

01;02

# Процессы одноэлектронной перезарядки и возбуждения при столкновениях между ионами $\text{Bi}^{4+}$ в keV диапазоне энергий столкновения

© 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 6 июля 2006 г.)

Впервые получены теоретические данные о процессах одноэлектронной перезарядки и возбуждения при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  в основном и метастабильном  $\text{Bi}^{4+}(6p)$  состояниях в интервале энергий столкновения (5–75) keV в системе центра масс. Расчет сечений выполнен в рамках метода уравнений сильной связи на базе двухэлектронных квазимолекулярных состояний для кулоновской траектории движения ядер. Получено, что основной вклад в полные сечения перезарядки при столкновениях  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$  (1) вносят процессы одноэлектронного захвата в синглетные  $6s^2$ -состояния ионов  $\text{Bi}^{3+}$  и при столкновениях  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$  (2) — в синглетные  $6s6p$ -состояния. В рассмотренном интервале энергий столкновения сечения меняются в пределах  $(1.2-1.9) \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$  для столкновений (1) и  $(3.8-5.3) \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$  для столкновений (2).

Сечения возбуждения  $6s \rightarrow 6p$  в реакции (1) находятся в пределах  $(0.6-0.8) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  и  $(2.2-2.8) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  для синглетного и триплетного каналов соответственно. Результаты расчета сравниваются с данными, полученными в экспериментах с пересекающимися пучками с энергиями ионов в keV диапазоне. Оценена фракция метастабильных ионов в пучках путем сравнения экспериментальных и средневзвешенных теоретических данных для сечений реакций (1) и (2). Полученные данные по сечениям перезарядки необходимы для расчета потерь частиц в релятивистских пучках из-за изменения зарядового состояния ионов при столкновениях между ними внутри пучка из-за бетатронных осцилляций.

PACS: 34.70.+e, 34.10.+x

## Введение

Процессы столкновений между тяжелыми многоэлектронными ионами практически не исследовались теоретически в физике атомных столкновений. Исследование процессов перезарядки между идентичными малозарядными тяжелыми ионами необходимо для проектирования ускорителей и накопительных колец с целью получения интенсивных пучков ионов. Возможными применениями этих пучков являются также устройства для реализации иницируемого тяжелыми ионами инерциального ядерного синтеза (heavy-ion-driven inertial fusion — HIDIF [1]). При получении интенсивных пучков важно оценить потери частиц в пучках из-за изменения зарядового состояния ионов (перезарядки и ионизации) при их столкновениях внутри пучка. Процессы перезарядки внутри пучка происходят при энергиях столкновения ионов в системе центра масс  $\sim 50 \text{ keV}$  при их относительном движении перпендикулярно направлению пучка из-за бетатронных осцилляций.

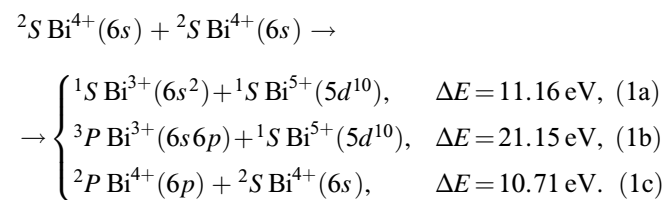
Недавно были измерены в экспериментах с пересекающимися пучками [2] полные сечения перезарядки при медленных столкновениях четырехзарядных тяжелых ионов элементов Ar, Kr, Xe, Pb, Bi. Полученные результаты имеют неопределенность, связанную с присутствием в пересекающихся пучках ионов в метастабильных состояниях, при столкновениях между которыми перезарядка происходит с большими сечениями, чем для

ионов в основном состоянии. Фракции метастабильных ионов составляют, согласно дополнительным экспериментам [2], порядка (12–29)% для ионов  $\text{Ar}^{4+}$ ,  $\text{Kr}^{4+}$  и  $\text{Xe}^{4+}$ . Для этих ионов были измерены также сечения ионизации и сделаны оценки ожидаемых потерь частиц в пучках [2].

Целью настоящей работы является теоретическое исследование процессов перезарядки и возбуждения при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  в основном и метастабильном  $\text{Bi}^{4+}(6p)$  состояниях.

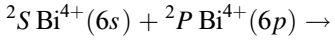
Оценка фракции метастабильных ионов в пучках получена путем сравнения экспериментальных и теоретических данных полных сечений перезарядки.

В работе рассмотрены процессы одноэлектронной перезарядки (1a, 1b) и возбуждения (1c) при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}$  в основном состоянии для синглетного и триплетного каналов реакций с дефектами резонанса  $\Delta E$



Процессы возбуждения (1c) рассматривались также как для синглетного, так и для триплетного входного канала.

Энергия дефекта резонанса для триплетного канала одноэлектронной перезарядки значительно больше, чем для синглетного. Поэтому в нашей предварительной публикации [3] канал (1b) не учитывался. Кроме того, в [3] не рассматривались столкновения между ионами в основном и метастабильном состояниях. В данной работе рассмотрены следующие реакции перезарядки при столкновениях между ионами в основном и метастабильном состояниях для синглетного ( $m = 1$ ) и триплетного ( $m = 3$ ) каналов



$$\rightarrow \begin{cases} {}^mP Vi^{3+}(6s6p) + {}^1S Vi^{5+}(5d^{10}), & \Delta E = 10.44 \text{ eV}, & (2a) \\ {}^1S Vi^{3+}(6s^2) + {}^1S Vi^{5+}(5d^{10}), & \Delta E = 0.46 \text{ eV}, & (2b) \\ {}^2P Vi^{4+}(6p) + {}^2S Vi^{4+}(6s), & \Delta E = 0 & (2c) \end{cases}$$

(реакция (2c) рассматривалась как для синглетного, так и для триплетного входного канала).

Полные энергии ионов, используемые для оценки приведенных выше дефектов резонанса, вычислены в релятивистском приближении Хартри–Фока–Слейтера.

## Теория

Расчет сечений реакций (1)–(2) выполнен в квазиклассическом приближении в рамках метода уравнений сильной связи на базе двухэлектронных квазимолекулярных состояний (влияние электронов ионных остовов  $Vi^{5+}(5d^{10})$  учитывалось в рамках метода эффективного потенциала). В рассматриваемом приближении задача сводится к определению электронной волновой функции  $\tilde{\Psi}(r_1, r_2, t)$ , удовлетворяющей нестационарному уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial \tilde{\Psi}(r_1, r_2, t)}{\partial t} = H(r_1, r_2, R(t)) \tilde{\Psi}(r_1, r_2, t), \quad (3)$$

где  $H(r_1, r_2, R(t))$  — двухэлектронный гамильтониан, параметрически зависящий от времени через межъядерное расстояние  $R(t)$ :

$$H = \sum_{k=1,2} H_0(r_k; R) + \frac{1}{r_{12}}, \quad (4)$$

где  $H_0(r_k; R)$  задается для каждой одноэлектронной молекулярной орбитали  $\psi_n(r_k; R)$  в виде

$$H_0(r_k; R) = -\frac{\nabla_k^2}{2} + V_{\text{eff}}^n(r_k; R). \quad (5)$$

Эффективный потенциал  $V_{\text{eff}}^n(r_k; R)$ , учитывающий многоэлектронность квазимолекулы, задается в параметрическом виде [4]

$$V_{\text{eff}}^n(r_k; R) = -\frac{Z_A}{r_{ak}} - \frac{Z_B}{r_{bk}} + \frac{1}{2} \left[ \frac{a_1^n - b_1^n}{r_{ak}} + \frac{a_1^n + b_1^n}{r_{bk}} + \frac{\tilde{a}_1^n + R a_0^n}{r_{ak} r_{bk}} + \frac{b_2^n (r_{ak} - r_{bk})^2}{R r_{ak} r_{bk}} \right]. \quad (6)$$

В (3)–(6)  $r_k$  — координаты внешних электронов,  $r_{ak}, r_{bk}$  — расстояния  $k$ -го электрона до ядер с зарядами  $Z_A$  и  $Z_B$  ( $A$  — налетающий ион,  $B$  — мишень;  $Z_A = Z_B = 5$ ),  $r_{12}$  — расстояние между электронами. Эффективный потенциал (6) допускает разделение переменных в одноэлектронном уравнении Шредингера

$$H_0(r; R) \psi_n(r; R) = \varepsilon_n(R) \psi_n(r; R) \quad (7)$$

в вытянутой сфероидальной системе координат, что позволяет получать [4] адиабатические экранированные двухатомные молекулярные орбитали  $\psi_n$  (ЭДМО), сохраняющие симметрию обычно используемых одноэлектронных двухатомных молекулярных орбиталей задачи  $H_2^+$  [5]. Вопрос о задании параметров эффективного потенциала обсуждается ниже. Классификация ЭДМО проводится по сферическим квантовым числам ( $n, l, m$ ) состояния объединенного атома, в которое переходит данная орбиталь при  $R \rightarrow 0$ . Для установления соответствия между заданной орбиталью и уровнями атомов при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  используются правила корреляции Бара–Лихтена [6].

Решение уравнения (3) находится в виде разложения по ортонормированному базису двухэлектронных состояний  $\Psi_l(r_1, r_2; R)$

$$\tilde{\Psi}(r_1, r_2, t) = \sum_{l=1}^n a_l(t) \Psi_l(r_1, r_2; R) \exp\left(-i \int_0^t E_l(R) dt'\right), \quad (8)$$

где

$$E_l(R) = \langle \Psi_l(r_1, r_2; R) | H | \Psi_l(r_1, r_2; R) \rangle. \quad (9)$$

Подстановка (8) в (3) приводит к системе линейных дифференциальных уравнений для определения коэффициентов  $a_l$ , которая для кулоновской траектории движения ядер имеет вид [7]

$$\frac{da_l(\tau)}{d\tau} = -\sum_{k \neq l} a_k(\tau) \left\{ \frac{\tau}{R - \gamma} R_{lk}(R) + \frac{\rho}{R(R - \gamma)} L_{lk}(R) + \frac{i}{v} \frac{R}{R - \gamma} H_{lk}(R) \right\} \exp\left(-\frac{i}{v} \int_0^\tau (E_k(R) - E_l(R)) \frac{R}{R - \gamma} d\tau'\right) \\ (R(\tau) = (\tau^2 + \gamma^2 + \rho^2)^{1/2} + \gamma; \quad -\infty < \tau < \infty). \quad (10)$$

В (10)  $\rho$  — параметр удара,  $v$  — относительная скорость сталкивающихся частиц,  $\gamma = Z_A Z_B / \mu v^2$ ,  $\mu$  — приведенная масса,

$$R_{lk} = \langle \Psi_l(r_1, r_2; R) | d/dR | \Psi_k(r_1, r_2; R) \rangle, \\ L_{lk} = \langle \Psi_l(r_1, r_2; R) | iL_y | \Psi_k(r_1, r_2; R) \rangle \quad (11)$$

матричные элементы динамических (радиальных  $R_{lk}$  и вращательных  $L_{lk}$ ) связей между базисными состояниями,

$$H_{lk} = \langle \Psi_l(r_1, r_2; R) | H | \Psi_k(r_1, r_2; R) \rangle \quad (12)$$

матричные элементы потенциальных связей.

**Таблица 1.** Параметры эффективных потенциалов  $V_{\text{eff}}^n$  (в а.е.) для расчета ЭДМО  $\psi_n$  квазимолекулы  $\text{Bi}^{4+} + \text{Bi}^{4+}$

$\psi_n$	$\tilde{a}_1^n$	$a_1^n$	$a_0^n$	$b_2^n$
$6s\sigma$	-0.250	-55.94	320.798	-278.863
$7p\sigma$	-2.247	-28.88	141.949	-127.852
$7d\sigma$	-6.110	-5.18	-0.518	-5.832
$8f\sigma$	-10.545	-0.35	-11.267	0.087

**Таблица 2.** Энергии  $\varepsilon_{nl}^{ua}$  и средние значения электронного потенциала  $\bar{V}_{nl}^{ua}$  для ЭДМО  $\psi_n$  в пределе объединенных атомов; энергии  $\varepsilon^{sa}$  ЭДМО  $\psi_n$  в пределе разведенных атомов (все величины даны в а.е.)

$\psi_n$	$R = 0$			$R \rightarrow \infty$	
	$nl$	$\varepsilon_{nl}^{ua}$	$\bar{V}_{nl}^{ua}$	$n'l'$	$\varepsilon^{sa}$
$6s\sigma$	$6s$	-71.637	514	$6s$	-2.004
$7p\sigma$	$7p$	-82.992	663	$6s$	-2.004
$7d\sigma$	$7d$	-4.846	25.9	$6p$	-1.609
$8f\sigma$	$8f$	-1.509	5.39	$6p$	-1.609

При записи уравнений сильной связи (10) и расчете динамических матричных элементов предполагалось, что начало системы координат, в которой описывается движение ядер, находится в центре межъядерной оси, ось  $z$  совпадает с направлением начальной скорости налетающего иона, а ось  $y$  перпендикулярна плоскости столкновения ( $xOz$ ).

Для расчета реакций (1)–(2) в число одноэлектронных орбиталей  $\psi_n(r; R)$  были включены орбитали

$$\psi_1^s = 6s\sigma, \quad \psi_2^u = 7p\sigma, \quad \psi_3^s = 7d\sigma, \quad \psi_4^u = 8f\sigma, \quad (13)$$

волновые функции которых в пределе разведенных атомов выражаются через четные и нечетные комбинации атомных  $6s_A$ - и  $6s_B$ -функций и  $6p_A$ - и  $6p_B$ -функций налетающего иона ( $A$ ) и иона-мишени ( $B$ )

$$\begin{aligned} 6s\sigma(r; R)_{R \rightarrow \infty} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (6s_A + 6s_B), \\ 7p\sigma(r; R)_{R \rightarrow \infty} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (6s_A - 6s_B), \\ 7d\sigma(r; R)_{R \rightarrow \infty} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (6p_A + 6p_B), \\ 8f\sigma(r; R)_{R \rightarrow \infty} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (6p_A - 6p_B). \end{aligned} \quad (14)$$

Параметры эффективного потенциала для расчета ЭДМО определялись следующим образом. Параметры  $\tilde{a}_1^n$  и  $a_1^n$  определялись из требования, чтобы энергия  $\varepsilon_n(R)$  молекулярной орбитали  $\psi_n$  и среднее значение эффективного потенциала  $\bar{V}_{\text{eff}}^n(r; R) = \langle \psi_n | V_{\text{eff}}^n | \psi_n \rangle$  переходили в пределе объединенного атома в соответствующие значения  $\varepsilon_{nl}^{ua}$ ,  $\bar{V}_{nl}^{ua}$ , полученные из атомных

расчетов. Параметры  $a_0^n$  и  $b_2^n$  ( $b_1 \equiv 0$  для гомоядерных систем) определялись из требования, чтобы в пределе больших межъядерных расстояний ( $R \rightarrow \infty$ ) энергия  $\varepsilon_n(R)$  выходила на свое асимптотическое значение  $\varepsilon_n(R)|_{R \rightarrow \infty} \rightarrow \varepsilon^{sa} - 4/R$ , где  $\varepsilon^{sa}$  — энергия атомного состояния ( $n', l', m$ ), в которое переходит данная орбиталь в пределе разведенных атомов. Детальные выражения для определения параметров приведены в [8]. Полученные параметры и значения атомных величин  $\varepsilon_{nl}^{ua}$ ,  $\bar{V}_{nl}^{ua}$  и  $\varepsilon^{sa}$ , используемые для их определения, приведены в табл. 1, 2. Определяемые из уравнения (7) орбитали  $\psi_n(r; R)$  одной симметрии неортогональны из-за зависимости эффективного потенциала  $V_{\text{eff}}^n$  от состояния  $n$ . Набор ортогонализированных [9] одночастичных состояний  $\psi'_n(r; R)$ , соответствующий базисному набору (13) и используемый далее для построения ортогонального базиса двухэлектронных состояний  $\Psi_l(r_1, r_2; R)$ , есть

$$\begin{aligned} \psi'_1 &\simeq \psi_1^s - \frac{S_{13}}{2} \psi_3^s, & \psi'_3 &\simeq \psi_3^s - \frac{S_{13}}{2} \psi_1^s, \\ \psi'_2 &\simeq \psi_2^u - \frac{S_{24}}{2} \psi_4^u, & \psi'_4 &\simeq \psi_4^u - \frac{S_{24}}{2} \psi_2^u. \end{aligned} \quad (15)$$

Выражения (15) записаны с учетом малости матричных элементов перекрытия между орбиталями  $\psi_n(r; R)$  ( $|S_{13}| = |\langle \psi_1^s | \psi_3^s \rangle| \langle 0.17$  и  $|S_{24}| = |\langle \psi_2^u | \psi_4^u \rangle| \langle 0.14$ ). Энергии и волновые функции ЭДМО, матричные элементы перекрытия между ними рассчитывались с использованием комплекса программ [10].

При построении базисных двухэлектронных волновых функций  $\Psi_l(r_1, r_2; R)$  использовались симметризованные (четные и нечетные) линейные комбинации двухэлектронных одноконфигурационных состояний  $\phi_i(r_1, r_2; R)$ , построенных на ортогонализированных одноэлектронных квазимолекулярных состояниях  $\psi'_n(r_k; R)$ :

$$\phi_i(r_1, r_2; R) \equiv \phi_i[\psi'_n, \psi'_{n'}] =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi'_n(r_1; R)\psi'_{n'}(r_2; R) \pm \psi'_{n'}(r_2; R)\psi'_n(r_1; R)], & n \neq n' \\ \psi'_n(r_1; R)\psi'_n(r_2; R), & n = n'. \end{cases} \quad (16)$$

Знаки „+“, „-“ в (16) соответствуют синглетным и триплетным двухэлектронным состояниям.

Симметризованные синглетные  $\Phi_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  и триплетные  $\bar{\Phi}_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  линейные комбинации одноконфигурационных двухэлектронных состояний  $\phi_i(r_1, r_2; R)$ , используемые для расчета реакций (1)–(2), и их атомные пределы при  $R \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \chi_j^{s,u}(r_1, r_2) &= \lim_{R \rightarrow \infty} \Phi_j^{s,u}(r_1, r_2; R), \\ \bar{\chi}_j^{s,u}(r_1, r_2) &= \lim_{R \rightarrow \infty} \bar{\Phi}_j^{s,u}(r_1, r_2; R), \end{aligned} \quad (17)$$

полученные с использованием соотношений (14), приведены в табл. 3, 4.

**Таблица 3.** Симметризованные комбинации  $\Phi_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  синглетных одноконфигурационных состояний  $\phi_i[\psi'_n, \psi'_{n'}] = [\psi'_n(r_1)\psi'_{n'}(r_2) + \psi'_{n'}(r_2)\psi'_n(r_1)]/\sqrt{2}$  и их атомные пределы при  $R \rightarrow \infty$ 

$\Phi_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$	Предел при $R \rightarrow \infty$ ( $\chi_j^{s,u}$ )
$\Phi_1^s(r_1, r_2; R) = (\phi_1[\psi'_1, \psi'_1] - \phi_2[\psi'_2, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$[6s_A, 6s_B]$
$\Phi_2^s(r_1, r_2; R) = (\phi_1[\psi'_1, \psi'_1] + \phi_2[\psi'_2, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$(6s_A(1)6s_A(2) + 6s_B(1)6s_B(2))/\sqrt{2}$
$\Phi_3^s(r_1, r_2; R) = (\phi_3[\psi'_1, \psi'_3] - \phi_4[\psi'_2, \psi'_4])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_B] + [6s_B, 6p_A])/\sqrt{2}$
$\Phi_4^s(r_1, r_2; R) = (\phi_3[\psi'_1, \psi'_3] + \phi_4[\psi'_2, \psi'_4])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_A] + [6s_B, 6p_B])/\sqrt{2}$
$\Phi_1^u(r_1, r_2; R) = \phi_1[\psi'_1, \psi'_2]$	$(6s_A(1)6s_A(2) - 6s_B(1)6s_B(2))/\sqrt{2}$
$\Phi_2^u(r_1, r_2; R) = (\phi_2[\psi'_1, \psi'_4] - \phi_3[\psi'_3, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$([6s_B, 6p_A] - [6s_A, 6p_B])/\sqrt{2}$
$\Phi_3^u(r_1, r_2; R) = (\phi_2[\psi'_1, \psi'_4] + \phi_3[\psi'_3, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_A] - [6s_B, 6p_B])/\sqrt{2}$

**Таблица 4.** Симметризованные комбинации  $\bar{\Phi}_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  триплетных одноконфигурационных состояний  $\bar{\phi}_i[\psi_n, \psi_{n'}] = [\psi'_n(r_1)\psi'_{n'}(r_2) - \psi'_{n'}(r_2)\psi'_n(r_1)]/\sqrt{2}$  и их атомные пределы при  $R \rightarrow \infty$ 

$\bar{\Phi}_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$	Предел при $R \rightarrow \infty$ ( $\bar{\chi}_j^{s,u}$ )
$\bar{\Phi}_3^s(r_1, r_2; R) = (\bar{\phi}_3[\psi'_1, \psi'_3] - \bar{\phi}_4[\psi'_2, \psi'_4])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_B] + [6s_B, 6p_A])/\sqrt{2}$
$\bar{\Phi}_4^s(r_1, r_2; R) = (\bar{\phi}_3[\psi'_1, \psi'_3] + \bar{\phi}_4[\psi'_2, \psi'_4])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_A] + [6s_B, 6p_B])/\sqrt{2}$
$\bar{\Phi}_1^u(r_1, r_2; R) = \bar{\phi}_1[\psi'_1, \psi'_2]$	$[6s_B, 6s_A]$
$\bar{\Phi}_2^u(r_1, r_2; R) = (\bar{\phi}_2[\psi'_1, \psi'_4] - \bar{\phi}_3[\psi'_3, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$([6s_A, 6p_A] - [6s_B, 6p_B])/\sqrt{2}$
$\bar{\Phi}_3^u(r_1, r_2; R) = (\bar{\phi}_2[\psi'_1, \psi'_4] + \bar{\phi}_3[\psi'_3, \psi'_2])/\sqrt{2}$	$([6s_B, 6p_A] - [6s_A, 6p_B])/\sqrt{2}$

## Расчет сечений одноэлектронной перезарядки и возбуждения при столкновениях между ионами $\text{Vi}^{4+}(6s) + \text{Vi}^{4+}(6s)$ в основном состоянии

Расчет столкновений между ионами в основном состоянии выполнен при использовании пяти двухэлектронных состояний  $\Psi_l(r_1, r_2; R)$ , описывающих в реакциях (1) входной канал  $\Psi_1$ , каналы перезарядки  $\Psi_2, \Psi_3$  ( $a, a'$  или  $b, b'$ ) и каналы  $6s-6p$  электронного возбуждения  $\Psi_4, \Psi_5$  ( $c, c'$ ). Для синглетных столкновений имеем

$$\begin{aligned}
\Psi_1(r_1, r_2; R) &= \Phi_1^s(r_1, r_2; R) \quad (\text{входной канал}), \\
\Psi_2(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_2^s(r_1, r_2; R) + \Phi_1^u(r_1, r_2; R)), \quad (a) \quad [6s_A(1)6s_A(2)] \\
\Psi_3(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_3^s(r_1, r_2; R) - \Phi_1^u(r_1, r_2; R)), \quad (a') \quad [6s_B(1)6s_B(2)] \\
\Psi_4(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_3^s(r_1, r_2; R) + \Phi_2^u(r_1, r_2; R)), \quad (c) \quad [6p_A, 6s_B] \\
\Psi_5(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_3^s(r_1, r_2; R) - \Phi_2^u(r_1, r_2; R)), \quad (c') \quad [6s_A, 6p_B], \quad (18)
\end{aligned}$$

где  $\Phi_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  — двухэлектронные состояния, выписанные в табл. 3. Для триплетных столкновений используются следующие состояния:

$$\begin{aligned}
\Psi_1(r_1, r_2; R) &= \bar{\Phi}_1^u(r_1, r_2; R) \quad (\text{входной канал}), \\
\Psi_2(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\Phi}_4^s(r_1, r_2; R) + \bar{\Phi}_2^u(r_1, r_2; R)), \quad (b) \quad [6s_A, 6p_A], \\
\Psi_3(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\Phi}_4^s(r_1, r_2; R) - \bar{\Phi}_2^u(r_1, r_2; R)), \quad (b') \quad [6s_B, 6p_B], \\
\Psi_4(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\Phi}_3^s(r_1, r_2; R) + \bar{\Phi}_3^u(r_1, r_2; R)), \quad (c) \quad [6s_B, 6p_A], \\
\Psi_5(r_1, r_2; R) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{\Phi}_3^s(r_1, r_2; R) - \bar{\Phi}_3^u(r_1, r_2; R)), \quad (c') \quad [6s_A, 6p_B], \quad (19)
\end{aligned}$$

где  $\bar{\Phi}_j^{s,u}(r_1, r_2; R)$  — двухэлектронные состояния, выписанные в табл. 4. Выражения (18), (19) могут быть получены при использовании приведенных в табл. 3, 4 пределов, к которым стремятся  $\Phi_j^{s,u}$  и  $\bar{\Phi}_j^{s,u}$  при  $R \rightarrow \infty$ .

Для решения уравнений сильной связи (10) необходимо записать начальные условия, накладываемые на коэффициенты  $a_l$ .

При  $t \rightarrow -\infty$  ( $R \rightarrow \infty$ ) квазимолекула находится в состоянии  $\Psi_1(r_1, r_2) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_1(r_1, r_2; R(t))$  с энергией  $E_1(\infty)$ :

$$\tilde{\Psi}(r_1, r_2, t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow \Psi_1(r_1, r_2) \exp(-iE_1(\infty)t). \quad (20)$$

Из (20) с учетом разложения (8) получаем следующие начальные условия, накладываемые на решения уравнений сильной связи

$$a_l(-\infty) = \delta_{1l} \exp(-iv_1),$$

$$v_1 = \frac{1}{v} \int_0^\infty [E_1(R) - E_1(\infty)] \frac{R}{R - \gamma} d\tau. \quad (21)$$

Амплитуда вероятности перехода из состояния  $\Psi_1(r_1, r_2)$  в конечное состояние  $\Psi_l(r_1, r_2) \simeq \lim_{t \rightarrow \infty} \Psi_l(r_1, r_2; R(t))$  для заданных значений параметра удара  $\rho$  и скорости столкновения  $v$  может быть представлена как

$$b_l(\rho, v) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_l(r_1, r_2) | \tilde{\Psi}(r_1, r_2, t) \rangle \exp(iE_l(\infty)t)$$

$$= a_l(v, \rho, \infty) \exp(-iv_1), \quad (22)$$

где

$$v_l = \frac{1}{v} \int_0^\infty [E_l(R) - E_l(\infty)] \frac{R}{R - \gamma} d\tau.$$

Для решения системы уравнений сильной связи (10) с начальными условиями (21) использовалась программа TANGO [11]. Входящие в уравнение сильной связи матричные элементы  $H_{lj}(R)$  двухэлектронного гамильтониана для  $R \leq R_0 = 30$  а.е. вычислялись с использованием программы [10] (матричные элементы двухэлектронного гамильтониана, вычисленные на базисных функциях (18) и (19), расписываются с использованием соотношений (15)). При  $R > R_0$  для расчета  $E_l(R)$  использовались асимптотические выражения

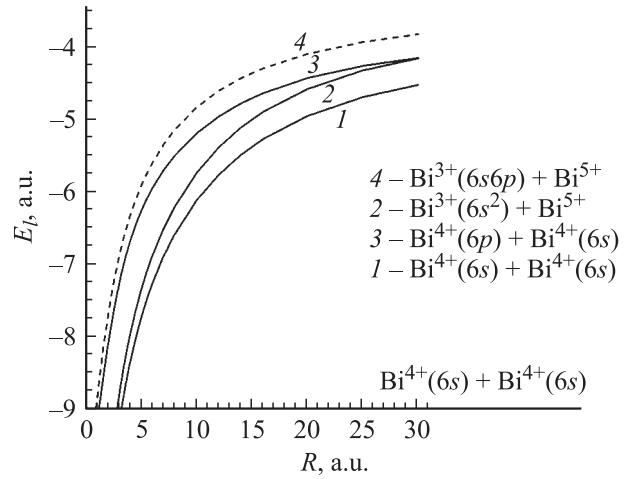
$$E_l(R) \simeq E_l(\infty) - \frac{\alpha_l}{R} = E_l(R_0) - \alpha_l \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right),$$

$$\alpha_l = 8 \text{ для } l = 1, 4, 5 \text{ и } \alpha_l = 10 \text{ для } l = 2, 3. \quad (23)$$

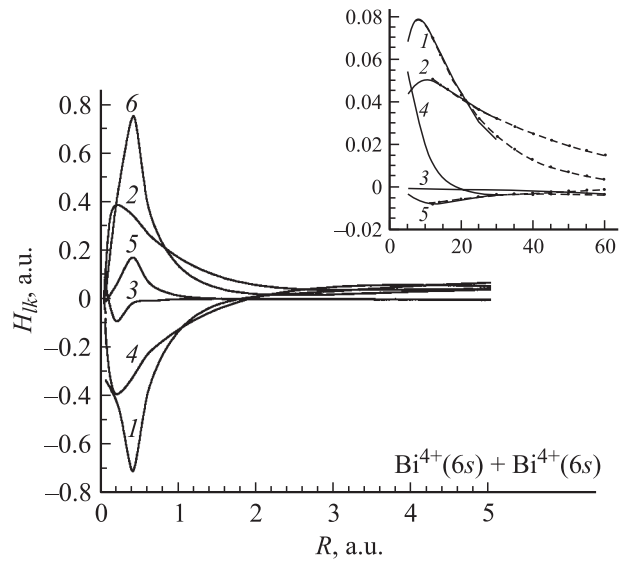
Значения диагональных матричных элементов  $E_l(R) = H_{ll}(R)$  для синглетных состояний (18) приведены на рис. 1, пунктиром нанесены энергии двухэлектронных состояний, описывающих каналы одноэлектронного захвата ( $b, b'$ ) в триплетные состояния ионов  $\text{Bi}^{3+}(6s6p)$ . Энергии состояний  $\Psi_{2,3}$  и  $\Psi_{4,5}$ , приведенные на рис. 1, были сдвинуты на  $-0.07$  и  $-0.27$  а.е., чтобы значения энергий дефектов резонанса для каналов ( $a, a'$ ), ( $b, b'$ ) и ( $c, c'$ ) совпадали со значениями, полученными из атомных расчетов.

Для расчета недиагональных матричных элементов потенциальных связей  $H_{lk}(R)$  при  $R > R_0$  использовались экстраполяционные формулы

$$H_{lk}(R) = H_{lk}(R_0) \exp[-\beta_{lk}(R - R_0)]. \quad (24)$$



**Рис. 1.** Энергии  $E_l(R)$  двухэлектронных состояний  $\Psi_l(r_1, r_2; R)$  для синглетных столкновений  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}(4+)(6s)$  (1a, 1c) (справа выписаны пределы  $\Psi_l$  при  $R \rightarrow \infty$ ). 1 — входной канал  $\Psi_1$ , 2 — каналы перезарядки  $\Psi_2, \Psi_3$  (a, a'), 3 — каналы возбуждения  $\Psi_4, \Psi_5$  (c, c'). 4 — каналы перезарядки  $\Psi_2, \Psi_3$  (b, b') в триплетных столкновениях (1b).



**Рис. 2.** Матричные элементы потенциальных связей  $H_{lk}$  между синглетными состояниями  $\Psi_l, \Psi_k$ . 1 —  $H_{12} = H_{13}$ , 2 —  $H_{14} = H_{15}$ , 3 —  $H_{23}$ , 4 —  $H_{24} = H_{35}$ , 5 —  $H_{25} = H_{34}$ , 6 —  $H_{45} = H_{34}$ .

Коэффициенты  $\beta_{lk}$ , входящие в выражения (24), определялись путем подгонки по методу наименьших квадратов значений матричных элементов потенциальных связей, получаемых по формулам (24), к расчетным значениям в области межъядерных расстояний  $R$  от 12 до 30 а.е. Матричные элементы потенциальных связей для синглетных столкновений (1) приведены на рис. 2 (пунктиром на вставке нанесены значения  $H_{lk}(R)$ , рассчитанные по формулам (24)).

Матричные элементы радиальных связей между функциями  $\Psi_l, \Psi_k$ , входящие в уравнения сильной связи (10), выражаются (с точностью до членов, квадратичных по малым параметрам  $S_{13}$  и  $S_{24}$ ) через линейные комбинации радиальных связей  $\langle 6s\sigma | d/dR | 7d\sigma \rangle$  и  $\langle 7p\sigma | d/dR | 8f\sigma \rangle$  между одноэлектронными ЭДМО (13), для расчета которых использовался комплекс программ [10]. Отличные от нуля матричные элементы радиальных связей  $R_{lk}^1$  и  $R_{lk}^3$  между синглетными и триплетными базисными состояниями приведены на рис. 3.

Проведенные детальные расчеты показали, что при рассматриваемых энергиях столкновений заселение двухэлектронных состояний идет в основном за счет потенциального взаимодействия.

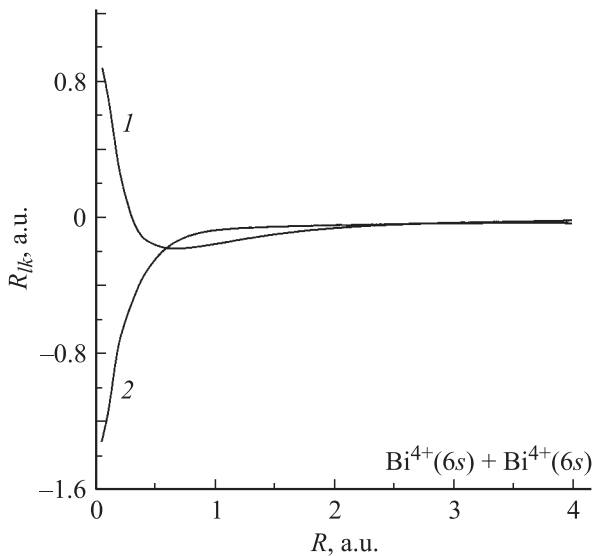
Сечения одноэлектронной перезарядки  $\sigma_{ir}^m$  и возбуждения  $\sigma_{exc}^m$  для заданной энергии столкновения  $E_c$  рассчитывались по формулам

$$\sigma_{ir}^m(E_c) = 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho |b_2^m(\rho, E_c)|^2,$$

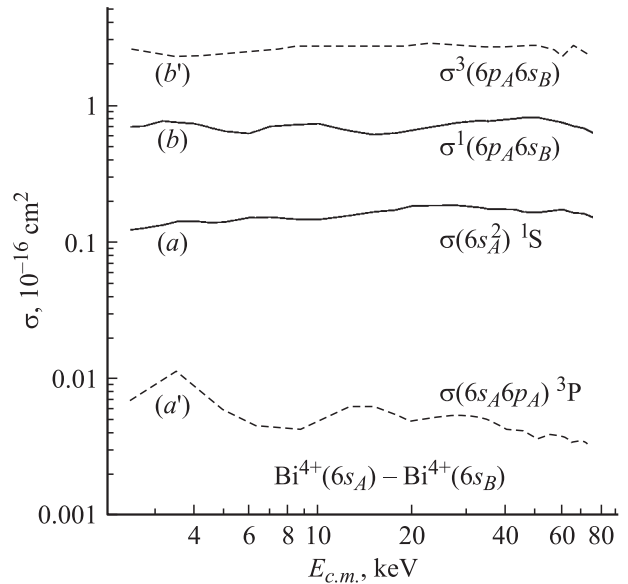
$$\sigma_{exc}^m(E_c) = 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho |b_4^m(\rho, E_c)|^2. \quad (25)$$

В (25)  $b_2^m(\rho, E_c)$ ,  $b_4^m(\rho, E_c)$  — амплитуды перехода (22) из начального состояния  $\Psi_1(r_1, r_2)$  в конечные состояния  $\Psi_2(r_1, r_2)$  и  $\Psi_4(r_1, r_2)$ , полученные из решения систем уравнений сильной связи (10), записанных на базисе синглетных ( $m=1$ ) и триплетных ( $m=3$ ) квазиолекулярных состояний. Для вычисленных амплитуд выполняются соотношения:  $b_2^m(\rho, E_c) = b_3^m(\rho, E_c)$  и  $b_4^m(\rho, E_c) = b_5^m(\rho, E_c)$ .

Полные сечения одноэлектронной перезарядки  $\Sigma_{ir}$  и электронного возбуждения  $\Sigma_{exc}$  налетающего иона



**Рис. 3.** Матричные элементы радиальных связей  $R_{lk}^1$  и  $R_{lk}^3$  между синглетными и триплетными состояниями  $\Psi_l, \Psi_k$ . 1 —  $R_{14}^1 = R_{15}^1 = R_{14}^3 = R_{31}^3$ , 2 —  $R_{24}^1 = R_{35}^1 = R_{21}^3 = R_{13}^3$ .



**Рис. 4.** Статистически взвешенные сечения перезарядки и возбуждения для столкновений  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$ : сечения перезарядки  $\sigma(6s_A^2)^1S$  и  $\sigma(6s_A 6p_A)^3P$  в синглетные  $\text{Bi}^{3+}(6s^2)$  (a) и триплетные  $\text{Bi}^{3+}(6s 6p)$  (a') состояния ионов, сечения возбуждения  $6s_A \rightarrow 6p_A$  налетающего иона для синглетного  $\sigma^1(6p_A 6s_B)$  (b) и триплетного  $\sigma^3(6p_A 6s_B)$  (b') входных каналов.

рассчитывались как сумма статистически взвешенных сечений перезарядки и возбуждения, вычисленных для синглетного и триплетного входных каналов

$$\Sigma_{ir} = \sigma(6s_A^2)^1S + \sigma(6s_A 6p_A)^3P \equiv 0.25 \sigma_{ir}^1 + 0.75 \sigma_{ir}^3$$

и

$$\Sigma_{exc} = \sigma^1(6p_A 6s_B) + \sigma^3(6p_A 6s_B) \equiv 0.25 \sigma_{exc}^1 + 0.75 \sigma_{exc}^3.$$

Полученные сечения (рис. 4) слабо зависят от энергии столкновения. Сечения перезарядки в синглетные  $6s^2$ - и триплетные  $6s 6p$ -состояния ионов  $\text{Bi}^{3+}$  изменяются в пределах  $(1.2-1.9) \cdot 10^{-17}$  и  $(0.3-1.0) \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ , а сечения возбуждения  $\sigma^1(6p_A 6s_B)$  и  $\sigma^3(6p_A 6s_B)$  — в пределах  $(0.6-0.8) \cdot 10^{-16}$  и  $(2.2-2.8) \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ . Основной вклад в полное сечение одноэлектронной перезарядки  $\Sigma_{ir}$  в столкновениях  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$  вносит процесс перезарядки в состояния иона  $\text{Bi}^{3+}(6s^2)$ .

### Расчет сечений одноэлектронной и резонансной перезарядки при столкновении $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$

Расчет столкновения между ионами в основном и метастабильном состояниях выполнялся для синглетного и триплетного входных каналов на базисе 6 (трех четных и трех нечетных) двухэлектронных состояний  $\Phi_j^{g,u}(r_1, r_2; R)$  из табл. 3

$$\Psi_1^g = \Phi_3^g, \quad \Psi_2^g = \Phi_2^g, \quad \Psi_3^g = \Phi_4^g,$$

$$\text{и } \Psi_1^u = \Phi_2^u, \quad \Psi_2^u = \Phi_1^u, \quad \Psi_3^u = \Phi_3^u \quad (26)$$

и на базисе 4 (двух четных и двух нечетных) двухэлектронных состояний  $\Phi_j^{g,u}(r_1, r_2; R)$  из табл. 4

$$\bar{\Psi}_1^g = \bar{\Phi}_3^g, \quad \bar{\Psi}_2^g = \bar{\Phi}_4^g \quad \text{и} \quad \bar{\Psi}_1^u = \bar{\Phi}_3^u, \quad \bar{\Psi}_2^u = \bar{\Phi}_2^u. \quad (27)$$

Для решения систем уравнений сильной связи (10) на базисе синглетных (26) и триплетных (27) состояний необходимо получить начальные условия, накладываемые на коэффициенты  $a_j^{g,u}$  в разложении (8) при четных и нечетных базисных функциях.

В начальный момент при  $t \rightarrow -\infty$  ( $R \rightarrow \infty$ ) квазимолекула находится в состоянии  $\Psi_1(r_1, r_2)$  с энергией  $\tilde{E}_1$

$$\tilde{\Psi}(r_1, r_2, t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow \Psi_1(r_1, r_2) \exp(-i\tilde{E}_1 t). \quad (28)$$

В рассматриваемых столкновениях функция  $\Psi_1(r_1, r_2)$  описывает состояние системы, когда один электрон находится у ядра  $Z_A$  в состоянии  $6s$ , а другой — у ядра  $Z_B$  в состоянии  $6p$ . Используя приведенные в табл. 3, 4 атомные пределы (17) функций  $\Phi_j^{g,u}(r_1, r_2; R)$  и  $\bar{\Phi}_j^{g,u}(r_1, r_2; R)$ , получаем, что функция  $\Psi_1(r_1, r_2)$  для синглетных и для триплетных столкновений (2) имеет вид

$$\Psi_1(r_1, r_2) = \begin{cases} (\chi_1^g - \chi_1^u)/\sqrt{2} \\ (\bar{\chi}_1^g - \bar{\chi}_1^u)/\sqrt{2}. \end{cases} \quad (29)$$

Подставив в (28) выражения (8) и (29), получим при  $t \rightarrow -\infty$  (с учетом ортогональности функций  $\chi_j^{g,u}$  и  $\bar{\chi}_j^{g,u}$ ) следующие начальные условия:

$$a_j^{g,u}(-\infty) = \begin{cases} \delta_{1j} \exp(-i\nu_1^{g,u})/\sqrt{2} \\ \delta_{1j} \exp(-i\bar{\nu}_1^{g,u})/\sqrt{2}. \end{cases} \quad (30)$$

Для синглетного канала фазы  $\nu_1^{g,u}$  имеют вид

$$\nu_1^{g,u} = \int_0^\infty (E_1^{g,u}(R) - \tilde{E}_1) \frac{R}{R - \gamma} d\tau,$$

где  $\tilde{E}_1 = \lim_{R \rightarrow \infty} E_1^{g,u}(R)$  и  $E_1^{g,u}(R)$  — матричные элементы  $\langle \Psi_1^{g,u} | H | \Psi_1^{g,u} \rangle$ . Для триплетного канала могут быть выписаны аналогичные выражения.

Четные и нечетные квазимолекулярные состояния гомоядерной квазимолекулы не связаны между собой, поскольку электронная система координат помещена в центре межъядерной оси, и система уравнений сильной связи (10) распадается на две независимые системы дифференциальных уравнений для определения коэффициента  $a_j^g$  и  $a_j^u$  с начальными условиями (30). Программа TANGO [11] (для коэффициентов  $c_j$ ) используется для решения системы уравнений сильной связи с начальными условиями

$$c_j(-\infty) = \delta_{1j} \exp\left(-\frac{i}{v} \nu_1\right).$$

Из линейности системы уравнений сильной связи следует

$$a_j^{g,u}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2}} c_j^{g,u}(\tau). \quad (31)$$

Используя приведенные в табл. 3, 4 пределы для функций  $\Phi_j^{g,u}$  и  $\bar{\Phi}_j^{g,u}$  при  $R \rightarrow \infty$ , можно получить

**Таблица 5.** Волновые функции  $\Psi_k$ , описывающие конечные состояния системы в синглетных столкновениях (2) и амплитуды перехода в эти состояния

$Z_A$	$Z_B$	$(k)$	$\Psi_k$	$b_k^1$
$\text{Bi}^{3+}(6s6p) + \text{Bi}^{5+}$		(a)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_3^g + \chi_3^u)$	$b_a^1 = 0.5(T_3^g + T_3^u)$
$\text{Bi}^{5+} + \text{Bi}^{3+}(6s6p)$		(a')	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_3^g - \chi_3^u)$	$b_{a'}^1 = 0.5(T_3^g - T_3^u)$
$\text{Bi}^{3+}(6s^2) + \text{Bi}^{5+}$		(b)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2^g + \chi_2^u)$	$b_b^1 = 0.5(T_2^g + T_2^u)$
$\text{Bi}^{5+} + \text{Bi}^{3+}(6s^2)$		(b')	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2^g - \chi_2^u)$	$b_{b'}^1 = 0.5(T_2^g - T_2^u)$
$\text{Bi}^{4+}(6p) + \text{Bi}^{4+}(6s)$		(c)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1^g + \chi_1^u)$	$b_c^1 = 0.5(T_1^g + T_1^u)$

**Таблица 6.** Волновые функции  $\Psi_k$ , описывающие конечные состояния системы в триплетных столкновениях (2) и амплитуды перехода в эти состояния

$Z_A$	$Z_B$	$(k)$	$\Psi_k$	$b_k^3$
$\text{Bi}^{3+}(6s6p) + \text{Bi}^{5+}$		(a)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{\chi}_2^g + \bar{\chi}_2^u)$	$b_a^3 = 0.5(\bar{T}_2^g + \bar{T}_2^u)$
$\text{Bi}^{5+} + \text{Bi}^{3+}(6s6p)$		(a')	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{\chi}_2^g - \bar{\chi}_2^u)$	$b_{a'}^3 = 0.5(\bar{T}_2^g - \bar{T}_2^u)$
$\text{Bi}^{4+}(6p) + \text{Bi}^{4+}(6s)$		(c)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{\chi}_1^g + \bar{\chi}_1^u)$	$b_c^3 = 0.5(\bar{T}_1^g + \bar{T}_1^u)$

(табл. 5, 6) волновые функции  $\Psi_k(r_1, r_2)$ , описывающие при  $t \rightarrow \infty$  состояния системы, соответствующие синглетным и триплетным каналам  $k = (a)-(c)$  в столкновениях  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$ :

$$\Psi_k(r_1, r_2) = \begin{cases} \lambda_k^g \chi_i^g + \lambda_k^u \chi_i^u, & i = 1 - 3; \\ \bar{\lambda}_k^g \bar{\chi}_j^g + \bar{\lambda}_k^u \bar{\chi}_j^u, & i = 1, 2. \end{cases} \quad (32)$$

Амплитуда перехода из состояния  $\Psi_1(r_1, r_2)$  в конечное состояние  $\Psi_k(r_1, r_2)$  с энергией  $\tilde{E}_k$ , определяемая как

$$b_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_k(r_1, r_2) | \tilde{\Psi}(r_1, r_2, t) \rangle \exp(i\tilde{E}_k t)$$

с учетом соотношений (31) и (32) следующим образом выражается через вычисляемые величины  $c_j^{g,u}$ :

$$b_k^m(\rho, E_c) = \begin{cases} (\lambda_k^g T_i^g + \lambda_k^u T_i^u)/\sqrt{2}, \\ (\bar{\lambda}_k^g \bar{T}_j^g + \bar{\lambda}_k^u \bar{T}_j^u)/\sqrt{2}, \end{cases} \quad (33)$$

где

$$T_i^{g,u} = c_i^{g,u}(\infty) \exp(-i\nu_i^{g,u}), \quad \bar{T}_j^{g,u} = \bar{c}_j^{g,u}(\infty) \exp(-i\bar{\nu}_j^{g,u})$$

и  $c_i^{g,u}, \bar{c}_j^{g,u}$  — решения системы уравнений сильной связи, записанных на базисе синглетных (26) и триплетных (27) состояний. Для синглетного канала фазы  $\nu_i^{g,u}$  имеют вид

$$\nu_i^{g,u} = \frac{1}{v} \int_0^\infty [E_i^{g,u}(R) - \tilde{E}_k] \frac{R}{R - \gamma} d\tau,$$

где  $\tilde{E}_k = \lim_{R \rightarrow \infty} E_i^{g,u}(R)$  и  $E_i^{g,u}(R)$  — матричные элементы  $\langle \Psi_i^{g,u} | H | \Psi_i^{g,u} \rangle$ . Аналогичные выражения могут быть выписаны для триплетного канала.

Парциальные сечения заселения конечных синглетных ( $m = 1$ ) и триплетных ( $m = 3$ ) состояний в реакциях (2)

рассчитывались по формулам

$$\sigma_k^m(E_c) = 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho |b_k^m(\rho, E_c)|^2.$$

Расчетные формулы для амплитуд перехода  $b_k^m$  выписаны в табл. 5, 6.

Входящие в уравнения сильной связи матричные элементы потенциальных и радиальных связей между базисными функциями (26) и (27) рассчитывались с использованием программ [10]. Диагональные матричные элементы двухэлектронного гамильтониана  $E_j^{g,u}(R)$ , вычисленные для синглетного набора базисных состояний (26), приведены на рис. 5.

На рис. 6 приведены статистически взвешенные парциальные сечения одноэлектронной перезарядки в синглетные (каналы (a, a') в табл. 5) и триплетные (каналы (a, a') в табл. 6) состояния ионов  $\text{Vi}^{3+}(6s6p)$ :

$$\sigma(6s_A 6p_A) {}^1P = 0.25 \sigma_a^1, \quad \sigma(6s_B 6p_B) {}^1P = 0.25 \sigma_{a'}^1, \quad (34)$$

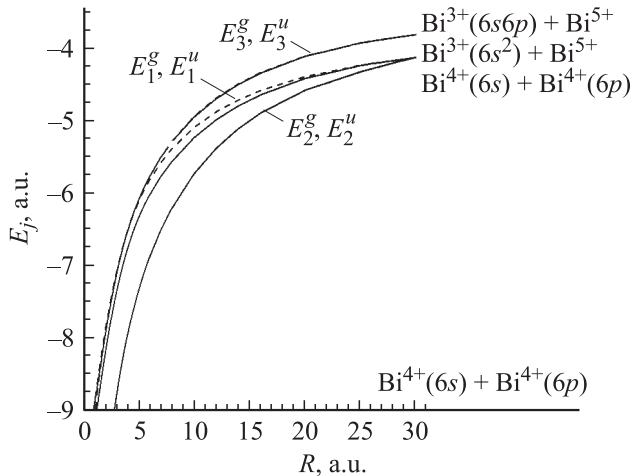
и

$$\sigma(6s_A 6p_A) {}^3P = 0.75 \sigma_a^3, \quad \sigma(6s_B 6p_B) {}^3P = 0.75 \sigma_{a'}^3. \quad (35)$$

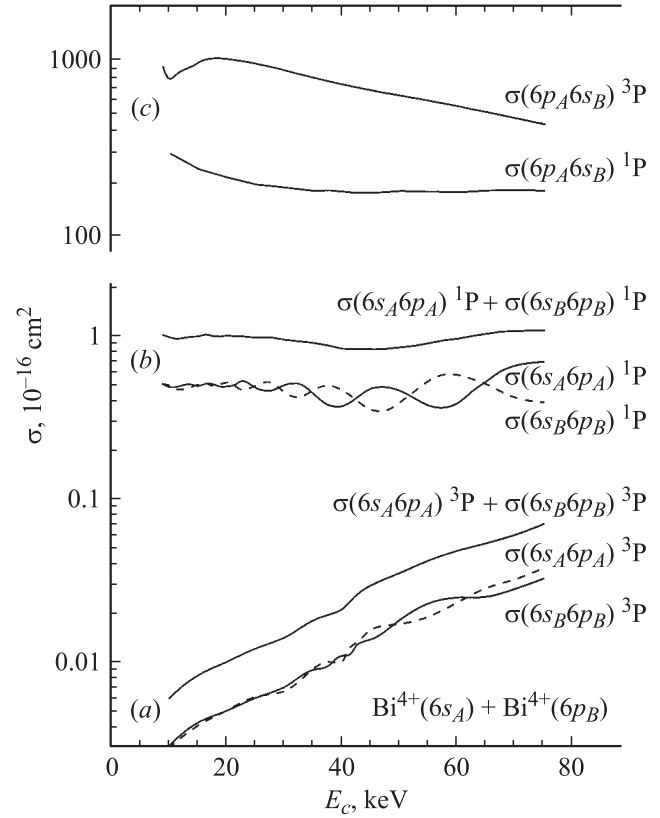
а также сечения резонансной перезарядки для синглетного и триплетного входных каналов:

$$\sigma(6p_A 6s_B) {}^1P = 0.25 \sigma_c^1, \quad \sigma(6p_A 6s_B) {}^3P = 0.25 \sigma_c^3 \quad (36)$$

(парциальные сечения одноэлектронного захвата в состояния ионов  $\text{Vi}^{3+}(6s^2)$ ,  $\sigma_b^1$  и  $\sigma_{b'}$ , почти на 3 порядка меньше сечений  $\sigma_a^1$ ,  $\sigma_{a'}$  и на рис. 6 не приводятся). Из рис. 6 видно, что как для синглетного, так и для триплетного входного канала, парциальные сечения заселения  $6s6p$ -состояний в налетающем ионе,  $\sigma(6s_A 6p_A)$ ,



**Рис. 5.** Диагональные матричные элементы  $E_j^{g,u}(R)$  двухэлектронного гамильтониана, вычисленные на базисе синглетных состояний  $\Psi_j^{g,u}(r_1, r_2; R)$  для  $g$ - (сплошные линии) и для  $u$ -симметрии (пунктир) (энергии состояний  $\Psi_2^g, \Psi_3^g$  и  $\Psi_2^u, \Phi_3^u$  на графике практически не различаются). Справа выписаны пределы  $\Psi_j$  при  $R \rightarrow \infty$ .



**Рис. 6.** Статистически взвешенные сечения одноэлектронной и резонансной перезарядки для столкновений  $\text{Vi}^{4+}(6s) + \text{Vi}^{4+}(6p)$  (2): а) парциальные  $\sigma(6s_A 6p_A) {}^3P$ ,  $\sigma(6s_B 6p_B) {}^3P$  и полные сечения одноэлектронной перезарядки в триплетные состояния ионов  $\text{Vi}^{3+}(6s6p)$  (a, a' каналы — табл. 6), б) парциальные  $\sigma(6s_A 6p_A) {}^1P$ ,  $\sigma(6s_B 6p_B) {}^1P$  и полные сечения одноэлектронной перезарядки в синглетные состояния ионов  $\text{Vi}^{3+}(6s6p)$  (a, a' каналы — табл. 5), в) сечения резонансной перезарядки  $\sigma(6p_A 6s_B) {}^1P$  и  $\sigma(6p_A 6s_B) {}^3P$  для синглетного (с канал — табл. 5) и триплетного (с канал — табл. 6) входных каналов.

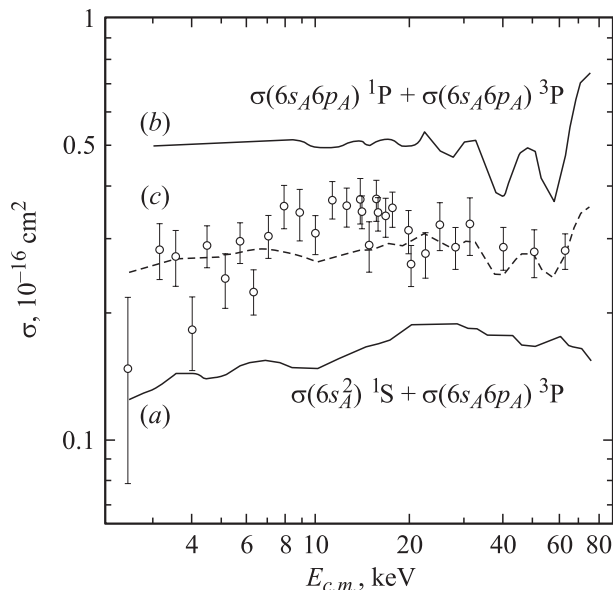
и в ионе-мишени,  $\sigma(6s_B 6p_B)$ , при малых энергиях столкновения различаются незначительно; при увеличении энергии они начинают заметно расходиться, колеблясь в противофазе. Сумма сечений одноэлектронного захвата в синглетные состояния ионов  $\text{Vi}^{3+} 6s6p$  слабо зависит от энергии столкновения, а в триплетные — растет с ростом энергии, оставаясь в рассматриваемом интервале энергий на порядок меньше сечения одноэлектронного захвата в синглетные состояния.

Полное сечение одноэлектронной перезарядки  $\Sigma_{ir}$  при столкновениях  $\text{Vi}^{3+}(6s) + \text{Vi}^{4+}(6p)$  рассчитывалось как сумма статистически взвешенных сечений одноэлектронной перезарядки, вычисленных для синглетного (34) и триплетного (35) входных каналов

$$\Sigma_{ir} = \sigma(6s_A 6p_A) {}^1P + \sigma(6s_A 6p_A) {}^3P.$$

На рис. 7 полные сечения одноэлектронной перезарядки, вычисленные для столкновений между ионами  $\text{Vi}^{4+}$  в основном состоянии (1) и между ионами  $\text{Vi}^{4+}$  в основном и возбужденном состояниях (2),





**Рис. 7.** Полные сечения перезарядки: *a*) для столкновений  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$  (1), *b*) для столкновений  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$  (2), *c*) средневзвешенное сечение перезарядки с долями 0.59 и 0.41 для столкновений (1) и (2).  $\circ$  — полное сечение перезарядки, полученное в экспериментах с пересекающимися пучками [2].

сравниваются с экспериментальными данными [2]. Характер зависимости сечений перезарядки от энергии столкновения хорошо согласуется с экспериментальными данными, причем абсолютные значения полных сечений перезарядки при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$  (1) примерно в два раза меньше экспериментальных данных. Полное сечение для столкновения  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$  (2), как и следовало ожидать, больше, чем сечение перезарядки при столкновении между ионами в основном состоянии.

Пунктиром на рис. 7 представлено средневзвешенное полное сечение перезарядки с долями 0.59 и 0.41 для реакций (1) и (2) соответственно (доли выбраны путем сопоставления суммарного полного теоретического и экспериментального сечений для всех точек на рис. 7). Полученные доли соответствуют фракции метастабильных ионов примерно 20% в каждом из пересекающихся пучков.

## Заключение

В рамках метода уравнений сильной связи на базе двухэлектронных квазимолекулярных состояний вычислены сечения одноэлектронной перезарядки и  $6s \rightarrow 6p$  электронного возбуждения при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  в основном состоянии и сечений перезарядки при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  в основном и метастабильном  $\text{Bi}^{4+}(6p)$  состояниях.

Сечения возбуждения  $6s \rightarrow 6p$  иона  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  при столкновениях между ионами  $\text{Bi}^{4+}(6s)$  в основном состоянии примерно в три раза больше для триплетного канала реакции, чем для синглетного.

Изучена зависимость сечений перезарядки от ориентации спинов электронов сталкивающихся ионов. Показано, что в интервале энергий столкновения (5–75) keV в системе центра масс (скорость относительного движения  $\sim 0.1$  a.u.) основными при столкновениях  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6s)$  (1) и  $\text{Bi}^{4+}(6s) + \text{Bi}^{4+}(6p)$  (2) являются процессы одноэлектронной перезарядки в синглетные состояния ионов  $\text{Bi}^{3+}(6s^2)$  в реакции (1) и в синглетные состояния ионов  $\text{Bi}^{3+}(6s6p)$  в реакциях (2). При этом сечения перезарядки в реакциях (2) примерно в три раза больше, чем в реакциях (1).

В работе впервые получены достоверные теоретические данные о процессах перезарядки и электронного возбуждения при столкновениях тяжелых четырехзарядных ионов висмута в keV диапазоне энергий. Как указано в [2], теоретические результаты [12] для этих столкновений не совпадают даже качественно с экспериментальными данными. Результаты в [12] получены при использовании приближения Оппенгеймера–Бринкмана–Крамерса, причем принципиально двухэлектронная квазимолекула  $\text{Bi}^{4+} + \text{Bi}^{4+}$  рассматривалась как система с одним активным электроном, для описания которого использовались водородоподобные волновые функции с голыми эффективными зарядами для снаряда и мишени.

Полученные данные по сечениям перезарядки необходимы, в частности, для оценки потерь частиц в релятивистских ионных пучках из-за изменения зарядового состояния ионов при их столкновениях внутри пучка при его бетатронных осцилляциях.

Авторы признательны Международному агентству по атомной энергии за финансовую поддержку, контракт № 13348/RBF, А. Салину за предоставление программы решения уравнений сильной связи, Р. Трасслу за предоставление экспериментальных данных.

## Список литературы

- [1] Hofmann I. // Nucl. Instr. and Meth. A. 2001. Vol. 464. P. 24.
- [2] Diehl A., Brauning H., Trassl R. et al. // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. 4073.
- [3] Nikulin V.K., Guschina N.A. // XXIII ICPEAC. Book of Abstracts (Stockholm). 2003. P. Tu165.
- [4] Nikulin V.K., Guschina N.A. // J. Phys. B. 1978. Vol. 11. P. 3553.
- [5] Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, М.: Наука, 1976. С. 171.
- [6] Barat M. and Lichten W. // Phys. Rev. A. 1972. Vol. 6. P. 221.
- [7] Никулин В.К., Гущина Н.А. // Опт. и спектр. 1996. Т. 80. С. 378.
- [8] Гущина Н.А., Никулин В.К., Самойлов А.В. и др. // Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 811, СПб. 1983. 26 с.
- [9] Löwdin P.O. // J. Chem. Phys. 1950. Vol. 18. С. 365.
- [10] Гущина Н.А., Никулин В.К. // Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе. № 1717. СПб. 1998. 66 с.
- [11] Piacentini R.D., Salin A. // Computer Phys. Comm. 1976. Vol. 12. С. 199.
- [12] Шевелько В.П. // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 10. С. 20.