ) и  $\vec{r}_a$  ( $a = 1, 2, \dots, N_a$ ), соответственно. Для иона,

движущегося со скоростью  $\vec{v}$  и имеющего при столкновении параметр удара  $\vec{b}$ , потенциал взаимодействия иона с мишенью может быть записан в виде

$$V = -\sum_{a=1}^{N_a} \frac{Z_p}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_a|} - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p|} + \sum_{p,a=1}^{N_p, N_a} \frac{1}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p-\vec{r}_a|} \quad (1)$$

где  $\vec{R} = \vec{b} + \vec{v}t$  – (зависящее от времени) расстояние между ядрами иона и мишени-атома в атомной системе единиц, которые, используются ниже. В данном потенциале первый член соответствует взаимодействию электронов мишени с ядром падающего иона, второй член – потенциал взаимодействия электронов иона с ядром мишени, тогда как третий член описывает взаимодействие электронов иона с электронами мишени.

Для того, чтобы приближение внезапных возмущений было применимо к данной столкновительной системе, необходимо выполнение условия

$$t_c \ll t_s,$$

где  $t_c$  – время столкновения,  $t_s$  – характерное время вращения наиболее быстрого (внутреннего) ионизуемого электрона по орбите.

Поскольку время столкновения приблизительно может быть оценено как  $t_c \approx a/v$ , где (в атомных единицах)  $a \approx 1$  – характерный размер партнеров по столкновению (то есть иона и мишени), а  $v = |\vec{v}|$  – их относительная скорость, то ввиду того, что для всех электронных орбит  $t_s \leq 1$  всех положительных ионов, условие (1) может быть переписано в виде  $t_c \approx 1/v \ll 1$  или, эквивалентно, в виде

$$v \gg 1. \quad (2)$$

Отсюда следует, что приближение внезапных возмущений может быть применено для столкновительной системы, состоящей из быстрого тяжелого иона и нейтральной мишени при условии, если скорость столкновения значительно больше скорости ионизуемых электронов.

Когда ион и мишень находятся достаточно далеко друг от друга, их волновые функции не зависят друг от друга. Обозначая волновые функции электронов иона и мишени через  $\psi_k \approx \psi_k(\{\vec{r}_p\}) \equiv \psi_k(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_p})$  и  $\phi_n \approx \phi_n(\{\vec{r}_a\}) \equiv \phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_a})$ , соответственно, а также соответствующие начальные (невозмущенные) волновые функции через  $\psi_0$  и  $\phi_0$ , для вероятности перехода мишени из состояния  $\phi_0$  в состояние  $\phi_n$ , а иона из  $\psi_0$  в  $\psi_k$  имеем

$$w_{0 \rightarrow k}^{0 \rightarrow n} = \left| \langle \phi_n \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} V dt\right) | \psi_0 \phi_0 \rangle \right|^2. \quad (3)$$

Поскольку нашей целью является неупругие электронные переходы в состояниях иона, а не мишени, то мы можем произвести суммирование по всем возможном конечным состояниям мишени и получить вероятность перехода иона из начального состояния  $\psi_0$  в некоторое (ионизованное или возбужденное) состояние  $\psi_k$  при произвольной судьбе мишени

$$W_{0 \rightarrow k} = \sum_n w_{0 \rightarrow k}^{0 \rightarrow n}. \quad (4)$$

Нетрудно показать, что данная вероятность может быть представлена как функция прицельного параметра  $\vec{b}$  в следующем виде:

$$W_{0 \rightarrow k} = \langle \phi_0 | \left| \langle \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} U_a dt\right) | \psi_0 \rangle \right|^2 | \phi_0 \rangle, \quad (5)$$

если выполнено условие применимости теории внезапных возмущений, а потенциал взаимодействия иона с мишенью имеет вид

$$U_a = -\sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p|} + \sum_{p,a=1}^{N_p, N_a} \frac{1}{|\vec{R}(t)+\vec{r}_p-\vec{r}_a|} \quad (6)$$

где  $\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}t$ .

Несмотря на формальную простоту, формула (5) для вероятности неупругого перехода еще не является удобной для расчетов. Поэтому необходимо ее дальнейшее упрощение. Для этой цели мы допустим, что во время столкновения координаты электронов иона не меняются относительно ядра мишени. В этом случае можно будет произвести усреднение потенциала взаимодействия между электронами иона и ядром мишени по положениям электронов мишени. Предполагая также, что состояния электронов мишени описываются одноэлектронными волновыми функциями модели Дирака-Хартри-Фока, после усреднения мы получаем следующий результат:

$$W_{0 \rightarrow k} = \left| \langle \psi_k | \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}_a dt\right) | \psi_0 \rangle \right|^2, \quad (7)$$

где усредненный потенциал взаимодействия электронов иона с ядром мишени:

$$\bar{U}_a = \langle \phi_0(\{\vec{r}_a\}) | U_a | \phi_0(\{\vec{r}_a\}) \rangle = - \sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_a}{|\vec{R}(t) - \vec{r}_p|} \sum_{i=1}^3 A_i \exp(-\alpha_i |\vec{R}(t) - \vec{r}_p|). \quad (8)$$

Отметим, что данное выражение для вероятности перехода формально совпадает с соответствующим выражением, выведенным ранее в рамках приближения Глаубера. Как видно из последней формулы, усредненный потенциал  $\bar{U}_a$  не зависит от координат атомных электронов,  $\{\vec{r}_a\}$  а содержит только табулированные константы  $A_i$  и  $\alpha_i$ . На самом деле такое усреднение означает, что электронная плотность мишени записана в виде

$$\rho_a(r) = \frac{Z_a}{4\pi|\vec{r}|} \sum_{i=1}^3 A_i \alpha_i^2 e^{-\alpha_i |\vec{r}|}. \quad (9)$$

С помощью последней формулы легко показать, что интеграл в формуле (7) может быть представлен в виде суммы эйконольных фаз электронов иона:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}_a dt = \sum_{p=1}^{N_p} \chi(\vec{b}, \vec{r}_p), \quad (10)$$

где функции  $\chi(\vec{b}, \vec{r}_p)$  имеет вид

$$\chi(\vec{b}, \vec{r}_p) = - \frac{2Z_a}{v} \sum_{i=1}^3 A_i K_0(\alpha_i |\vec{b} - \vec{s}_p|). \quad (11)$$

В данном выражении,  $\vec{s}_p$  обозначает проекцию вектора  $\vec{r}_p$  на плоскость, перпендикулярную направлению скорости, а  $K_0$  - функция Макдональда. В рамках такого приближения полное сечение ионизации падающего иона, проинтегрированное по всем возможным значениям параметра удара, имеет вид

$$\sigma = \int d^2\vec{b} W(b) = \int d^2\vec{b} \sum_{[k]} W_{0 \rightarrow k}, \quad (12)$$

где суммирование и интегрирование по  $[k]$  проводится по всем конечным состояниям (электронов иона), соответствующим  $N$  - кратной ионизации снаряда.

Для того, чтобы привести формулу (12) к виду, удобному для вычисления сечений, необходимо допускать следующие упрощения: число ионизируемых электронов будем считать значительно меньшим полного числа электронов в ионе до ионизации, то есть,  $N < N_p$ , а также будем считать, что имеет место приближение независимых электронов, то есть волновая функция иона может быть представлена в виде произведения одноэлектронных водородоподобных волновых функций. Тогда для вероятности  $W^{N+}(\vec{b})$  потери ионом  $N$  электронов при заданном параметре удара  $\vec{b}$  имеем следующее выражение:

$$W^{N+}(\vec{b}) = \frac{N_p}{(N - N_p)! N!} \prod_{i=1}^{N_p - N} p_i(\vec{b}) \prod_{i=N_p - N + 1}^{N_p} (1 - p_j(\vec{b})), \quad (13)$$

где  $p_i(\vec{b})$  – одноэлектронные неупругие формфакторы:

$$p_i(\vec{b}) = \int d^3 k_i \left| \int d^3 r_i \psi_{k_i}^*(\vec{r}_i) \exp\{-i\chi_i(\vec{b}, \vec{r}_i)\} \phi_i(\vec{r}_i) \right|^2. \quad (14)$$

Далее, усредняя неупругий формфактор по орбитальным и магнитным квантовым числам,  $l$  и  $m$  для данного главного квантового числа  $n$ , имеем

$$p(b) = \frac{1}{n_0} \sum_{n=1}^{n_0} \frac{1}{n^2} \sum_{l,m} \int d^3 k \left| \int d^3 r \psi_k^*(\vec{r}) \exp\{-i\chi(\vec{b}, \vec{r})\} \phi_{n,l,m}(\vec{r}) \right|^2, \quad (15)$$

причем  $p(b)$  содержит только зависимость от модуля параметра удара,  $b$ . С помощью данного выражения вероятность  $W^{N+}(\vec{b})$  потери ионом-снарядом  $N$  электронов при столкновении с нейтральным атомом может быть записана в виде

$$W^{N+}(b) = \frac{N_p}{(N_p - N)! N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \frac{N!}{(N-m)! m!} \{p(b)\}^{N_p - N - m} \quad (16)$$

интегрирование которой по параметру удара дает нам соответствующее сечение  $N$  – кратных электронных потерь:

$$\sigma^{N+} = \frac{N_p! \sigma^{N_p+}}{(N_p - N)! N!} \sum_{m=0}^N (-1)^m \left( \frac{Z_p + N_p}{Z_p + N + m} \right)^2 \frac{(N_p - N)!}{(N_p - N - m)! m!} \left( \frac{N_p}{N + m} \right)^{\kappa} \{p(b_0, E)\}^{N_p - N + m}. \quad (17)$$

В данном выражении величина  $b_0$  представляет собой значение параметра удара, при котором неупругий формфактор достигает своего максимального значения,  $\kappa$  – некая величина, характеризующая поведение функции  $p(b)$  вблизи данного максимума, а  $\sigma^{N_p+}$  – сечение полной обдирки иона.

С помощью развития этого метода нами представлены **во второй главе** данной диссертации, описание и расчеты электронных потерь быстрых тяжелых ионов при столкновениях с нейтральными молекулами. Данная задача представляет значительный интерес для проводимых в настоящее время экспериментов на ускорителях тяжелых ионов. А именно, процесс обдирки ионов, который предшествует процессу их ускорения, проводится, в большинстве случаев путем пропуска относительно низкозарядных ионов через газовые среды. В отличие от ион-атомных столкновений, когда ион-снаряд сталкивается с молекулярными мишенями, возникает ряд новых эффектов, учет которых необходим для получения максимально точных оценок сечений обдирки. К таким эффектам, прежде всего, относятся эффект кратности столкновений (т.е., вклады от столкновения иона с каждым атомом молекулы), а также эффект ориентации оси молекулы.

Более точно, эффект кратности столкновений подразумевает случай, когда ион, возбужденный после столкновения с первым атомом молекулы, не успевает релаксировать и сталкивается со вторым атомом, находясь в возбужденном состоянии. Значительный вклад эффектов кратности столкновений в процессах потерь энергии и электронов быстрыми структурными ионами при столкновениях с двухатомными молекулами был ранее продемонстрирован рядом авторов и при столкновениях с многоатомными молекулами и наночастицами. Такого рода эффекты будут иметь место при наличии «выстроенности» молекул вдоль какого-либо направления и при условии, что время между двумя последовательными столкновениями меньше или порядка времени релаксации электронной шубы иона.

Качественно эффекты кратности столкновений могут быть поняты следующим образом. Не трудно убедиться, что, если направление движения

снаряда близко по ориентации с осью молекулы, то в сечения возбуждения и ионизации снаряда заметную поправку может вносить учет двух последовательных столкновений иона с атомными остовами, входящими в состав одной молекулы. Действительно, для движущихся с релятивистской скоростью снарядов время между таким двумя последовательными столкновениями порядка  $10^{-19}$  сек. Очевидно, что это время намного меньше среднего времени жизни возбужденных состояний структурного иона (снаряда) относительно радиационных и оже-распадов. В этом случае, при расчете сечения возбуждения и ионизации снаряда, необходимо учитывать вклад двухступенчатых процессов, когда снаряд, возбужденный в результате столкновения с первым ядром молекулы, не успевает релаксировать в основное состояние и претерпевает столкновение со вторым ядром молекулы, находясь в возбужденном состоянии. Далее, поскольку эффективный размер возбужденных состояний больше размера основного состояния, постольку сечения возбуждения и ионизации из возбужденного состояния оказываются больше сечений возбуждения и ионизации из основного состояния и следует ожидать заметный вклад от учета последовательных столкновений. Подчеркнем, что эффект кратности столкновений относится только к сечениям возбуждения или ионизации электронных оболочек снаряда, тогда сечения возбуждения и ионизации электронов мишени не изменяются за счет кратности столкновения. Действительно, в этом случае при последовательном столкновении с каждым из двух атомов молекулы происходит возбуждение или ионизация разных атомов. Ясно, что аналогичные аргументы справедливы и для столкновений достаточно быстрых структурных ионов с молекулами, состоящими более чем из двух атомов.

В данной диссертации нами также развит непertурбативный метод расчетов сечений потерь электронов быстрыми тяжелыми структурными ионами при столкновениях с нейтральными мишенями (молекулами), с учетом всевозможных возбуждений и ионизации, как снаряда, так и мишени. Существенного упрощения задачи удалось достичь путем рассмотрения ионов высоких зарядов и многоэлектронных мишеней.

Проведены расчеты зависимостей сечений однократной, двукратной и трехкратной обдирки снарядов от ориентации мишени относительно направления движения снаряда. Показано что эффект кратности столкновений приводит к значительной разнице между сечениями обдирки снаряда при параллельной и перпендикулярной относительно скорости снаряда ориентации мишени, при хаотической же ориентации мишени этот эффект малозначителен.

Столкновительная система, которую мы исследуем, состоит из быстрого структурного иона, сталкивающегося с молекулой, состоящей из многоэлектронных атомов (число электронов  $N_A \gg 1$ ). В этом случае, с малой погрешностью  $\sim 1/N_A$ , сечение перехода электронов снаряда из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  при произвольной (т.е. после суммирования по всем конечным состояниям) судьбе электронов мишени может быть найдено в приближении эйконала:

$$\sigma = \int \left| \langle k | \exp \left\{ -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX \right\} | 0 \rangle \right|^2 d^2 b, \quad (18)$$

где  $\vec{v}$  – скорость снаряда, ось  $x$  направлена по  $\vec{v}$ , молекула (мишень) неподвижна и одно из ядер молекулы находится в начале системы координат,  $\vec{b}$  – параметр удара, тогда координаты ядра снаряда  $\vec{R} = (X, \vec{b})$ , здесь и везде ниже используются атомные единицы. В формуле (18) потенциал  $U$  – взаимодействие электронов снаряда с мишенью – молекулой, описываемой как протяженный заряд. Другими словами, сечение (18) выражено через электронную плотность молекулы. В молекуле, состоящей из многоэлектронных атомов, электронная плотность (в основном состоянии) мало отличается от соответствующей электронной плотности изолированных атомов. Поэтому, будем считать молекулу, состоящей из изолированных и невзаимодействующих между собой атомов, расположенных на равновесных для данной молекулы расстояниях. Электронную плотность каждого атома мишени будем описывать в модели Дирака-Хартри-Фока-Слейтера, согласно которой пространственная плотность электронного заряда в атоме имеет вид

$$\rho_m(r) = -\frac{Z_m}{4\pi r} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \alpha_{m,i}^2 \exp(-\alpha_{m,i} r), \quad \sum_{i=1}^3 A_{m,i} = 1, \quad (19)$$

где  $Z_m$  – заряд ядра атома с номером  $m$ ,  $A_{m,i}$  и  $\alpha_{m,i}$  – постоянные, табулированные для всех атомных элементов ( $Z_m = 1, 2, \dots, 92$ ).

Потенциал, создаваемый молекулой в точке наблюдения  $\vec{r}$ , очевидно, является суммой потенциалов, создаваемых отдельными атомами с электронными плотностями (19) и равен:

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N \frac{Z_m}{d_m} \Phi_m(d_m), \quad (20)$$

где  $N$  – число атомов в мишени,  $d_m$  – расстояние ядра атома с номером  $m$  до точки наблюдения  $\vec{r}$ ,  $\Phi_m(\vec{r})$  – экранирующая функция для атома с номером  $m$ . В модели Дирака-Хартри-Фока-Слейтера экранирующая функция  $\Phi_m$  в формуле (20) согласно (19) равна:

$$\Phi_m(r) = \sum_{i=1}^3 A_{m,i} \exp(-\alpha_{m,i} r). \quad (21)$$

Пусть  $\vec{r}_p$  – координаты электронов структурного иона-снаряда относительно ядра снаряда, ( $p = 1, 2, \dots, N_p$ ),  $N_p$  – полное число электронов в ионе,  $\vec{R}_m = (X_m, \vec{b}_m)$  – координаты ядра снаряда относительно ядра  $m$ -го атома мишени,  $\vec{b}_m$  – прицельный параметр относительно  $m$ -го атома, тогда  $\vec{d}_m = |\vec{R}_m + \vec{r}_p|$ . Поэтому потенциал взаимодействия электронов снаряда с мишенью

$$U = -\sum_{p=1}^{N_p} \phi(r_p) = -\sum_{p=1}^{N_p} \frac{Z_m}{|\vec{R}_m + \vec{r}_p|} \Phi_m(|\vec{R}_m + \vec{r}_p|). \quad (22)$$

Далее, принимая во внимание (22), для эйкональной фазы в (18) получим

$$\chi = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} U dX = \sum_{m=1}^N \frac{2Z_m}{v} \sum_{p=1}^{N_p} \sum_{i=1}^3 A_{m,i} K_0(\alpha_{m,i} |\vec{b}_m + \vec{s}_p|), \quad (23)$$

где  $K_0(z)$  – функция Макдональда,  $\vec{s}_p$  – проекция  $\vec{r}_p$  на плоскость параметра удара. Причем формула (18) с эйкональной фазой (23) применима и в случае релятивистских столкновений и описывает сечение перехода электронов снаряда из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|k\rangle$  при произвольной судьбе электронов мишени с небольшой относительной погрешностью  $\sim 1/N_A$ ,  $N_A$  – полное число электронов в мишени, для многоэлектронных мишеней  $N_A \gg 1$ .

В данной главе нами рассмотрены структурные тяжелые ионы, видимый заряд  $Z_p$  которых много больше единицы (например, для иона железа  $Fe^{10+}$

видимый заряд  $Z_p = 10$ , заряд ядра  $Z = 26$ ), тогда характерный размер электронной шубы иона будет много меньше характерного размера нейтрального атома (входящего в состав мишени) и можно считать среднее поле атома однородным на размерах иона, что соответствует разложению эйкональной фазы (23) по малым  $s_p/b$ , в результате формула (18) при ортогональных  $|0\rangle$  и  $|k\rangle$  примет вид

$$\sigma = \int \left| \langle k | \exp \left( -i \sum_{m=1}^N q_m \sum_{p=1}^{N_p} r_p \right) | 0 \rangle \right|^2 d^2 b, \quad (24)$$

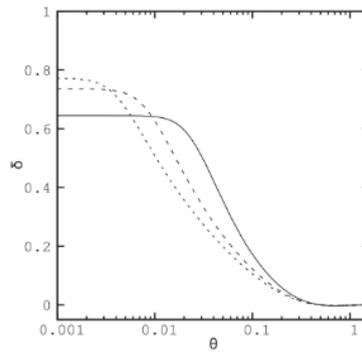
где

$$\vec{q}_m = \frac{2Z_m}{v} \sum_{i=1}^3 \alpha_{m,i} A_{m,i} K_1(\alpha_{m,i} b_m) \frac{\vec{b}_m}{b_m}, \quad (25)$$

очевидно, имеет смысл импульса, передаваемого каждому электрону снаряда при столкновении с  $m$ -ом атомом молекулы,  $K_1(z)$  – функция Макдональда.

Приведем условия применимости подхода. Наше рассмотрение справедливо для ионов больших зарядов  $Z_p \gg 1$  и нейтральных мишеней, образованных из многоэлектронных атомов, что требует выполнения неравенств  $Z_t \gg 1$ , где  $t = 1, 2, \dots, N$  – номера атомов, входящих в состав  $N$  – атомной мишени. Вычисление сечений основано на приближении эйконала, условия применимости которого: кинетическая энергия снаряда  $E$  предполагается настолько большой, что  $E \gg U$  и  $kL \gg 1$ , где  $U$  – энергия взаимодействия снаряда и мишени,  $k$  – импульс снаряда,  $L$  – радиус взаимодействия  $U$ . В нашем случае нейтральных мишеней, размерами много больших размеров снаряда, в качестве оценки величины  $L$  можно принять характерные размеры мишени. Эти условия, очевидно, выполнены в нашем случае для быстрых ионов, движущихся со скоростью  $v \gg 1$ . Кроме того, для столкновения сложных систем необходимо добавить условия: за время столкновения электроны снаряда не успевают заметно изменить своего положения относительно ядра снаряда и электроны мишени не успевают заметно изменить своего положения относительно покоящейся как целое мишени, другими словами, время столкновения  $\tau_c \sim L/v$  должно быть намного меньше  $\tau_e$  – характерных электронных периодов в системе покоя для каждой из сталкивающихся систем, или  $L/v \ll \tau_e$ . Выполнение этого условия позволяет, например, описывать движение снаряда при фиксированных положениях электронов мишени. В случае релятивистских скоростей  $v$  это условие следует переписать так:  $\sqrt{1 - v^2/c^2} L/v \ll \tau_e$ . Для каждого конкретного выбора сталкивающихся систем может быть проведена оценка характерных периодов времени  $\tau_e$ . Если же иметь целью рассмотрение столкновений многоэлектронных систем, у которых подавляющее число электронов находится на верхних оболочках с большими квантовыми числами, то характерное время обращения электронов на орбите  $\tau_e$  можно считать  $\sim 1$ .

На Рис. 1 приведена зависимости величины  $\delta(\theta) = (\sigma(\theta) - \sigma_{\perp})/\sigma_{\perp}$  (где  $\sigma_{\perp} = \sigma(\pi/2)$ ) от угла ориентации оси молекулы для столкновительных систем  $Fe^{25+} + N_2$  при энергиях столкновения 10, 100, и 1000 МэВ/нуклон. Как видно из данных рисунков, значение сечения обдирки очень чувствительно к изменению оси ориентации молекулы. Например, разница между параллельными и перпендикулярными ориентациями порядка 50% - 100%.



**Рис. 1.** Результаты расчетов относительной поправки к сечению однократной обдирки  $Fe^{25+}$ , возникающей за счет эффекта кратности столкновений. Сплошная линия – значения поправки  $\delta(\theta)$  для столкновения с энергией  $10 \text{ МэВ/нуклон}$  в зависимости от угла ориентации молекулы; длинный пунктир – поправка к сечению для столкновения с энергией  $100 \text{ МэВ/нуклон}$ , короткий пунктир – поправка к сечению для столкновения с энергией  $1000 \text{ МэВ/нуклон}$ , угол  $\theta$  в радианах.

В третьей главе диссертации исследуются неупругие электронные переходы, вызванные взаимодействием атомов с высокоэнергетическими фотонами. При этом рассматривается случай, когда фотоионизация сопровождается рождением электрон-позитронных пар. Подобные процессы представляют собой значительный интерес для проверки ряда базовых основ современной квантовой физики с участием атомных электронов.

В рамках данного исследования мы вычисляли  $\sigma$ , сечение образования ионов при взаимодействии высокоэнергетических фотонов с атомами, с одновременным рождением электрон-позитронных пар. Кроме того, нами проведены расчеты дифференциального сечения  $d\sigma/d\varepsilon$  для данного процесса, при котором образуются электроны с энергиями  $\varepsilon$ .

Мы рассмотрели высокоэнергетические асимптотики этих величин при условии, когда выполняется соотношение

$$\omega \gg m$$

где  $m$  масса покоя электрона (в системе единиц:  $\hbar = c = 1$ ). В наших расчетах мы брали только члены невысокого порядка разложения  $\omega^{-1}$ .

Один из простых механизмов образования ионов при взаимодействии атомов с внешними полями – это фотоионизация при которой в конечном состоянии имеется только ион и свободный электрон. Ряд авторов показали возможность, для достаточно высоких энергий фотонов, сопровождения данного процесса рождением электрон-позитронных пар. Были также проведены расчеты данного процесса для случая очень больших зарядов ядер атомов. Однако, использованные в этих работах подходы неприменимы для малых зарядов ядер, когда выполняется условие

$$(\alpha Z)^2 \ll 1, \tag{26}$$

и величина  $(\alpha Z)^2$  может быть рассмотрена как малый параметр. При этом диапазон энергий ионизованного электрона можно разделить на три части, для двух крайних из которых сечение ионизации может быть оценено асимптотически, а для промежуточной области возможно проведение сшивки двух асимптотик. Другими словами, мы находим асимптотику сечения для

случаев больших и малых энергий выхода электронов, а для промежуточных энергий сечение находим путем сшивки двух асимптотик.

Таким образом, мы рассмотрим процесс перехода атомного электрона из дискретного в непрерывный спектр в результате его отрыва от атома, вызванного ударом высокоэнергетического фотона.

Во всех процессах далее мы рассматриваем, отрыв электрона из атома в состояния континуума. Полезно рассмотреть одновременно похожий процесс на свободном электроном. Для сечения рождения пар в поле связанного электрона при взаимодействии высокоэнергетическим фотоном имеем

$$d\sigma = \frac{\pi}{\omega} |F_{BH}(\omega, p_e, p_p, p_2)|^2 \delta(\omega - E_e - E_p - E_2 + m - I_b) d\Gamma_b, \quad (27)$$

где  $F$  является амплитудой перехода,  $d\Gamma_b = d\Gamma \frac{d^3 p_2}{2E_2(2\pi)^3}$ , а  $I_b$  потенциалом ионизации. Здесь использованы следующие обозначения:  $p_{1,2}$  – четыре-импульс связанных электронов, а  $p_{10} = m$  его временная компонента,  $\vec{p}_1 = 0$  – векторная компонента. А четыре-импульсы  $e^-e^+$  пары, образующейся при столкновении с фотоном, обозначены через  $p_e$  и  $p_p$ , соответственно. Для каждого импульса  $p_i (i = e, p, 1, 2)$  полная энергия пишется как  $E_i = \sqrt{m^2 + \vec{p}_i^2}$ , при этом соответствующая кинетическая энергия равна  $\varepsilon_i = E_i - m$ . А  $k$  является четырех импульсом падающего фотона, для модуля его векторной компоненты имеем  $|\vec{k}| = \omega$ .

Рассмотрим далее предел больших энергий ионизованных электронов, определенных как

$$\omega_2 \gg I, \quad (28)$$

где  $I$  – потенциалом ионизации на  $K$  оболочке. Для данного случая дифференциальное сечение процесса может быть записано как

$$d\sigma = \frac{\pi}{\omega} |F_0(\omega, p_e, p_p, p_2)|^2 \delta(\omega - E_e - E_p - E_2 + m - I_b) \frac{1}{2E_e} \frac{d^3 p_p}{2E_p(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{2E_2(2\pi)^3} |\psi(Q)|^2 \frac{d^3 Q}{(2\pi)^3}. \quad (29)$$

Здесь предполагается, что связанный электрон описывается одночастичной волновой функцией  $\psi(r)$ , а амплитуда процесса рождения пары на связанном электроном может быть представлена как

$$F(p_i, Q) = \psi_F(Q) F_0(p_i), \quad (30)$$

где  $\psi_F(Q) = \int d^3 r \psi(r) \exp(-i(\vec{Q}\vec{r}))$ .

Для медленных электронов, т.е. если выполняется условие  $\varepsilon_2 \sim I$ , имеем

$$d\sigma = \frac{1}{Z^2} d\sigma_{BH} \sum_b |\Phi_b(p_2, q)|^2 \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3}, \quad (31)$$

где

$$\Phi_b(p_2, q) = \int d^3 r \psi_{\vec{p}_2}^*(r) \psi_b(r) \exp(-i(\vec{q}\vec{r})), \quad (32)$$

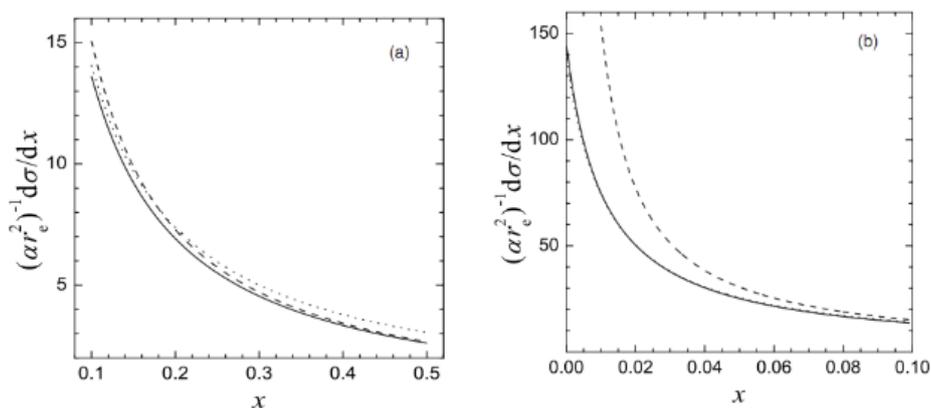
Здесь  $\psi_{\vec{p}_2}$  является волновой функцией вылетевшего электрона. Сшивка двух асимптотических выражений для сечения в промежуточной области

$$I \ll \varepsilon_2 \ll m,$$

дает нам следующее выражение для полного сечения:

$$\sigma = \frac{14}{9} \alpha r_e^2 \left( \ln \frac{m}{I} + C \right), \quad (33)$$

где  $C = c_s + c_f$ . В этом приближении  $C$  может иметь слабые зависимости от  $Z$ . На Рис. 2 приведены графики зависимости дифференциального сечения от величины  $x = \varepsilon/m$  для значений параметров  $Z = 20$ .



**Рис. 2.** Сшивка сечения ионизации для двух (медленных и быстрых электронов) интервалов энергий для характерного значения заряда атомного  $Z = 20$ . (а) Штрихованная линия соответствует функции  $T_f(x)$  и рассчитанной для быстрых электронов с  $x = \varepsilon_2/m$ . (б) Здесь показана нижняя часть спектра более подробно.

**Четвертая глава** диссертации посвящена к изучению релятивистского фотоэффекта для  $s$  состояний в центральном поле.

Мы рассматриваем только фотоионизацию одночастичных связанных состояний с орбитальными моментами  $l = 0$ . Найдены общие выражения для распределения импульсов отдачи и полных сечений.

Характеристики релятивистского фотоэффекта  $1s$ -состояний в кулоновском поле в низшем порядке константы связи  $g = \alpha Z$  ( $\alpha \sim 1/137$  – постоянная тонкой структуры,  $Z$  – заряд ядра) были найдены на заре квантовой механики.

Дальнейший прогресс был достигнут путем рассмотрения более высоких членов в разложении  $\alpha Z$  для кулоновского поля. Также были проведены численные расчеты для экранированного кулоновского поля. Однако выражения для угловых распределений фотоэлектронов или импульсов отдачи и полных сечений могут быть получены для широкого класса центральных потенциалов. Сечение фотоионизации связанного состояния с одним электроном можно записать как

$$d\sigma = pE|F|^2 \frac{d\Omega}{4\pi}$$

где  $\Omega$  телесный угол фотоэлектрона. Мы воспроизводим хорошо известный результат для кулоновского поля и находим сечения экранированного кулоновского потенциала и экспоненциального потенциала.

Мы наглядно показали, что энергетическая зависимость для потенциала с конечным скачком на действительной оси совпадает с зависимостью для кулоновского поля. Сечение явно зависит от квадратичного скачка потенциала, содержащего его в качестве фактора. Мы показали, что тот же подход может быть применен для анализа фотоионизации в полях, непрерывных на действительной оси, но имеющих скачки производных первого или более высокого порядка.

**Пятая глава** диссертации посвящена к изучению электронных переходов в многоуровневых атомах с вырожденными уровнями, вызванных воздействием внешнего, периодического по времени поля. В частности, рассматривается задача о полном или частичном заполнении заселенности в квантовых

состояниях атомного электрона в результате взаимодействия с внешним полем. Особую актуальность данная проблема приобрела в свете последних достижений в области квантовой информатики, где для записи одной единицы информации используется многоуровневые квантовые системы. При этом для успешного решения подобной задачи требуется иметь возможность манипулирования межуровневыми переходами, изменениями заселенностей квантовых уровней в случае вырожденных состояний. Кроме квантовой информатики данная задача также имеет актуальность для ряда задач квантовой химии, квантовой оптики и физики ультра-холодных атомов. В диссертации исследуется возможность контролирования заселенностей квантовых уровней с помощью периодического по времени внешнего поля.

В частности, рассматривается  $n$ -уровневый атом, взаимодействующий с внешним полем  $V_{ext}(\vec{r}, t)$ . Полный гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = H_0 + V_{ext}(\vec{r}, t). \quad (34)$$

Зная собственные функции  $\varphi_k$  и собственные значения  $E_k$  невозмущенной системы  $H_0$  волновую функцию такой системы можно представить следующим образом:

$$\Psi(t) = a_1(t)\varphi_1 + a_2(t)\varphi_2 + \dots + a_n(t)\varphi_n. \quad (35)$$

Тогда квантовая динамика системы описывается с помощью уравнения Шредингера, которое имеет вид

$$i\dot{\Psi} = (H_0 + V_{ext}(\vec{r}, t))\Psi, \quad (36)$$

с  $H_0\varphi_k = E_k\varphi_k$  и  $\int \varphi_j^* \varphi_k d\vec{r} = \delta_{jk}$ .

Отсюда получаем систему уравнений для амплитуды вероятности

$$i\dot{a}_j(t) = E_j a_j(t) + \sum_{k=1}^n V_{jk}(t) a_k(t), \quad (37)$$

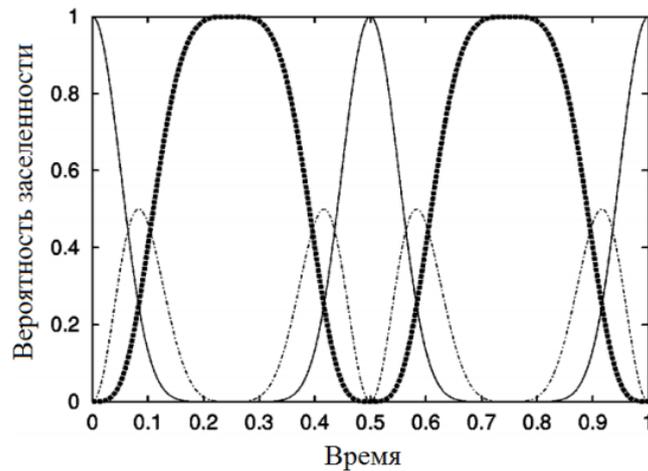
где  $V_{jk}(t) = \int \varphi_j^* V_{ext}(\vec{r}, t) \varphi_k d\vec{r}$ .

Если рассматриваемая система вырожденная, т.е. все энергетические уровни являются одинаковыми и лежат на нуле  $E_j = 0$ , то уравнения для амплитуды вероятности принимают следующий вид:

$$i\dot{a}_j(t) = \sum_{k=1}^n V_{jk}(t) a_k(t), \quad (38)$$

Выбирая начальные условия в виде  $a_1(0) = 1$  и  $a_j(0) = 0, j \neq 1$ , а также для простоты требуя, чтобы  $V_{jk}(t)$  имели одинаковую временную зависимость и были действительными  $V_{jk} = V_{kj}$ , мы можем решать систему уравнений для амплитуд вероятности в аналитическом виде. Для простоты рассмотрим трехуровневый атом, для которого решение систем дифференциальных уравнений дает нам следующие выражения для вероятностей перехода:

$$\begin{aligned} P_1(t) &= |a_1(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (x_2 y_3 - x_3 y_2)^2 + (x_3 y_1 - x_1 y_3)^2 + (x_3 y_1 - x_1 y_3)^2 + 2(x_2 y_3 - x_3 y_2)(x_3 y_1 - x_1 y_3) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right] \\ &\quad + 2(x_2 y_3 - x_3 y_2)(x_1 y_2 - x_2 y_1) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(x_3 y_1 - x_1 y_3)(x_1 y_2 - x_2 y_1) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \Big], \\ P_2(t) &= |a_2(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (y_2 - y_3)^2 + (y_3 - y_1)^2 + (y_1 - y_2)^2 + 2(y_2 - y_3)(y_3 - y_1) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right] \\ &\quad + 2(y_2 - y_3)(y_1 - y_2) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(y_3 - y_1)(y_1 - y_2) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \Big], \\ P_3(t) &= |a_3(t)|^2 \\ &= \frac{1}{\Delta^2} \left[ (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_1)^2 + (x_1 - x_2)^2 + 2(x_2 - x_3)(x_3 - x_1) \cos((z_1 - z_2)A(t)) \right] \\ &\quad + 2(x_2 - x_3)(x_1 - x_2) \cos((z_1 - z_3)A(t)) + 2(x_3 - x_1)(x_1 - x_2) \cos((z_2 - z_3)A(t)) \Big], \\ \Delta &= x_1 y_2 + x_2 y_3 + x_3 y_1 - x_3 y_1 - x_1 y_3 + x_2 y_1. \end{aligned} \quad (39)$$



**Рис. 3.** Вероятность заполнения как функция времени для трехуровневого атома лития (линия соответствует переходу начального состояния —  $4p_0$ , длинный пунктир — промежуточное состояние —  $4d_0$ , короткий пунктир — конечное состояние —  $4f_0$ ).

Используя данный подход можно решать задачи о нахождении вероятностей переходов между уровнями для любой многоуровневой системы. На Рис. 3 приведены графики зависимости от времени вероятности заселения от начального состояния в конечные, в трехуровневом атоме лития.

Как показывает данный рисунок, вероятности заселения начального ( $4p_0$ ) состояния не превышает 90%, тогда как для конечного состояния данная вероятность доходить до 100%. Отметим также, что время заселения (перехода) того или иного квантового уровня может быть проконтролировано путем изменения параметров (частоты и амплитуды) внешнего поля.

**В шестой главе** диссертации исследованы процессы, происходящие с углеродными наноструктурами (фуллерен, графен, нанотрубка) при их взаимодействии с быстрыми структурными ионами или под воздействием внешнего поля. Исследован процесс фотоионизации несферического фуллерена с высокоэнергетическим фотонами, где в качестве мишеней — фуллерены  $C_{70}$  и  $C_{80}$ , имеющие эллипсоидальную форму, в отличие от  $C_{60}$ , который имеет сферическую форму. Получено аналитическое выражение для сечения процесса фотоионизации с высокоэнергетическим фотоном. Также в диссертации исследованы энергетические потери быстрых структурных ионов при их столкновении с углеродной нанотрубкой. В качестве падающих ионов-снарядов мы выбираем быстрые структурные высокозарядные ионы, а в качестве мишеней — углеродная нанотрубка  $C_{640}$ . В такой системе электронная плотность мало отличается от электронной плотности отдельных атомов, поскольку при их объединении в подобную структуру наибольшее изменение претерпевает электронная плотность внешних — валентных электронов, число которых не велико по сравнению с общим числом атомных электронов. Электронная плотность же подавляющего количества остальных — остовных электронов искажается слабо. Поэтому влиянием "совокупности" электронной структуры мишени на величину сечений можно пренебречь и рассчитывать сечения для

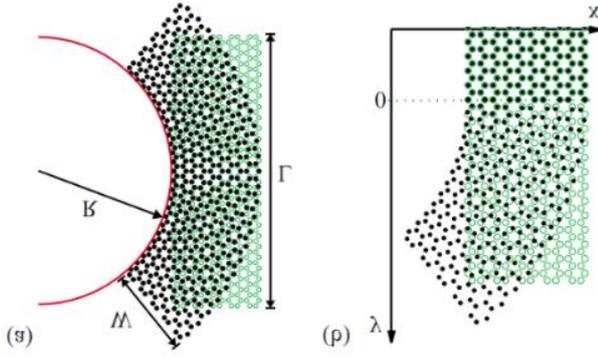
мишеней в виде многоатомных молекул, формально составленных из изолированных атомов, без искажения их электронных оболочек.

Также исследован транспорт носителей заряда (электронов и дырок) в двумерном кристалле из атомов углерода, так называемом графене при наличии внешнего поля. При этом отдельно рассмотрен случай псевдомагнитное поле рассматривается как вызывается в результате изгиба графенового листа. Графен является двумерным материалом, представляющий собой гексагональную кристаллическую решетку с толщиной в один атом углерода. Данный материал обладает рядом необычных свойств, благодаря которым его рассматривают как наиболее перспективный материал нанoeлектроники будущего. В частности, его прочность выше, чем у алмаза, проводимость выше, чем у меди, он является оптически прозрачным, а графеновые наноленты могут проявить как металлические, так и полупроводниковые свойства. Дисперсионная зависимость для носителей энергии для данного материала имеет линейную форму. Зонная структура графена также необычная и имеет вид дираковских световых конусов, а в бесконечном графеновом листе отсутствуют запрещенные зоны. Однако, если графеновый лист разрезать на узкие наноленты с зигзагообразными краями, то они станут полупроводниками. А если края нанолент имеют так называемую кресло-образную форму, то наноленты будут обладать металлическими электронными свойствами, то есть запрещенная зона отсутствует. Динамика квазичастиц в графене в низкоэнергетическом диапазоне кинетических энергий описывается безмассовым ультрарелятивистским уравнением Дирака. При этом скорость квазичастиц примерно в 300 раз меньше скорости света. Помимо вышеперечисленного, графен обладает рядом других необычных свойств, что делает его одним из самых перспективных материалов в плане ресурсосбережения. Поэтому очень большое фундаментальное и прикладное значение имеет исследование свойств переноса (транспорта) носителей заряда в данном материале.

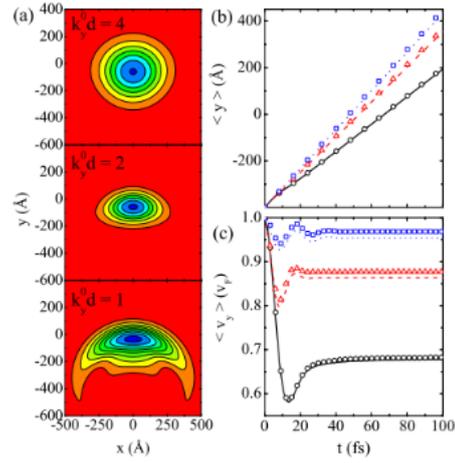
Также, в данной части мы изучаем транспорт электронов в графене при наличии сильного псевдомагнитного поля, вызванного изгибом графенового листа. Как известно, в 2010 году в ряде экспериментов было обнаружено, что при изгибе графенового листа появляется очень сильное псевдомагнитное поле. При этом величина и направление поля зависят от радиуса и способа изгиба листа. Нами исследованы перенос электронов под воздействием такого поля, туннелирование электронов через потенциальный барьер, а также возможность движение электрона с дрожанием (*Zitterbewegung*). При этом начальное состояние волновой функции электронов выбрано в виде гауссовских волновых пакетов и исследована эволюция данных пакетов.

Стартовой точкой в наших исследованиях является двумерное нестационарное уравнения Дирака.

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H_0 \psi, \quad \text{где} \quad H_0 = i\alpha_x p_x + i\alpha_y p_y = \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (40)$$



**Рис. 4.** Способ изгиба графеновой наноленты шириной  $W$  и длиной  $L$ , с радиусом кривизны  $R$ .



**Рис. 5.** Контуры квадрата модуля волновой функции в момент времени  $t = 40$  фс, для трех различных значений параметра  $k_y^0 d$ .

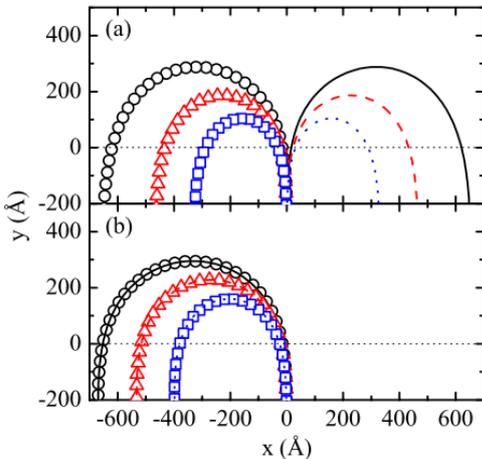
Решение, которого для малых промежутков времени имеет вид

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) \psi(\vec{r}, t), \quad (41)$$

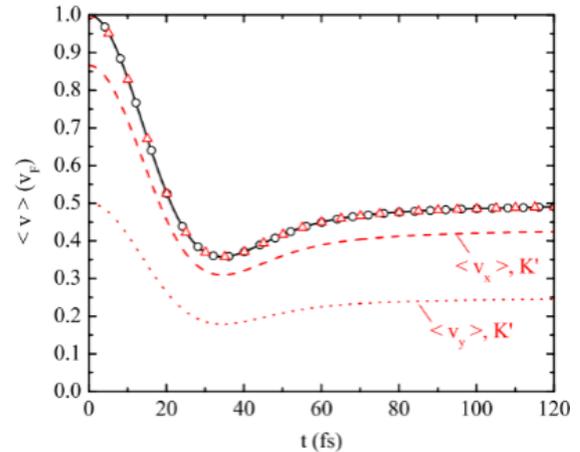
где  $H$  - не зависящий от времени безмассовый гамильтониан Дирака:

$$H_D = [v_F \vec{\sigma}(\vec{p} + e\vec{A}) + V(x, y)] e^{-i\varphi}. \quad (42)$$

Решая уравнения (42) для различных (скаляр, Лоренц-скаляр и вектор) потенциалов для начального условия, заданного в виде гауссовского волнового пакета, мы находим волновую функцию электрона для произвольного момента времени и значений координат. Во всех случаях мы рассматриваем движение электрона в изогнутом графене, с формой изгиба, представленной на Рис. 4. В результате вычислений мы получаем, плотность вероятности, траекторию пакета, скорость и вероятность туннелирования пакета через потенциальные барьеры. На Рис. 5 приведена эволюция волновой функции через 40 фс после начала движения для различных значений параметра  $k_y^0 d$ . Рис. 6 представляет собой траекторию волнового пакета на плоскости  $xu$  для начального значения импульса  $k_y^0 = 0.02 \text{ \AA}^{-1}$  и различных радиусов изгиба  $R = 1 \text{ \mu m}, 0.8 \text{ \mu m},$  и  $0.6 \text{ \mu m}$ . При этом значение внешнего магнитного поля равно нулю и имеется только псевдомагнитное поле, вызванное изгибом графена.



**Рис. 6.** Траектории волнового пакета на  $xu$  – плоскости.



**Рис. 7.** Изменения средней скорости пакета для случая плоского графена.

Рис. 7 представляет собой среднее значение скорости пакета для начальных значений компонент импульсов  $k_x^0 = k_y^0 = 0$  и различных значений псевдоспина  $[1,1]^T$  (сплошная линия) и  $[1,i]^T$  (кружочки). Как видно из данного рисунка, для случая графена во внешнем магнитном поле, траектории для различных псевдоспинов  $K$  и  $K'$  имеют противоположные направленности, что является следствием того факта, что импульсы для двух траектории имеют противоположные направления. Такое же поведение траекторий можно наблюдать и для изогнутого графена. А именно, если для одного значения спина, соответствующего дираковской точке  $K$  траектория прямая линия, то для спина, соответствующего  $K'$ , траектория имеет форму полукруга. Очевидно, что данные свойства позволяют создать спин-фильтры путем изгиба графенового листа.

Кроме того, исследовано рассеяния волнового пакета в графене с различными дефектами при наличии случайно распределенных круговых потенциалов, а также отдельно в случае легирования атомами азота (см. Рис. 11), где эволюция волнового пакета во времени выполняется с помощью простой вычислительной техники, основанной на методе оператора расщепления. Мы показали, что, несмотря на туннельный эффект Клейна, наличие этих потенциальных ступенек значительно снижает вероятность перехода, особенно для более высокой концентрации барьеров и высоких значения потенциала.

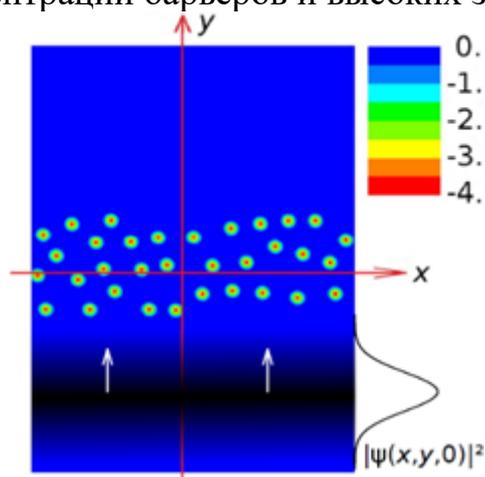


Рис. 8. Эскиз графеновой ленты, иллюстрирующий геометрию задачи.

В рамках континуум модели легирующие примеси моделируются областями притягивающего потенциала вокруг случайно локализованных точек в плоскости графена, а уравнение движения Дирака-Вейля для волнового пакета было численно решено, чтобы исследовать, как набор примесей влияет на транспортные свойства легированного образца графена. Исследована электропроводность графена, содержащего случайно замещенные атомы азота, при различных концентрациях легирования. Полученные результаты показывают, что проводимость несколько снижается с увеличением концентрации примесей азота. Приближение континуум модели, используемой в этой работе, игнорирует какой-либо механизм междолинного рассеяния, поскольку два конуса Дирака графена развязаны. Таким образом, данные расчеты позволяют оценить единственный вклад внутридолинного упругого рассеяния на примесях.

## Заключение

Приведем основные результаты, полученные в диссертации:

1. Разработан новый эффективный подход к изучению процесса обдирки быстрых многоэлектронных ионов при их столкновениях с атомными системами, позволяющий описать подобные процессы вне рамок теории возмущений. На основе данного подхода проведено систематическое изучение процесса обдирки многоэлектронных ионов при их высокоэнергетических столкновениях с молекулами, наночастицами и фотонами.
2. На основе приближения внезапных возмущений получены оценки для сечения многократной обдирки быстрых ионов, таких как  $Fe^{25+}$ ,  $Fe^{24+}$  и  $Fe^{23+}$  при их столкновениях с мишенями  $N_2$  при различных значениях энергии столкновения, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.
3. Изучен процесс обдирки быстрых структурных ионов при их столкновении с молекулярными мишенями. Выявлена роль кратности столкновений и ориентации оси молекулы в данном процессе. Установлено, что данные эффекты могут внести существенный вклад в сечение обдирки.
4. Изучены энергетические потери быстрых тяжелых ионов при их столкновениях с наночастицами. Получены оценки для таких потерь, которые зависят от кратности столкновений и выстроенности молекул наночастицы вдоль движения иона.
5. Выведена аналитическая формула для сечения образования ионов при столкновениях с высокоэнергетическими фотонами, сопровождающихся рождением электрон-позитронных пар.
6. Выведена аналитическая формула для процесса релятивистского фотоэффекта для  $s$  состояний в системах, связанных достаточно слабыми центральными полями для больших энергий фотонов, соответствующих релятивистским фотоэлектронам.
7. Получено аналитическое выражение для заселенности электрона в трех- и многоуровневых системах, взаимодействующих с внешним полем. Предложен способ контроля процесса заполнения заселенностей квантовых уровней многоуровневых атомов.
8. Выведена аналитическая формула для сечения процесса фотоионизации несферического фуллерена с высокоэнергетическими фотонами.
9. Проведено детальное исследование транспорта носителей заряда в графене, взаимодействующего с постоянным внешним магнитным полем.
10. Проведено детальное исследование транспорта носителей заряда в согнутом графене, где за счет изгиба появляется псевдомагнитное поле.
11. Предложен способ вычисления вероятности прохождения волнового пакета через область графена, имеющего распределенные случайным образом круговые ступенчатые потенциалы.
12. Предложен способ вычисления зависимости вероятности туннелирования и коэффициента прохождения электронов от концентрации допированных случайным образом атомов азота в графене.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 ON AWARD OF  
SCIENTIFIC DEGREES AT THE INSTITUTE OF ION-PLASMA AND  
LASER TECHNOLOGIES**

---

**INSTITUTE OF ION-PLASMA AND LASER TECHNOLOGIES**

**RAKHIMOV KHAMDAM YULDASHEVICH**

**ELECTRON PROCESSES AT ION-ATOMIC COLLISIONS AND THEIR  
APPLICATION IN THE PHYSICS OF CARBON NANOSTRUCTURES**

**01.04.04 – Physical electronics**

**ABSTRACT OF DOCTORAL (DSc) THESIS IN PHYSICS AND MATHEMATICS**

**TASHKENT – 2022**

**The subject of doctoral dissertation is registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number No. B2021.2DSc/FM172**

Dissertation has been prepared at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies.

The abstract of the dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) has been posted on the website of the Scientific Council ([www.iplt.uz](http://www.iplt.uz)) and on Information-educational portal «ZiyoNet» ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)).

**Scientific consultants:** **Matveev Victor Ivanovich**  
Doctors of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Official opponents:** **Oksengendler Boris Leonidovich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Umirzakov Boltahuja Ermatovich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Umarov Farid Fahrievich**  
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor

**Leading organization:** **Ferghana Polytechnic Institute**

The defense will take place on « 9 » march 2022 at 14<sup>30</sup> at the meeting of the Scientific Council number DSc.02/30.12.2019.FM.65.01 at the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-42-54, e-mail: [info@iplt.uz](mailto:info@iplt.uz)).

The doctoral dissertation is can be looked through in the Information-Resource Centre of Ion-Plasma and Laser Technologies (is registered № 3) (Address: 100125, Uzbekistan. Tashkent city, 33, Durmon yuli str., Phone: (99871) 262-32-54).

The abstract of the dissertation is sent out on « 23 » february 2022.

(Mailing report № 3 on « 23 » february 2022).



**Kh.B. Ashurov**  
Chairman of the Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees  
DSc Thech, professor

**I.D. Yadgarov**  
Scientific Secretary of the Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees  
DSc in physics and mathematics

**B.E. Umirzakov**  
Chairman of scientific seminar under scientific council  
on award of scientific degrees,  
DSc in physics and mathematics, professor

## INTRODUCTION (abstract of DSc thesis)

**The aim of the study** is to study inelastic electronic transitions in the process of stripping structural ions collisions with molecules, carbon nanoparticles and high-energy photons in the framework of nonperturbative approaches, as well as to study electronic transitions in multilevel atoms interacting with external fields.

**The objects of the research** are fast heavy ions collisions with molecules, carbon nanoparticles; high-energy photons interacting with atoms; multilevel atoms in a periodic electric field; carbon nanostructures (nonspherical fullerene, graphene and nanotube), collisions with fast highly charged ions.

**The subject of the study** is the highly charged ions, molecules and nanostructures (nonspherical fullerene, graphene, nanotube), interaction of high-energy photons with atoms or molecules, electronic transitions, scattering of electrons in graphene under the external field.

**Methods of the research.** Sudden perturbation approximation; Glauber approximation; analytical and numerical solutions of the Schrödinger and Dirac equations.

**Scientific novelty of the research work** consists of the following results:

- a systematic study of the processes of stripping of fast structural ions during their collisions with atomic systems was carried out, a nonperturbative method was developed that makes it possible to study the electronic losses of fast structural ions during their collisions with molecular targets;

- studies have been carried out on the stripping of fast structural ions on molecular targets. It has been established that the cross section of the process of stripping a projectile ion and its absolute value change by 50%–100% depending on the orientation of the molecular axis relative to the direction of ion motion;

- for the first time, the role of the effect of the multiplicity of collisions and the orientation of the molecular axis during stripping of a projectile ion was determined. It is shown that the effect of the multiplicity of collisions leads to a significant difference between the cross sections of the projectile stripping for parallel and perpendicular to the projectile velocity orientation of the target, while for a random orientation of the axis of the target molecules, this effect is insignificant;

- for the first time, the cross sections for the stripping of an atom or structural ions during their collisions with high-energy photons, accompanied by the simultaneous production of electron-positron pairs, were determined; It is established that the asymptotic value does not depend on the energy of the photon;

- for the first time a method was proposed for studying the relativistic photoeffect of s states in a central field corresponding to relativistic photoelectrons. It is shown that the energy dependence of the photoionization cross section can be obtained without solving the wave equation;

- for the first time, a method was proposed for population control of quantum levels of atoms by external monochromatic field;

- for the first time, analytical expressions were obtained for estimating the differential cross sections for the photoionization process of (non-spherical) fullerene in the form of an ellipsoid;

- estimates are obtained for the energy losses of fast multiply charged ions in their collision with a carbon nanotube;

- it is shown for the first time that, despite the Klein tunneling effect, the presence of these potential steps significantly reduces the probability of an electron passing through the barrier, especially for a higher concentration of scatterers and higher potential heights;

- the trembling motion of an electron (zitterbewegung) in a pseudomagnetic field, which appears due to the bending of graphene, was revealed;

- it was determined for the first time that the residence time of an electron inside the scattering region increases significantly due to the presence of defects that appear due to a constant external field or doping with nitrogen atoms in graphene.

**Scientific and practical value of the research results.** The results of the work are mainly of fundamental importance. In practical terms, the results can be applied to create stable heavy ion beams in modern accelerators such as the Large Hadron Collider at CERN, the Relativistic Heavy Ion Collider at Brookhaven, and the FAIR accelerator complex in Darmstadt.

**Application of researches results** for beams of heavy highly charged ions have such practical applications as ion treatment, implantation of metals and in solid-state structures, the creation of nanopores on thin films, the creation of nanoparticles and clusters with desired properties, sizes, and also in the early diagnosis of cancer.

**Approbation of research results.** Results of the research work have been discussed at twenty (20) international and local scientific conferences.

**Publication of the results.** On the topic of the dissertation, 42 publications have been published, including 2 articles in collective monography of authors, 14 articles in international and local scientific journals, 2 book chapters, 2 articles in the proceedings of International Workshops and in bulletins of university, 21 theses of reports of scientific conferences and workshops.

**Structure and scope of the thesis.** The thesis consists of introduction, six chapters, conclusion and references. It is presented on 217 pages of typewritten text, where the main part of the thesis is 186 pages, including 41 figures, 3 tables, and 340 references.

**ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I бўлим (I часть, part I)**

1. McGuire J.H., Godunov A., Shakov Kh., Rakhimov Kh., Chalastaras A. Quantum time ordering and degeneracy. I Time ordering in quantum mechanics. // **Developments in Quantum Physics** (Eds. F. Columbus and V. Krasnoholovets, Nova Science Pub., Inc., – New York, USA 2004). P. 111-122.
2. Rakhimov Kh.Yu., McGuire J.H., and Shakov Kh.Kh. Quantum time ordering and degeneracy. II Coherent Population Transfer between degenerate states. // **Developments in Quantum Physics** (Eds. F. Columbus and V. Krasnoholovets, Nova Science Pub., Inc., – Hauppauge, New York, USA 2004). P. 123-142.
3. McGuire J.H., Shakov Kh.Kh., and Rakhimov Kh.Yu. Population control in nearly degenerate n-level atoms. // **From the Atomic to the Nano-Scale** (Eds. C. Whelan and J.H. McGuire), Old Dominion University Press – Norfolk, 2003. P. 159-167.
4. McGuire J.H., Godunov A.L., Shakov Kh.Kh., and Rakhimov Kh.Yu. Quantum Correlation in Time. // **From the Atomic to the Nano-Scale** (Eds. C.T. Whelan and J.H. McGuire), Old Dominion University Press – Norfolk, 2003. P. 62-79.
5. Rakhimov Kh.Yu., Chaves A., Farias G.A. Wave packet propagation through randomly distributed scattering centers in graphene. // Book chapter in **Low-Dimensional Functional Material** (Eds. Egger, *et al.*, Springer Verlag, 2013).
6. Márk G.I., Vancsó P., Biró L., Kvashnin D.G., Chernozatonskii L.A., Chaves A., Rakhimov Kh.Yu., and Lambin Ph. Wave packet dynamical calculations for carbon nanostructures, // Book chapter in **Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics** (Eds. A. Maffucci and S. Maksimenko, Springer, 2016).
7. Rakhimov Kh.Yu., Pazderskiy V.A., and Matveev V.I. Inelastic processes in collisions of fast highly-charged ions with hydrogen molecules. // **Узбекский физический журнал**, - Ташкент 2001. Vol. 3. Nos. 1-2. P. 132-137.
8. Матвеев В.И., Паздерский В.А., Рахимов Х.Ю. Неупругие процессы при столкновении быстрых многозарядных ионов с молекулой водорода. // **Журнал Технической Физики**, - Россия 2001. Том. 71. Вып. 5. С. 9-14. (№1.Web of Science; IF= 1.003)
9. McGuire J.H., Shakov Kh. Rakhimov Kh.Yu. Analytic description of population transfer in a degenerate n-level atom. // **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics** – United Kingdom 2003. Vol. 36. P. 3145-3154. (№1. Web of Science; IF= 1.703)
10. Rakhimov Kh.Yu., McGuire J.H., and Shakov Kh.Kh. Complete population transfer in a degenerate three-state atom. // **Physical Review A**, – USA 2004. Vol. 69. P. 023405-1-9. (№1.Web of Science; IF= 2.777)
11. Drukarev E.G., Mikhailov A.I., Mikhailov I.A., Rakhimov Kh.Yu., and Scheid W. Formation of ions by high-energy photons. // **Physical Review A**, – USA 2007. Vol. 75 (3). P. 032717-1-9. (№1. Web of Science; IF=2.777)

12. Рахимов Х.Ю. Конечно-размерные эффекты ядер при столкновении релятивистских тяжелых ионов. // **Узбекский физический журнал**, – 2008. Том.10 (4&5). Стр. 255-259.
13. Chaves A., Covaci L., Rakhimov Kh.Yu., Farias G.A., and Peeters F.M. Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene. // **Physical Review B**, – USA 2010. Vol. 82. P. 205430-1-11. (№1. Web of Science; IF= 3.575)
14. Матвеев В.И., Макаров Д.Н., и Рахимов Х.Ю. Процессы обдирки быстрых гелиеподобных ионов при кратных столкновениях с двухатомными молекулами. // **Письма в Журнал Технической Физики**, – Россия 2011, Том 37, вып. 12, стр. 73-79. (№1. Web of Science; IF= 0.926)
15. Rakhimov Kh.Yu., Chaves A., Farias G.A., and Peeters F.M. Wave packet scattering of Dirac and Schrödinger particles on potential and magnetic barriers. // **Journal of Physics: Condensed Matter** – UK 2011, Vol. 23, No. 27, P. 275801 (№1. Web of Science; IF= 2.707)
16. Matveev V.I., Makarov D.N., and Rakhimov Kh.Yu. Electron loss of fast projectiles in the collisions with molecules. // **Physical Review A**, – USA, 2011. Vol. 84. P. 012704-1-6. (№1. Web of Science; IF= 2.777)
17. Rakhimov Kh.Yu., Chaves A., and Farias G.A. Particle transport through randomly distributed potential barriers in graphene. // **Uzbek Journal of Physics** – 2015, Vol. 17 (1&2). P. 71-74.
18. Rakhimov Kh.Yu., Chaves A., and Lambin Ph. Scattering of Dirac Electrons by Randomly Distributed Nitrogen Substitutional Impurities in Graphene. // **Applied Sciences** – Switzerland 2016, Vol. 6, P. 256. (№1. Web of Science; IF= 2.474)
19. Рахимов Х.Ю., Узоков А.А., Рихсиева М., и Матвеев В.И. Энергетические потери высокоэнергетических тяжелых ионов при их столкновении с углеродной нанотрубкой. // **Вестник НУУз** – 2018, № 2/1. Стр. 75-82.
20. Drukarev E.G., Mikhailov A.I., Rakhimov Kh.Yu., and Yusupov H.T. Relativistic photoeffect for *s* states in a central field. // **The European Physical Journal D** – Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics. – Europe 2020, Vol.74. P. 166-1-9 (№1. Web of Science; IF= 1.393)

### II бўлим (II часть, part II)

21. Rakhimov Kh., Chaves A., Uzoqov A. Wave packet propagation in graphene with a random potential landscape. // Proceedings of Advanced Research Workshop on Low-Dimensional Functional Materials. Tashkent, October 15-19, 2012, P. 45-52.
22. Rakhimov Kh.Yu., Pazdersky V.A., and Matveev V.I. Collision of Fast Highly Charged Ion with the Hydrogen Molecule. // 11<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Highly Charged Ions. Sep. 1-7, 2002. Caen, France. B2-3-6. P. 126.
23. Shakov Kh.Kh., McGuire J.H., and Rakhimov Kh.Yu. Population control in nearly degenerate 2- and 3-level atoms. // The 34<sup>th</sup> meeting of the Division of Atomic, Molecular and Optical Physics. May 20-24, 2003, Boulder, Colorado. Bulletin of the American Physics Society – USA 2003, Vol. 48, No.3, P. 33.
24. McGuire J.H., Shakov Kh.Kh., and Rakhimov Kh.Yu. Population control in nearly degenerate n-level atom. // The 34<sup>th</sup> meeting of the Division of Atomic, Molecular

- and Optical Physics. May 20-24, 2003. Boulder, Colorado. Bulletin of the American Physics Society – USA 2003, Vol. 48, No.3 P. 137.
25. Shakov Kh., Rakhimov Kh., Chalastaras A., McGuire J.H. Quantum control in an N-state degenerate system. // Joint Meeting of the American Physical Society Division of Atomic, Molecular and Optical Physics & Canadian Association of Physicists Division of Atomic and Molecular Physics. May 25-29, 2004, Arizona.
  26. Uskov D., Shakov Kh., Rakhimov Kh., Chalastaras A., McGuire J.H. Quantum control in a 4-state degenerate system. // Joint Meeting of the American Physical Society Division of Atomic, Molecular and Optical Physics & Canadian Association of Physicists Division of Atomic and Molecular Physics. May 25-29, 2004.
  27. Rakhimov Kh.Yu. Projectile finite-size effects in electron positron pair production at relativistic heavy ion collisions. // 12<sup>th</sup> International Conference on the Physics of Highly Charged Ions. September 6-11, 2004. Vilnius. B1-42.
  28. Rakhimov Kh.Yu. Nuclear finite-size effects in electron positron pair creation induced by relativistic heavy ion collisions. // XVth National Conference on Atomic & Molecular Physics. December 20-23, 2004. Navrangpura, India.
  29. Rakhimov Kh.Yu. Population control in the two-state relativistic hydrogen atom. // 357<sup>th</sup> Wilhelm und Heraeus Seminar: The Photon: Generation, Detection, and Application. November 6-9, 2005. Bad Honnef, Germany.
  30. Rakhimov Kh.Yu. Dynamic population control in the two state relativistic systems. // 8<sup>th</sup> European Conference on Atomic and Molecular Physics. A European conference organized by the Atomic and Molecular Physics Division of the European Physical Society. July 6-10, 2004 Rennes, France. 4-88. B-4-35.
  31. Rakhimov Kh.Yu. Electron positron pair production in the relativistic collision of heavy nuclei at finite temperature. // 5<sup>th</sup> Conference on Nuclear and Particle Physics. November 19-23, 2005, Cairo, Egypt.
  32. Rakhimov Kh.Yu. Population Control in the Two State Relativistic Hydrogen-like Atom. // 377<sup>th</sup> Wilhelm und Heraeus Seminar: Strong Coupling of Light and Matter, September 13–16, 2006, Bad Honnef, Germany.
  33. Chaves A., Covaci L., Rakhimov Kh.Yu., Farias G.A., and Peeters F.M. Time evolution of wave packets in strained graphene nanoribbons. // in Proceedings of the International Conference on Superlattices, Nanostructures, and Nanodevices. July 18-23, 2010, Beijing, China.
  34. Rakhimov Kh.Yu., Wave packet scattering in graphene with random potential. // Advanced Research Workshop on Low Dimensional Systems, Tashkent, November 6-7, 2012.
  35. Rakhimov Kh.Yu., Chaves A., and Lambin Ph. Wave packet scattering through randomly distributed nitrogen dopant area in graphene. // Advanced Research Workshop on Fundamental and Applied Electromagnetics. May 25-27, 2015, Minsk, Belarus. P. 94-95.
  36. Rakhimov Kh.Yu., and Uzoqov A.A. Wave packet transmission through randomly distributed Nitrogen dopants in graphene. // Назарий ва ядро физиканинг долзарб муаммолари илмий конференциясининг тезислар тўплами. Ташкент, 23-24 октябрь 2015, Стр. 84-85.

37. Lambin Ph. and Rakhimov Kh.Yu. Doping graphene with substitutional nitrogen: electronic properties, STM images and mobility. // Nanosciences and nanotechnology 2016, Frascati, Italy, 26-29 september 2016
38. Lambin Ph. and Rakhimov Kh.Yu. Electronic properties of graphene doped with nitrogen atoms. // FAEMCAR symposium, Budapest, October 11, 2016.
39. Rakhimov Kh., Yusupov H., Uzokov A., Abdullaev Sh. Wave packet scattering in graphene. // Труды республиканской научной конференции «Инновации в науке и образовании». Ташкент, 20 августа 2020 года, Стр. 31-32.
40. Рахимов Х.Ю., Мирзаев С.З., Друкарев Е.Г., Михайлов А.И., Юсупов Х.Т. Релятивистский фотоэффект для одноэлектронного атома. // “Фан ва таълимни ривожлантиришда ёшларнинг ўрни мавзусидаги” Республика илмий ва илмий-техник анжумани. Тошкент, 30 октябрь 2020 йил, 60-бет.
41. Рахимов Х.Ю., Узоков А.А., Юсупов Х.Т., Мирзаев С.З. Фотоионизация эллипсоидального фуллерена. // В международной научной конференции «наука и инновации», Ташкент, 25 ноября 2021 г.
42. Юсупов Х.Т., Рахимов Х.Ю., Узоков А.А., Друкарев Е.Г., и Михайлов А.И. Релятивистский фотоэффект для атома в основном состоянии. // В международной научной конференции «наука и инновации», Ташкент, 25 ноября 2021 г.

Босишга рухсат этилди: 14.02.2022 йил.  
Бичими 60x84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>, «Times New Roman»  
гарнитурда рақамли босма усулида босилди.  
Шартли босма табағи: 3.8. Адади 100. Буюртма № 34.  
Тел (99) 832 99 79; (97) 815 44 54.  
Гувоҳнома reestr № 10-3279  
“IMPRESS MEDIA” МЧЖ босмаҳонасида чоп этилган.  
100031, Тошкент ш., Яккасарой тумани, Қушбеги кўчаси, 6-уй