

# ОДНОЭЛЕКТРОННАЯ ПЕРЕЗАРЯДКА ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ БЫСТРЫХ ИОНОВ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ВОДОРОДОМ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ПАРАМЕТРА УДАРА

Ф.Ф. Горяев <sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2023 г.,  
после переработки 15 марта 2023 г.  
Принята к публикации 21 марта 2023 г.

Представлен теоретический метод для расчета сечений одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых ионов с молекулой  $H_2$  в основном состоянии. Задача рассеяния при ион-молекулярных столкновениях формулируется в представлении параметра удара с использованием связи между квантовомеханической и квазиклассической амплитудами перезарядки. Амплитуды перезарядки и соответствующие вероятности захвата электрона в состояния  $(nlm)$  налетающего иона получены в приближении Бринкмана–Крамерса. Выведены общие аналитические выражения для амплитуд вероятности одноэлектронной перезарядки в  $n$ -состояния, просуммированные по квантовым числам  $l$  и  $m$ , из которых затем вычисляются соответствующие вероятности перезарядки с использованием процедуры многоканальной нормировки. Для столкновений  $H^+ + H_2$  рассмотрена зависимость дифференциальных сечений перезарядки, проинтегрированных по параметру удара налетающего иона, от ориентации молекулы  $H_2$  и даны сравнения с измерениями и другими расчетами. Вычислены полные сечения одноэлектронной перезарядки, проинтегрированные по ориентациям молекулы  $H_2$  и просуммированные по  $n$ -состояниям, для ряда голых ядер и многозарядных ионов, и представлено их сравнение с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов с помощью других теоретических методов.

DOI: 10.31857/S0044451023090043

EDN: KCHXFJ

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы переноса заряда при столкновениях ионов с молекулярными мишенями представляют большой интерес в фундаментальных и прикладных исследованиях, таких как астрофизика, физика плазмы, термоядерный синтез, физика ускорителей, химия, и др. В расчетах сечений процессов при ион-молекулярных столкновениях часто пользуются правилом аддитивности Брэгга для интерпретации экспериментальных данных. Согласно этому правилу эффективное сечение взаимодействия налетающей частицы с молекулой определяется как сумма сечений взаимодействия со всеми атомами молекулы. Этот подход является достаточно удовлетвори-

тельным в случае процессов обдирки (т.е. ионизации налетающих частиц молекулами) и захвата электронов мишени (процесс перезарядки) для большинства молекулярных мишеней, тогда как для простейшей молекулы  $H_2$  ситуация оказывается сложнее и правило Брэгга нарушается. В частности, в работе [1] на основе экспериментальных данных было исследовано отношение сечений одноэлектронной перезарядки многозарядных ионов на молекулярном и атомарном водороде. В [1] было установлено, что это отношение изменяется в пределах  $0.76 \leq \sigma_{EC}(H_2)/\sigma_{EC}(H) \leq 3.84$  ( $EC$  – electron capture) и оказывается примерно равным 2 для скалярных энергий  $E(\text{кэВ/нуклон})/q^{4/7} \approx 50$  ( $q$  – заряд налетающего иона).

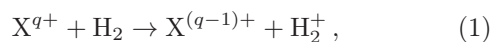
Сечения перезарядки при столкновениях быстрых ионов с мишенями  $H_2$  требуются для определения времен жизни ионных пучков в ускорителях и накопительных кольцах (см., например, [2] и приводимые там ссылки). Молекулярный водород, используемый в качестве газовой мишени для быст-

\* E-mail: goryaev\_farid@mail.ru

рых ионных пучков, широко применяется для получения высокозарядных и узких зарядовых распределений ионов [3]. В недавней работе [4] были выполнены измерения зарядовых распределений тяжелых ионов с энергиями 0.74 и 1.4 МэВ/нуклон, проходящих через различные газы, и было установлено, что молекулы  $\text{H}_2$  являются одними из лучших газовых мишеней для обдирки налетающих ионов. Поэтому знание сечений перезарядки при ион-молекулярных столкновениях оказывается важным как для теоретических предсказаний, так и для планирования экспериментов.

Сечения одноэлектронной перезарядки при ион-молекулярных столкновениях также важны для проблемы детектирования сверхтяжелых элементов (СТЭ) с атомным номером  $Z > 92$ , когда используются газонаполненные сепараторы с газом  $\text{H}_2$  или  $\text{He}$  (или их смесь) [5, 6]. После прохождения через газовую камеру устанавливается равновесное распределение ионных фракций со средним зарядом  $\bar{q}$ , с помощью которого можно оценить требуемую для детектирования СТЭ величину магнитного поля  $B$ . Один из способов определить средний заряд  $\bar{q}$  состоит в решении уравнений баланса для зарядовых фракций, в которые входят в качестве коэффициентов рассчитанные сечения обдирки и перезарядки [2]. В работе [7] такие расчеты были выполнены для элементов с  $Z = 80 - 120$ , проходящих через газ  $\text{He}$ .

В настоящее время используется несколько теоретических подходов к рассмотрению процесса захвата электрона быстрым ионом у молекулярного водорода в реакции переноса заряда



где  $\text{X}^{q+}$  обозначает налетающий ион с зарядом  $q$ : квантовомеханический подход (см., например, [8–12]), квазиклассический метод параметра удара (IP — impact parameter) (см., например, [13–15]) и метод классических траекторий Монте-Карло (СТМС — Classical Trajectory Monte Carlo) [16–18].

Следует заметить, что большинство работ, посвященных исследованию реакции (1), в основном рассматривали захват электрона голыми ядрами и главным образом для столкновений  $\text{H}^+ + \text{H}_2$  и  $\text{He}^{2+} + \text{H}_2$ . Теоретические расчеты для голых ядер с зарядом  $q > 2$  немногочисленны (см., например, [16–18]) или, в частности для налетающих ионов с электронной оболочкой (далее везде для них используется термин «многозарядные ионы»), практически отсутствуют. Кроме того, большинство теорети-

ческих подходов ограничивались рассмотрением захвата электрона в состояния с  $n = 1$  и 2 (см., например, [8, 13, 14]), что является более или менее адекватным приемом при интерпретации экспериментальных данных только для ионов  $\text{H}^+$  и  $\text{He}^{2+}$ . При увеличении заряда  $q$  налетающего иона становится существенным (а при определенных условиях даже доминирующим) захват в возбужденные состояния с большими значениями  $n$ . Для того чтобы учесть захват во все конечные состояния налетающего иона, в работах [19, 20], в которых использовался метод искаженных кулоновских волн (CDW — Continuum Distorted Wave), авторы вычисляли полные сечения перезарядки

$$\sigma_{tot} = \sum_n \sigma_n$$

для голых ядер  $\text{H}^+$ ,  $\text{He}^{2+}$  и  $\text{Li}^{3+}$ , суммируя сечения для  $n = 1 - 3$  и применяя экстраполяцию  $n^{-3}$  для захвата в состояния с  $n > 3$ . Этот экстраполяционный закон, являясь достаточно пригодным для определения полных сечений при высоких энергиях и небольших зарядах  $q$ , оказывается не вполне надежным для вычисления парциальных сечений  $\sigma_n$  при больших  $q$ , когда становится существенным захват в состояния с  $n \sim q$ . Более того, когда в процессе (1) участвуют многозарядные ионы, у которых основному состоянию образующегося иона  $\text{X}^{(q-1)+}$  соответствует главное квантовое число  $n > 1$ , расчеты сечений перезарядки в состояния с высокими  $n$  без использования экстраполяции  $n^{-3}$  становятся критически необходимыми.

В настоящей работе представлен теоретический метод для получения сечений одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом для средних и больших энергий столкновения. Процесс (1) рассматривается в IP-представлении, которое является обобщением на ион-молекулярные столкновения подхода, разработанного в [21, 22] для ион-атомных столкновений. В этом подходе для процесса (1) в приближении Бринкмана–Крамерса (БК) выводится соотношение, связывающее квантовомеханическую и квазиклассическую амплитуды перезарядки. Затем применяется процедура многоканальной нормировки для вычисления вероятностей перезарядки и на их основе парциальных сечений перезарядки  $\sigma_n$ . Приводятся сравнения с экспериментальными данными и другими теоретическими расчетами, для чего также используется база данных [23] для сечений перезарядки в ион-атомных столкновениях. В статье всюду используются атомные единицы, если не оговорено противное.

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

### 2.1. Формулировка проблемы

Рассмотрим ион, налетающий на покоящуюся молекулу  $H_2$  с фиксированной ориентацией. Для описания геометрии столкновения, соответствующей процессу (1), далее используются обозначения из работы [8], которая была первой теоретической моделью для рассмотрения одноэлектронной перезарядки при столкновениях протонов с молекулами водорода. Два электрона с номерами 1 и 2 характеризуются векторами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  относительно протонов А и В в молекуле  $H_2$ , соответственно, которые разделены межъядерным расстоянием, связанным с вектором  $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{BA}$ . Налетающий ион Р находится на расстоянии  $\mathbf{R}$  относительно центра масс (ЦМ) молекулярной мишени, а активный электрон 1 (т.е. электрон, захватываемый ионом) характеризуется вектором  $\mathbf{r}'_1$  относительно иона Р. Для быстрых столкновений колебательным и вращательным движениями молекулы можно пренебречь, тогда молекулярная мишень остается фиксированной в течение быстрого столкновения. Ориентация молекулы  $H_2$ , связанная с вектором  $\boldsymbol{\rho}$ , определяется тогда полярным и азимутальным углами  $(\theta_\rho, \phi_\rho)$  относительно оси  $z$  вдоль скорости  $\mathbf{v}$  налетающего иона.

В ИР-приближении относительное движение налетающей частицы и мишени описывается прямой траекторией с постоянной скоростью  $\mathbf{v}$  и параметром удара  $\mathbf{b}$ . В этом случае вектор  $\mathbf{R}(t)$ , характеризующий положение иона Р относительно ЦМ, дается выражением

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{b} + \mathbf{v}t, \quad \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

где значение  $\mathbf{b} = 0$  в момент времени  $t = 0$  соответствует прохождению через ЦМ молекулы.

Чтобы установить выражение для амплитуды захвата, соответствующей процессу (1), возьмем для простоты начало координат в центре вектора  $\mathbf{R}$ . Это можно сделать, так как конечный результат не зависит от этого выбора (см., например, [24] для деталей). Согласно [25], начальное и конечное состояния полной системы можно записать в виде

$$\Psi_i = \Phi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) e^{-i\frac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - i\frac{1}{8}v^2t}, \quad (3)$$

$$\Psi_f = \Phi_I(\mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) u(\mathbf{r}'_1) e^{i\frac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} - i\frac{1}{8}v^2t}, \quad (4)$$

где  $\Phi_M$ ,  $\Phi_I$  и  $u(\mathbf{r}'_1)$  — волновые функции молекулы  $H_2$ , молекулярного иона  $H_2^+$  и иона  $X^{(q-1)+}$  соответственно;  $\mathbf{r}$  — вектор положения активного электрона

1 относительно начала координат, который связан с  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}'_1$  следующим образом:

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \mathbf{R}/2 - \boldsymbol{\rho}/2, \quad (5)$$

$$\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r} - \mathbf{R}/2. \quad (6)$$

Зависящий от скорости фазовый фактор в уравнениях (3) и (4) является трансляционным фактором, учитывающим переносное движение захватываемого электрона относительно выбранного начала координат. Волновые функции молекулы  $H_2$ ,  $\Phi_M$ , и молекулярного иона  $H_2^+$ ,  $\Phi_I$ , имеют вид

$$\begin{aligned} \Phi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) = N_M \{ & u_m(r_1)u_m(r_2) + \\ & + u_m(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|)u_m(|\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}|) + c[u_m(r_1)u_m(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|) + \\ & + u_m(r_2)u_m(|\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}|)] \}, \quad (7) \end{aligned}$$

$$\Phi_I(\mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) = N_I^\pm [u_i(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|) \pm u_i(r_2)], \quad (8)$$

где нормировочные коэффициенты  $N_M$  и  $N_I^\pm$  равны

$$N_M = 1/\{2[(1+c^2)(1+\Delta_M^2) + 4c\Delta_M]\}^{1/2},$$

$$\Delta_M = \left(1 + Z_M\rho + \frac{1}{3}Z_M^2\rho^2\right) e^{-Z_M\rho},$$

и

$$N_I^\pm = 1/[2(1 \pm \Delta_I)]^{1/2},$$

$$\Delta_I = \left(1 + Z_I\rho + \frac{1}{3}Z_I^2\rho^2\right) e^{-Z_I\rho}.$$

В уравнениях (7) и (8)  $u_m$  и  $u_i$  являются водородоподобными волновыми функциями основного состояния с эффективными зарядами  $Z_M$  молекулы  $H_2$  и  $Z_I$  иона  $H_2^+$  соответственно, а  $c$  — вариационный параметр. Знаки  $(\pm)$  в (8) и далее обозначают четное ( ${}^2\Sigma_g^+$ ) и нечетное ( ${}^2\Sigma_u^+$ ) основные состояния иона  $H_2^+$  соответственно.

Амплитуда вероятности перезарядки для процесса (1) определяется следующим выражением:

$$a(\mathbf{b}, v) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \Psi_f | V_i | \Psi_i \rangle, \quad (9)$$

где  $V_i$  является так называемым «*prig*» взаимодействием (см. ниже);  $\omega = I_M - I_X$  — дефект резонанса реакции (1) ( $I_M$  и  $I_X$  — энергии связи захватываемого электрона в молекуле  $H_2$  и образующемся ионе  $X^{(q-1)+}$  соответственно); матричный элемент в формуле (9) имеет вид

$$\langle \Psi_f | V_i | \Psi_i \rangle =$$

$$= \int \Phi_I^*(\mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) u^*(\mathbf{r}'_1) V_i \Phi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} d\mathbf{r}_2. \quad (10)$$

Ргог-взаимодействие  $V_i$  далее рассматривается как взаимодействие между налетающим ионом и активным электроном 1, что соответствует БК-приближению (т.е.  $V_i = V(r'_1)$ ). Используя далее волновые функции (7) и (8) и интегрируя по  $\mathbf{r}_2$ , приводим матричный элемент (10) к виду

$$\langle \Psi_f | V_i | \Psi_i \rangle = N_t^\pm [I_{1P}(A) \pm I_{1P}(B)], \quad (11)$$

$$I_{1P}(A) = \int u^*(\mathbf{r}'_1) V(r'_1) u_m(r_1) e^{-i\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r},$$

$$I_{1P}(B) = \int u^*(\mathbf{r}'_1) V(r'_1) u_m(|\boldsymbol{\rho} + \mathbf{r}_1|) e^{-i\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r},$$

где член  $I_{1P}(A)$  соответствует захватываемому электрону, связанному с протоном  $A$ , а  $I_{1P}(B)$  тому же электрону, связанному с протоном  $B$ ; коэффициент  $N_t^\pm$  выражается формулой

$$N_t^\pm = N_M N_I^\pm (1 \pm c) (\Delta_{IM} \pm \chi_{IM}), \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{IM} &= \frac{8(Z_I Z_M)^{3/2}}{(Z_I + Z_M)^3}, \\ \chi_{IM} &= \frac{8(Z_I Z_M)^{3/2}}{\rho \mu^3} [Z_I(\rho \mu - 4Z_M) e^{-Z_M \rho} + \\ &\quad + Z_M(\rho \mu + 4Z_I) e^{-Z_I \rho}], \\ \mu &= Z_I^2 - Z_M^2. \end{aligned}$$

Далее, используя преобразования Фурье

$$\begin{aligned} u^*(\mathbf{r}'_1) V(r'_1) &= (2\pi)^{-3} \int g^*(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}'_1} d\mathbf{p}, \\ u_m(r_1) &= (2\pi)^{-3} \int g_m(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} d\mathbf{q}, \quad (13) \\ u_m(|\boldsymbol{\rho} + \mathbf{r}_1|) &= (2\pi)^{-3} \int g_m(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{r}_1)} d\mathbf{q} \end{aligned}$$

и соотношения (5) и (6), амплитуду захвата (9) можно представить в виде

$$a(\mathbf{b}, v) = N_t^\pm \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} [I_{1P}(A) \pm I_{1P}(B)], \quad (14)$$

$$\begin{aligned} I_{1P}(A) &= (2\pi)^{-6} \int g_m(\mathbf{q}) g^*(\mathbf{p}) \times \\ &\quad \times e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{R}/2 - \boldsymbol{\rho}/2) - i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{R}/2) - i\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} d\mathbf{p} d\mathbf{q}, \quad (15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_{1P}(B) &= (2\pi)^{-6} \int g_m(\mathbf{q}) g^*(\mathbf{p}) \times \\ &\quad \times e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{R}/2 + \boldsymbol{\rho}/2) - i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{R}/2) - i\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} d\mathbf{p} d\mathbf{q}. \quad (16) \end{aligned}$$

Интегрируя последовательно по переменным  $\mathbf{r}$  и  $t$  в уравнениях (14)–(16) и используя дельта-функции  $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{p} - \mathbf{v})$  и  $\delta(\mathbf{q}\mathbf{v} + \omega - v^2/2)$ , появляющиеся в процессе интегрирования, получим окончательно общее выражение для амплитуды вероятности перезарядки:

$$a(\mathbf{b}, v) = N_t^\pm [a(\mathbf{B}_-) e^{-iq_z \rho_z/2} \pm a(\mathbf{B}_+) e^{iq_z \rho_z/2}], \quad (17)$$

где

$$a(\mathbf{B}_\mp) = \frac{1}{(2\pi)^2 v} \int_P f(\mathbf{q}, v) e^{i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{B}_\mp} d^2\mathbf{q}, \quad (18)$$

$$f(\mathbf{q}, v) = g_m(\mathbf{q}) g^*(\mathbf{q} - \mathbf{v}), \quad (19)$$

$$\mathbf{q} - \mathbf{p} = \mathbf{v}, \quad p^2 - q^2 = 2\omega. \quad (20)$$

Интегрирование в (18) проводится по плоскости

$$P = \{\mathbf{q}\mathbf{v} + \omega - v^2/2 = 0\};$$

$q_z = v/2 - \omega/v$ ,  $\rho_z = \rho \cos \theta_\rho$ ,  $\mathbf{q}_\perp$  — поперечная компонента вектора  $\mathbf{q}$ ; векторы  $\mathbf{B}_\mp = \mathbf{b} \mp \boldsymbol{\rho}_\perp/2$  характеризуют положение траектории налетающего иона относительно двух ядерных центров молекулы  $\text{H}_2$  ( $\boldsymbol{\rho}_\perp$  — поперечная компонента вектора  $\boldsymbol{\rho}$ ). Произведение фурье-компонент (19) является квантовомеханической амплитудой в БК-приближении, а соотношение (18) связывает квазиклассическую IP-амплитуду перезарядки с квантовомеханической.

Вычисление интеграла (18) выполняется аналогично процедуре, использованной в [21, 22] для ион-атомных столкновений. Для интегрирования в (18) по плоскости  $P$  следует перейти от трехмерных векторов  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{q}$  к их поперечной компоненте  $\mathbf{k}$  ( $\mathbf{k}\cdot\mathbf{v} = 0$ ):

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} + \frac{\mathbf{v}}{v} \left( \frac{v}{2} - \frac{\omega}{v} \right), \quad \mathbf{p} = \mathbf{k} - \frac{\mathbf{v}}{v} \left( \frac{v}{2} + \frac{\omega}{v} \right). \quad (21)$$

Фурье-компонента  $g_m(\mathbf{q})$  в (19) легко вычисляется:

$$g_m(\mathbf{q}) = \frac{2^3 (\pi Z_M^5)^{1/2}}{(Z_M^2 + q^2)^2}. \quad (22)$$

Факторизуя затем угловую и радиальную части фурье-преобразования  $g^*(\mathbf{p})$  в (19) для перехода в состояние  $(nlm)$  образующегося иона  $X^{(q-1)+}$ , получим амплитуду вероятности в виде

$$a(\mathbf{B}_\mp) = \frac{8 Z_M^{5/2} C_{lm}}{v} \times$$

$$\times \int_0^\infty \frac{P_l^m(\cos \theta_p) \tilde{R}_{nl} \left( \sqrt{k^2 + (v/2 + \omega/v)^2} \right)}{(Z_M^2 + k^2 + (v/2 - \omega/v)^2)^2} \times J_m(k|\mathbf{B}_\mp|) k dk, \quad (23)$$

$$C_{lm} = [(2l + 1)(l - m)!/(l + m)!]^{1/2},$$

$$\cos \theta_p = \frac{v/2 + \omega/v}{\sqrt{k^2 + (v/2 + \omega/v)^2}},$$

$P_l^m$  — присоединенный полином Лежандра,  $J_m$  — функция Бесселя и

$$|\mathbf{B}_\mp| = (b^2 + \rho_\perp^2/4 \mp b\rho_\perp \cos(\phi_b - \phi_\rho))^{1/2} \quad (24)$$

с азимутальным углом  $\phi_b$  параметра удара  $\mathbf{b}$ . Функция  $\tilde{R}_{nl}$  является радиальной частью фурье-преобразования  $g^*(\mathbf{p})$ :

$$\tilde{R}_{nl}(p) = \int_0^\infty R_{nl}(r) j_l(pr) V(r) r^2 dr, \quad (25)$$

где  $j_l(x)$  — сферическая функция Бесселя.

Используя уравнения (17) и (18), получаем вероятность перезарядки

$$P(\mathbf{b}, v) = |a(\mathbf{b}, v)|^2 = (N_t^\pm)^2 [|a_1|^2 + |a_2|^2 \pm 2a_1 a_2 \cos(q_z \rho_z)], \quad (26)$$

где  $a_1 = a(\mathbf{B}_-)$ ,  $a_2 = a(\mathbf{B}_+)$ . Последний член в квадратных скобках справа в формуле (26) определяет интерференцию между амплитудами  $a_1$  и  $a_2$  при рассеянии на двух центрах в молекуле  $\text{H}_2$ . Парциальное сечение одноэлектронной перезарядки для фиксированной ориентации молекулы  $\text{H}_2$  получается путем интегрирования вероятности захвата (26) по полярным координатам  $(b, \phi_b)$  вектора  $\mathbf{b}$ :

$$\sigma(\theta_\rho, \phi_\rho) = 2 \int P(\mathbf{b}, v) d^2\mathbf{b}, \quad d^2\mathbf{b} = b db d\phi_b, \quad (27)$$

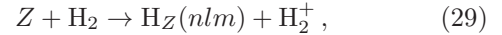
где множитель 2 связан с тем фактом, что любой из двух электронов молекулы может быть захвачен. Наконец, парциальное сечение перезарядки, усредненное по всем ориентациям молекулы, вычисляется по формуле

$$\sigma(v) = \frac{1}{4\pi} \int \sigma(\theta_\rho, \phi_\rho) d\Omega_\rho, \quad (28)$$

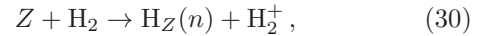
где  $d\Omega_\rho = \sin \theta_\rho d\theta_\rho d\phi_\rho$ .

## 2.2. Голые ядра

Рассмотрим случай, когда налетающее голое ядро с зарядом  $Z$  захватывает электрон у молекулы водорода



где  $\text{H}_Z$  — атом водорода или водородоподобный ион. В различных приложениях часто требуется знать вероятности захвата и сечения перезарядки для реакции



т.е. просуммированные по квантовым числам  $(lm)$ . Чтобы получить замкнутую аналитическую формулу для IP-амплитуды перезарядки

$$|a_n|^2 = \sum_{lm} |a_{nlm}|^2,$$

соответствующей реакции (30), в настоящей работе применялся подход, аналогичный использовавшемуся в работе [22] для случая ион-атомных столкновений. С этой целью применялось правило суммы [26] для фурье-преобразований водородоподобных волновых функций, чтобы получить фурье-компоненту  $g_n(p)$  (см. уравнения (13) и (19)), усредненную по  $l$  и  $m$ :

$$|g_n(p)|^2 = \sum_{lm} |g_{nlm}(p)|^2 = \frac{2^4 \pi Z^5}{n^3(p^2 + Z^2/n^2)^2} = \frac{2^4 \pi Z^5}{n^3(q^2 + 2I_M)^2}. \quad (31)$$

Предполагая, что дефект резонанса  $\omega$  реакции (30) в приближении водородоподобных функций слабо зависит от квантовых чисел  $l$  и  $m$  и подставляя амплитуды  $|g_n(p)|$  из формулы (31) и  $g_m(q)$  из формулы (22) в (18), окончательно получаем IP-амплитуду перезарядки для реакции (30):

$$a_n(\mathbf{B}_\mp) = \frac{2^4 (Z_M Z)^{5/2}}{v n^{3/2} (Z_M^2 - 2I_M)^2} \times \left[ \frac{(Z_M^2 - 2I_M) |\mathbf{B}_\mp| K_1(x_\mp)}{2(q_z^2 + Z_M^2)^{1/2}} + K_0(x_\mp) - K_0(y_\mp) \right], \quad (32)$$

$$x_\mp = |\mathbf{B}_\mp| (q_z^2 + Z_M^2)^{1/2},$$

$$y_\mp = |\mathbf{B}_\mp| (q_z^2 + 2I_M)^{1/2},$$

где  $K_0$  и  $K_1$  — функции Макдональда нулевого и первого порядков соответственно. Используя формулу (32) в выражениях (26) — (28), можно найти вероятности захвата  $P_n(\mathbf{b}, v)$  и парциальные сечения перезарядки  $\sigma_n(\theta_\rho, \phi_\rho)$  (уравнение (27)) и  $\sigma_n(v)$  (уравнение (28)) для процесса (30).



### 2.3. Нормированные вероятности перезарядки и асимптотика при больших энергиях

Поскольку выражение (18) для амплитуды перезарядки выведено в первом порядке теории возмущений, соответствующие вероятности и сечения перезарядки часто оказываются значительно завышенными по сравнению с экспериментом, особенно в области малых относительных скоростей  $v \lesssim \sqrt{2|\omega|}$ . В этом случае вероятности переходов становятся больше 1 из-за нарушения условия унитарности в задаче рассеяния. Для преодоления этой проблемы в настоящей работе применяется метод многоканальной нормировки для вероятности перезарядки (26), ранее также использовавшийся в [22] для рассмотрения ион-атомных столкновений. Нормированные вероятности перезарядки  $P^{(N)}(\mathbf{b}, v)$  вычисляются следующим образом:

$$P_n^{(N)}(\mathbf{b}, v) = \frac{P_n(\mathbf{b}, v)}{1 + \sum_{k=n_0}^{n_{max}} P_k(\mathbf{b}, v)}, \quad (33)$$

где  $P_n(\mathbf{b}, v)$  — ненормированная вероятность одноэлектронной перезарядки в состоянии  $n$  налетающего иона; сумма в знаменателе распространяется на все конечные состояния  $k$  образующегося иона  $X^{(q-1)+}$ ;  $n_0$  — минимальное главное квантовое число, соответствующее нижней электронной оболочке иона  $X^{(q-1)+}$ ;  $n_{max}$  — максимальное главное квантовое число, учитываемое в расчетах. Процедура нормировки играет роль при низких и средних относительных скоростях ( $v/q^{1/2} \lesssim 1 - 2$ ).

Другой важный момент, который учитывается в настоящей работе, касается асимптотического поведения сечений одноэлектронной перезарядки при больших относительных скоростях сталкивающихся частиц ( $v/q^{1/2} \gg 1$ ). В работе [27] на примере столкновения  $H^+ + H$  было показано, что в пределе больших скоростей сечение перезарядки, вычисленное с учетом второго порядка борновского приближения, составляет около 1/3 от сечения, рассчитанного в БК-приближении. Аналогичный результат был получен в [28] для реакций, связанных с столкновениями  $H^+ + H$  и  $H^+ + He$ . Реакция  $H^+ + H_2$  была исследована во втором порядке приближения Борна в работе [29], где было показано, что коэффициент, равный примерно 1/3, также сохраняется. Основываясь на этих результатах, выражение (33) переписываем в виде

сываем в виде

$$P_n^{(N)}(\mathbf{b}, v) = \frac{\frac{1}{3}P_n(\mathbf{b}, v)}{1 + \frac{1}{3} \sum_{k=n_0}^{n_{max}} P_k(\mathbf{b}, v)}. \quad (34)$$

Используя нормированные вероятности перезарядки (34) для вычисления парциальных сечений  $\sigma_n(\theta_\rho, \phi_\rho)$  и  $\sigma_n(v)$  в соответствии с уравнениями (27) и (28), можно затем получить полные сечения перезарядки  $\sigma_{tot}(v)$ , суммируя парциальные сечения по  $n$ :

$$\sigma_{tot}(v) = \sum_{n=n_0}^{n_{max}} \sigma_n(v). \quad (35)$$

### 2.4. Многозарядные ионы

Для налетающих ионов с электронной оболочкой (будем называть их многозарядными ионами) радиальные функции  $R_{nl}(r)$  оптического (или захваченного) электрона в уравнении (25) рассматриваются в настоящей работе как водородоподобные, т.е.

$$R_{nl}^{Z^*}(r) = (Z^*)^{3/2} R_{nl}^H(Z^*r), \quad (36)$$

где  $R_{nl}^H(r)$  являются радиальными функциями атома водорода, а  $Z^*$  — эффективный заряд, в котором движется оптический электрон в образовавшемся ионе  $X^{(q-1)+}$  (см. также [22] для деталей). Имеются две существенные причины для использования водородоподобных волновых функций. Во-первых, захват электрона в высоковозбужденные (водородоподобные) состояния многозарядных ионов вносит заметный вклад (для  $n \sim q$ ) в полные сечения перезарядки. Во-вторых, численные расчеты сечений перезарядки в этом случае существенно упрощаются (см. разд. 2.2).

Эффективный заряд  $Z^*$  в водородоподобном приближении берется в виде

$$Z^* = n\sqrt{2I_n}, \quad (37)$$

где  $I_n$  — усредненная по электронной оболочке с номером  $n$  энергия связи захваченного электрона в конечном состоянии  $n$  образовавшегося иона  $X^{(q-1)+}$ . Когда  $n$  растет,  $Z^*$  асимптотически приближается к значению заряда  $q$  налетающего иона  $X^{q+}$ . Обычно достаточно найти энергии связи  $I_n$  для нескольких ( $\approx 4-7$ ) первых оболочек, начиная с нижней электронной оболочки  $n_0$ , чтобы получить условие  $Z^* \simeq q$  с хорошей точностью.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

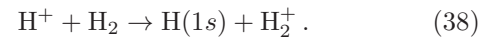
Для расчетов вероятностей и сечений перезарядки можно использовать разные волновые функции мишени  $\Phi_M$  и  $\Phi_I$  в зависимости от значений параметров  $c$ ,  $Z_M$  и  $Z_I$ . Для эффективного заряда молекулярного иона использовалось значение  $Z_I = 1.4$ . В случае волновой функции молекулы  $H_2$  в расчетах обычно используют три набора параметров  $c$  и  $Z_M$ : для волновой функции, соответствующей предельным атомным орбиталам,  $c = 0$ ,  $Z_M = 1.166$  [30]; для промежуточной волновой функции Вайнбаума  $c = 0.256$ ,  $Z_M = 1.193$  [31]; для предельных молекулярных орбиталей  $c = 1$ ,  $Z_M = 1.193$ . Отличия в расчетах при использовании указанных трех наборов параметров для волновой функции молекулы  $H_2$  в столкновении  $H^+ + H_2$  обсуждались в работах [8, 10], в которых авторы получили незначительные расхождения в результатах. В настоящей работе представлены результаты расчетов, выполненные с волновой функцией Вайнбаума [31]; эта функция также использовалась во многих исследованиях (см., например, [8, 10, 11, 14]) и считается в целом наилучшей волновой функцией молекулы  $H_2$  из указанных выше. Также, в соответствии с принципом Франка–Кондона, межъядерное расстояние  $\rho$  между протонами в молекуле  $H_2$  в расчетах принималось равным  $\rho = 1.4$  а.е.д. до и после столкновения.

Далее, переходы в нечетное (ungerade) состояние иона  $H_2^+$  в расчетах не учитывались. Расчеты, выполненные в настоящей работе, показали, что вклад в нечетное состояние пренебрежимо мал в сравнении с вкладом для перехода в четное (gerade) состояние иона  $H_2^+$ . В случае волновой функции Вайнбаума разница для переходов в четное и нечетное состояния составляет приблизительно порядок величины. Аналогичные выводы о переходах в нечетное состояние и его незначительном вкладе в сечения перезарядки в сравнении с четным состоянием были также получены в работах [8, 10, 14].

#### 3.1. Зависимость вероятностей перезарядки $P(\mathbf{b})$ от ориентации молекулы

Рассмотрим сначала зависимость вероятности перезарядки  $P(\mathbf{b})$  (см. уравнение (26)) как функции параметра удара  $b$  от различных ориентаций молекулярной оси. Плоскость рассеяния при этом предполагается фиксированной при азимутальном угле  $\phi_b = 0$  параметра удара  $\mathbf{b}$  и рассматривается также как базисная плоскость для ориентации молекулы.

Зависимость вероятности  $P(\mathbf{b})$  от ориентации молекулы  $H_2$  иллюстрируется на примере реакции переноса заряда



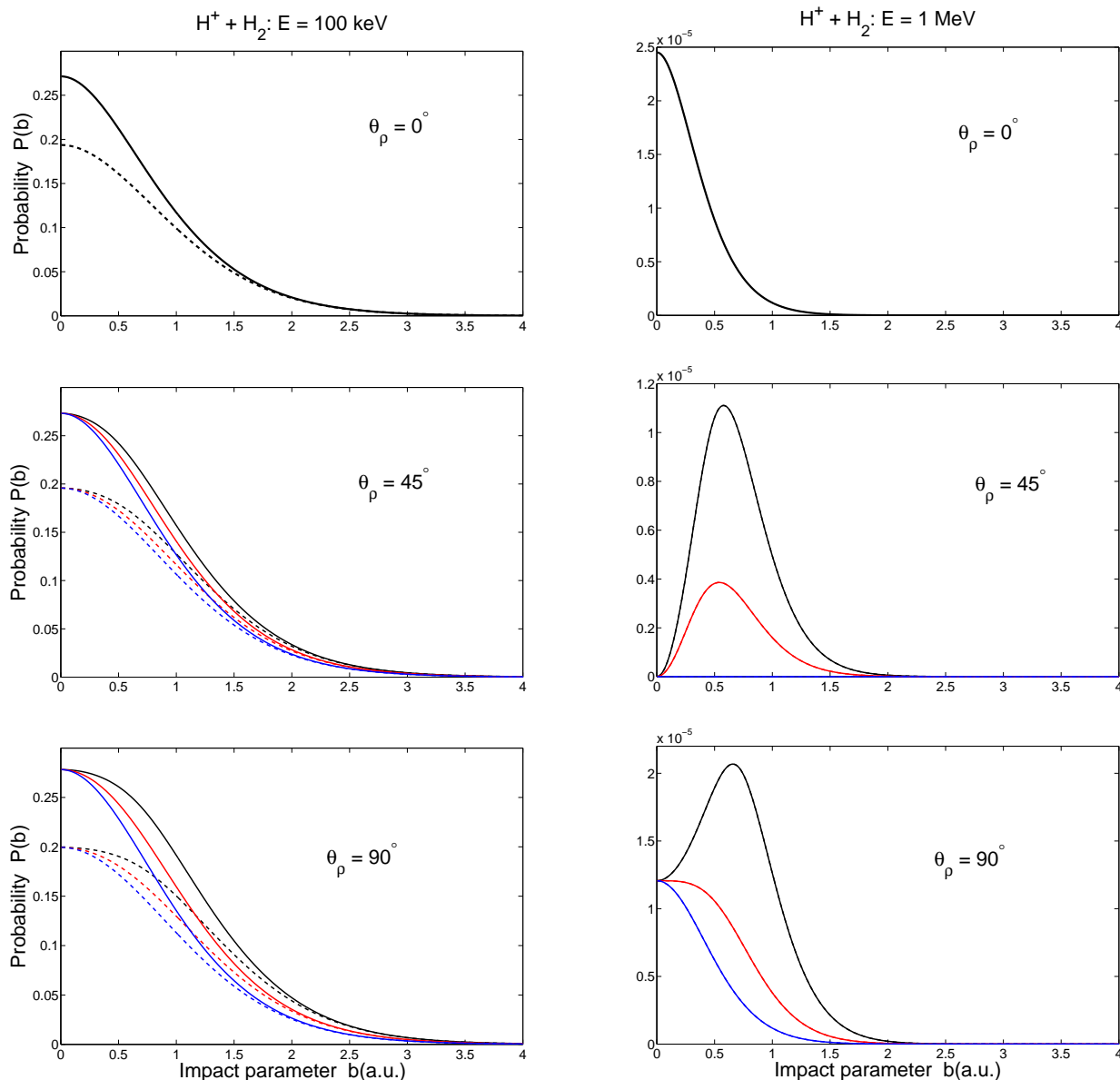
На рис. 1 вероятности перезарядки  $P(\mathbf{b})$  представлены как функции параметра удара для энергий столкновения 100 кэВ и 1 МэВ при фиксированных ориентациях молекулярной оси, соответствующих углам  $\theta_\rho$  и  $\phi_\rho$ , равным 0, 45° и 90°.

На рис. 1 видно, что величина  $P(\mathbf{b})$  слабо зависит от азимутального угла  $\phi_\rho$  для средней энергии столкновения 100 кэВ и полярных углов  $\theta_\rho = 45^\circ$  и  $90^\circ$ . Этот вывод находится в согласии с результатами работы [13]. Зависимость вероятности перезарядки от угла  $\phi_\rho$  для большой энергии 1 МэВ становится более существенной. Далее, как видно на рис. 1, процедура нормировки заметно уменьшает вероятности перезарядки при 100 кэВ, тогда как для энергии 1 МэВ нормированные вероятности  $P(\mathbf{b})$  практически совпадают с ненормированными. Численные расчеты показывают, что нормировка вероятностей играет существенную роль для энергий столкновения  $\sim 10$ –100 кэВ, а при энергиях  $\gtrsim 200$  кэВ ее влияние становится незначительным. Расчеты вероятностей перезарядки, выполненные в настоящей работе для энергии столкновения 1 МэВ, хорошо согласуются с результатами [14], которые также были получены для процесса (38) в IP-приближении.

#### 3.2. Зависимость сечений перезарядки от ориентации молекулы

Интерференция между амплитудами рассеяния от двух ядерных центров мишени  $H_2$  приводит к ориентационным эффектам в сечениях перезарядки. Процесс переноса возбуждения в столкновениях быстрых протонов (0.3, 0.7, 1.0 и 1.3 МэВ) с молекулами  $H_2$  был экспериментально исследован в работах [32, 33], где соответствующие дифференциальные сечения измерялись как функции полярного угла  $\theta_\rho$  между осью молекулы и траекторией налетающего иона. Эти измерения выявили существенную угловую зависимость от ориентации молекул из-за интерференционных эффектов, связанных с наличием двух атомных центров в молекуле  $H_2$ .

Метод, представленный в настоящей работе, также применяется к расчетам дифференциальных сечений одноэлектронной перезарядки в столкновениях  $H^+ + H_2$  и сравнивается с экспериментальными данными [32, 33] и с результатами других теоретических расчетов. Значения дифференциальных се-



**Рис. 1.** Вероятность перезарядки  $P(\mathbf{b})$  для реакции  $\text{H}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}_2^+$  как функция параметра удара  $b$  при энергиях 100 кэВ (левая колонка) и 1 МэВ (правая колонка) для разных ориентаций молекулы  $\text{H}_2$ . Сплошные кривые соответствуют ненормированным, а штриховые кривые — нормированным вероятностям (в правой колонке, при энергии 1 МэВ, сплошные и штриховые кривые практически совпадают). Цветные кривые маркируют разные азимутальные углы:  $\phi_\rho = 0^\circ$  (черный),  $\phi_\rho = 45^\circ$  (красный),  $\phi_\rho = 90^\circ$  (синий). При энергии 1 МэВ и для ориентации  $\theta_\rho = 45^\circ$  и  $\phi_\rho = 90^\circ$ ,  $P(\mathbf{b})$  пренебрежимо мало, но имеет максимум при  $b = 0$

чений получаются путем интегрирования по полярным координатам  $(b, \phi_b)$  параметра удара  $\mathbf{b}$  в уравнении (27), где плоскость рассеяния берется фиксированной при угле  $\phi_b = 0$  и является базисной плоскостью для обоих азимутальных углов  $\phi_b$  и  $\phi_\rho$ . Вероятность перезарядки  $P(\mathbf{b}, v)$  содержит угол  $\phi_\rho$  в виде разности  $(\phi_b - \phi_\rho)$  (см. уравнение (24)). В резуль-

тате, интегрирование в уравнении (27) по углу  $\phi_b$  снимает зависимость от угла  $\phi_\rho$  и приводит к дифференциальному сечению  $d\sigma/d(\cos\theta_\rho)$  как функции полярного угла  $\theta_\rho$ .

На рис. 2 представлены кривые зависимостей дифференциальных сечений перезарядки для реакции  $\text{H}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}(n) + \text{H}_2^+$  для энергий столкнове-



ния 0.3, 0.7, 1.0 и 1.3 МэВ. Расчеты сравниваются с измерениями [32, 33] для относительных дифференциальных сечений. На рис. 2 показаны два расчета, полученных в настоящей работе: (i) одноэлектронная перезарядка в состоянии  $1s$  налетающего иона (сплошная зеленая кривая) и (ii) сумма дифференциальных сечений по состояниям  $n = 1-100$  (сплошная черная кривая). На рис. 2 видно, что эти две кривые практически не отличаются для всех приведенных энергий. Настоящие расчеты также сравниваются с расчетами из [32] (штриховые кривые), основанными на IP-методе [14], и результатами [12] (штрихпунктирные кривые), основанными на первом борновском приближении с корректными граничными условиями (В1В). Все расчеты, представленные на рис. 2, учитывают только канал электронного захвата в общем процессе передачи возбуждения и основываются на предположении, что оставшее возбуждение не влияет на угловую зависимость (см. [32]). Следует отметить, что экспериментальные исследования [34] по перезарядке в столкновениях  $H^+ + H_2$  показали, что процессы диссоциации и ионизации не вносят заметного вклада в сравнении с механизмами недиссоциативного переноса заряда.

Рисунок 2 показывает, что наблюдаемые вариации численных и экспериментальных данных качественно находятся в согласии, которое также улучшается количественно с увеличением энергии столкновения. Это, очевидно, является следствием использования первого порядка борновского приближения, которое имеет тенденцию к улучшению численных результатов с ростом энергии столкновения. Результаты всех расчетов относительно близки для энергий 0.3 и 1.3 МэВ, тогда как для 0.7 и 1.0 МэВ они заметно различаются. Настоящие расчеты и измерения также имеют очень хорошее согласие в области значений полярных углов  $\theta_p \approx 60^\circ-120^\circ$  для энергий 0.7, 1.0 и 1.3 МэВ.

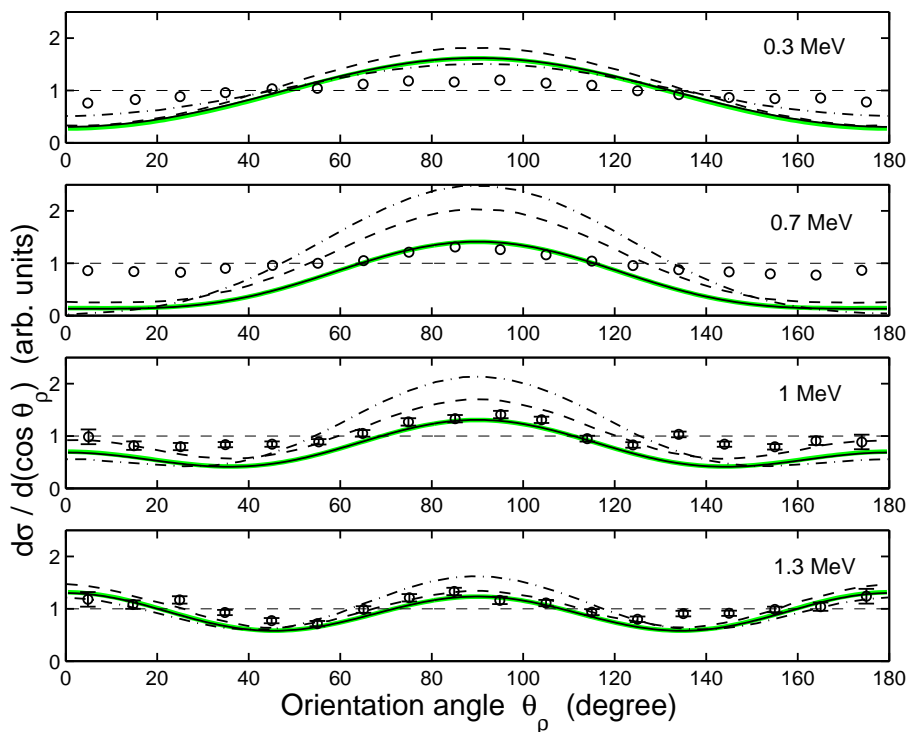
### 3.3. Полные сечения перезарядки: налетающие голые ядра

Эксперименты, связанные с измерениями сечений перезарядки в ион-молекулярных столкновениях, обычно содержат информацию о столкновительных характеристиках, усредненных по всем молекулярным ориентациям. Более того, в различных приложениях часто требуются полные сечения перезарядки как функции энергии (или относительной скорости) столкновения, усредненные по ориентациям молекулы и просуммированные по кван-

товым числам  $n$  конечных состояний налетающего иона. Ниже рассчитанные в настоящей работе полные сечения одноэлектронной перезарядки (см. уравнение (35)) для нескольких налетающих ионов, являющихся голыми ядрами, сравниваются с экспериментальными данными и результатами других расчетов.

Рисунок 3 демонстрирует результаты расчетов с помощью метода, представленного в настоящей работе, для процесса захвата электрона у молекулы  $H_2$  протоном  $H^+$  в диапазоне энергий 2–8000 кэВ/нуклон, которые сравниваются с измерениями и другими расчетами. На рис. 3 приведены расчеты, основанные на следующих теоретических методах (с указанием диапазонов энергий, для которых соответствующие расчеты были проведены): (1) модель сильной связи с атомными орбиталями (АО — atomic-orbital) [13], в которой волновая функция молекулярной мишени  $H_2$  записывается в виде линейной комбинации атомных орбиталей для двух атомов молекулы, а амплитуда перезарядки представляется в первом порядке теории возмущений (АО 1); (2) метод классических траекторий Монте-Карло [16, 17] (СТМС 1) и тот же метод с некоторыми модификациями [18] (СТМС 2); (3) молекулярная версия первого порядка борновского приближения с корректными граничными условиями (В1В) и приближение Опенгеймера–Бринкмана–Крамерса (ОВК) из [35]; (4) метод искаженных кулоновских волн (CDW), представленный работами [19] (CDW 1) и [20] (CDW 2). Большинство экспериментальных измерений на рис. 3 взяты из компилированных данных, собранных в [36], и несколько измерений в области больших энергий 2–8 МэВ/н воспроизведены из [37]. Стоит отметить заметную дисперсию в экспериментальных данных, представленных на рис.3. Рекомендованные данные [38], собранные и оцененные на основе опубликованных экспериментальных и теоретических данных, также представлены на рис.3 и в среднем хорошо описывают измерения, собранные в [36].

Расчеты, представленные на рис. 3 и основанные на методах АО 1, В1В и ОВК, соответствуют захвату электрона только в состояние  $1s$  атома  $H$  и поэтому они недооценивают вклад перезарядки в состоянии налетающего протона с  $n > 1$ . В то же время, расчеты, основанные на приближениях CDW 1 и CDW 2, учитывают электронный захват в состояния с  $n > 3$  с помощью экстраполяции  $n^{-3}$  (см. разд. 1). Результаты метода ОВК [35] демонстрируют хорошо известную переоценку данных измерений фактора



**Рис. 2.** Угловые распределения дифференциальных сечений одноэлектронной перезарядки для столкновения  $H^+ + H_2$  при энергиях 0.3, 0.7, 1.0 и 1.3 МэВ как функции полярного угла  $\theta_\rho$ . Кружки обозначают экспериментальные данные [32, 33] для процесса переноса возбуждения (интервал погрешностей для энергий 0.3 и 0.7 МэВ соответствует размеру кружков). Сплошные кривые представляют результаты настоящей работы: толстые зеленые кривые соответствуют захвату электрона в состояние  $1s$  налетающего иона, а тонкие черные кривые представляют полные дифференциальные сечения, просуммированные по состояниям  $n = 1 - 100$ . Штриховые кривые — это расчеты [32], основанные на IP-формализме [14]. Штрихпунктирные линии представляют расчеты [12] методом В1В (см. текст). Тонкие горизонтальные штриховые линии — сечения (приведенные к единице) без учета интерференционного члена при расчете сечений

3, который можно учесть во втором порядке приближения Борна (см. разд. 2.3). Далее, на рис. 3а видно, что при низких энергиях,  $E \lesssim 25$  кэВ/нуклон (относительная скорость  $v \lesssim 1$ ), результаты настоящей работы заметно превышают другие расчеты и измерения, что связано с использованием основанного на теории возмущений приближения Борна. При низких энергиях столкновения преобладает квази-резонансный механизм захвата, который не учитывается в рамках борновского приближения. В области средних ( $v \sim 1$ ) и относительно высоких энергий ( $E \approx 100 - 500$  кэВ/нуклон,  $v \approx 2 - 4$ ), настоящие расчеты превышают результаты методов CDW 1 и CDW 2, хорошо согласуются с расчетами В1В и в среднем находятся в согласии с измерениями в пределах 30–50%. Рис. 3b показывает, что при больших энергиях  $E \approx 0.5 - 8$  кэВ/нуклон результаты настоящей работы согласуются очень хорошо с расчетами В1В и CDW 1 и лучше описывают измерения [37]

в пределах около 20% за исключением одной точки при 2 МэВ/н.

На рис. 4 представлены полные сечения одноэлектронной перезарядки для молекулярной мишени  $H_2$  в столкновениях с ионами  $He^{2+}$ . В дополнение к численным расчетам, выполненным с помощью приведенных на рис. 3 методов, также представлены расчеты, выполненные в [39] для одноэлектронной перезарядки в области низких и средних энергий (2–100 кэВ/нуклон) с помощью модели сильной связи с атомными орбиталями (АО 2) с некоторыми улучшениями и модификациями в сравнении с методом АО 1 [13]. Расчеты методом АО 1 на рис.4 включают только захват в состояния с  $n = 1$  и  $n = 2$  иона  $He^+$ . Результаты В1В [40] получены расчетом сечений перезарядки в состояния с  $n = 1$  и 2, а состояния с  $n > 2$  учтены с помощью экстраполяции  $n^{-3}$ . Экспериментальные данные на рис. 4 представлены в основном компиляцией из [36], а также из

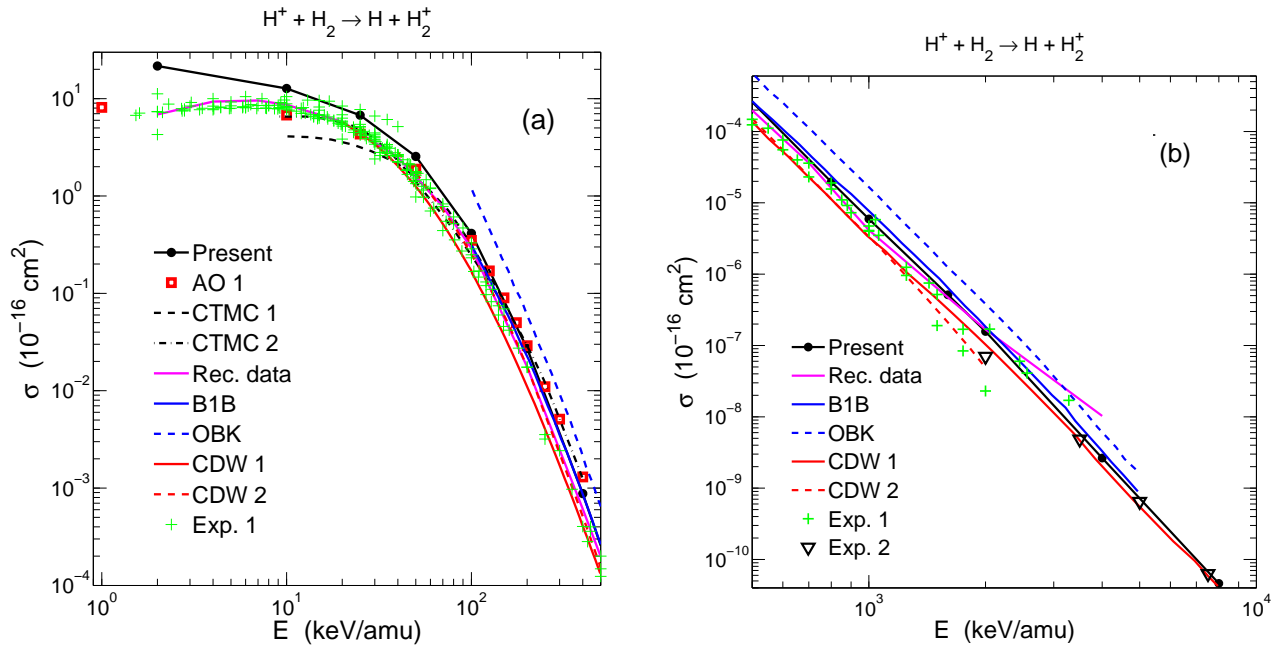


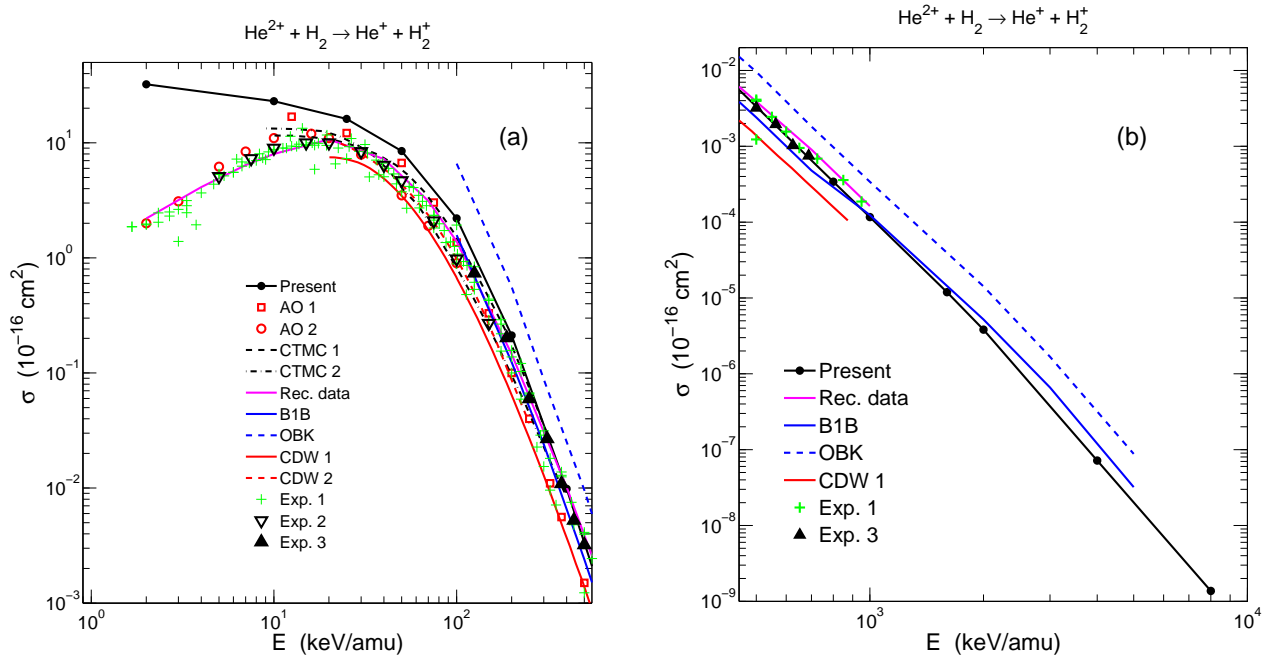
Рис. 3. Полные сечения одноэлектронной перезарядки (уравнение (35)) в столкновениях  $H^+ + H_2$  для энергий 2–500 кэВ/нуклон (а) и 0.5–8 МэВ/н (b). Расчеты: сплошные черные кривые с закрашенными кружками — настоящая работа; красные квадратики — АО 1 [13] (1–400 кэВ/нуклон); штриховая черная кривая — СТМС 1 [16, 17] (10–150 кэВ/нуклон); штрихпунктирная черная кривая — СТМС 2 [18] (10–400 кэВ/нуклон); сплошные пурпурные кривые — рекомендованные данные [38] (2–4000 кэВ/нуклон); сплошные синие кривые — В1В [35] (0.1–5 МэВ/н); штриховые синие кривые — ОБК [35] (0.1–5 МэВ/н); сплошные красные кривые — CDW 1 [19] (0.02–8 МэВ/н); штриховые красные кривые — CDW 2 [20] (40–2000 кэВ/нуклон). Эксперимент: зеленые крестики — компилированные данные из [36]; перевернутые треугольники — [37]

мерениями [41] и недавними данными [42]. Для области энергий на рис. 4а можно сделать аналогичные выводы, как и для рис. 3а: результаты настоящей работы демонстрируют превышение над другими расчетами и измерениями при относительных скоростях  $v \lesssim 1$  и имеют хорошее согласие с рекомендованными и экспериментальными данными при  $v \approx 2 - 4$ . Также стоит отметить очень хорошее согласие настоящих расчетов с недавними измерениями [42] на рис. 4а и b, особенно для энергий около 300–700 кэВ/нуклон, в пределах 20%.

Рисунок 5 демонстрирует данные для полных сечений перезарядки в столкновениях молекулы  $H_2$  с ионами  $V^{5+}$  (диаграмма а) и  $C^{6+}$  (диаграмма b). Для этих более тяжелых ионов имеющиеся расчеты и измерения не так многочисленны, как в случае ионов  $H^+$  и  $He^{2+}$ . Для иона  $V^{5+}$  настоящие расчеты сравниваются с расчетами СТМС 2 [18] и экспериментальными данными [36, 43]. При энергиях около 100–200 кэВ/нуклон результаты СТМС 2 недооценивают измерения из [36], тогда как результа-

ты настоящей работы переоценивают экспериментальные данные [36] в пределах приблизительно 50%. Недавние измерения [43] удовлетворительно согласуются с настоящими расчетами: при энергии 334 кэВ/нуклон согласие находится в пределах 30%, а для энергии 752 кэВ/нуклон эксперимент превышает расчет приблизительно в 2 раза.

Для иона  $C^{6+}$  результаты настоящей работы сравниваются с расчетами СТМС 1 [16, 17] и СТМС 2 [18], а также с рекомендованными данными [44] и измерениями [36, 45, 46]. На рис. 5b видно, что настоящие расчеты хорошо согласуются с результатами СТМС 1 и СТМС 2 при средних ( $v \sim 1$ ) и больших энергиях столкновения и с рекомендованными данными при энергиях около 100–1300 кэВ/нуклон. Далее, стоит заметить, что наблюдается очень хорошее согласие между настоящими результатами и компилированными экспериментальными данными [36] (включая даже область низких энергий) в пределах около 30%. Кроме того, расчеты настоящей работы очень хо-



унках

**Рис. 4.** То же, что на рис. 3 в столкновениях  $\text{He}^{2+} + \text{H}_2$  для энергий 2–500 кэВ/нуклон (a) and 0.5–8 МэВ/н (b). Расчеты: сплошные черные кривые с закрашенными кружками — настоящая работа; красные квадратики — АО 1 [13] (10–500 кэВ/нуклон); красные кружки — АО 2 [39] (2–100 кэВ/нуклон); штриховая черная кривая — СТМС 1 [16, 17] (10–300 кэВ/нуклон); штрихпунктирная черная кривая — СТМС 2 [18] (10–400 кэВ/нуклон); сплошные пурпурные кривые — рекомендованные данные [38] (2–1000 кэВ/нуклон); сплошные синие кривые — B1B [40] (0.1–5 МэВ/н); штриховые синие кривые — OBK [40] (0.1–5 МэВ/н); сплошные красные кривые — CDW 1 [19] (20–900 кэВ/нуклон); штриховые красные кривые — CDW 2 [20] (20–250 кэВ/нуклон). Эксперимент: зеленые крестики — компилированные данные из [36]; перевернутые треугольники — [41]; закрашенные треугольники — [42]

**Таблица 1.** Полные сечения одноэлектронной перезарядки для столкновения  $\text{O}^{8+} + \text{H}_2$

$E$ , кэВ/нуклон	500	625	781	1000	1250
$\sigma$ , $10^{-16}$ см <sup>2</sup>	0.184	$6.62 \cdot 10^{-2}$	$2.39 \cdot 10^{-2}$	$7.93 \cdot 10^{-3}$	$2.97 \cdot 10^{-3}$
Данная работа					
$\sigma$ , $10^{-16}$ см <sup>2</sup>	0.56	0.18	$7.2 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-2}$	$9.6 \cdot 10^{-3}$
[15]					

рошо согласуются с измерениями [45] — в пределах 10%. Согласие с экспериментом [46] находится в пределах около 50%, причем расчет переоценивает измерение для энергии 833 кэВ/нуклон, тогда как при 1830 кэВ/нуклон настоящий результат недооценивает эксперимент. Сравнение расчетов и имеющихся измерений для налетающих ионов  $\text{V}^{5+}$  и  $\text{C}^{6+}$  показывает, что для надежных выводов о точности теоретических методов, использу-

ющихся в расчетах сечений перезарядки, требуется существенно больше экспериментальных данных.

В работе [15] расчеты полных сечений одноэлектронной перезарядки в столкновениях  $\text{O}^{8+} + \text{H}_2$  также рассматривались в IP-представлении для энергий 500, 625, 781, 1000 и 1250 кэВ/нуклон. Вклад в полное сечение захвата электрона в состоянии  $n > 1$  в [15] учитывался путем использования водородоподобных волновых функций  $u_n(Z) = n u_{1s}(Z/n)$

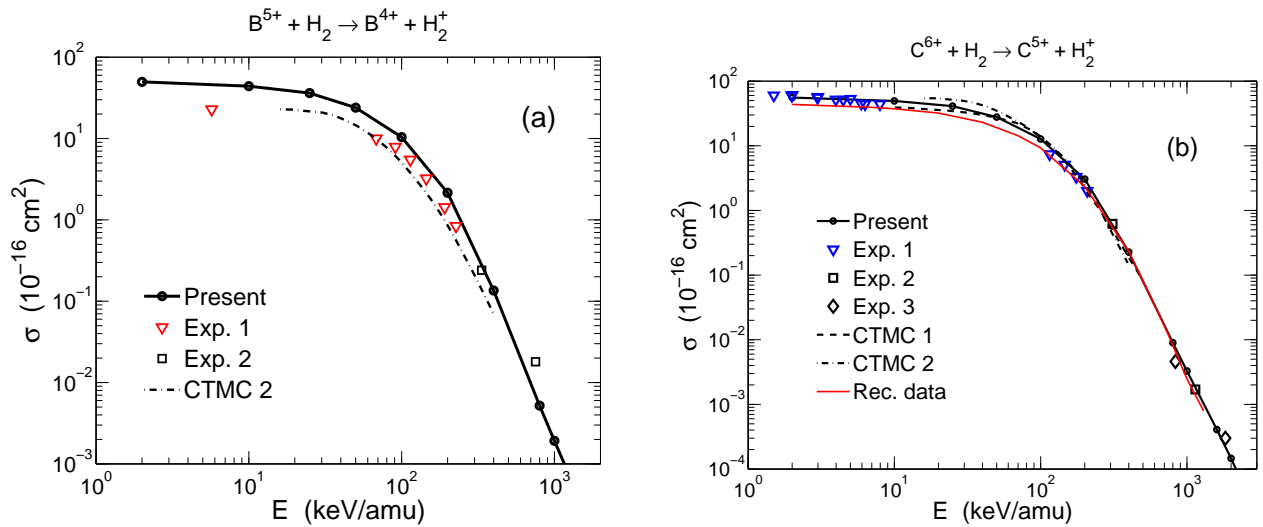


Рис. 5. То же, что на рис. 3 в столкновениях  $B^{5+} + H_2$  для энергий 2–1000 кэВ/нуклон (a) и в столкновениях  $C^{6+} + H_2$  для энергий 2–2000 кэВ/нуклон (b). Расчеты: сплошные черные кривые с закрашенными кружками — настоящая работа; штриховая черная кривая — СТМС 1 [16, 17] (10–500 кэВ/нуклон); штрихпунктирная черная кривая — СТМС 2 [18] (15–400 кэВ/нуклон); сплошная красная кривая на диаграмме (b) — рекомендованные данные [44] (2–1300 кэВ/нуклон). Эксперимент: перевернутые треугольники на диаграммах (a) и (b) — компилированные данные из [36]; квадратики на диаграмме (a) — из [43]; квадратики на диаграмме (b) — данные [45]; ромбики на диаграмме (b) — данные [46]

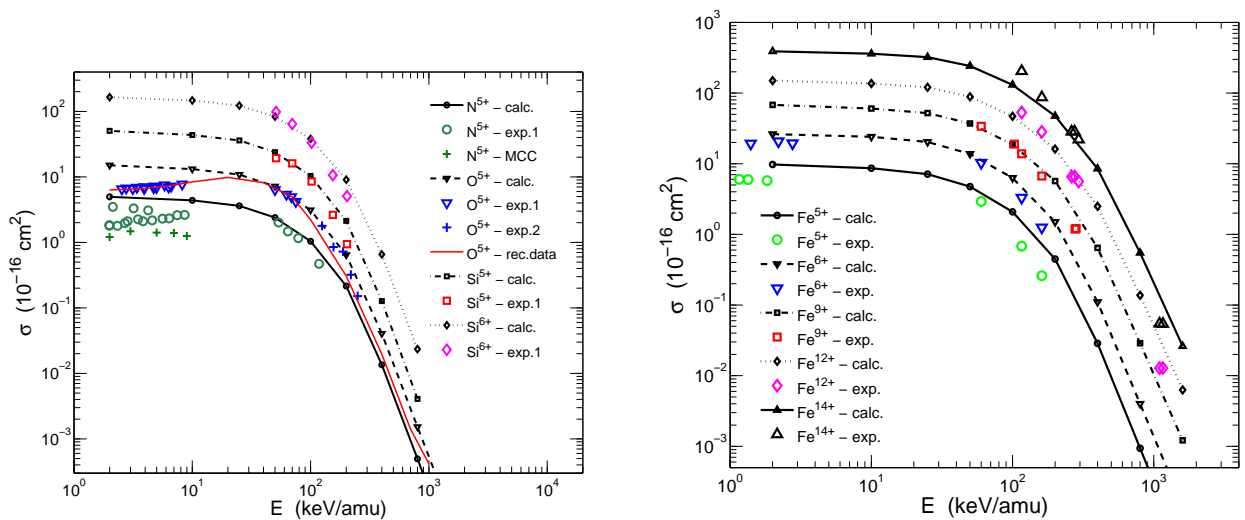


Рис. 6. Полные сечения одноэлектронной перезарядки в столкновениях  $X^{q+} + H_2$  для ионов  $X^{q+} = \{N^{5+}, O^{5+}, Si^{5+}, Si^{6+}\}$  (на левой диаграмме) и  $X^{q+} = \{Fe^{5+}, Fe^{6+}, Fe^{9+}, Fe^{12+}, Fe^{14+}\}$  (на правой диаграмме). Представленные данные для сечений масштабированы следующим образом:  $N^{5+} \times 0.1$ ,  $O^{5+} \times 0.3$ ,  $Si^{6+} \times 3$ ,  $Fe^{5+} \times 0.2$ ,  $Fe^{6+} \times 0.5$ ,  $Fe^{12+} \times 2$ ,  $Fe^{14+} \times 5$ . Расчеты: результаты настоящей работы обозначены как «calc.»; зеленые крестики на левой диаграмме — метод молекулярной сильной связи (MCC — molecular close-coupling) [48] для иона  $N^{5+}$ ; сплошная красная кривая на левой диаграмме — рекомендованные данные [44] для иона  $O^{5+}$ . Эксперимент: данные, обозначенные как «exp.1» на левой диаграмме и «exp.» на правой, из работы [36]; данные, обозначенные как «exp.2», из работы [49] для иона  $O^{5+}$ . Для упрощения зрительного восприятия кривые с результатами расчетов обозначаются теми же значками, что и соответствующие экспериментальные данные



(см., например, [47]) для конечных состояний иона. В таблице приведено сравнение настоящих расчетов с данными [15]. Значения полных сечений из работы [15] приблизительно в 3 раза превышают значения, полученные в настоящей работе. Это различие связано главным образом с асимптотикой сечений перезарядки при больших энергиях, так как в [15] не учитывалась поправка, связанная со вторым порядком борновского приближения (см. разд. 2.3).

### 3.4. Полные сечения перезарядки: многозарядные ионы

Результаты расчетов полных сечений одноэлектронной перезарядки для нескольких многозарядных ионов, относящихся к элементам N, O, Si и Fe, представлены на рис. 6. Вычисленные сечения перезарядки для всех ионов сравниваются с экспериментальными данными из [36]. Дополнительно, для целей сравнения приводятся также расчеты методом молекулярной сильной связи (МСС — molecular close-coupling) [48] при низких энергиях для иона  $N^{5+}$ , а также экспериментальные [49] и рекомендованные данные [44] для иона  $O^{5+}$ . В случае ионов  $N^{5+}$ ,  $O^{5+}$ ,  $Si^{5+}$  и  $Si^{6+}$  захват электрона происходит в состоянии с  $n \geq 2$ , а для рассматриваемых ионов элемента Fe в состоянии с  $n \geq 3$ .

На рис. 6 видно, что настоящие расчеты для ионов  $N^{5+}$  и  $O^{5+}$  при низких энергиях 2–10 кэВ/нуклон завышены в сравнении с измерениями в среднем приблизительно в 2 раза, а МСС расчеты для иона  $O^{5+}$  недооценивают эксперимент примерно на 50%. Результаты настоящей работы для иона  $N^{5+}$  при средних энергиях 50–120 кэВ/нуклон согласуются с экспериментальными данными [36] в пределах 50%. Согласие с экспериментальными данными [36] при энергиях 50–80 кэВ/нуклон для иона  $O^{5+}$  очень хорошее в пределах 15%, тогда как согласие с экспериментом [49] в области энергий 125–250 кэВ/нуклон лучше при более низких энергиях в пределах примерно 30% и становится хуже для более высоких энергий около 50–80%. Измерения для ионов  $Si^{5+}$  и  $Si^{6+}$  представлены областью энергий 50–200 кэВ/нуклон. Для этих ионов вычисленные полные сечения перезарядки согласуются с экспериментом при  $E \lesssim 100$  кэВ/нуклон в пределах 20%, а для энергий  $> 100$  кэВ/нуклон различие составляет приблизительно 1.5–2 раза.

Экспериментальные данные на рис. 6 для ионов  $Fe^{5+}$  и  $Fe^{6+}$  представлены низкими энергиями при-

мерно 2 кэВ/нуклон и областью средних энергий 60–160 кэВ/нуклон. При низких энергиях рассчитанные полные сечения переоценивают эксперимент приблизительно на 70% для иона  $Fe^{5+}$  и 20% для иона  $Fe^{6+}$ . Для энергий 60–160 кэВ/нуклон вычисленные полные сечения начинают превышать эксперимент с ростом энергии от примерно 30% до 2–2.5 раз. Измерения для иона  $Fe^{9+}$  покрывают область энергий 60–300 кэВ/нуклон: при энергиях около 60–200 кэВ/нуклон расчеты и эксперимент согласуются хорошо в пределах 30%, тогда как при  $E > 200$  кэВ/нуклон вычисленные полные сечения превышают эксперимент примерно в 1.5 раза. Наконец, экспериментальные данные для ионов  $Fe^{12+}$  и  $Fe^{14+}$  представлены областью энергий 116–1160 кэВ/нуклон. Для энергий  $E \lesssim 300$  кэВ/нуклон расчет и измерения имеют хорошее согласие в пределах примерно 30% (за исключением энергии 116 кэВ/нуклон в случае иона  $Fe^{14+}$ , где отличие составляет примерно 50%). При больших энергиях около 1100 кэВ/нуклон рассчитанные полные сечения превышают измерения примерно в 2–2.5 раза.

Сравнение показывает в целом хорошее согласие между расчетами и экспериментом для многозарядных ионов в области средних энергий столкновения, что достигается благодаря процедуре нормировки для вероятностей перезарядки (см. разд. 2.3). Заметные различия при более высоких энергиях могут быть предположительно вызваны учетом поправки, связанной со вторым порядком борновского приближения, в вероятностях перезарядки. Этот вопрос следует прояснить и уточнить в случае электронного захвата в ионные состояния с  $n > 1$ . Эта проблема выходит за рамки данной работы и является предметом отдельного рассмотрения.

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрен процесс одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом. Модельный подход, ранее использованный при рассмотрении ион-атомных столкновений в [21, 22], разработан и расширен на ион-молекулярные столкновения. Теоретический метод для расчета сечений одноэлектронной перезарядки, соответствующей процессу (1), сформулирован в представлении параметра удара с использованием БК-приближения для амплитуды перезарядки. Чтобы в задаче рассеяния учесть нарушение условия унитарности в области низких и

средних энергий столкновения, применяется процедура многоканальной нормировки вероятностей захвата, которые затем используются для вычисления сечений одноэлектронной перезарядки.

Разработанный метод позволяет исследовать как ориентационные эффекты при столкновениях быстрых ионов с молекулярными мишенями, так и вычислять сечения одноэлектронной перезарядки. В целом, получено хорошее согласие с измерениями и другими расчетами в области средних и высоких энергий столкновения молекулы  $H_2$  как с голыми ядрами, так и с многозарядными ионами. Расчеты полных сечений перезарядки в настоящей работе очень хорошо согласуются с измерениями в случае голых ядер, и это согласие составляет в среднем около 20–50%. В случае многозарядных ионов, рассмотренных в работе, наблюдается хорошее согласие, около 30%, между расчетами и измерениями в области средних энергий. Для высоких энергий столкновения различия в случае многозарядных ионов достигают фактора 1.5–2.5, что предположительно связано с тем, что захват для этих ионов происходит в состоянии с  $n > 1$ . В этом случае требуется уточнение поправки, связанной с учетом второго борновского приближения. Другая причина этих различий может быть связана с тем, что данные измерений для многозарядных ионов, связанные с процессом (1), немногочисленны (особенно для высоких энергий), и для надежных выводов о точности расчетов требуется больше экспериментальной информации.

Результаты настоящей работы могут быть использованы в разных приложениях, таких как физика плазмы, физика ускорителей, ядерная физика и др. Разработанный и использованный в этой работе метод для водородной молекулярной мишени может быть расширен и применен к более сложным двухатомным гомоядерным молекулам, таким как  $N_2$ ,  $O_2$ , и др. Дальнейшая работа по развитию представленного метода связана с включением в настоящую модель первого порядка борновского приближения с корректными граничными условиями (В1В), который был рассмотрен в [35, 40] при столкновениях ионов  $H^+$  и  $He^{2+}$  с мишенью  $H_2$ .

**Благодарности.** Автор хотел бы поблагодарить В. П. Шевелько (ФИАН) за полезные дискуссии и поддержку этой работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. Knudsen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund, *Phys. Rev. A* **24**, 2287 (1981).
2. I. Tolstikhina, M. Imai, N. Winckler, and V. Shevelko, *Basic Atomic Interactions of Accelerated Heavy Ions in Matter*, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Vol. 98, Springer-Verlag GmbH (2018).
3. V. P. Shevelko, P. Scharrer, C. E. Düllmann et al., *NIMB* **428**, 56 (2018).
4. P. Scharrer, C. E. Düllmann, W. Barth et al., *Phys. Rev. Acceler. Beams* **20**, 043503 (2017).
5. Y. T. Oganessian, V. K. Utyonkov, Y. V. Lobanov, et al., *Phys. Rev. C* **64**, 064309 (2001).
6. Y. T. Oganessian and V. K. Utyonkov, *Rep. Progr. Phys.* **78**, 036301 (2015).
7. J. Khuyagbaatar, V. P. Shevelko, A. Borschevsky, et al., *Phys. Rev. A* **88**, 042703 (2013).
8. T. F. Tuan and E. Gerjuoy, *Phys. Rev.* **117**, 756 (1960).
9. P. P. Ray and B. C. Saha, *Phys. Lett. A* **71**, 415 (1979).
10. P. P. Ray and B. C. Saha, *Phys. Rev. A* **23**, 1807 (1981).
11. N. C. Deb, A. Jain, J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* **38**, 3769 (1988).
12. E. G. Adivi, *J. Phys. B* **42**, 095207 (2009).
13. R. Shingal, C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **40**, 1302 (1989).
14. Y. D. Wang, J. H. McGuire, R. D. Rivarola, *Phys. Rev. A* **40**, 3673 (1989).
15. Y. D. Wang and J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* **44**, 367 (1991).
16. L. Meng, C. O. Reinhold, R. E. Olson, *Phys. Rev. A* **40**, 3637 (1989).
17. L. Meng, C. O. Reinhold, R. E. Olson, *Phys. Rev. A* **42**, 5286 (1990).
18. C. Illescas and A. Riera, *Phys. Rev. A* **60**, 4546 (1999).
19. H.F. Busnengo, S.E. Corchs, R.D. Rivarola, *Phys. Rev. A* **57**, 2701 (1998).
20. S. Halder, S. Samaddar, K. Purkait, et al., *Indian J. Phys.* **94**, 151 (2020).

21. V. P. Shevelko, *J. Phys. B* **13**, L319 (1980).
22. V. P. Shevel'ko, *J. Tech. Phys.* **46**, 1225 (2001).
23. <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/cccs/HTM/main.htm>.
24. D. R. Bates and R. McCarroll, *Proc. Royal Soc. London A* **245**, 175 (1958).
25. D. R. Bates, *Proc. Royal Soc. London A* **247**, 294 (1958).
26. R.M. May, *Phys. Rev.* **136**, 669 (1964).
27. R. M. Drisko, Ph.D. thesis, Carnegie-Mellon University (1955).
28. A. M. Brodskii, V. S. Potapov, V. V. Tolmachev, *Soviet JETP* **31**, 144 (1970).
29. V. S. Potapov, *Soviet JETP* **36**, 228 (1973).
30. S. C. Wang, *Phys. Rev.* **31**, 579 (1928).
31. S. Weinbaum, *J. Chem. Phys.* **1**, 593 (1933).
32. K. Støchkel, O. Eidem, H. Cederquist, et al., *Phys. Rev. A* **72**, 050703 (2005).
33. D. Fischer, M. Gudmundsson, K. Støchkel, et al., *J. Phys. Conf. Series*, Vol. 88, 012021 (2007).
34. M. B. Shah, P. McCallion, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **22**, 3983 (1989).
35. S.E. Corchs, R.D. Rivarola, J.H. McGuire, et al., *Phys. Rev. A* **47**, 201 (1993).
36. H. Tawara, T. Kato, and Y. Nakai, *At. Data Nucl. Data Tables* **32**, 235 (1985).
37. W. Schwab, G. B. Baptista, E. Justiniano, et al., *J. Phys. B* **20**, 2825 (1987).
38. C. F. Barnett, H. T. Hunter, M. I. Fitzpatrick, et al., *Atomic data for fusion*, Vol. 1 (1990).
39. W. Fritsch, *Phys. Rev. A* **46**, 3910 (1992).
40. S. E. Corchs, R. D. Rivarola, J. H. McGuire, et al., *Physica Scripta* **50**, 469 (1994).
41. M. E. Rudd, T. V. Goffe, A. Itoh, *Phys. Rev. A* **32**, 2128 (1985).
42. M. M. Sant'anna, W. S. Melo, A. C. Santos, et al., *Phys. Rev. A* **61**, 052717 (2000).
43. I. S. Dmitriev, Y. A. Teplova, Y. A. Belkova, et al., *Soviet JETP* **98**, 918 (2004).
44. R. Phaneuf, R. Janev, and M. Pindzola, *Atomic data for fusion*, Vol. 5 (1987).
45. W. G. Graham, K. H. Berkner, R. V. Pyle, et al., *Phys. Rev. A* **30**, 722 (1984).
46. R. Anholt, X. Y. Xu, C. Stoller, et al., *Phys. Rev. A* **37**, 1105 (1988).
47. J. Eichler and F.T. Chan, *Phys. Rev. A* **20**, 104 (1979).
48. L. F. Errea, L. Fernández, A. Macías, et al., *Phys. Rev. A* **69**, 012705 (2004).
49. E. C. Montenegro, G. M. Sigaud, and W. E. Meyerhof, *Phys. Rev. A* **45**, 1575 (1992).