

01;02

# Теоретическое изучение процессов перезарядки и возбуждения при столкновениях между $\text{He}^+$ и $\text{C}^{5+}$ , $\text{N}^{6+}$ , $\text{O}^{7+}$ водородоподобными ионами

© В.К. Никулин, Н.А. Гущина

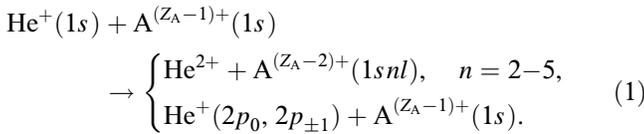
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: nikulin@astro.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 23 декабря 2003 г. В окончательной редакции 27 апреля 2004 г.)

Впервые получены данные о сечениях электронной перезарядки и возбуждения при столкновениях  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$ ,  $\text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  в диапазоне энергий ионов  $\text{He}^+$  от 0.2 до 3 MeV. Вычислены сечения электронной перезарядки в синглетные и триплетные  $1snl$  состояния ионов  $\text{C}^{4+}$ ,  $\text{N}^{5+}$ ,  $\text{O}^{6+}$  ( $2 \leq n \leq 5$ ) и электронного возбуждения  $1s \rightarrow 2p_{0,\pm 1}$  ионов  $\text{He}^+(1s)$ . Расчет сечений выполнен в рамках метода уравнений сильной связи на базисе 10 двухэлектронных квазимолекулярных состояний.

## Введение

В центральной области плазмы в установках УТС представляют интерес [1] реакции при столкновении ионов  $\text{He}^+$  с водородоподобными примесными ионами  $\text{C}^{5+}$ ,  $\text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  ( $\text{A}^{(Z_A-1)+}$ ) в MeV диапазоне энергий столкновения



Данные о сечениях реакций (1) необходимы как для моделирования поведения альфа-частиц в плазме, так и для спектроскопической диагностики высокотемпературной плазмы. Излучение из возбужденных примесных ионов и ионов гелия, образовавшихся после столкновения, представляет интерес для диагностики кора плазмы. Реакции (1) не изучались теоретически до настоящего времени, прямое же экспериментальное исследование ион-ионных столкновений с сильным кулоновским отталкиванием между ионами затруднительно.

Расчет сечений реакций (1) выполнен в интервале энергий столкновения 0.2–3 MeV в рамках метода уравнений сильной связи на базисе двухэлектронных состояний квазимолекул  $(\text{HeA})^{Z_A+}$ . Двухэлектронные состояния рассчитаны в одноконфигурационном приближении, реализованном на адиабатических одноэлектронных экранированных двухатомных молекулярных орбиталах (ЭДМО) [2].

## Методы расчета

Расчет сечений одноэлектронного захвата и возбуждения в реакциях (1) выполнен в приближении параметра удара в рамках метода уравнений сильной связи. В рассматриваемом приближении задача сводится к определению электронной волновой функции  $\Psi(r_1, r_2, t)$ , удовле-

творяющей нестационарному уравнению Шредингера,

$$i \frac{\partial \Psi(r_1, r_2, t)}{\partial t} = H'(r_1, r_2, \mathbf{R}(t)) \Psi(r_1, r_2, t), \quad (2)$$

где  $H'$  — полный электронный гамильтониан, параметрически зависящий от времени через межъядерное расстояние  $\mathbf{R}(t)$ ,

$$H' = \sum_{k=1,2} \left( -\frac{\nabla_k^2}{2} - \frac{Z_A}{r_{ak}} - \frac{Z_B}{r_{bk}} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_A Z_B}{\mathbf{R}} \equiv H + \frac{Z_A Z_B}{\mathbf{R}}. \quad (3)$$

В (2), (3)  $r_1, r_2$  — координаты электронов;  $r_{ak}, r_{bk}$  — расстояния  $k$ -го электрона до ядер с зарядами  $Z_A$  и  $Z_B$  ( $Z_B = Z_{\text{He}}$ );  $r_{12}$  — расстояние между электронами.

Волновая функция  $\Psi(r_1, r_2, t)$  раскладывается в ряд по базисному набору двухэлектронных одноконфигурационных состояний

$$\phi_j(r_1, r_2; \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S_{0j}^2)}} \left( \psi_0(r_1; \mathbf{R}) \psi_j(r_2; \mathbf{R}) \pm \psi_0(r_2; \mathbf{R}) \psi_j(r_1; \mathbf{R}) \right) \equiv [\psi_0, \psi_j], \quad (4)$$

построенных с использованием одноэлектронных волновых функций ЭДМО  $\psi_j$  (знаки „+“, „–“ в (4) соответствуют синглетным и триплетным двухэлектронным состояниям квазимолекулы):

$$\Psi(r_1, r_2, t) = \sum_{j=1}^n a_j(t) \phi_j(r_1, r_2, \mathbf{R}) \times \exp \left( -i \int_0^t \left[ E_j(\mathbf{R}) + \frac{Z_A Z_B}{\mathbf{R}} \right] dt' \right), \quad (5)$$

где

$$E_j(\mathbf{R}) = \langle \phi_j(r_1, r_2; \mathbf{R}) | H | \phi_j(r_1, r_2; \mathbf{R}) \rangle. \quad (6)$$

ЭДМО  $\psi_j$  [2] есть решения стационарного одноэлектронного уравнения Шредингера с эффективным потенциалом, оптимально учитывающим экранировку зарядов ядер электронами и допускающим одновременно разде-

ление переменных в вытянутой сфероидальной системе координат,

$$V_{\text{eff}}^j(r_k; \mathbf{R}) = -\frac{Z_A}{r_{ak}} - \frac{Z_B}{r_{bk}} + \Delta V_{\text{eff}}^j(r_k; \mathbf{R}),$$

$$\Delta V_{\text{eff}}^j = \frac{1}{2} \left[ \frac{a_1^j - b_1^j}{r_{ak}} + \frac{a_1^j + b_1^j}{r_{bk}} + \frac{\tilde{a}_1^j + R a_0^j}{r_{ak} r_{bk}} + \frac{b_2^j (r_{ak} - r_{bk})^2}{R r_{ak} r_{bk}} \right], \quad (7)$$

что позволяет получать адиабатические орбитали, сохраняющие симметрию орбиталей задачи  $\text{H}_2^+$ . ЭДМО  $\psi_0$ , входящая в выражение (4), описывает в пределе разведенных атомов ( $R \rightarrow \infty$ )  $1s$ -состояние электрона у ядра  $Z_A$ .

Если первоначально при  $t \rightarrow -\infty$  ( $R \rightarrow \infty$ ) система находилась в состоянии  $\phi_1(r_1, r_2) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_1(r_1, r_2; \mathbf{R})$  (с энергией  $E_1(\infty)$ ), то

$$\Psi(r_1, r_2, t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow \phi_1(r_1, r_2) \exp(-iE_1(\infty)t). \quad (8)$$

Подстановка (5) в (2) с учетом (8) приводит к системе линейных дифференциальных уравнений для определения коэффициентов  $a_j$ , которая для ортогонального набора двухэлектронных базисных функций и кулоновской траектории движения ядер с зарядами  $Z_A$  и  $Z_B$  преобразуется к следующему виду [3]:

$$\frac{da_j(\tau)}{d\tau} = - \sum_{k \neq j} a_k(\tau) \times \left\{ \frac{\tau}{R - \gamma} R_{jk} + \frac{\rho}{R(R - \gamma)} L_{jk} + \frac{i}{v} \frac{R}{R - \gamma} H_{jk} \right\} \times \exp\left(-\frac{i}{v} \int_0^\tau (E_k - E_j) \frac{R}{R - \gamma} d\tau\right) \quad (9)$$

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

с начальными условиями

$$a_j(-\infty) = \delta_{ij} \exp(-iv_1), \quad (10)$$

где

$$v_1 = \exp\left(\frac{1}{v} \int_0^\infty \left[ E_1(\mathbf{R}) - E_1(\infty) + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] \frac{R}{R - \gamma} d\tau\right).$$

В (9)  $\rho$  — параметр удара,  $v$  — относительная скорость движения ядер,  $\gamma = Z_A Z_B / \mu v^2$ ,  $\mu$  — приведенная масса. Матричные элементы динамических (радиальных и вращательных)  $R_{jk} = \langle \phi_j | d/dR | \phi_k \rangle$ ,  $L_{jk} = \langle \phi_j | iL_y | \phi_k \rangle$  и потенциальных  $H_{ik} = \langle \phi_j | H | \phi_k \rangle$  связей вычисляются на двухэлектронных состояниях (4). При записи уравнений сильной связи (9) полагалось, что система координат, в которой описывается движение ядер, выбрана так, что ось  $y$  перпендикулярна плоскости столкновений ( $xoz$ ), а ось  $z$  совпадает с направлением начальной скорости движения иона  $\text{He}^+$ .

При квазимолекулярном описании атомных столкновений (решения уравнений сильной связи) возникает проблема переноса импульса электрона при перезарядке, которая до сих пор со времени пионерской работы [4] не имеет строгого решения даже при описании одноэлектронных квазимолекулярных процессов. В работе [4] было показано, что из-за пренебрежения трансляцией электрона при движении ядер базисные функции (электронные состояния) в разложении типа (5) будут связаны между собой при любых положениях ядер. Поэтому при конечном числе членов  $n$  в базисном наборе результаты расчета сильно зависят от его размера. Для устранения нефизической связи между состояниями в работе [4] было предложено использовать в разложении типа (5) базисные молекулярные функции (4), умноженные на „факторы трансляции“ в виде плоской волны. К настоящему времени предложено большое количество различных форм 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 настоящей работе мы используем для учета переноса импульса альтернативный подход, предложенный в [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.

Для двухэлектронных квазимолекул, рассматриваемых в данной работе, этот подход тестировался при расчете процессов, обратных по времени по отношению к реакции (1), в нашей недавней публикации [6]. Было показано, что наши результаты расчетов близки к имеющимся квазимолекулярным расчетам при малых энергиях с учетом факторов трансляции и к расчетам в приближении больших энергий, полученным с использованием атомного базиса. Кроме того, эти наши расчеты [6] лучше всего соответствуют имеющимся экспериментальным данным в широком интервале энергий.

Амплитуда перехода из начального состояния  $\phi_1(r_1, r_2)$  в конечное состояние  $\phi_j(r_1, r_2) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_j(r_1, r_2; \mathbf{R})$  для заданных значений параметра удара  $\rho$  и скорости столкновения  $v$  равна

$$b_j(\rho, v) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi_j(r_1, r_2) | \Psi(r_1, r_2, t) \rangle \exp(iE_j(\infty)t) = a_j(\infty) \exp(-iv_j), \quad (11)$$

где

$$v_j = \frac{1}{v} \int_0^\infty \left[ E_j(\mathbf{R}) - E_j(\infty) + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] \frac{R}{R - \gamma} d\tau. \quad (12)$$

При расчете реакций (1), поскольку матричные элементы динамических и потенциальных связей между синглетными и триплетными состояниями квазимолекулы равны нулю, система уравнений сильной связи (9) распадается на две независимые системы уравнений для синглетного и триплетного входного канала.

Все расчеты ЭДМО, двухэлектронных состояний и матричных элементов динамического и потенциального взаимодействия между ними выполнены при использовании разработанного нами ранее комплекса программ [7].

### Расчет энергий одноэлектронных и двухэлектронных состояний квазимолекул $(\text{HeC})^{6+}$ , $(\text{HeN})^{7+}$ и $(\text{HeO})^{8+}$

Энергии  $\varepsilon_j(\text{R})$  и волновые функции  $\psi_j(r; \text{R})$  одноэлектронных ЭДМО находились из решения одноэлектронного уравнения Шредингера с эффективным потенциалом (7). Неортогональность ЭДМО, вычисляемых для различных эффективных потенциалов, значительно усложняет решение системы уравнений сильной связи. Поэтому для всех рассчитываемых орбиталей, за исключением  $\psi_0$ , описывающей в пределе разведенных атомов сильно отщепленное по энергии  $1s$ -состояние электрона у ядра А, использовался один и тот же эффективный потенциал  $V_{\text{eff}}^1$ , наиболее оптимально описывающий ближайший по энергии к входному каналу канал одноэлектронного захвата в  $3d$ -состояния иона  $A^{(Z_A-2)+}(1snl)$ . Схема определения параметров этого потенциала описана в [8]. Для их определения использовались энергии  $3p$ - и  $3d$ -уровней объединенных атомов (предел  $\text{R} = 0$ ) и энергии  $3d$ -уровней ионов  $A^{(Z_A-2)+}(1s3d)$  [9] и  $1s$ -уровня иона  $\text{He}^+$ . Получены следующие значения параметров эффективных потенциалов (в а.е.) для расчета орбиталей  $\psi_j$  ( $j \neq 0$ ) в квазимолекулах  $(\text{HeA})^{Z_A+}$ :

$$(\text{HeC})^{6+} - \tilde{a}_1^1 = -0.066, \quad a_1^1 = 1.023, \quad a_0^1 = -0.037, \\ b_1^1 = 0.997, \quad b_2^1 = 0.010;$$

$$(\text{HeN})^{7+} - \tilde{a}_1^1 = -0.187, \quad a_1^1 = 1.096, \quad a_0^1 = -0.014, \\ b_1^1 = 0.997, \quad b_2^1 = -0.016;$$

$$(\text{HeO})^{8+} - \tilde{a}_1^1 = -0.214, \quad a_1^1 = 1.124, \quad a_0^1 = -0.107, \\ b_1^1 = 0.996, \quad b_2^1 = -0.022.$$

При расчете молекулярной орбитали  $\psi_0$ , описывающей состояние  $1s$  электрона в ионах  $A^{(Z_A-1)+}(1s)$  ( $\psi_0 = 1s\sigma$ ) или в ионах  $A^{(Z_A-2)+}(1snl)$  ( $\psi_0 = 1s\sigma'$ ), использовались различные эффективные потенциалы  $V_{\text{eff}}^0$ . Схема определения параметров этих потенциалов описана в [10]. Необходимые для их расчета атомные энергии  $1s$ -состояний объединенных атомов и ионов  $A^{(Z_A-1)+}(1s)$  или  $A^{(Z_A-2)+}(1snl)$  [9] и среднее значение эффективного потенциала  $V_{\text{eff}}^0$  в пределе объединенного атома

$$\bar{V}_{\text{eff}}^0 = -\frac{Z^{*2}}{n^{*2}} + \frac{\tilde{a}_1 Z^{*2}}{2n^{*3}(s+1/2)}, \quad (13)$$

полученное из атомных расчетов [9], выписаны в табл. 1.

**Таблица 1.** Энергии  $E_{1s}^u$  и средние значения эффективных потенциалов  $\bar{V}_{\text{eff}}^0$  для  $1s\sigma$  и  $1s\sigma'$  ЭДМО в пределе объединенных атомов; энергии  $E_{1s}^s$   $1s\sigma$  или  $1s\sigma'$  ЭДМО в пределе разведенных атомов (все величины даны в атомных единицах)

	МО	$ E_{1s}^u $	$ \bar{V}_{\text{eff}}^0 $	$ E_{1s}^s $
$(\text{HeC})^{6+}$	$1s\sigma$	29.66	61.747	18.00
	$1s\sigma'$	28.82	60.529	16.30
$(\text{HeN})^{7+}$	$1s\sigma$	37.87	78.502	24.50
	$1s\sigma'$	40.91	78.930	22.46
$(\text{HeO})^{8+}$	$1s\sigma$	47.51	97.764	32.00
	$1s\sigma'$	47.08	97.281	29.66

**Таблица 2.** Параметры эффективных потенциалов (в а.е.) для расчета  $1s\sigma$  и  $1s\sigma'$  ЭДМО квазимолекул  $(\text{HeA})^{Z_A+}$

	МО	$\tilde{a}_1^0$	$a_1^0$	$a_0^0$	$b_1^0$
$(\text{HeC})^{6+}$	$1s\sigma$	-0.036	0.585	1.045	-1.630
	$1s\sigma'$	-0.032	0.511	1.740	-1.627
$(\text{HeN})^{7+}$	$1s\sigma$	-0.033	0.593	1.044	-1.637
	$1s\sigma'$	-0.030	0.515	-0.240	0.321
$(\text{HeO})^{8+}$	$1s\sigma$	-0.026	0.519	1.172	-1.694
	$1s\sigma'$	-0.030	0.597	-0.368	0.366

В (13)  $Z^* = Z_A + Z_B - a_0^0$ ;  $n^* = n - (l + 1/2) + [(l + 1/2)^2 + \tilde{a}_1^0]^{1/2}$ ;  $n, l$  — главное и орбитальное квантовые числа состояния объединенного атома;  $s$  — эффективный орбитальный момент, связанный с  $l$  соотношением  $s(s + 1) = l(l + 1) + \tilde{a}_1^0$ . Значения параметров эффективных потенциалов для расчета  $1s\sigma$  и  $1s\sigma'$  ЭДМО приведены в табл. 2 ( $b_2^0 \equiv 0$ ).

Энергии двухэлектронных синглетных и триплетных состояний, определяемые выражением (6), вычислялись в первом порядке теории возмущений по остаточному взаимодействию  $W = 1/r_{12} - (V_{\text{eff}}^0 + V_{\text{eff}}^1)$ :

$$E_j(\text{R}) = \varepsilon_0 + \varepsilon_j + \frac{1}{1 \pm S_{0j}^2} (J_j \pm Q_j \mp S_{0j}(V_{0j}^1 + V_{j0}^0) - (V^0 + V^1)), \quad (14)$$

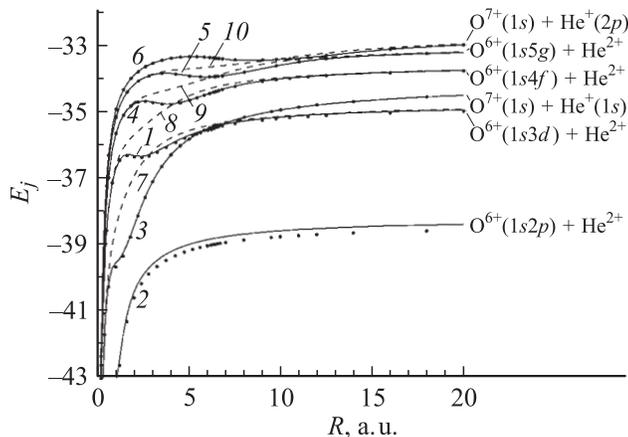
где  $S_{0j} = \langle \psi_0 | \psi_j \rangle$ ,  $J_j = \langle \psi_0(r_1) \psi_j(r_2) | 1/r_{12} | \psi_0(r_1) \psi_j(r_2) \rangle$  и  $Q_j = \langle \psi_0(r_1) \psi_j(r_2) | 1/r_{12} | \psi_0(r_2) \psi_j(r_1) \rangle$  — кулоновский и обменный интегралы,  $V^l = \langle \psi_l | V_{\text{eff}}^l | \psi_l \rangle$  ( $l = 0, 1$ ) и  $V_{lk}^k = \langle \psi_l | V_{\text{eff}}^k | \psi_k \rangle$  — диагональные и недиагональные матричные элементы эффективных потенциалов.

В число одноэлектронных орбиталей  $\psi_j$  ( $j \neq 0$ ) для расчета реакций (1) были включены ЭДМО, описывающие в пределе разведенных атомов состояния  $1s$  и  $2p_{0,\pm 1}$  электронов в ионе  $\text{He}^+$  и  $2p_0, 3d_{0,\pm 1}, 4f_{0,\pm 1}$  и  $5g_{0,\pm 1}$  электронов в ионах  $A^{(Z_A-2)+}(1snl)$ . Базис двухэлектронных диабатических состояний  $\phi_j(r_1, r_2; \text{R}) = [\psi_0, \psi_j]$  для расчета реакций (1) выписан в табл. 3 (для одноэлектронных ЭДМО используется их классификация по сферическим квантовым

**Таблица 3.** Базис 10 двухэлектронных диабатических состояний  $\phi_j(r_1, r_2; R)$  для расчета реакций (1)

$\text{He}^+ - \text{C}^{5+}, \text{N}^{6+}$		$\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$	Атомные пределы при $R \rightarrow \infty$
Входные каналы $\text{He}^+(1s) + \text{A}^{(Z_A-1)+}(1s)$			
$\phi_1 = [1s\sigma, 3d\sigma]$	$\phi_1 = [1s\sigma, 4f\sigma]$		
Каналы перезарядки $\text{He}^{2+} + \text{A}^{(Z_A-2)+}(1snl)$			
$\phi_2 = [1s\sigma', 2p\sigma]$	$\phi_2 = [1s\sigma', 2p\sigma]$	$(nl)$	
$\phi_3 = [1s\sigma', 4f\sigma]$	$\phi_3 = [1s\sigma', 3d\sigma]$	$2p_0$	
$\phi_4 = [1s\sigma', 5g\sigma]$	$\phi_4 = [1s\sigma', 5g\sigma]$	$3d_0$	
$\phi_6 = [1s\sigma', 7i\sigma]$	$\phi_5 = [1s\sigma', 6h\sigma]$	$4f_0$	
$\phi_7 = [1s\sigma', 3d\pi]$	$\phi_7 = [1s\sigma', 6h\sigma]$	$5g_0$	
$\phi_8 = [1s\sigma', 4f\pi]$	$\phi_8 = [1s\sigma', 3d\pi]$	$3d_{\pm 1}$	
$\phi_{10} = [1s\sigma', 6h\pi]$	$\phi_9 = [1s\sigma', 4f\pi]$	$4f_{\pm 1}$	
	$\phi_9 = [1s\sigma', 5g\pi]$	$5g_{\pm 1}$	
Каналы возбуждения $\text{He}^+(2l) + \text{A}^{(Z_A-1)+}(1s)$			
$\phi_5 = [1s\sigma', 6h\sigma]$	$\phi_6 = [1s\sigma', 7i\sigma]$	$(2l)$	
$\phi_9 = [1s\sigma', 5g\pi]$	$\phi_{10} = [1s\sigma', 6h\pi]$	$2p_0$	
		$2p_{\pm 1}$	

числам  $(nlm)$  состояния объединенного атома). Анализ характера волновых функций ЭДМО показал, что при переходе от  $Z_A = 7$  к  $Z_A = 8$  происходит смена состояний, описывающих в пределе разведенных атомов входной канал и канал одноэлектронного захвата в  $3d_0$ -состояние иона  $\text{A}^{(Z_A-2)+}$ , а при переходе от  $Z_A = 6$  к  $Z_A = 7$  — смена состояний, описывающих при  $R \rightarrow \infty$  каналы  $1s \rightarrow 2p_{0,\pm 1}$  возбуждения иона  $\text{He}^+$  и каналы одноэлектронного захвата в  $5g_{0,\pm 1}$



**Рис. 1.** Энергии  $E_j$  синглетных ( $^1\Sigma_j$  — сплошные кривые,  $^1\Pi_j$  — штриховые) и триплетных ( $^3\Sigma_j$  —  $\bullet$ ) двухэлектронных состояний  $\phi_j$  квазимолекулы  $(\text{OHe})^{8+}$ : входной канал —  $\phi_1 = [1s\sigma, 4f\sigma]$ ; каналы одноэлектронного захвата —  $\phi_2 = [1s\sigma', 2p\sigma]$ ,  $\phi_3 = [1s\sigma', 3d\sigma]$ ,  $\phi_7 = [1s\sigma', 3d\pi]$ ,  $\phi_4 = [1s\sigma', 5g\sigma]$ ,  $\phi_8 = [1s\sigma', 4f\pi]$ ,  $\phi_5 = [1s\sigma', 6h\sigma]$ ,  $\phi_9 = [1s\sigma', 5g\pi]$ ; каналы возбужденного иона  $\text{He}^+$  —  $\phi_6 = [1s\sigma', 7i\sigma]$ ,  $\phi_{10} = [1s\sigma', 6h\pi]$ .

состояния иона  $\text{A}^{(Z_A-2)+}$ . В табл. 3 атомные пределы двухэлектронных состояний выписаны с учетом того, что при рассматриваемых скоростях столкновений имеющиеся в квазимолекуле  $(\text{NHe})^{7+}$  далекие квазипересечения состояний  $[1s\sigma', 6h\sigma] - [1s\sigma', 7i\sigma]$  (при  $R \sim 18$  a.u.) и  $[1s\sigma', 5g\pi] - [1s\sigma', 6h\pi]$  (при  $R \sim 16$  a.u.) проходятся диабатически в процессе столкновения, в результате чего для квазимолекулы  $(\text{NHe})^{7+}$  сохраняется та же корреляционная диаграмма, что и для квазимолекулы  $(\text{CHe})^{6+}$ .

Проведенные расчеты показали, что во всех рассматриваемых системах энергии синглетных ( $E_j^s$ ) и триплетных ( $E_j^r$ ) состояний различаются несущественно из-за малости обменного взаимодействия между нижним ( $\psi_0$ ) и возбужденными ( $\psi_j$ ) электронными состояниями. На рис. 1 приведены энергии двухэлектронных состояний квазимолекулы  $(\text{OHe})^{8+}$  (корреляционные диаграммы для квазимолекул  $(\text{CHe})^{6+}$  и  $(\text{NHe})^{7+}$  имеются в предварительной публикации [11]).

### Матричные элементы динамических и потенциальных связей

Матричные элементы динамической связи между синглетными ( $d_{ij}^s$ ) и триплетными ( $d_{ij}^r$ ) двухэлектронными состояниями (4) совпадают и выражаются через матричные элементы радиальной или вращательной связи между одноэлектронными ЭДМО  $\psi_i$  и  $\psi_j$

$$d_{ij}^s = d_{ij}^r \equiv d_{ij} = \begin{cases} R_{ij} = \langle \psi_i | d/dR | \psi_j \rangle, & \text{если } m_i - m_j = 0; \\ L_{ij} = \langle \psi_i | iL_y | \psi_j \rangle, & \text{если } |m_i - m_j| = 1 \end{cases} \quad (i, j \neq 0). \quad (15)$$

Выражения (15) записаны без учета малой неортогональности между нижними ( $\psi_0$ ) и возбужденными ( $\psi_i, \psi_j$ ) ЭДМО.

В результате проведенных исследований в уравнениях сильной связи, расписанных на базисе 10 двухэлектронных состояний, перечисленных в табл. 3, были оставлены следующие наиболее существенные матричные элементы динамических связей для столкновительных систем  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}, \text{N}^{6+}$ :

$$\begin{aligned} R_{12} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 2p\sigma \rangle, & R_{13} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 4f\sigma \rangle, \\ R_{14} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 5g\sigma \rangle, & R_{15} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, \\ R_{34} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 5g\sigma \rangle, & R_{35} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, \\ R_{36} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, & R_{45} &= \langle 5g\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, \\ R_{46}^N &= \langle 5g\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, & R_{56} &= \langle 6h\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, \\ R_{89} &= \langle 4f\pi | d/dR | 5g\pi \rangle, & R_{9,10} &= \langle 5g\pi | d/dR | 6h\pi \rangle \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} L_{17} &= \langle 3d\sigma | iL_y | 3d\pi \rangle, & L_{38} &= \langle 4f\sigma | iL_y | 4f\pi \rangle, \\ L_{48} &= \langle 5g\sigma | iL_y | 4f\pi \rangle, & L_{49} &= \langle 5g\sigma | iL_y | 5g\pi \rangle, \\ L_{5,10} &= \langle 6h\sigma | iL_y | 6h\pi \rangle, & L_{6,10} &= \langle 7i\sigma | iL_y | 6h\pi \rangle \end{aligned}$$

и для столкновительной системы  $\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$ :

$$\begin{aligned} R_{13} &= -\langle 3d\sigma | d/dR | 4f\sigma \rangle, & R_{14} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 5g\sigma \rangle, \\ R_{15} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, & R_{16} &= \langle 4f\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, \\ R_{23} &= -\langle 3d\sigma | d/dR | 2p\sigma \rangle, & R_{34} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 5g\sigma \rangle, \\ R_{35} &= \langle 3d\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, & R_{45} &= \langle 5g\sigma | d/dR | 6h\sigma \rangle, \\ R_{46} &= \langle 5g\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, & R_{56} &= \langle 6h\sigma | d/dR | 7i\sigma \rangle, \\ R_{89} &= \langle 4f\pi | d/dR | 5g\pi \rangle, & R_{9,10} &= \langle 5g\pi | d/dR | 6h\pi \rangle \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} L_{37} &= \langle 3d\sigma | iL_y | 3d\pi \rangle, & L_{18} &= \langle 4f\sigma | iL_y | 4f\pi \rangle, \\ L_{48} &= \langle 5g\sigma | iL_y | 4f\pi \rangle, & L_{49} &= \langle 5g\sigma | iL_y | 5g\pi \rangle, \\ L_{59} &= \langle 6h\sigma | iL_y | 5g\pi \rangle, & L_{5,10} &= \langle 6h\sigma | iL_y | 6h\pi \rangle, \\ L_{6,10} &= \langle 7i\sigma | iL_y | 6h\pi \rangle. \end{aligned}$$

При вычислении матричных элементов динамической связи начало электронной системы координат помещалось в центре зарядов ядер квазимолекулы.

Матричные элементы потенциальных связей  $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$  ( $i < j$ ) между двухэлектронными состояниями квазимолекул равны

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \frac{1}{[(1 \pm S_{0i}^2)(1 \pm S_{0j}^2)]^{1/2}} \\ &\times [(\varepsilon_0 + \varepsilon_j)(S_{ij} \pm S_{0j}S_{i0}) + (I_{0j0i} \pm I_{j00i}) \\ &- V_{ij}^1 - S_{ij}V^0 \mp S_{i0}V_{0j}^1 \mp S_{0j}V_{i0}^0] \delta(m_i - m_j), \quad (16) \end{aligned}$$

где  $I_{klmn} = \langle \psi_k(r_1)\psi_l(r_2) | 1/r_{12} | \psi_m(r_1)\psi_n(r_2) \rangle$  — интегралы межэлектронного взаимодействия.

Подробная информация о матричных элементах динамических и потенциальных связей для квазимолекул  $(\text{CHe})^{6+}$  и  $(\text{NHe})^{7+}$  имеется в [11]. Отличительной особенностью для квазимолекулы  $(\text{OHe})^{8+}$  является резкое изменение матричных элементов  $d_{ij}$  и  $H_{ij}$ , содержащих  $3d\sigma$  или  $4f\sigma$  ЭДМО, в окрестности квазипересечения этих орбиталей при межъядерном расстоянии  $R \simeq 6.4$  а.у.

## Расчет сечений одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновении ионов $\text{He}^+$ с водородоподобными ионами $\text{C}^{5+}$ , $\text{N}^{6+}$ и $\text{O}^{7+}$

Расчет сечений одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновениях  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$ ,  $\text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  выполнен в рамках метода уравнений сильной связи в интервале энергий налетающего иона  $\text{He}^+$  от 0.2 до 3.0 MeV.

Парциальные сечения заселения двухэлектронных синглетных и триплетных состояний  $\phi_j(r_1, r_2) = \lim_{R \rightarrow \infty} \phi_j(r_1, r_2; R)$  для заданной скорости столкновения  $v$  рассчитывались по формулам

$$\sigma_j(v) = 2\pi \int_0^\infty d\rho |b_j(\rho, v)|^2, \quad (17)$$

где  $b_j(\rho, v)$  — амплитуды перехода (11) из начального состояния  $\phi_1(r_1, r_2)$  в конечное состояние  $\phi_j(r_1, r_2)$ , вычисленные для синглетного и триплетного входного канала (малая неортогональность используемого базиса двухэлектронных состояний ( $\langle \phi_i | \phi_j \rangle < 10^{-3}$ ) не учитывается при записи уравнений сильной связи).

Для расчета  $b_j(\rho, v)$  использовалась программа „TANGO“ [12], любезно предоставленная нам Антойне Салином.

В уравнениях сильной связи использовались обрезанные по экспоненте при больших  $R$  не исчезающие при  $R \rightarrow \infty$  радиальные связи между входным каналом ( $\phi_1$ ) и каналом возбуждения ( $\phi_j$ ) в  $2p_0$ -состояние иона  $\text{He}^+$ :

$$R_{1j}(R) = \begin{cases} R_{1j}(R) & \text{при } R \leq R_c, \\ R_{1j}(R_c) \exp[-\beta(R - R_c)] & \text{при } R > R_c \end{cases}$$

( $j = 5$  для столкновительных систем  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$ ,  $\text{N}^{6+}$  и  $j = 6$  для столкновительной системы  $\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$ ),  $R_c$  полагалось равным порядку 7 а.у. для всех рассчитываемых систем, константа  $\beta$  полагалась равной  $\simeq 0.3$  а.у. (в пределе больших  $R$  эти связи во всех трех системах описывают одну и ту же радиальную связь между  $1s$  и  $2p_0$  состояниями иона  $\text{He}^+$ ).

а) Сечения одноэлектронного захвата и возбуждения для столкновения  $\text{He}^+(1s) - \text{C}^{5+}(1s)$ . Для квазимолекулы  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$  решение уравнения сильной связи проводилось для синглетного и триплетного входного канала. Полные  $\sigma_{\text{sec}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{sec}}(n)$  сечения одноэлектронного захвата в синглетные и триплетные  $1snl$  состояния иона  $\text{C}^{4+}$  для  $n = 2-5$  рассчитывались по формулам

$$\sigma_{\text{sec}} = \sum_{n=2-5} \sigma_{\text{sec}}(n), \quad (18)$$

где

$$\sigma_{\text{sec}}(2) = \sigma_2(2p_0), \quad \sigma_{\text{sec}}(3) = \sigma_3(3d_0) + \sigma_7(3d_{\pm 1}),$$

$$\sigma_{\text{sec}}(4) = \sigma_4(4f_0) + \sigma_8(4f_{\pm 1}),$$

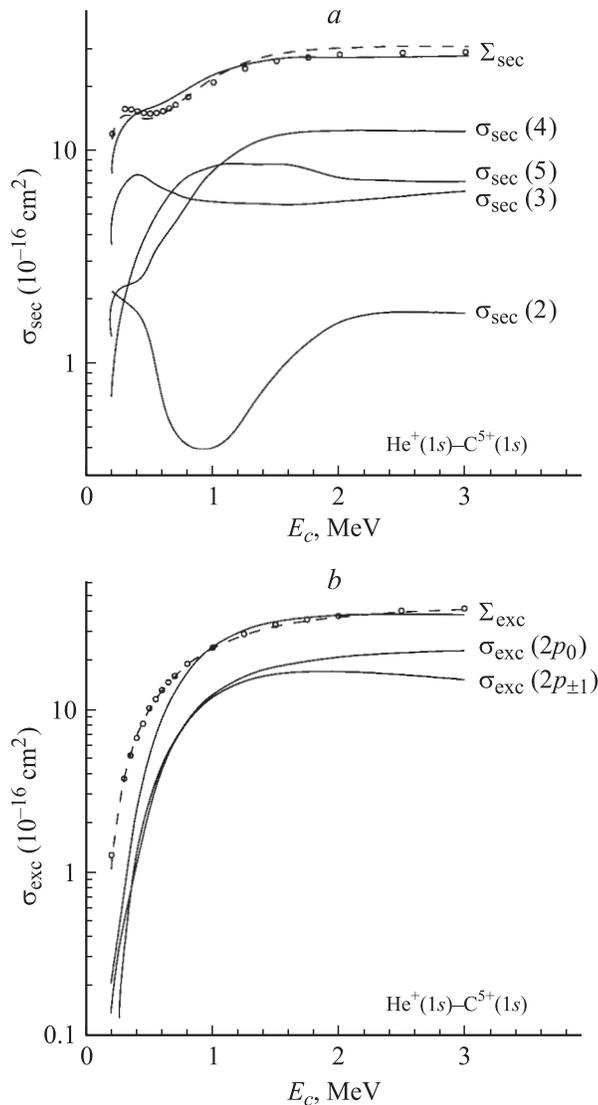
$$\sigma_{\text{sec}}(5) = \sigma_6(5g_0) + \sigma_{10}(5g_{\pm 1});$$

полные  $\sigma_{\text{exc}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{0,\pm 1})$  сечения возбуждения иона  $\text{He}^+$  — по формулам

$$\sigma_{\text{exc}} = \sigma_{\text{exc}}(2p_0) + \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}), \quad (19)$$

где

$$\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = \sigma_5(2p_0), \quad \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = \sigma_9(2p_{\pm 1}).$$



**Рис. 2.** Сечения одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновении  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$  (штриховые кривые и кружки — полные сечения одноэлектронного захвата и возбуждения, вычисленные на базисе синглетных и триплетных состояний квазимолекулы без учета каналов перезарядки в  $1s5g$  состояния иона  $\text{C}^{4+}$ ). *a* — полное  $\Sigma_{\text{sec}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{sec}}(n)$  сечения одноэлектронного захвата в  $1snl$  состояния иона  $\text{C}^{4+}$ :  $\Sigma_{\text{sec}} = \sum_{n=2-5} \sigma_{\text{sec}}(n)$ ;  $\sigma_{\text{sec}}(2) = \sigma_2(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(3) = \sigma_3(3d_0) + \sigma_7(3d_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(4) = \sigma_4(4f_0) + \sigma_8(4f_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(5) = \sigma_6(5g_0) + \sigma_{10}(5g_{\pm 1})$ ; *b* — полное  $\Sigma_{\text{exc}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{exc}}(2p_l)$  сечения  $1s \rightarrow 2p_l$  электронного возбуждения иона  $\text{He}^+$ :  $\Sigma_{\text{exc}} = \sigma_{\text{exc}}(2p_0) + \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1})$ ;  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = \sigma_5(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = \sigma_9(2p_{\pm 1})$ .

Проведенные расчеты показали, что парциальные сечения одноэлектронного захвата и возбуждения, вычисленные на базисе синглетных и триплетных состояний квазимолекулы  $(\text{HeC})^{6+}$ , различаются несущественно (на рис. 2 нанесены для сравнения полные сечения процессов перезарядки и возбуждения, вычисленные на базисе синглетных и триплетных состояний без уче-

та канала одноэлектронного захвата в  $1s5g$ -состояния иона  $\text{C}^{4+}$ ). Это связано с тем, что энергии синглетных и триплетных состояний различаются очень слабо из-за малости обменного взаимодействия, а матричные элементы динамического взаимодействия (дающего основной вклад в сечения рассматриваемых процессов) между синглетными ( $d_{ij}^s$ ) и триплетными ( $d_{ij}^{tr}$ ) состояниями полностью совпадают. Поэтому с хорошей степенью точности можно полагать, что полные сечения одноэлектронного захвата ( $\Sigma_{\text{sec}}$ ) и возбуждения ( $\Sigma_{\text{exc}}$ ) при столкновении  $\text{He}^+(1s) - \text{C}^{5+}(1s)$  равны

$$\Sigma_{\text{sec}} = 0.25\sigma_{\text{sec}}^s + 0.75\sigma_{\text{sec}}^{tr}$$

и

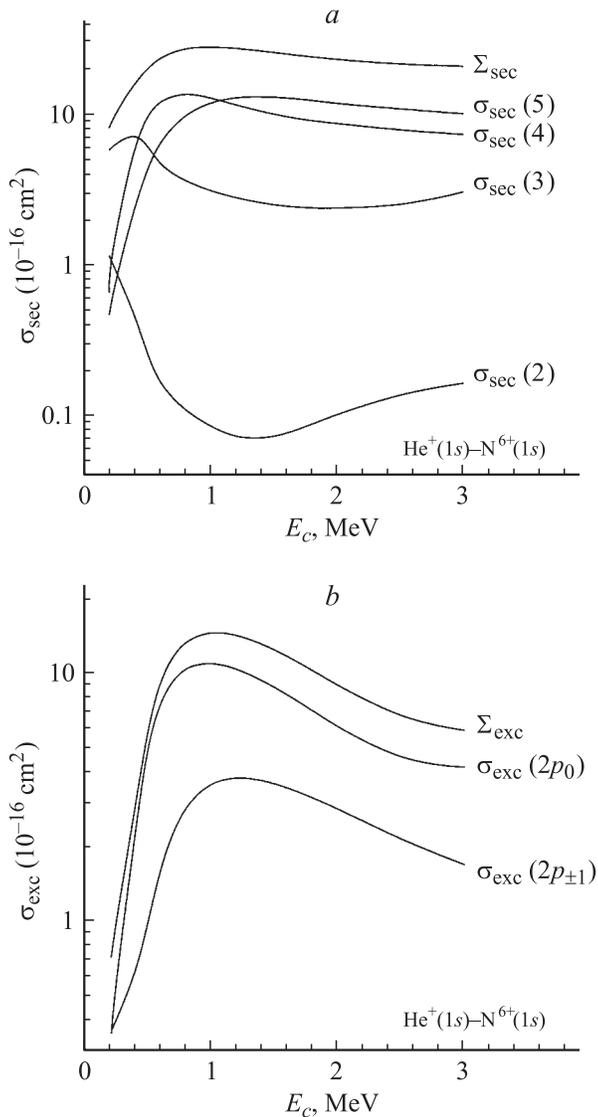
$$\Sigma_{\text{exc}}(2p_l) = 0.25\sigma_{\text{exc}}^s + 0.75\sigma_{\text{exc}}^{tr},$$

где  $\sigma_{\text{sec}}^s$ ,  $\sigma_{\text{exc}}^s$  и  $\sigma_{\text{sec}}^{tr}$ ,  $\sigma_{\text{exc}}^{tr}$  — полные сечения перезарядки и возбуждения, вычисленные соответственно на базисе синглетных и триплетных двухэлектронных состояний квазимолекулы.

Результаты расчетов полных сечений процессов перезарядки и возбуждения представлены на рис. 2. При малых энергиях столкновения ( $E_c < 0.9$  MeV) основным является процесс одноэлектронного захвата. Полное сечение одноэлектронного захвата растет с ростом  $E_c$  во всем рассмотренном интервале энергии столкновений (от  $7.9 \cdot 10^{-16}$  до  $27.98 \cdot 10^{-16}$   $\text{cm}^2$ ), слабо завися от энергии столкновения при  $E_c > 1.6$  MeV. При энергиях столкновения  $E_c < 0.65$  MeV одноэлектронный захват идет в основном в  $3l$ -состояния иона  $\text{C}^{4+}(1snl)$ , в интервале энергий  $0.65 < E_c < 1.0$  MeV — в  $5l$ -состояния и при  $E_c > 1.0$  MeV — в  $4l$ -состояния иона  $\text{C}^{4+}$ . Полное сечение возбуждения имеет слабо выраженный максимум ( $39.53 \cdot 10^{-16}$   $\text{cm}^2$ ) при  $E_c = 2.33$  MeV. Парциальное сечение  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0)$  растет с ростом энергии столкновения во всем рассмотренном интервале изменения  $E_c$ , парциальное сечение  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1})$  имеет максимум ( $17.50 \cdot 10^{-16}$   $\text{cm}^2$ ) при  $E_c = 2.0$  MeV. В интервале  $E_c$  от 0.5 до 1.3 MeV оба парциальных сечения возбуждения практически совпадают; при больших  $E_c$  разница в сечениях начинает нарастать и при  $E_c = 3.0$  MeV  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0)$  превосходит  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1})$  примерно в 1.5 раза (при  $E_c = 3.0$  MeV  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = 23.52 \cdot 10^{-16}$   $\text{cm}^2$  и  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = 15.62 \cdot 10^{-16}$   $\text{cm}^2$ ).

*б)* Сечения одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновениях ионов  $\text{He}^+(1s)$  с ионами  $\text{N}^{6+}(1s)$ ,  $\text{O}^{7+}(1s)$ . Учитывая результаты детального исследования столкновения  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$ , расчеты сечений одноэлектронного захвата и возбуждения для столкновений ионов  $\text{He}^+$  с ионами  $\text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  выполнялись только на базисе синглетных двухэлектронных состояний, и полагалось, что вычисленные при этом сечения с хорошей точностью описывают статистически взвешенные полные сечения перезарядки и возбуждения для столкновений  $\text{He}^+ - \text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$ .

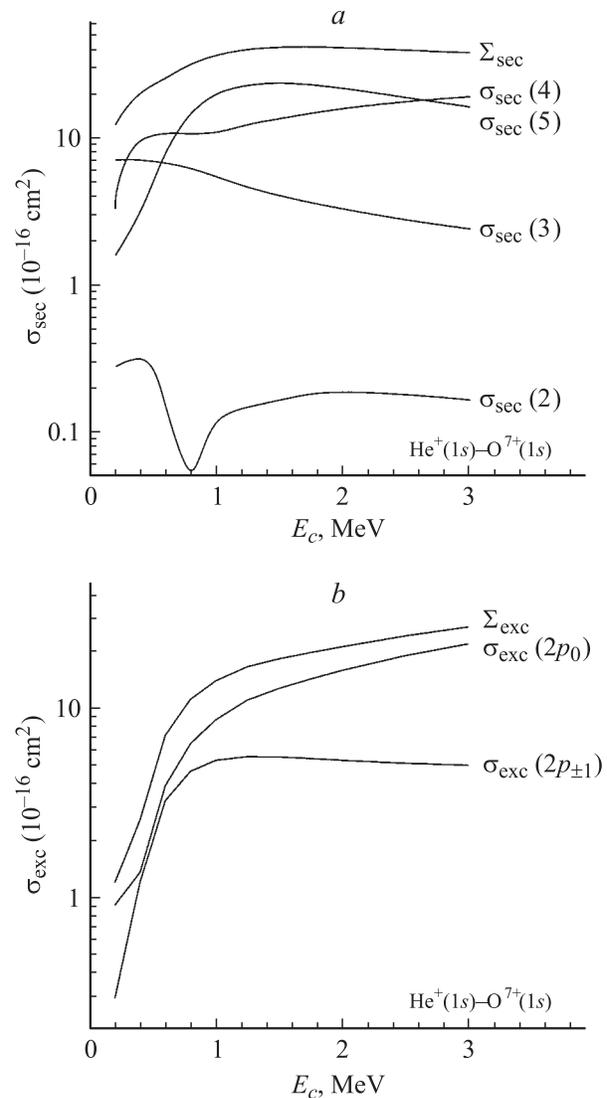
Полные и парциальные сечения одноэлектронного захвата и возбуждения для столкновения ионов  $\text{He}^+$  с



**Рис. 3.** Сечения одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновении  $\text{He}^+ - \text{N}^{6+}$ . *a* — полное  $\Sigma_{\text{sec}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{sec}}(n)$  сечения одноэлектронного захвата в  $1snl$  состоянии иона  $\text{N}^{5+}$ :  $\Sigma_{\text{sec}} = \sum_{n=2-5} \sigma_{\text{sec}}(n)$ ;  $\sigma_{\text{sec}}(2) = \sigma_2(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(3) = \sigma_3(3d_0) + \sigma_7(3d_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(4) = \sigma_4(4f_0) + \sigma_8(4f_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(5) = \sigma_6(5g_0) + \sigma_{10}(5g_{\pm 1})$ ; *b* — полное  $\Sigma_{\text{exc}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{exc}}(2p_l)$  сечения  $1s \rightarrow 2p_l$  электронного возбуждения иона  $\text{He}^+$ :  $\Sigma_{\text{exc}} = \sigma_{\text{exc}}(2p_0) + \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1})$ ;  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = \sigma_5(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = \sigma_9(2p_{\pm 1})$ .

ионами  $\text{N}^{6+}$  рассчитывались по формулам (18), (19). Результаты расчетов приведены на рис. 3. Полное сечение одноэлектронного захвата  $\sigma_{\text{sec}}^{\text{N}}$  имеет максимум ( $27.3 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ) при энергии столкновения  $E_c$  порядка 1.0 MeV. При малых энергиях столкновения ( $E_c < 0.4 \text{ MeV}$ ) одноэлектронный захват идет в основном в состояния иона  $\text{N}^{5+}(1snl)$  с  $n = 3$ , при  $0.4 \text{ MeV} < E_c < 1.1 \text{ MeV}$  — в состояния с  $n = 4$  и при  $E_c > 1.1 \text{ MeV}$  — в состояния иона  $\text{N}^{5+}$  с  $n = 5$ . Сечение возбуждения иона  $\text{He}^+(1s)$  в состояния  $2p_{0,\pm 1}$  при столкновении с ионами  $\text{N}^{6+}(1s)$  во всем интервале

рассмотренных энергий столкновений остается меньше сечения одноэлектронного захвата (максимальное значение  $\Sigma_{\text{exc}}^{\text{N}}$  равно  $14.5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  при  $E_c \simeq 1.0 \text{ MeV}$ ). Основной вклад в сечение возбуждения вносит канал возбуждения в  $2p_0$ -состояние иона  $\text{He}^+$ . Однако в отличие от столкновения  $\text{He}^+ + \text{C}^{5+}$  вклад его в полное сечение возбуждения менее существен. Оба сечения возбуждения  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{N}}(2p_0)$  и  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{N}}(2p_{\pm 1})$  имеют ярко выраженный максимум при энергиях столкновений 1.0 и 1.2 MeV соответственно; максимальные значения се-



**Рис. 4.** Сечения одноэлектронного захвата и возбуждения при столкновении  $\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$ . *a* — полное  $\Sigma_{\text{sec}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{sec}}(n)$  сечения одноэлектронного захвата в  $1snl$  состоянии иона  $\text{O}^{6+}$ :  $\Sigma_{\text{sec}} = \sum_{n=2-5} \sigma_{\text{sec}}(n)$ ;  $\sigma_{\text{sec}}(2) = \sigma_2(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(3) = \sigma_3(3d_0) + \sigma_7(3d_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(4) = \sigma_4(4f_0) + \sigma_8(4f_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{sec}}(5) = \sigma_5(5g_0) + \sigma_9(5g_{\pm 1})$ ; *b* — полное  $\Sigma_{\text{exc}}$  и парциальные  $\sigma_{\text{exc}}(2p_l)$  сечения  $1s \rightarrow 2p_l$  электронного возбуждения иона  $\text{He}^+$ :  $\Sigma_{\text{exc}} = \sigma_{\text{exc}}(2p_0) + \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1})$ ,  $\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = \sigma_6(2p_0)$ ,  $\sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = \sigma_{10}(2p_{\pm 1})$ .

чений равны:  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{N}}(2p_0)|_{E_c=1.0\text{MeV}} = 10.92 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  и  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{N}}(2p_{\pm 1})|_{E_c=1.2\text{MeV}} = 3.60 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ .

При расчете сечений одноэлектронного захвата и возбуждения для столкновения ионов  $\text{He}^+$  с ионами  $\text{O}^{7+}$  в формулах (18), (19) выражения для парциальных сечений  $\sigma_{\text{sec}}(5)$  и  $\sigma_{\text{exc}}(2p)$  были заменены на следующие:

$$\sigma_{\text{sec}}(5) = \sigma_5(5g_0) + \sigma_9(5g_{\pm 1})$$

и

$$\sigma_{\text{exc}}(2p_0) = \sigma_6(2p_0), \quad \sigma_{\text{exc}}(2p_{\pm 1}) = \sigma_{10}(2p_{\pm 1}).$$

Результаты расчетов приведены на рис. 4. Полное сечение одноэлектронного захвата  $\Sigma_{\text{sec}}^{\text{O}}$  имеет максимум ( $40.95 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ) при энергии столкновения  $E_c \simeq 1.75 \text{ MeV}$ . При малых энергиях столкновения ( $E_c \leq 0.4 \text{ MeV}$ ) электрон захватывается в основном в состоянии  $n = 3$  иона  $\text{O}^{6+}(1snl)$ , в интервале энергий  $E_c$  от 0.4 до 0.7 MeV захват электрона идет в основном в состоянии  $n = 4$  и в интервале энергий  $E_c$  от 0.7 до 2.6 MeV — в состоянии  $n = 5$ . При  $E_c > 2.6 \text{ MeV}$  основным снова становится захват электрона в состоянии  $n = 4$  иона  $\text{O}^{6+}(1snl)$ . Полное сечение возбуждения  $\Sigma_{\text{exc}}^{\text{O}}$ , растет с ростом  $E_c$  во всем интервале рассмотренных энергий столкновения, оставаясь меньше полного сечения одноэлектронного захвата. При  $E_c > 1.0 \text{ MeV}$  возбуждение иона  $\text{He}^+$  идет в основном в состоянии  $2p_0$  и при  $E_c = 3.0 \text{ MeV}$   $\sigma_{\text{exc}}^{\text{O}}(2p_0)$  превосходит  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{O}}(2p_{\pm 1})$  примерно в 4 раза (при  $E_c = 3.0 \text{ MeV}$   $\sigma_{\text{exc}}^{\text{O}}(2p_0) = 21.84 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  и  $\sigma_{\text{exc}}^{\text{O}}(2p_{\pm 1}) = 5.05 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ).

## Заключение

Получены новые данные о полных и парциальных сечениях одноэлектронного захвата и возбуждения снаряда при столкновениях ионов  $\text{He}^+$  с водородоподобными ионами  $\text{C}^{5+}$ ,  $\text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  в интервале энергий столкновения от 0.2 до 3.0 MeV.

Наибольшее значение полного сечения одноэлектронного захвата ( $40.95 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ) получено для столкновения  $\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$  при  $E_c = 1.75 \text{ MeV}$ , а наибольшее значение полного сечения возбуждения иона  $\text{He}^+$  ( $39.53 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ) — для столкновения  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$  при  $E_c = 2.33 \text{ MeV}$ . В столкновениях  $\text{He}^+ - \text{N}^{6+}$ ,  $\text{O}^{7+}$  сечение одноэлектронного захвата остается больше сечения возбужденного во всем интервале рассмотренных энергий столкновения, а в столкновениях  $\text{He}^+ + \text{C}^{5+}$  — только при  $E_c < 0.9 \text{ MeV}$ .

Во всех рассмотренных системах при малых энергиях столкновений основной захват идет в  $1s3l$ -состояния ионов  $\text{A}^{(Z_A-2)+}$ . При увеличении  $E_c$  в столкновении  $\text{He}^+ - \text{C}^{5+}$  основным становится одноэлектронный захват в  $1s5l$  и затем в  $1s4l$ -состояния ионов  $\text{C}^{4+}$ , в столкновениях  $\text{He}^+ - \text{N}^{6+}$  — одноэлектронный захват в  $1s4l$ - и затем в  $1s5l$ -состояния ионов  $\text{N}^{5+}$  и в столкновении  $\text{He}^+ - \text{O}^{7+}$  — одноэлектронный захват в  $1s4l$ -

затем в  $1s5l$ - и снова в  $1s4l$ -состояния иона  $\text{O}^{6+}$ . Ниже мы приводим для каждой столкновительной системы интервалы  $E_c$  (в MeV), в которых одноэлектронный захват происходит преимущественно в  $n$  состоянии ионов  $\text{A}^{(Z_A-2)+}(1snl)$  (в скобках приводятся максимальные значения сечений  $\sigma_{\text{sec}}(n)$  (в  $10^{-16} \text{ cm}^2$ ) в каждом из интервалов)

$$n = 3 \qquad n = 4$$

$$\text{C}^{4+}(1snl): E_c < 0.7 (7.79); E_c > 1.0 (12.58);$$

$$\text{N}^{5+}(1snl): E_c < 0.4 (7.02); 0.4 < E_c < 1.1 (13.25);$$

$$\text{O}^{6+}(1snl): E_c < 0.4 (7.05); 0.4 < E_c < 0.71 (10.69);$$

$$E_c > 2.6 (20.30)$$

$$n = 5$$

$$\text{C}^{4+}(1snl): 0.7 < E_c < 1.0 (8.72);$$

$$\text{N}^{5+}(1snl): E_c > 1.1 (12.63);$$

$$\text{O}^{6+}(1snl): 0.7 < E_c < 2.6 (23.28)$$

(парциальные сечения одноэлектронного захвата в  $1s2p$ -состояния ионов  $\text{A}^{(Z_A-2)+}$  во всех рассмотренных системах малы:  $\sigma_{\text{sec}}^{\text{C}}(2) < 2.0 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ,  $\sigma_{\text{sec}}^{\text{N}}(2) < 1.0 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  и  $\sigma_{\text{sec}}^{\text{O}}(2) < 0.3 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ ).

Возбуждение иона  $\text{He}^+$  во всех рассмотренных системах происходит в основном в состоянии  $2p_0$ .

Работа поддержана РФФИ (проект № 02-02-17590) и International Atomic Energy Agency (Research Contract #RUS11720/R2).

## Список литературы

- [1] *Tawara H.* Roles of Atomic and Molecular Processes in Fusion Plasma Researches. NIFS-DATA-25. Nagoya (Japan), May 1995. 47 p.
- [2] *Nikulin V.K., Guschina N.A.* // J. Phys. B. 1978. Vol. 11. N 20. P. 3553–3562.
- [3] *Гущина Н.А., Никулин В.К.* // Опт. и спектр. 1992. Т. 73. С. 458–468.
- [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. 1979. Vol. 12. N 18. P. L571.
- [6] *Nikulin V.K., Guschina N.A.* // Atomic Plasma and Material Interaction Data for Fusion. 2002. Vol. 10. P. 95–102.
- [7] *Гущина Н.А., Никулин В.К.* Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 1717. СПб., 1998. 66 с.
- [8] *Никулин В.К., Гущина Н.А.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 1. С. 15–28.
- [9] *Банд И.М., Тржасковская М.Б., Фомичев В.И.* Препринт Ленинградского института ядерной физики им. Б.П. Константинова АН СССР. № 299. Л., 1977. 46 с.
- [10] *Гущина Н.А., Никулин В.К., Самойлов А.В.* и др. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 811. Л., 1983. 26 с.
- [11] *Никулин В.К., Гущина Н.А.* Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 1764. СПб., 2003. 42 с.
- [12] *Piacentini R.D., Salin A.* // Computer Phys. Comm. 1976. Vol. 12. P. 199.