

01;02

Сечения процессов перезарядки и возбуждения при столкновении альфа-частиц с примесными Ве-подобными ионами кислорода в плазме

© В.К. Никулин, Н.А. Гущина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: nikulin@astro.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 15 февраля 2006 г.)

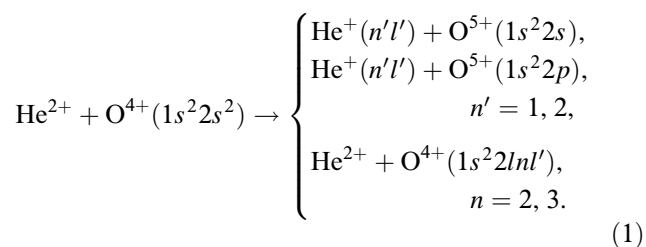
Впервые получены данные о сечениях электронной перезарядки и возбуждения при столкновении альфа-частиц в диапазоне энергий столкновений E_c 20 keV–2 MeV с примесными ионами $O^{4+}(1s^2 2s^2)$ в горячей плазме. Расчет сечений выполнен в рамках метода уравнений сильной связи на базе 13 синглетных четырехэлектронных квазимолекулярных состояний. Вычислены парциальные сечения перезарядки в $1s$ -, $2s$ - и $2p$ -состояния иона He^+ и электронного возбуждения иона $O^{4+}(1s^2 2s^2) \rightarrow O^{4+}(1s^2 2lnl')$ ($n = 2, 3$). Максимальное значение полного сечения перезарядки равно $\sim 2.2 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при $E_c \sim 0.7 \text{ MeV}$. Полное сечение возбуждения в зависимости от энергии столкновения имеет максимум одноэлектронного возбуждения при $E_c \sim 80 \text{ keV}$ ($\sim 7.7 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$) и двухэлектронного возбуждения при $E_c \sim 0.7 \text{ MeV}$ ($\sim 6.5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$).

PACS: 52.20.Hv

Введение

Данные о сечениях процессов перезарядки при столкновениях альфа-частиц с примесями необходимы для спектроскопической диагностики высокотемпературной плазмы и моделирования поведения альфа-частиц в плазме.

В настоящей работе исследуются процессы перезарядки, перезарядки с возбуждением мишени и электронного возбуждения мишени при столкновении альфа-частиц с примесными Ве-подобными ионами кислорода в горячей плазме:



Теоретически реакции (1) до настоящего времени не изучались, прямое же экспериментальное исследование столкновений с сильным кулоновским отталкиванием между ионами встречает большие затруднения.

Расчет сечений выполнен в квазимолекулярном приближении в рамках метода уравнений сильной связи. На первый взгляд может показаться, что столкновительную систему $He^{2+} + O^{4+}(1s^2 2s^2)$ можно рассматривать как систему только с двумя активными электронами, полагая, что действие остальных, неактивных, электронов ионного кора $O^{6+}(1s^2)$ сводится в основном к экранированию заряда ядра O^{8+} . Однако выполненные нами исследования этой столкновительной системы показали, что двухэлектронная модель, не учитывающая релаксацию электронов остова, плохо

описывает двухэлектронные переходы активных электронов в таких квазимолекулах. При расчете реакций (1) необходимо непосредственно учитывать $1s$ -электроны остова и рассматривать четырехэлектронные квазимолекулярные состояния, образующиеся в процессе столкновения.

Волновые функции четырехэлектронных адиабатических состояний представлены в нулевом приближении как комбинации детерминантов Слейтера с использованием базиса одноэлектронных экранированных двухатомных молекулярных орбиталей (ЭДМО), рассчитываемых в рамках разработанного нами метода эффективного потенциала [1]. Значения энергии четырехэлектронных состояний, вычисленные с учетом межэлектронного взаимодействия в первом порядке теории возмущений, соответствуют значениям, полученным с использованием приближения типа Хартри–Фока.

Матричные элементы динамической связи между многоэлектронными адиабатическими состояниями сводятся к матричным элементам между ЭДМО.

Методы расчета

Сечения реакций (1) вычислены в приближении параметра удара в рамках метода уравнений сильной связи на базе синглетных четырехэлектронных адиабатических состояний квазимолекулы ($He^{2+} + O^{4+}$). В рассматриваемом приближении задача сводится к определению электронной волновой функции $\Psi(\mathbf{r}; t)$, удовлетворяющей нестационарному уравнению Шредингера с электронным гамильтонианом, параметрически зависящим от времени через межъядерное расстояние $R(t)$ (\mathbf{r} —

совокупность электронных координат):

$$H'_{el} = \tilde{H} + \frac{Z_A Z_B}{R}, \quad (2)$$

где

$$\tilde{H} = H^{(0)} + H^{(1)}$$

$$\equiv \sum_{i=1-4} h^i(\mathbf{r}_i) + \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1-4} V_{eff}^j(\mathbf{r}_i; R) \right), \quad (3)$$

$$h^i(\mathbf{r}_i) = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z_A}{r_{ai}} - \frac{Z_B}{r_{bi}} + V_{eff}^j(\mathbf{r}_i; R). \quad (4)$$

V_{eff}^j , добавка к одноэлектронному потенциалу, учитывающая экранирование зарядов ядер электронами квазимолекулы, задается в параметрическом виде [1], допускающем разделение переменных в вытянутой сферической системе координат и позволяющем свести симметрию потенциала в квазимолекуле к симметрии хорошо известной одноэлектронной двухатомной задачи при расчете молекулярных орбиталей (ОЭДМО):

$$V_{eff}^j = \frac{1}{2} \left[\frac{a_1^j - b_1^j}{r_{ai}} + \frac{a_1^j + b_1^j}{r_{bi}} + \frac{\tilde{a}_1^j + R a_0^j}{r_{ai} r_{bi}} + \frac{b_2^j (r_{ai} - r_{bi})}{R r_{ai} r_{bi}} \right]. \quad (5)$$

В (2)–(5) \mathbf{r}_i — координаты i -го электрона, r_{ai} , r_{bi} — расстояние i -го электрона до ядер с зарядами Z_A и Z_B ($Z_A = Z_{\text{He}}$, $Z_B = Z_{\text{O}}$), r_{ij} — расстояние между i -м и j -м электронами. Параметры эффективных потенциалов \tilde{a}_1^j , a_1^j , a_0^j , b_1^j и b_2^j определялись из условий совпадения энергии ЭДМО ψ_j и энергий соответствующих ей атомных уровней в пределах $R = 0$ и $R \rightarrow \infty$. Для установления соответствия между заданной орбиталью и уровнями атомов при $R = 0$ и $R \rightarrow \infty$ использовались правила корреляции Бара–Лихтена [2]. Классификация ЭДМО проводилась по квантовым числам состояния объединенного атома ($j = (nlm)$). Все атомные величины, необходимые для расчета параметров эффективных потенциалов, вычислялись с использованием комплекса программ RAINE [3].

Волновая функция $\Psi(\mathbf{r}; t)$ раскладывается в ряд по ортогональному набору синглетных четырехэлектронных квазимолекулярных состояний $\Phi_p(\mathbf{r}; R)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_p a_p(t) \Phi_p(\mathbf{r}; R) \times \exp\left(-i \int_0^t \left[\tilde{E}_p(R) + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] dt'\right), \quad (6)$$

где

$$\tilde{E}_p = \int \Phi_p(\mathbf{r}; R) \tilde{H} \Phi_p(\mathbf{r}; R) d\mathbf{r}. \quad (7)$$

Если первоначально при $t \rightarrow -\infty$ ($R \rightarrow \infty$) столкновительная система находилась в состоянии

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \Phi_1(\mathbf{r}; R) \quad (\text{с энергией } \tilde{E}_1(\infty)),$$

где $\Psi_1(\mathbf{r}; R)$ — функция, описывающая при $R \rightarrow \infty$ входной канал в реакциях (1), то

$$\Psi(\mathbf{r}; t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow \Phi_1(\mathbf{r}) \exp(-i \tilde{E}_1(\infty) t). \quad (8)$$

Подстановка (6) в нестационарное уравнение Шредингера с учетом (8) приводит к системе линейных дифференциальных уравнений для определения амплитуд вероятностей a_p , которая для кулоновской траектории движения сталкивающихся частиц (с зарядами $Z_A = 2$ и $Z_B^* = 4$) преобразуется к следующему виду:

$$\frac{da_p(\tau)}{d\tau} = - \sum_{k \neq p} a_k(\tau) \left\{ \frac{\tau}{R - \tau} R_{pk} + \frac{\rho}{R(R - \gamma)} L_{pk} + \frac{i}{v} \frac{R}{R - \gamma} \tilde{H}_{pk} \right\} \times \exp\left(-\frac{i}{v} \int_0^\tau (\tilde{E}_k - \tilde{E}_p) \frac{R}{R - \gamma} d\tau\right), \quad (9)$$

$$(R(\tau) = (\tau^2 + \gamma^2 + \rho^2)^{1/2} + \gamma; \quad -\infty < \tau < \infty)$$

с начальными условиями

$$a_j(-\infty) = \delta_{1j} \exp(-i v_1), \quad (10)$$

где

$$v_1 = \exp\left(-\frac{i}{v} \int_0^\infty \left[\tilde{E}_1(R) - \tilde{E}_1(\infty) + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] \frac{R}{R - \gamma} d\tau\right).$$

В (9) ρ — параметр удара, v — относительная скорость движения ядер, $\gamma = Z_A Z_B^* / \mu v^2$, μ — приведенная масса ($m_{\text{He}} = 4$), $R_{pk} = \langle \Phi_p | d/dR | \Phi_k \rangle$, $L_{pk} = \langle \Phi_p | i L_y | \Phi_k \rangle$ и $\tilde{H}_{pk} = \langle \Phi_p(\mathbf{r}; R) | \tilde{H} | \Phi_k(\mathbf{r}; R) \rangle$ — матричные элементы динамических (радиальных и вращательных) и потенциальных связей между базисными состояниями. При записи уравнений сильной связи (9) полагалось, что система координат, в которой описывается движение ядер, выбрана так, что ось y перпендикулярна плоскости столкновения (xOz), а ось z совпадает с направлением начальной скорости движения иона He^{2+} .

При квазимолекулярном описании атомных столкновений (решении уравнений сильной связи) возникает проблема переноса импульса электрона при перезарядке, которая до сих пор, со времени пионерской работы Бэйтса и Мак-Керрлоа [4], не имеет строгого решения даже при описании одноэлектронных квазимолекулярных процессов. В работе [4] было показано, что из-за пренебрежения трансляцией импульса электрона при

движении ядер базисные функции (электронные состояния) в разложении типа (6) будут связаны между собой при любых положениях ядер. Поэтому при конечном числе членов n в базисном наборе результаты расчета зависят от его размера. Для устранения нефизической связи между состояниями в работе [4] было предложено использовать в разложении типа (6) базисные молекулярные функции, умноженные на „факторы трансляции“ в виде плоской волны. К настоящему времени предложены различные формы факторов трансляции как для квазимолекулярных, так и для атомных базисов, а также как для одноэлектронных, так и двухэлектронных сталкивающихся систем и как для гетероядерных, так и гомоядерных квазимолекул.

В данной работе при учете переноса импульса используется альтернативный подход, предложенный Винтером и др. [5] для одноэлектронных квазимолекул, связанный с выбором специальной системы координат для электронов при расчете матричных элементов динамической связи состояний. Было показано [5], что для гетероядерных квазимолекул $\text{He}^{2+}-\text{H}(1s)$ при выборе начала координат в „центре масс“ зарядов на межъядерной оси (или точке „одинакового потенциала“, естественной границе, разделяющей электроны, связанные с одним ядром, от электронов, связанных с другим ядром) результаты расчета вероятностей перехода в зависимости от параметра удара и полных сечений близки к результатам расчета с учетом фактора трансляции в виде плоской волны. Такой подход использовался нами при расчете процессов электронного захвата и возбуждения при столкновении альфа-частиц с ионами углерода $\text{C}^{4+}(1s^2)$ [6], а также между водородоподобными ионами He^+ и ионами B^{4+} , C^{5+} , N^{6+} , O^{7+} [7,8]. Было показано [6], что результаты наших расчетов близки к имевшимся квазимолекулярным расчетам при малых энергиях с учетом факторов трансляции и к расчетам в приближении больших энергий, полученным с использованием атомного базиса. Кроме того, наши расчеты [6] лучше всего соответствовали имеющимся экспериментальным данным в широком интервале значений энергии.

Волновые функции четырехэлектронных состояний

Волновые функции $\Phi_p(\mathbf{r}; R)$ синглетных четырехэлектронных состояний квазимолекулы ($\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}$) записывались в нулевом приближении в виде линейной комбинации детерминантов Слейтера, построенных на одноэлектронных волновых функциях

$$\bar{\psi}_j(i) = \psi_j(\mathbf{r}_i; R)s(i), \quad i = 1-4,$$

где $s(i)$ — спиновая волновая функция i -го электрона.

Энергии $\varepsilon_j(R)$ и волновые функции $\psi_j(\mathbf{r}_i; R)$ одноэлектронных экранированных двухатомных молекулярных орбиталей находились из решения стационарного

Таблица 1. Набор базисных квазимолекулярных состояний $\Phi_p(\mathbf{r}; R)$ и их энергии $\tilde{E}_p(R)$ в пределе разведенных атомов

Φ_p	Атомный предел при $R \rightarrow \infty$	$\tilde{E}_p(R = \infty)$, а.е.
$\Phi_{13}(1s\sigma_1^2; \psi_{2p}, 6h\sigma)$	$\text{He}^+(2p) + \text{O}^{5+}(1s^2 2p)$	$\tilde{E}_{13} = -63.64$
$\Phi_{12}(1s\sigma_1^2; \psi_{2p}, 5f\sigma)$	$\text{He}^+(2s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2p)$	$\tilde{E}_{12} = -63.64$
$\Phi_9(1s\sigma_2^2; \psi_{2p}, 5g\sigma)$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2p 4f)$	$\tilde{E}_9 = -63.77$
$\Phi_{11}(1s\sigma_1^2; \psi_{2s}, 6h\sigma)$	$\text{He}^+(2p) + \text{O}^{5+}(1s^2 2s)$	$\tilde{E}_{11} = -64.02$
$\Phi_{10}(1s\sigma_1^2; \psi_{2s}, 5f\sigma)$	$\text{He}^+(2s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2s)$	$\tilde{E}_{10} = -64.02$
$\Phi_8(1s\sigma_2^2; \psi_{2s}, 5g\sigma)$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s 4f)$	$\tilde{E}_8 = -64.20$
$\Phi_7(1s\sigma_2^2; \psi_{2p}, 4f\sigma)$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2p 3d)$	$\tilde{E}_7 = -64.42$
$\Phi_6(1s\sigma_2^2; \psi_{2s}, 4f\sigma)$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s 3d)$	$\tilde{E}_6 = -64.86$
$\Phi_5(1s\sigma_1^2; \psi_{2p}, 3d\sigma)$	$\text{He}^+(1s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2p)$	$\tilde{E}_5 = -65.14$
$\Phi_4(1s\sigma_1^2; \psi_{2s}, 3d\sigma)$	$\text{He}^+(1s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2s)$	$\tilde{E}_4 = -65.56$
$\Phi_3(1s\sigma_2^2; \psi_{2p}, \psi_{2p})$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2p^2)$	$\tilde{E}_3 = -66.65$
$\Phi_2(1s\sigma_2^2; \psi_{2s}, \psi_{2p})$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s 2p)$	$\tilde{E}_2 = -67.13$
$\Phi_1(1s\sigma_2^2; \psi_{2s}, \psi_{2s})$	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s^2)$	$\tilde{E}_1 = -67.61$

уравнения Шредингера

$$h^i \psi_j(\mathbf{r}_i; R) = \varepsilon_j(R) \psi_j(\mathbf{r}_i; R). \quad (11)$$

Для выбора минимального набора базисных состояний при расчете реакций (1) были вычислены полные электронные энергии нижних состояний квазимолекулы ($\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}$) в пределе разведенных атомов (электронные энергии ионов $\text{O}^{5+}(1s^2 nl)$ и $\text{O}^{4+}(1s^2 nln'l')$ рассчитывались с использованием комплекса программ RAINE [3]). В результате в число базисных было включено 13 квазимолекулярных состояний (табл. 1).

Все базисные состояния, описывающие при $R = \infty$ входной канал (Φ_1), каналы электронной перезарядки ($\Phi_4, \Phi_5, \Phi_{10-13}$) и возбуждения мишени ($\Phi_2, \Phi_3, \Phi_{6-9}$) в реакциях (1), имеют заполненную нижнюю ЭДМО $\psi_0 = 1s\sigma$. Если два оставшихся „валентных“ электрона находятся в одной и той же ЭДМО ψ_i , то четырехэлектронная волновая функция Φ_p записывается в нулевом приближении в виде одного детерминанта Слейтера, построенного на одноэлектронных функциях $\bar{\psi}_0$ и $\bar{\psi}_i$:

$$\Phi_p(\psi_0; \psi_i, \psi_i) = \frac{1}{\sqrt{24}} \times \begin{vmatrix} \psi_0(1)\alpha(1) & \psi_0(2)\alpha(2) & \psi_0(3)\alpha(3) & \psi_0(4)\alpha(4) \\ \psi_0(1)\beta(1) & \psi_0(2)\beta(2) & \psi_0(3)\beta(3) & \psi_0(4)\beta(4) \\ \psi_i(1)\alpha(1) & \psi_i(2)\alpha(2) & \psi_i(3)\alpha(3) & \psi_i(4)\alpha(4) \\ \psi_i(1)\beta(1) & \psi_i(2)\beta(2) & \psi_i(3)\beta(3) & \psi_i(4)\beta(4) \end{vmatrix}, \quad (12)$$

если же активные электроны (с противоположно направленными спинами) находятся в разных состояниях (ψ_i, ψ_j), то Φ_p записывается в виде линейной ком-

бинации двух детерминантов Слейтера

$$\Phi_p(\psi_0; \psi_i, \psi_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \left(\frac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} \psi_0(1)\alpha(1) & \psi_0(2)\alpha(2) & \psi_0(3)\alpha(3) & \psi_0(4)\alpha(4) \\ \psi_0(1)\beta(1) & \psi_0(2)\beta(2) & \psi_0(3)\beta(3) & \psi_0(4)\beta(4) \\ \psi_j(1)\alpha(1) & \psi_j(2)\alpha(2) & \psi_j(3)\alpha(3) & \psi_j(4)\alpha(4) \\ \psi_i(1)\beta(1) & \psi_i(2)\beta(2) & \psi_i(3)\beta(3) & \psi_i(4)\beta(4) \end{vmatrix} + \frac{1}{\sqrt{24}} \begin{vmatrix} \psi_0(1)\alpha(1) & \psi_0(2)\alpha(2) & \psi_0(3)\alpha(3) & \psi_0(4)\alpha(4) \\ \psi_0(1)\beta(1) & \psi_0(2)\beta(2) & \psi_0(3)\beta(3) & \psi_0(4)\beta(4) \\ \psi_i(1)\alpha(1) & \psi_i(2)\alpha(2) & \psi_i(3)\alpha(3) & \psi_i(4)\alpha(4) \\ \psi_j(1)\beta(1) & \psi_j(2)\beta(2) & \psi_j(3)\beta(3) & \psi_j(4)\beta(4) \end{vmatrix} \right), \quad (13)$$

где α, β — спиновые волновые функции электронов с противоположно направленными спинами.

При расчете входящих в базисные состояния Φ_p одноэлектронных ЭДМО ψ_j нами использовались:

— потенциалы V_{eff}^0 для расчета молекулярных орбиталей ψ_0 , описывающих при $R = \infty$ сильно отщепленные по энергии состояния $1s$ -электронов в ионах $O^{5+}(1s^2 2s)$ ($\psi_0 = 1s\sigma_1$) и $O^{4+}(1s^2 2s^2)$ ($\psi_0 = 1s\sigma_2$);

— потенциал V_{eff}^1 для расчета молекулярных орбиталей $2s\sigma'$ и $2p\sigma'$, описывающих при $R = \infty$ состояния $2s$ - и $2p_0$ -электронов в ионах $O^{4+}(1s^2 2l 2l')$;

— потенциал V_{eff} для расчета ЭДМО $2s\sigma, 2p\sigma, 4f\sigma, 5g\sigma$, описывающих при $R = \infty$ состояния $2s$ -, $2p_0$ -, $3d_0$ -, $4f_0$ -электронов в ионах $O^{5+}(1s^2 nl)$ и $O^{4+}(1s^2 2l nl')$ с $n = 3, 4$, и ЭДМО $3d\sigma, 5f\sigma, 6h\sigma$, описывающих при $R = \infty$ состояния $1s$ -, $2s$ -, $2p_0$ -электронов в ионе Ne^+ .

Схема определения параметров эффективных потенциалов V_{eff}^0 приведена в [9] (параметр b_2 в (5) для V_{eff}^0 полагался равным нулю). Необходимые для их расчета атомные энергии $1s$ -состояний ионов $Ne^{6+}(1s^2 2s^2)$ и $Ne^{6+}(1s^2 2s 3d)$ (предел $R = 0$) и ионов $O^{4+}(1s^2 2s^2)$ и $O^{5+}(1s^2 2s)$ (предел $R \rightarrow \infty$) и средние значения эффективного потенциала $V_{eff}^0(R)$ в пределе соответствующего объединенного атома

$$\bar{V}_{eff}^0(R=0) = -\left(\frac{Z^*}{n^*}\right)^2 + \frac{\tilde{a}_1^0 Z^{*2}}{2n^{*3}(s+1/2)}, \quad (14)$$

полученные из атомных расчетов, приведены в табл. 2.

В (14) $Z^* = Z_A + Z_B - a_1^0$, $n^* = n + \Delta_l$, $\Delta_l = -(l+1/2) + [(l+1/2)^2 + \tilde{a}_1^0]^2$, s — эффективный орбитальный момент, связанный с l соотношением $s(s+1) = l(l+1) + \tilde{a}_1^0$ (для орбитали ψ_0 $n = 1, l = 0$).

Схема определения параметров эффективных потенциалов V_{eff}^1 и V_{eff} была описана в [10]. Для их расчета использовались энергии $2s$ - и $2p$ -уровней в объединенном атоме $Ne^{6+}(1s^2 2s 2p)$ ($\epsilon_{2s}^u = -7.454$ а.е., $\epsilon_{2p}^u = -6.779$ а.е.), энергия $1s$ -уровня иона Ne^+ и энергия $2s$ -уровня в ионе $O^{4+}(1s^2 2s^2)$ ($\epsilon_{2s}^s = -4.092$ а.е.) или $2p$ -уровня в ионе $O^{5+}(1s^2 2p)$ ($\epsilon_{2p}^s = 4.748$ а.е.) при расчете параметров потенциалов V_{eff}^1 или V_{eff}

Таблица 2. Энергии ϵ_{1s}^u и средние значения эффективных потенциалов \bar{V}^0 для $1s\sigma_1$ и $1s\sigma_2$ ЭДМО в пределе объединенных атомов; энергии ϵ_{1s}^s $1s\sigma_1$ и $1s\sigma_2$ ЭДМО в пределе разведенных атомов (все величины даны в а.е.)

ψ	$ \epsilon_{1s}^u $	\bar{V}^0	$ \epsilon_{1s}^s $
$1s\sigma_1$	40.515	88.2356	25.700
$1s\sigma_2$	39.646	87.178	23.854

Таблица 3. Параметры эффективных потенциалов (в а.е.) для расчета ЭДМО ψ_j

V_{eff}^j	\tilde{a}_1^j	a_1^j	a_0^j	b_1^j	b_2^j
V_{eff}^0					
$(1s\sigma_1)$	-0.069824	1.6783	0.960	-0.817	—
$(1s\sigma_2)$	-0.076074	1.8341	-0.957	1.309	—
V_{eff}^1	-0.112	2.775	-1.080	2.279	0.584
V_{eff}	-0.112	2.275	-0.286	1.910	-0.579

соответственно. Значения параметров эффективных потенциалов приведены в табл. 3. В дальнейшем малая неортогональность ЭДМО, вычисленных для различных эффективных потенциалов, не учитывается.

Для расчета энергий $\epsilon_j(R)$ и волновых функций ψ_j одноэлектронных квазимолекулярных состояний использовался комплекс программ [11]. Энергии ЭДМО приведены на рис. 1. Атомные пределы ЭДМО при $R \rightarrow \infty$ выписаны с учетом того, что для рассматриваемых скоростей столкновений далекие квазипересечения орбиталей $5f\sigma - 6g\sigma$ ($R \simeq 14$ а.е.) и $6h\sigma - 7i\sigma$ ($R \simeq 16.5$ а.е.) проходятся адиабатически в процессе столкновения.

При построении волновых функций $\Phi_p(\mathbf{r}; R)$ четырехэлектронных состояний мы использовали вместо молекулярных орбиталей $2s\sigma', 2p\sigma'$ ($p = 1-3$) и $2s\sigma, 2p\sigma$ ($p > 3$) молекулярные орбитали ψ_{2s}, ψ_{2p} , описывающие в пределе разведенных атомов $2s$ - и $2p_0$ -состояния электрона в ионах $O^{4+}(1s^2 2l 2l')$ и $O^{5+}(1s^2 2l)$:

$$\psi_{2s} = (2s\sigma' + 2p\sigma')/\sqrt{2},$$

$$\psi_{2p} = (2s\sigma' - 2p\sigma')/\sqrt{2} \quad \text{при } p = 1-3 \quad (15)$$

и

$$\psi_{2s} = (2s\sigma + 2p\sigma)/\sqrt{2},$$

$$\psi_{2p} = (2s\sigma - 2p\sigma)/\sqrt{2} \quad \text{при } p > 3. \quad (16)$$

Это позволяет аккуратно записать волновую функцию $\Phi_1(\mathbf{r}; R)$, описывающую входной канал в реакциях (1).

Входящие в уравнения сильной связи энергии базисных состояний ($\tilde{E}_p = \tilde{H}_{pp}$) и матричные элементы потенциального взаимодействия между ними (\tilde{H}_{pk}) вычислялись в первом порядке теории возмущения по

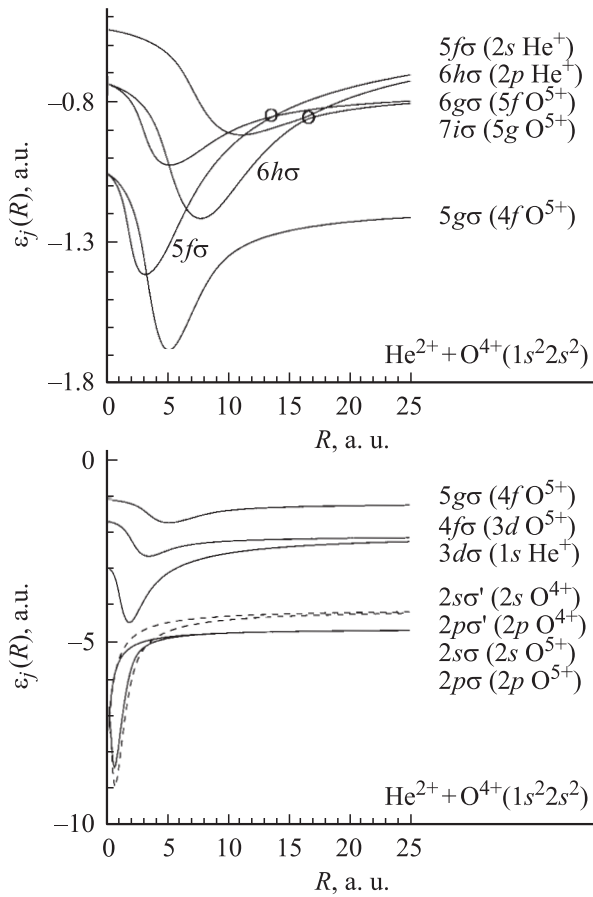


Рис. 1. Энергии $\varepsilon_j(R)$ экранированных одноэлектронных двухатомных молекулярных орбиталей ψ_j квазимолекулы ($\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}$).

остаточному взаимодействию

$$\tilde{H}_{pk} = \langle \Phi_p | H^{(0)} | \Phi_k \rangle + \langle \Phi_p | H^{(1)} | \Phi_k \rangle. \quad (17)$$

Матричные элементы радиальных связей между базисными состояниями

$$R_{pk} = \langle \Phi_p | d/dR | \Phi_k \rangle \quad (18)$$

расписывались через матричные элементы радиальных связей между одноэлектронными ЭДМО.

Расчетные формулы для матричных элементов \tilde{E}_p , \tilde{H}_{pk} и R_{pk} приведены в [12]. Энергии базисных синглетных четырехэлектронных состояний приведены на рис. 2.

Расчет сечений одноэлектронной перезарядки и возбуждения мишени

Парциальные сечения заселения конечных состояний $\Phi_p(r) = \lim_{R \rightarrow \infty} \Phi_p(\mathbf{r}; R)$ для заданной скорости столкновения v рассчитывались по формулам

$$\sigma_p = 2\pi \int_0^{\tau_{\max}} \rho |b_p(\rho, v)|^2 d\rho, \quad (19)$$

где $b_p(\rho, v)$, амплитуда перехода из начального состояния $\Phi_1(\mathbf{r})$ в конечное $\Phi_p(\mathbf{r})$, равна

$$b_p(\rho, v) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Phi_p(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle \exp(i\tilde{E}_p(\infty)t) \approx a_p(\tau_{\max}) \exp(-iv_p), \quad (20)$$

$$v_p = \frac{1}{v} \int_0^{\tau_{\max}} \left[\tilde{E}_p(R) - \tilde{E}_p(\infty) + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] \frac{R}{R - \gamma} d\tau. \quad (21)$$

Амплитуды вероятностей $a_p(\tau_{\max})$ определяются при интегрировании уравнений сильной связи (9) в преде-

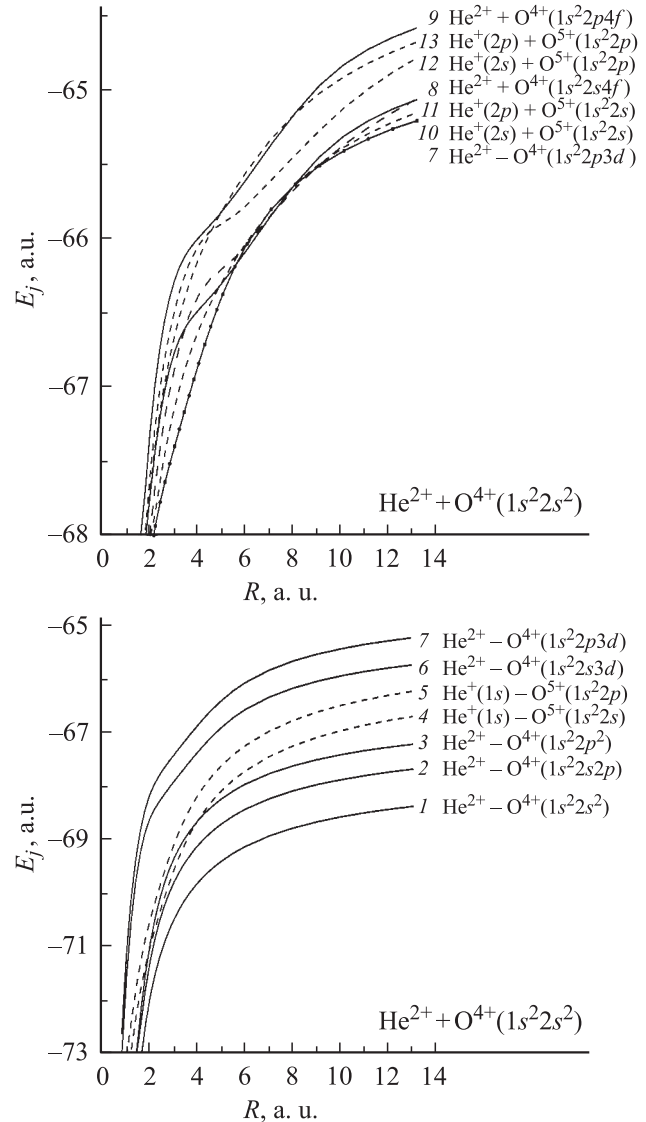


Рис. 2. Энергии $\tilde{E}_j(R)$ синглетных четырехэлектронных состояний $\Phi_j(\mathbf{r}; R)$ ($j = 1-13$) квазимолекулы ($\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}$): $\Phi_1(\mathbf{r}; R)$ — входной канал; $\Phi_4(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_{10}(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_{11}(\mathbf{r}; R)$ — каналы одноэлектронной перезарядки; $\Phi_5(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_{12}(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_{13}(\mathbf{r}; R)$ — каналы одноэлектронной перезарядки с одноэлектронным $2s \rightarrow 2p$ электронным возбуждением мишени; $\Phi_2(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_3(\mathbf{r}; R)$, $\Phi_6(\mathbf{r}; R)$ — каналы электронного возбуждения мишени.

лах $[-\tau_{\max}, \tau_{\max}]$ с начальными условиями

$$a_p(-\tau_{\max}) = \delta_{1p} \exp(-i\nu_1).$$

Параметр τ_{\max} находится из требования, чтобы при $\rho \rightarrow \tau_{\max}$ $\rho |b_p(\rho, E_c)|^2 \rightarrow 0$ для $p \neq 1$ (при расчете τ_{\max} менялся при изменении E_c от 20 keV до 2 MeV в пределах 5.3–12.4 а.е.). Анализ амплитуд вероятностей заселения выходных каналов в функции от параметра удара ρ показал, что основной вклад в сечения перезарядки и возбуждения в рассмотренном интервале энергий столкновения вносят $\rho < 4$ а.е. Для решения системы уравнений сильной связи использовалась программа TANGO [13].

Парциальные сечения, дающие основной вклад в полные сечения электронной перезарядки в $1s$ -, $2l$ -состояния иона He^+ и электронной перезарядки с одновременным $2s \rightarrow 2p$ возбуждением мишени приведены на рис. 3. Парциальные сечения одноэлектронной перезарядки в $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -состояния иона He^+ совместно с соответствующими сечениями перезарядки с одновременным электронным возбуждением мишени

$$\sigma_{ir}(1s) = \sigma_4 + \sigma_5,$$

$$\sigma_{ir}(2s) = \sigma_{10} + \sigma_{12}, \quad \sigma_{ir}(2p) = \sigma_{11} + \sigma_{13},$$

а также полное сечение одноэлектронной перезарядки Σ_{ir}

$$\Sigma_{ir} = \sigma_{ir}(1s) + \sigma_{ir}(2s) + \sigma_{ir}(2p)$$

приведены на рис. 4. Основной вклад в Σ_{ir} вносит процесс чисто одноэлектронного захвата в $1s$ -состояние

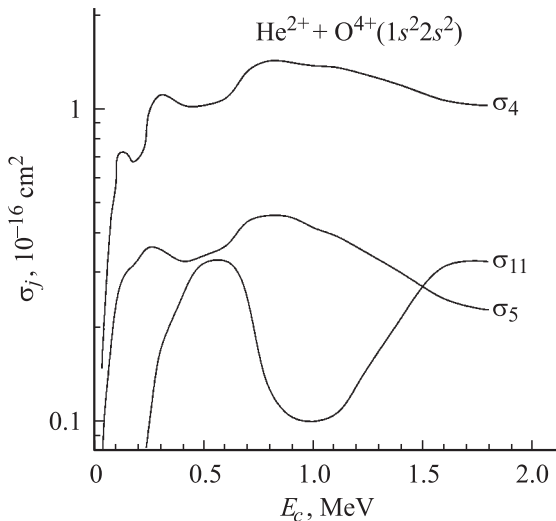


Рис. 3. Основные парциальные сечения σ_j одноэлектронной перезарядки и перезарядки с одновременным $2s \rightarrow 2p$ возбуждением мишени при столкновении $\text{He}^{2+} - \text{O}^{4+}(1s^2 2s^2)$: σ_4 , σ_{11} — парциальные сечения перезарядки в $1s$ -, $2p$ -состояния иона He^+ (перезарядочные каналы $\text{He}^+(1s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2s)$, $\text{He}^+(2p) + \text{O}^{5+}(1s^2 2s)$), σ_5 — парциальное сечение перезарядки в $1s$ -состояние иона He^+ с одновременным электронным возбуждением мишени (перезарядочный канал $\text{He}^+(1s) + \text{O}^{5+}(1s^2 2p)$).

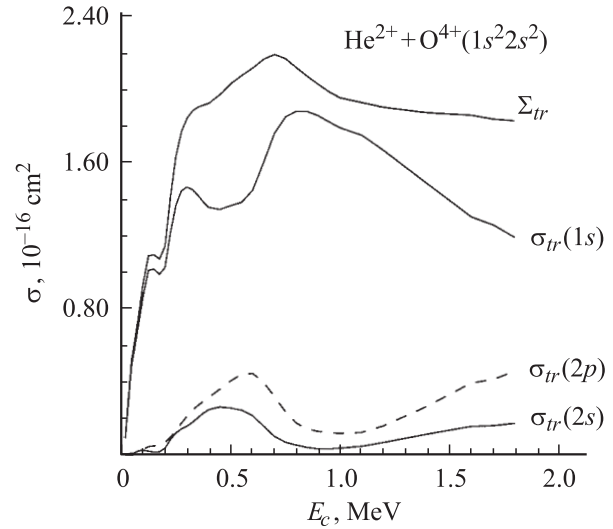


Рис. 4. Полное сечение перезарядки Σ_{ir} и суммы парциальных сечений перезарядки в $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -состояния иона He^+ и соответствующих сечений перезарядки с одновременным $2s \rightarrow 2p$ электронным возбуждением мишени: $\sigma_{ir}(1s) = \sigma_4 + \sigma_5$, $\sigma_{ir}(2s) = \sigma_{10} + \sigma_{12}$, $\sigma_{ir}(2p) = \sigma_{11} + \sigma_{13}$.

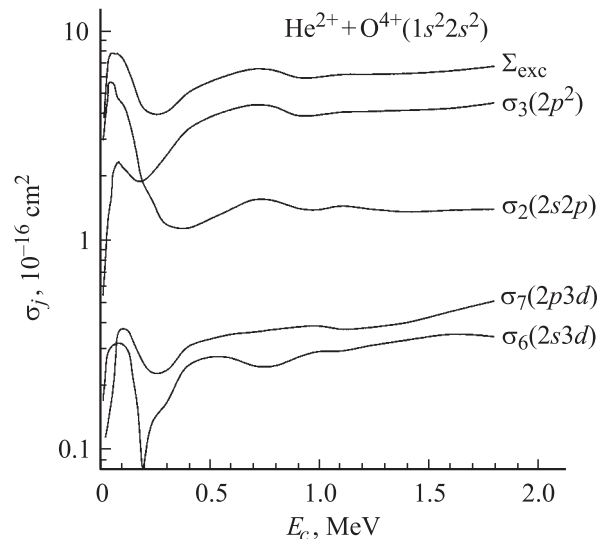


Рис. 5. Полное сечение возбуждения Σ_{exc} в $2lnl$ -состояния иона O^{4+} ($n=2,3$) и парциальные сечения σ_j возбуждения мишени при столкновении $\text{He}^{2+} - \text{O}^{4+}(1s^2 2s^2)$: $\sigma_2(2s 2p)$, $\sigma_6(2s 3d)$ — сечения одноэлектронного возбуждения мишени (каналы возбуждения $\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s 2p)$ и $\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2s 3d)$); $\sigma_3(2p^2)$, $\sigma_7(2p 3d)$ — сечения двухэлектронного возбуждения мишени (каналы возбуждения $\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2p^2)$ и $\text{He}^{2+} + \text{O}^{4+}(1s^2 2p 3d)$).

иона He^+ (σ_4). Существенный вклад в полное сечение перезарядки вносят процессы перезарядки с одновременным $2s \rightarrow 2p$ электронным возбуждением мишени: вклад парциальных сечений электронной перезарядки с одновременным возбуждением мишени ($\sigma_5 + \sigma_{12} + \sigma_{13}$) в Σ_{ir} составляет от 24% (при $E_c \approx 2$ MeV) до 39% (при $E_c \approx 0.9$ MeV).

Парциальные сечения одноэлектронных $\sigma_2(2s2p)$, $\sigma_6(2s3d)$ и двухэлектронных $\sigma_3(2p^2)$, $\sigma_7(2p3d)$ возбуждений в $2lnl'$ -состояния иона O^{4+} ($n = 2, 3$) и полное сечение электронного возбуждения Σ_{exc} приведены на рис. 5. При малых энергиях столкновения ($E_c < 0.2 \text{ MeV}$) основным является процесс одноэлектронного $2s \rightarrow 2p$ возбуждения мишени. Именно с максимумом сечения этого процесса связан максимум в полном сечении возбуждения мишени при $E_c \sim 80 \text{ keV}$. При $E_c > 0.2 \text{ MeV}$ основной вклад в полное сечение возбуждения вносит процесс двухэлектронного $2s^2 \rightarrow 2p^2$ возбуждения иона O^{4+} (с максимумом сечения этого процесса связан максимум в полном сечении возбуждения при $E_c \sim 0.7 \text{ MeV}$).

Заключение

Получены новые данные о полных и парциальных сечениях процессов электронной перезарядки и возбуждении при столкновении альфа-частиц с Ве-подобными ионами кислорода $O^{4+}(1s^22s^2)$ при энергиях столкновения E_c от 20 keV до 2 MeV . Основными в рассмотренном интервале E_c являются процессы одноэлектронного (при $E_c < 0.2 \text{ MeV}$) и двухэлектронного (при $E_c > 0.2 \text{ MeV}$) возбуждения иона кислорода. Полное сечение возбуждения имеет соответственно максимумы при $E_c \sim 80 \text{ keV} - 7.76 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ и при $E_c \sim 0.7 \text{ MeV} - 6.5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Основной вклад в полное сечение перезарядки вносят процессы одноэлектронной перезарядки в $1s$ -состояние иона He^+ : при изменении E_c от 0.2 до 2 MeV сечение чисто электронной перезарядки (σ_4) изменяется в пределах $(0.70 - 1.02) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ с максимальным значением $1.43 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при $E_c \simeq 0.8 \text{ MeV}$. Сечение электронной перезарядки с одновременным $2s \rightarrow 2p$ электронным возбуждением иона $O^{4+}(\sigma_5)$ меняется в пределах $(0.33 - 0.22) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ с максимальным значением $0.45 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при $E_c \simeq 0.9 \text{ MeV}$.

Заметный вклад в полное сечение перезарядки вносит процесс чисто одноэлектронной перезарядки в $2p$ -состояние иона $He^+(\sigma_{11})$: максимальное значение сечения равно $0.32 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ при $E_c \simeq 0.6 \text{ MeV}$. Максимальное значение полного сечения электронной перезарядки (при $E_c \simeq 0.7 \text{ MeV}$) равно $2.19 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$.

Авторы благодарны за поддержку работы грантом International Atomic Energy Agency, contract N 13349/RBF.

Список литературы

- [1] Nikulin V.K., Guschina N.A. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1978. Vol. 11. P. 3553–3562.
- [2] Barat M., Lichten W. // Phys. Rev. A. 1972. Vol. 6. P. 221.
- [3] Банд И.М., Тржасковская М.Б., Фомичев В.И. Препринт ЛИЯФ им. Б.П. Константинова АН СССР. № 299. Л., 1977. 46 с.

- [4] Bates D.R., McCarroll R. // Proc. R. Soc. A. 1958. Vol. 245. P. 175–183.
- [5] Hatton G.J., Lane N.F., Winter T.G. // J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 1979. Vol. 12. P. L571.
- [6] Nikulin V.K., Guschina N.A. // Atomic and Plasma-Material Interaction DATA for Fusion. 2002. Vol. 10. P. 95–102.
- [7] Никулин В.К., Гущина Н.А. // ЖТФ. 2004. Т. 74. Вып. 12. С. 32–39.
- [8] Nikulin V.K., Guschina N.A. // Atomic and Plasma-Material Interaction DATA for Fusion. 2006 (in press).
- [9] Гущина Н.А., Никулин В.К., Самойлов А.В. и др. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 811. Л., 1983. 26 с.
- [10] Никулин В.К., Гущина Н.А. ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 1. С. 15–29.
- [11] Гущина Н.А., Никулин В.К. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 1717. СПб, 1998. 66 с.
- [12] Никулин В.К., Гущина Н.А. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 1786. СПб, 2005. 41 с.
- [13] Piacentini R.D., Salin A. // Computer Phys. Comm. 1976. Vol. 12. P. 199.