

01;02

Одно- и двухэлектронные процессы захвата при медленных столкновениях $\text{Ne}^{q+} - \text{He}$ ($q = 10, 6$)

© В.К. Никулин, Н.А. Гущина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 25 августа 1997 г.)

Рассчитаны сечения процессов одно- и двухэлектронного захвата в состоянии $\text{Ne}^{9+}(n)$ с $n = 3-6$ и $\text{Ne}^{8+}(3l, n'l')$, $\text{Ne}^{8+}(4l, n'l')$ с $n' \geq 4$ и сечения одноэлектронного захвата в состоянии Ne^{5+} (3) при столкновении ионов Ne^{10+} и Ne^{6+} с атомами He в интервале энергий столкновения от 10 до 150 keV. Расчет выполнен в многоканальных моделях Ландау–Зинера, Никитина и Ландау–Зинера–Чаплика с учетом радиальной связи каналов в точках пересечения энергий квазидиабатических двухэлектронных состояний квазимолекулы. Энергии двухэлектронных состояний вычислялись в рамках метода эффективного потенциала в первом порядке теории возмущений по остаточному межэлектронному у взаимодействию. Энергии адиабатических состояний в окрестностях пересечения квазидиабатических термов определялись в рамках метода взаимодействия конфигураций. Получено, что при столкновении $\text{Ne}^{10+} - \text{He}$ электрон захватывается в основном в состоянии иона Ne^{9+} с $n = 5$. Сечение двухэлектронного захвата в состоянии $3lnl'$ ($n \geq 4$) иона Ne^{8+} на порядок меньше сечения одноэлектронного захвата. Вклад в полное сечение двухэлектронной перезарядки от состояний $4l4l'$, $4l5l'$ и $4l6l'$ составляет примерно 25%. Изучена зависимость сечений двухэлектронной перезарядки от значений l и l' .

1. Введение

В последние несколько лет интенсивно изучались столкновения между многозарядными ионами и атомными мишенями [1]. Процессы перезарядки при таких столкновениях являются наиболее эффективными механизмами передачи возбуждения. Особый интерес имеет рассмотрение реакций перезарядки ионов Ne^{q+} и Ar^{q+} ($q = 1-10$) с H, He, H_2 из-за роли примесей Ne и Ar в процессах охлаждения плазмы в установках по термоядерному синтезу. Для оценки вклада в процессы охлаждения процессов перезарядки необходимы оценки их полных и парциальных сечений.

При столкновениях многозарядного иона с нейтральным атомом наиболее вероятным процессом является процесс одноэлектронной квазирезонансной перезарядки в возбужденные состояния иона с энергией связи, близкой к потенциалу ионизации атома. Если атомная оболочка имеет эквивалентные электроны, как в атоме гелия, то возможен двухэлектронный захват (ДЗ) в нестабильные возбужденные состояния иона, распадающиеся либо путем автоионизации, либо радиационным путем. Особый интерес вызывают процессы ДЗ в связи с проблемой столкновительных корреляционных эффектов (СКЭ). Эти эффекты в медленных атомных столкновениях должны проявляться через вероятность квазидиабатических переходов между квазимолекулярными состояниями (КС), т.е. через величину эффективной связи на тех межъядерных расстояниях, где имеют место почти резонансные условия, определяющие доминирующие каналы реакции. СКЭ должны проявляться особенно заметно [2] для дважды возбужденных КС в кулоновском поле многозарядной квазимолекулы. Эти состояния могут включать значительную смесь взаимодействующих

электронных конфигураций, что должно проявляться в парциальных сечениях ДЗ. К настоящему времени имеют место прямо противоположные точки зрения как на возможные механизмы ДЗ, так и на роль СКЭ.

Исследование СКЭ в реакциях ДЗ проводилось недавно, например в работе [2], при использовании атомного базиса в рамках метода сильной связи. Этот метод в принципе позволяет косвенно изучать детали механизмов реакций перезарядки путем изменения соответствующих матричных элементов динамической связи.

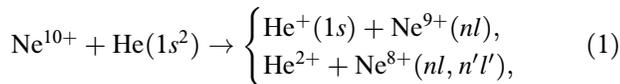
Для физически прозрачного исследования механизмов перезарядки необходимо определить наиболее адекватным образом квазимолекулярный базис и соответственно понятие модели независимых частиц. При грубом описании реакций перезарядки ободранных многозарядных ионов на атоме водорода, как хорошо известно, достаточно анализа всего лишь нескольких псевдопересечений между одноэлектронными двухатомными молекулярными орбиталями (ОЕДМО). Конкретно, из мультиплетта вырожденных на бесконечности состояний иона Ze квазипересечения с термом атома водорода в основном состоянии испытывают [1,3] лишь термы с параболическими квантовыми числами $[Z-1, 0; Z-2, 0]$. Причиной таких "правил отбора" является специальная дополнительная симметрия, связанная с возможностью разделения переменных в двухцентровой квантовомеханической проблеме.

Для многоэлектронных квазимолекул оказывается возможным также сохранить эту симметрию, если эффективный потенциал, учитывающий оптимальную экранировку ядер электронами, удовлетворяет требованию разделения переменных в сфероидальных координатах. Таким путем [4] можно получить диабатические экранированные двухатомные молекулярные орбитали (ЭДМО),

которые обладают такими же свойствами симметрии, как и ОЕДМО. Значения диагональных матричных элементов точного гамильтониана квазимолекулы — КС, вычисленные на однодетерминантных волновых функциях на основе ЭДМО, оказываются достаточно близкими к значениям самосогласованных хартри-фоковских расчетов. Поэтому такие квазидиабатические КС в духе квантовой химии естественно считать соответствующими состояниями независимых частиц. В настоящей работе рассмотренные выше квазидиабатические КС являются основой для исследования СКЭ.

Расчет базиса ЭДМО для системы $\text{Ne}^{10+}-\text{He}$

Двухэлектронные КС, описывающие входной и выходной каналы реакции



рассчитываются в одноконфигурационном приближении

$$\phi_i(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_k(r_1)\varphi_l(r_2) + \varphi_k(r_2)\varphi_l(r_1)) \quad (1a)$$

на базисе ЭДМО φ_j . Молекулярные орбитали φ_j идентифицируются набором сферических квантовых чисел $j = (nlm)$ состояния объединенного атома (АО), в которое переходит данная орбиталь при $R \rightarrow 0$. ЭДМО определяются путем решения двухцентровой задачи

$$H_i\varphi_i = \left[-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} + V_{\text{eff}}^{(i)}(R, r_1, r_2) \right] \varphi_i = \varepsilon_i(R)\varphi_i \quad (2)$$

с эффективным потенциалом $V_{\text{eff}}^{(i)}$, задаваемым [4] в параметрическом виде

$$V_{\text{eff}}^{(i)} = \frac{1}{2} \left[\frac{a_1^{(i)} - b_1^{(i)}}{r_1} + \frac{a_1^{(i)} + b_1^{(i)}}{r_2} + \frac{\tilde{a}_1^{(i)} + Ra_0^{(i)}}{r_1 r_2} + \frac{b_2^{(i)}(r_1 - r_2)^2}{Rr_1 r_2} \right], \quad (3)$$

где R — межъядерное расстояние; r_1, r_2 — расстояния электрона до ядер с зарядами Z_1 и Z_2 соответственно; здесь и далее используются атомные единицы.

Схема определения параметров эффективного потенциала $a_0^{(i)}$, $\tilde{a}_1^{(i)}$, $a_1^{(i)}$, $b_1^{(i)}$ и $b_2^{(i)}$ для гетероядерной системы приведена в Приложении А. Недостатком метода эффективного потенциала является неортогональность различных ЭДМО, что существенно усложняет вычисления энергий адиабатических состояний квазимолекулы методом взаимодействия конфигураций. Поэтому в дальнейшем нами использовались ортогональные ЭДМО, удовлетворяющие уравнению (2) с одним эффективным потенциалом, наиболее оптимально описывающим орбитали входного канала.

В рассматриваемой нами схеме определения параметров $V_{\text{eff}}^{(i)}$ помимо энергии ε_{sa}^i , в которую переходит энергия МО $\varepsilon_i(R)$ при $R \rightarrow \infty$ (для орбитали входного канала энергия $1s$ -электрона в атоме $\text{He}(1s^2)$), необходимо знать также энергию ε_{ua}^i , в которую переходит $\varepsilon_i(R)$ в пределе объединенного атома, т.е. знать заранее набор квантовых чисел i , характеризующих орбиталь входного канала. А это в свою очередь зависит от значений параметров эффективного потенциала. Так, согласно известным правилам [5], устанавливающим связь термов изолированных атомов с термами объединенного атома в задаче двух кулоновских центров Z_1 и Z_2 , для рассматриваемых зарядов ядер ($Z_1 = 2$ и $Z_2 = 10$) в качестве функции входного канала (орбитали eZ_1 -типа) должна использоваться $5g\sigma$ -ОЕДМО (см. Приложение В). При этом в $5g$ -состояние иона Ne^{10+} будет переходить при $R \rightarrow \infty$ орбиталь $6h\sigma$. При грубом учете экранировки заряда Z_1 , что позволяет получить правильное значение энергии входного канала в пределе разведенных атомов, в качестве функции входного канала должна использоваться $6h\sigma$ -ОЕДМО ($Z_1^* = 1.6875$, $Z_2 = 10$). Это можно объяснить, если учесть [3], что энергии МО, отличающихся только одним из сфероидальных квантовых чисел k, q, m , не могут пересекаться. Именно к таким орбиталям относятся $5g\sigma$ - ($k = m = 0, q = 4$) и $6h\sigma$ -орбитали ($k = m = 0, q = 5$). Энергии этих орбиталей для $Z_1 = 2$ и $Z_2 = 10$ вырождены при $R = \infty$. При введении экранировки заряда Z_1 энергия eZ_1 -терма при $R = \infty$ (энергия $1s$ -электрона в атоме гелия) становится больше энергии $5g$ -электрона в ионе Ne^{10+} , и, так как при $R = 0$ энергия $6h\sigma$ -орбитали больше энергии $5g\sigma$ -орбитали, в качестве функции входного канала при $Z_1^* = 1.6875$ должна использоваться $6h\sigma$ -ОЕДМО.

Нами для определения параметров эффективного потенциала используется энергия $1s$ -электрона в атоме He : $\varepsilon_{SA}^{(1)} = -1.42$, $Z_{s1} = 1.6875$, $n_{s1} = 1$, $\Delta_1 = 0$, $N_2 = 0$. Здесь Z_{s1} — эффективный заряд, связанный с энергией ε_{s1} соотношением $Z_{s1} = n_{s1} \sqrt{2|\varepsilon_{SA}^{(1)}|}$; $\Delta_1 = n_1^{(1)} - n_2^{(1)}$; $n_{s1}, n_1^{(1)}, n_2^{(1)}$ — главное квантовое число и параболические квантовые числа атомного состояния, в которое переходит орбиталь входного канала в пределе разведенных атомов; N_2 — число электронов у ядра Z_2 в этом пределе. Мы приняли, что для рассматриваемого нами V_{eff} в качестве входного канала должна использоваться $6h\sigma$ -орбиталь и для определения параметров \tilde{a}_1 и a_1 (см. выражения (17) и (16) Приложения А) использовали энергии $6f$ - и $6g$ -электронных уровней в атоме Mg^{10+} [6]: $\varepsilon_{6f} = -1.7646(\varepsilon_j)$ и $\varepsilon_{6g} = -1.748(\varepsilon_i)$, что дало следующие значения параметров $\tilde{a}_1 = -0.864$ и $a_1 = 0.964$. Параметры a_0 и b_1 , согласно выражениям (23) и (22) Приложения А, равны $a_0 = 0.142$ и $b_1 = 0.481$. Для таких значений параметров эффективного потенциала (3) энергия $5g\sigma$ -орбитали (eZ_2 -типа) при $R \rightarrow \infty$ лежит ниже энергии $\varepsilon_{6h\sigma}(\infty) = \varepsilon_{SA}^{(1)}$. При $R = \infty$ она равна, как легко убедиться,

$$\varepsilon_{5g\sigma}(\infty) = -\frac{[Z_2 - (a_1 + b_1)/2]^2}{2n_{s2}^2} = -1.72 \quad (n_{s2} = 5).$$

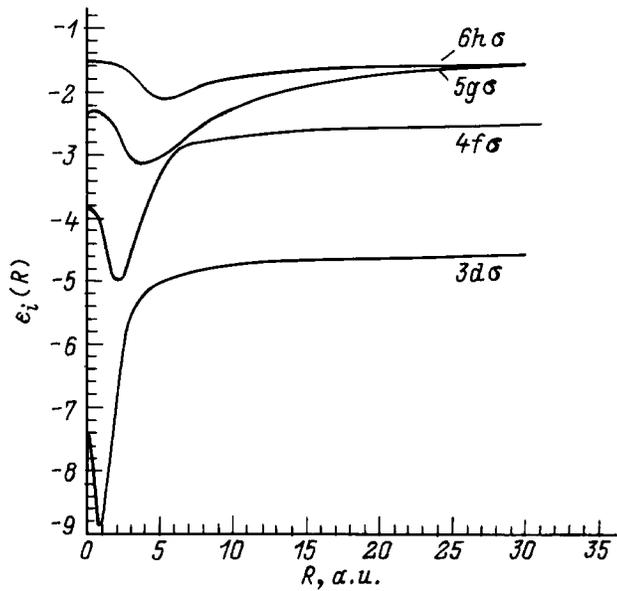


Рис. 1. Энергии ЭДМО для квазимолекулы $Ne^{10+}-He$.

На рис. 1 приведена полученная для данного потенциала зависимость энергий $3d\sigma$ -, $4f\sigma$ -, $5g\sigma$ - и $6h\sigma$ -ЭДМО. Для расчета одноэлектронных энергий ε_i и одноэлектронных волновых функций φ_i использовалась разработанная ранее программа [4]. Как видно из рис. 1, на больших расстояниях ($R \approx 30$ а.е.), когда квазимолекулярные волновые функции практически полностью сосредоточены у одного из ядер, имеет место квазипересечение $6h\sigma$ - и $5g\sigma$ -орбиталей. Известно, что при переходе через область квазипересечения энергий двух состояний происходит резкое изменение волновых функций этих состояний, связанное с переходом электрона от одного ядра к другому. Вследствие этого при $R < 30$ а.е. $5g\sigma$ -ЭДМО становится орбиталью eZ_1 -типа и выполняет роль МО входного канала. При уменьшении межъядерного расстояния (при $R \approx 6$ а.е.) имеет место квазипересечение энергий $5g\sigma$ - и $4f\sigma$ -ЭДМО, которое, как следует ожидать, должно существенно влиять на вероятности заселения различных каналов реакции (1). При $R \leq 6$ а.е. орбиталью входного канала (eZ_1 -типа) становится $4f\sigma$ -ЭДМО.

Двухэлектронные состояния квазимолекулы $Ne^{10+}-He$

Полученный базис ЭДМО используется для расчета [7] полных энергий E_i двухэлектронных диабатических состояний

$$E_i = \langle \phi_i | H | \phi_i \rangle, \quad (4)$$

$$H = \sum_{i=1}^2 \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z_1}{r_{1i}} - \frac{Z_2}{r_{2i}} \right) + \frac{1}{r_{12}}, \quad (5)$$

где $\phi_i = [\psi_k(r_1)\psi_l(r_2) + \psi_k(r_2)\psi_l(r_1)]/\sqrt{2}$ — одноконфигурационная волновая функция (ОВФ); r_i — координаты i -го электрона; r_{1i} , r_{2i} — расстояния i -го электрона до ядер Z_1 и Z_2 соответственно; r_{12} — расстояние между электронами.

Двухэлектронные энергии вычисляются в первом порядке теории возмущений по остаточному взаимодействию $W = 1/r_{12} - (V_{\text{eff}}(r_1) + V_{\text{eff}}(r_2))$

$$E_i = \varepsilon_k + \varepsilon_l + J_{kl}^c + J_{kl}^{ex} - (V_{kk} + V_{ll}),$$

где $J_{kl}^c = \langle \psi_k(r_1)\psi_l(r_2) | 1/r_{12} | \psi_k(r_1)\psi_l(r_2) \rangle$ — кулоновский интеграл, $J_{kl}^{ex} = \langle \psi_k(r_1)\psi_l(r_2) | 1/r_{12} | \psi_k(r_2) \times \psi_l(r_1) \rangle$ — обменный интеграл, $V_{kk} = \langle \psi_k | V_{\text{eff}} | \psi_k \rangle$ и $V_{ll} = \langle \psi_l | V_{\text{eff}} | \psi_l \rangle$ — средние значения эффективного потенциала в состояниях ψ_k и ψ_l .

Адиабатические состояния в окрестности точек пересечения диабатических термов строятся методом взаимодействия конфигураций (CI). В этом методе волновая функция системы, удовлетворяющая уравнению

$$H\Phi_i^a = E_i^a\Phi_i^a, \quad (6)$$

представляется в виде линейной комбинации ОВФ

$$\Phi_i^a = \sum_{k=1}^N c_k \phi_k \quad (7)$$

и энергии адиабатических состояний E_i^a ($i = 1, \dots, N$) для базиса ортогональных ОВФ находятся как корни уравнения

$$\det |\hat{H} - E_i^a \hat{I}| = 0, \quad (8)$$

где \hat{H} — матрица полного гамильтониана (5), вычисленная на базисе ОВФ; \hat{I} — единичная матрица; N — число взаимодействующих конфигураций.

При учете двух взаимодействующих конфигураций ϕ_i и ϕ_j из уравнения (8) получаем, что

$$E_{i,j}^a = \frac{H_{ii} + H_{jj}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{ii} - H_{jj})^2}{4} + H_{ij}^2} \quad (9)$$

и расщепление энергий $\Delta_{ij}(R_{ij}^c) = |E_i^a(R_{ij}^c) - E_j^a(R_{ij}^c)|$ в точке пересечения R_{ij}^c диабатических состояний ($H_{ii}(R_{ij}^c) = H_{jj}(R_{ij}^c)$) равно $\Delta_{ij}(R_{ij}^c) = 2H_{ij}(R_{ij}^c)$.

В число базисных функций для расчета сечений процессов одно- и двухэлектронной перезарядки (1) в состоянии ионов $Ne^{9+}(n)$ с $n = 3-6$ и $Ne^{8+}(n, n')$ с $n = 3-4$ и $n' = 4-6$, как показали проведенные расчеты, достаточно включить одноконфигурационные состояния, перечисленные в табл. 1. В перезарядочные каналы включены только Σ -состояния, т.е. при расчете вероятностей их заселения учитывалось лишь потенциальное и радиальное взаимодействия между каналами, которые не связывают состояния квазимолекулы с различными значениями проекции орбитального момента на ось молекулы. В правом столбце (табл. 1) указаны атомные пределы ОВФ при $R \rightarrow \infty$. При записи этих пределов

Таблица 1. Волновые функции двухэлектронных состояний квазимолекулы $(\text{NeHe})^{10+}$ и их атомные пределы при $R \rightarrow \infty$

ϕ_i	Предел при $R \rightarrow \infty$
$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)4d\sigma(2) + 3d\sigma(2)4d\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 4) + \text{He}^{2+}$
$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)4f\sigma(2) + 3d\sigma(2)4f\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 4) + \text{He}^{2+}$
$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)5d\sigma(2) + 3d\sigma(2)5d\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 5) + \text{He}^{2+}$
$\phi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)5d\sigma(2) + 3d\sigma(2)5g\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{9+}(3) + \text{He}^+(1s)$
$\phi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)6g\sigma(2) + 3d\sigma(2)6g\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 6) + \text{He}^{2+}$
$\phi_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)6h\sigma(2) + 3d\sigma(2)6h\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 5) + \text{He}^{2+}$
$\phi_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)7i\sigma(2) + 3d\sigma(2)7i\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 6) + \text{He}^{2+}$
$\phi_8 = 4f\sigma(1)4f\sigma(2)$	$\text{Ne}^{8+}(4, 4) + \text{He}^{2+}$
$\phi_9 = \frac{1}{\sqrt{2}}[4f\sigma(1)5g\sigma(2) + 4f\sigma(2)5g\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{9+}(4) + \text{He}^+(1s)$
$\phi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[4f\sigma(1)6h\sigma(2) + 4f\sigma(2)6h\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(4, 5) + \text{He}^{2+}$
$\phi_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}[4f\sigma(1)7i\sigma(2) + 4f\sigma(2)7i\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(4, 6) + \text{He}^{2+}$
$\phi_{12} = 5g\sigma(1)5g\sigma(2)$	$\text{He}(1s^2)$
$\phi_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}}[5g\sigma(1)6h\sigma(2) + 5g\sigma(2)6h\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{9+}(5) + \text{He}^+(1s)$
$\phi_{14} = \frac{1}{\sqrt{2}}[5g\sigma(1)7i\sigma(2) + 5g\sigma(2)7i\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{9+}(6) + \text{He}^+(1s)$
$\phi_{15} = \frac{1}{\sqrt{2}}[3d\sigma(1)5p\sigma(2) + 3d\sigma(2)5p\sigma(1)]$	$\text{Ne}^{8+}(3, 5) + \text{He}^{2+}$

учтено, что для рассматриваемых межъядерных расстояний ($R < 30$ а.у.) орбиталью eZ_1 -типа (орбиталью входного канала) является $5g\sigma$ -орбиталь.

Результаты расчета зависимости от R электронных энергий E_i диабатических состояний, перечисленных в табл. 1, приведены на рис. 2. Штриховыми кривы-

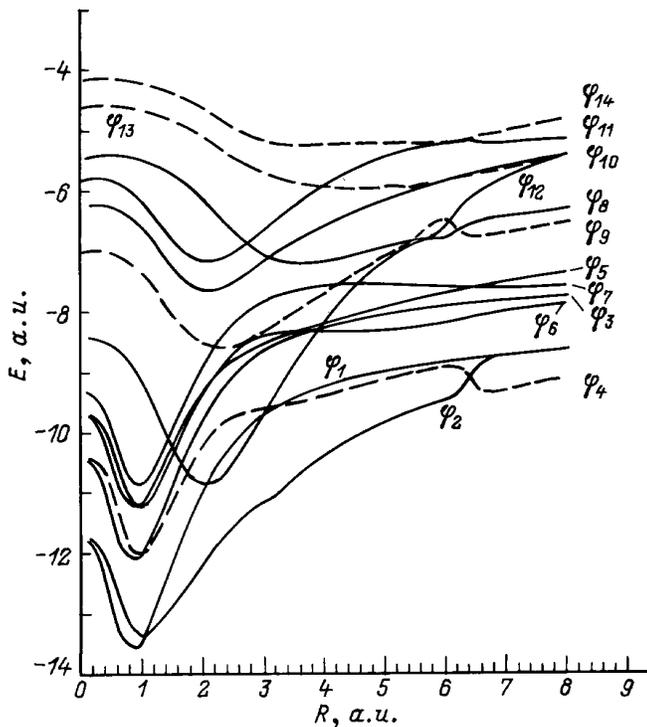


Рис. 2. Двухэлектронные диабатические энергии $E_i(R)$ состояний квазимолекулы $\text{Ne}^{10+}-\text{He}$, перечисленных в табл. 1.

ми представлены энергии состояний, описывающих каналы одноэлектронной перезарядки. Следует обратить внимание на область сильного взаимодействия входного канала $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ с перезарядочными каналами $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ в области межъядерных расстояний $R \simeq 5.6-6.4$ а.у., возникшего вследствие квазипересечения одноэлектронных орбиталей $5g\sigma$ и $4f\sigma$. Из анализа корреляционной диаграммы, представленной на рис. 2, следует, что именно через эти перезарядочные каналы заселяются атомные состояния $\text{Ne}^{9+}(3)$ и $\text{Ne}^{8+}(3l, n'l')$ с $n' = 4-6$ (состояния $\phi_1-\phi_6$). Исключение составляет канал $\phi_7(3d\sigma 7i\sigma)$, описывающий перезарядку в состоянии $3d6h$ иона Ne^{8+} . Он может заселяться непосредственно через входной канал в области межъядерных расстояний $R \simeq 3.7$ а.у.

Расчет сечений одноэлектронной и двухэлектронной перезарядки для реакции $\text{Ne}^{10+}-\text{He}$

Сечения процессов перезарядки (1) рассчитываются для прямолинейной траектории в многоканальных моделях Ландау–Зинера и Никитина. В этих моделях предполагается, что переход между адиабатическими состояниями происходит в точках их квазипересечений. Вероятность перехода при пересечении энергий квазидиабатических состояний ϕ_i и ϕ_j вычислялась в приближении Ландау–Зинера–Чаплика [8] с учетом радиальной связи этих состояний в точке их пересечения R_{ij}^c

$$p_{ij}^{LZ}(\rho, v) = \begin{cases} 0, & \text{если } \rho > R_{ij}^c, \\ \exp \left[-\frac{\pi \Delta_{ij}^2}{2F_{ij}vR} - \frac{2\pi \kappa_{ij}^2 vR}{F_{ij}} \right], & \text{если } \rho \leq R_{ij}^c, \end{cases} \quad (10)$$

где ρ — параметр удара, F_{ij} — разность наклонов термов в точке их пересечения, $vR = v[1 - (\rho/R_{ij}^c)^2]^{1/2}$ — радиальная скорость в точке $R = R_{ij}^c$, v — скорость налетающей частицы, $\kappa_{ij} = \langle \phi_i | d/dR | \phi_j \rangle$ — матричный элемент радиальной связи между квазидиабатическими состояниями в точке их пересечения.

Для ортогонального базиса κ_{ij} отличен от нуля только для состояний $\phi_i(\psi_k, \psi_l)$ и $\phi_j(\psi_k, \psi_l)$, у которых совпадает одна из МО. При этом κ_{ij} выражается через матричный элемент радиальной связи между ψ_l и $\psi_{l'}$ МО

$$\begin{aligned} \kappa_{ij} &= \left\langle \phi_i(\psi_k, \psi_l) \left| \frac{d}{dR} \right| \phi_j(\psi_k, \psi_{l'}) \right\rangle \\ &= \begin{cases} \sqrt{2} \left\langle \psi_l \left| \frac{d}{dR} \right| \psi_{l'} \right\rangle, & \text{если } \psi_k = \psi_{l'}, \\ \left\langle \psi_l \left| \frac{d}{dR} \right| \psi_{l'} \right\rangle, & \text{если } \psi_k \neq \psi_{l'}. \end{cases} \end{aligned}$$

Последний вычислялся через интегралы перекрытия ЭДМО [9].

Таблица 2. Параметры моделей Ланадау–Зинера и Ландау–Зинера–Чаплика ($\kappa \neq 0$) для расчета вероятностей p_{ij}^{LZ} (10)

$i, j (\phi_i - \phi_j)$	R_{ij}^c	$\Delta_{i,j}$	F_{ij}	κ_{ij}
14,12 ($5g\sigma 7i\sigma - 5g\sigma^2$)	1.610E 01	0.120E-03	0.425E-01	0.200E-02
12,13 ($5g\sigma^2 - 5g\sigma 6h\sigma$)	8.200E 00	0.262E-00	0.144E 00	0.127E-00
12,10 ($5g\sigma^2 - 4f\sigma 6h\sigma$)	7.900E 00	1.670E-04	0.220E 00	0.000E 00
13,10 ($5g\sigma 6h\sigma - 4f\sigma 6h\sigma$)	7.230E 00	0.760E-02	1.067E 00	0.364E 00
13,10 ($5g\sigma 6h\sigma - 4f\sigma 6h\sigma$)	6.400E 00	0.482E-01	0.452E 00	0.364E 00
8,9 ($4f\sigma^2 - 4f\sigma 5g\sigma$)	6.20E 00	0.223E-00	1.400E-00	0.230E 00
12,9 ($5g\sigma^2 - 4f\sigma 5g\sigma$)	6.060E 00	0.312E 00	2.300E-00	0.388E-01
8,12 ($4f\sigma^2 - 5g\sigma^2$)	5.700E 00	0.486E 00	0.261E-00	0.000E 00
12,9 ($5g\sigma^2 - 4f\sigma 5g\sigma$)	5.460E 00	0.170E-00	0.480E 00	0.129E-02
8,9 ($4f\sigma^2 - 4f\sigma 5g\sigma$)	5.300E 00	0.272E-00	0.374E 00	0.388E-01
7,8 ($3d\sigma 7i\sigma - 4f\sigma^2$)	4.600E 00	0.716E-04	0.950E 00	0.000E 00
7,9 ($3d\sigma 7i\sigma - 4f\sigma 5g\sigma$)	4.200E 00	0.110E-01	0.548E 00	0.000E 00
8,5 ($4f\sigma^2 - 3d\sigma 6g\sigma$)	3.880E 00	0.484E-03	1.035E 00	0.000E 00
8,3 ($4f\sigma^2 - 3d\sigma 5d\sigma$)	3.830E 00	0.262E-02	1.035E-00	0.000E 00
8,6 ($4f\sigma^2 - 3d\sigma 6h\sigma$)	3.820E 00	0.852E-03	1.335E 01	0.000E 00
4,1 ($3d\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 4d\sigma$)	3.280E 00	0.577E-01	0.402E-00	0.000E 00
8,1 ($4f\sigma^2 - 3d\sigma 4d\sigma$)	2.860E 00	0.376E-01	1.830E-00	0.000E 00
8,1 ($4f\sigma^2 - 3d\sigma 4d\sigma$)	2.200E 00	0.584E-01	2.250E-00	0.000E 00

Таблица 3. Параметры модели Никитина для расчета вероятностей p_{ij}^N (11)

$i, j (\phi_i - \phi_j)$	$R_{i,j}^p$	$\Delta\varepsilon_{ij}$	θ_{ij}	α_{ij}
12,13 ($5g\sigma^2 - 5g\sigma 6h\sigma$)	7.270E 00	0.027E 00	1.570E 00	3.686E 00
4,2 ($3d\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 4f\sigma$)	6.220E 00	0.500E 00	1.280E-00	0.403E 00
11,14 ($4f\sigma 7i\sigma - 5g\sigma 7i\sigma$)	5.890E 00	0.422E 00	0.075E 00	0.481E 00
11,13 ($4f\sigma 7i\sigma - 5g\sigma 6h\sigma$)	3.930E 00	0.600E 00	0.151E 00	1.290E 00
12,7 ($5g\sigma^2 - 3d\sigma 7i\sigma$)	3.720E 00	1.000E 00	0.436E 00	0.587E 00
5,6 ($3d\sigma 6g\sigma - 3d\sigma 6h\sigma$)	3.630E 00	0.499E 00	0.080E 00	0.623E 00
12,10 ($5g\sigma^2 - 4f\sigma 6h\sigma$)	3.060E 00	0.512E 00	0.419E 00	2.000E 00
9,3 ($4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 5d\sigma$)	3.010E 00	0.953E-00	0.365E-00	0.675E 00
4,8 ($3d\sigma 5g\sigma - 4f\sigma^2$)	3.000E 00	1.000E 00	0.195E 00	1.618E 00
9,15 ($4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 5p\sigma$)	2.950E 00	0.724E 00	0.397E 00	0.950E 00
9,6 ($4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 6h\sigma$)	2.900E 00	0.500E 00	0.345E 00	0.360E 00
9,5 ($4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 6g\sigma$)	2.890E 00	0.815E 00	0.197E 00	0.842E 00
4,8 ($3d\sigma 5g\sigma - 4f\sigma^2$)	1.760E 00	1.706E 00	0.181E 00	1.850E 00

Вероятность неадиабатического прохождения областей квазипересечений диабатических состояний ϕ_i и ϕ_j рассчитывалась в модели Никитина [10]

$$p_{ij}^N(\rho, \nu) = \begin{cases} 0, & \text{если } \rho > R_{ij}^p, \\ \exp(-\pi\xi_c) \frac{\text{sh}[\pi(\xi - \xi_c)]}{\text{sh}(\pi\xi)}, & \text{если } \rho \leq R_{ij}^p, \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\xi = \frac{\Delta\varepsilon_{ij}}{\alpha_{ij}\nu} \quad \text{и} \quad \xi_c = \frac{\xi}{2}(1 - \cos\theta_{ij}),$$

$\Delta\varepsilon_{ij}$ — разница энергий адиабатических состояний при $R \gg R_{ij}^p$; α_{ij} , θ_{ij} — параметры модели, входящие в выражение для функции $f_{ij}(R)$, аппроксимирующей щель $\Delta_{ij}(R) = |E_i^a(R) - E_j^a(R)|$ между адиабатическими

состояниями в окрестности точки их квазипересечения,

$$f_{ij}(R) = \Delta_{ij} \sqrt{1 - 2 \cos\theta_{ij} \exp[-\alpha_{ij}(R - R_{ij}^p)] + \exp[-2\alpha_{ij}(R - R_{ij}^p)]}, \quad (E_i^a \geq E_j^a), \quad (12)$$

R_{ij}^p — центр области неадиабатичности.

В настоящей работе все величины R_{ij}^p , $\Delta\varepsilon_{ij}$, α_{ij} и θ_{ij} , входящие в выражение (12), рассматривались как параметры и определялись из условия минимума функционала

$$F_{ij}(R_{ij}^p, \Delta\varepsilon_{ij}, \alpha_{ij}, \theta_{ij}) = \sum_{l=1}^k (f_{ij}(R_l) - \Delta_{ij}(R_l))^2.$$

В табл. 2 и 3 приведены полученные из анализа энергий двухэлектронных состояний параметры моделей

Ландау–Зинера, Ландау–Зинера–Чаплика и Никитина, используемые для расчета вероятностей однократного прохождения областей пересечений и квазипересечений диабатических состояний, перечисленных в табл. 1.

При расчете заселенностей различных каналов реакции (1) учитывалось также вращательное взаимодействие при малых межъядерных расстояниях между Σ и Π состояниями квазимолекулы, вырожденными при $R = 0$. Вероятность таких переходов оценивалась по формуле [11]

$$p^{\text{rot}}(\rho) = 2G(\rho) \exp(-c_1 D^3), \quad (13)$$

где

$$c_1 D^3 = \frac{2A\rho^3}{v \cos^2(\theta/2)} \left[\frac{2}{3} + \frac{11}{6} \sin^2(\theta/2) + \frac{1}{2}(\pi + \theta) \left(\frac{3}{2} + \sin^2(\theta/2) \right) \text{tg}(\theta/2) \right];$$

θ — угол рассеяния для кулоновской траектории, связанный с параметром удара соотношением

$$\text{ctg}(\theta/2) = Mv^2\rho/(Z_1 Z_2);$$

M — приведенная масса; $G(\rho)$ — фактор обрезания, равный

$$G(\rho) = \frac{(\sin(\theta/2) + c_2 D)^2}{2 + (c_2 D)^2},$$

$$c_2 D = \frac{2\pi}{3\Gamma(4/3)} \left(\frac{A}{3v} \right)^{1/3} \rho \cos(\theta).$$

При выводе формулы (13) предполагается, что разница энергий ΔE вырожденных при $R = 0$ Σ - и Π -состояний при малых межъядерных расстояниях с достаточной степенью точности может быть описана квадратичной зависимостью $\Delta E \simeq AR^2$. При расчете сечений перезарядки нами учитывались только Σ – Π -переходы, приводящие к перераспределению заселенностей между различными каналами реакции (1). В табл. 4 приведены рассматриваемые Σ – Π -переходы и используемые для расчета

Таблица 4. Σ – Π -переходы, учитываемые при малых межъядерных расстояниях

Σ -состояние (атомный предел при $R \rightarrow 0$)	Π -состояние (атомный предел при $R \rightarrow 0$)	A
$\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$ ($\text{Ne}^{9+}(3)$)	$\phi(3d\sigma 5g\pi)$ ($\text{Ne}^{8+}(3, 5)$)	0.0358
$\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$ ($\text{Ne}^{8+}(3, 5)$)	$\phi(3d\sigma 6h\pi)$ ($\text{Ne}^{8+}(3, 6)$)	0.0009
$\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ ($\text{Ne}^{9+}(4)$)	$\phi(4f\sigma 5g\pi)$ ($\text{Ne}^{8+}(4, 5)$)	0.0358
$\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$ ($\text{Ne}^{8+}(4, 5)$)	$\phi(4f\sigma 6h\pi)$ ($\text{Ne}^{8+}(4, 6)$)	0.0009

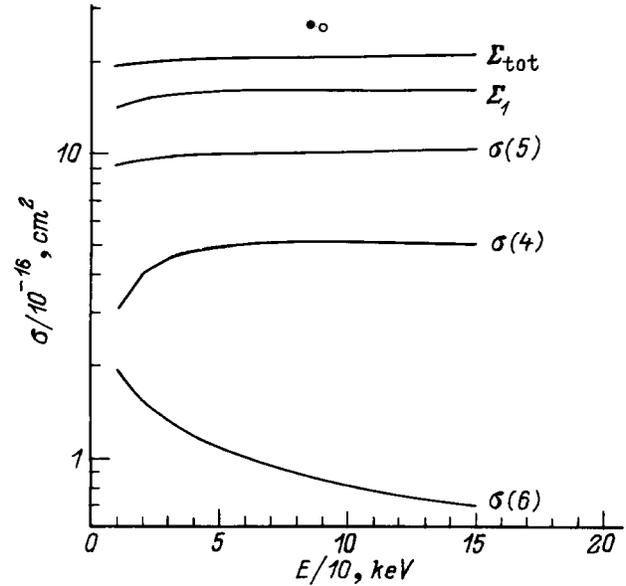


Рис. 3. Сечения одноэлектронного захвата $\sigma(n)$ в состоянии иона $\text{Ne}^{9+}(n)$, полное сечение одноэлектронного захвата Σ_1 , сумма (Σ_{tot}) полного сечения одноэлектронного захвата и сечений двухэлектронного захвата $\sigma(4, 4)$, $\sigma(4, 5)$ и $\sigma(4, 6)$: \bullet, \circ — экспериментальные данные [12,13] для полного сечения Σ_{tot} при энергиях столкновения $E = 86$ и 90 keV.

их вероятностей значения константы A , полученные из анализа разностей энергий соответствующих МО.

Сечение $\sigma_k(v)$ реакции (1), связанной с переходом квазимолекулы из начального состояния (ϕ_{12}) в конечное состояние ϕ_k , рассчитывалось как

$$\sigma_k(v) = 2\pi \int_0^\infty \rho P_k(\rho, v) d\rho, \quad (14)$$

где $P_k(\rho, v)$ — вероятность заселения состояния ϕ_k при разлете ядер, рассчитанная путем накопления вероятностей всех возможных переходов между состояниями квазимолекулы при изменении R от ∞ до ρ при сближении ядер и от ρ до ∞ при их разлете.

Положив в (14) $k = 4, 9, 13$ и 14 , получим, согласно правому столбцу в табл. 1, сечения одноэлектронного захвата $\sigma(n)$ в состоянии иона $\text{Ne}^{9+}(n)$ с $n = 3, 4, 5$ и 6 . Зависимость от энергии столкновения сечений $\sigma(n)$ приведена на рис. 3. Как видно, наибольшие значения имеют сечения одноэлектронного захвата в состоянии $n = 5$ и 4 иона $\text{Ne}^{9+}(n)$, которые заселяются непосредственно через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при больших межъядерных расстояниях ($R > 6$ a.u.) в результате одноэлектронных переходов $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ и $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$. Основной вклад в сечение $\sigma(5)$ вносит область квазипересечения ($R_{12,13} \simeq 7.27$ a.u.) состояния $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ с входным каналом ϕ_{12} , в то время как вклад от точки пересечения ($R_{12,13}^c = 8.2$ a.u.) этих состояний несущественен. При сближении ядер имеет место умень-

шение заселенностей канала $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ за счет перераспределения вероятности в состоянии $\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$ ($R_{10,13}^c \simeq 6.4$ а.у.) и $\phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$ ($R_{11,13}^c \simeq 3.93$ а.у.) и канала $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$, через который при $R_{9,8}^c = 5.3$ а.у. идет заселение состояния $\phi_8(4f\sigma^2)$, а в области межъядерных расстояний $R_{9,8}^c \simeq 2.8-3.0$ а.у. — серии состояний $\phi(3l\sigma 5l'\sigma)$. Вероятно, с этим связана слабая зависимость сечений $\sigma(5)$ и $\sigma(4)$ от энергии столкновений E . При E от 20 до 150 keV они практически не зависят от энергии столкновения. Механизмы заселения одноэлектронных состояний с $n = 6$ и 3 в ионе Ne^{9+} отличны от описанного выше механизма заселения одноэлектронных состояний с $n = 4, 5$.

Канал $\phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$, описывающий при $R \rightarrow \infty$ захват электрона в состояния $n = 6$ иона Ne^{9+} , заселяется через канал одноэлектронной перезарядки $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ в результате одно- и двухэлектронного переходов: при сближении ядер ($R_{11,13}^c \simeq 3.93$ а.у.) через канал $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ заселяется состояние $\phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$, а затем при разлете ядер ($R_{11,14}^c \simeq 7.23$ а.у.) через него происходит заселение канала $\phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$

$$\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma) \rightarrow \phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma) \rightarrow \phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$$

(канал $\phi_{14}(5g\sigma 6h\sigma)$ заселяется через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при $R_{12,13} \simeq 7.27$ а.у.). Заселение канала $\phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$ через входной канал не происходит, так как область межъядерных расстояний $R_{12,14} \sim 16$ а.у., где имеет место пересечение этих каналов, проходит адиабатически и не влияет на величину сечения одноэлектронного захвата $\sigma(6)$.

Заселение канала $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$, описывающего при $R \rightarrow \infty$ одноэлектронную перезарядку в состояние $n = 3$ иона Ne^{9+} , происходит при $R < 6$ а.у. через канал $\phi_8(4f\sigma^2)$ ($R_{4,8}^c \simeq 3$ и 1.76 а.у.). В области межъядерных расстояний $R \simeq 5.3-6.2$ а.у. вследствие квазипересечения одноэлектронных орбиталей $4f\sigma$ и $5g\sigma$ происходит существенное перераспределение заселенности входного канала между тремя состояниями: $\phi_{12}(5g\sigma^2)$, $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$. Анализ вероятностей прохождения точек пересечения этих состояний в указанной области межъядерных расстояний показал, что канал $\phi_8(4f\sigma^2)$ заселяется в основном через канал одноэлектронной перезарядки $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ при $R_{9,8}^c \simeq 5.3$ а.у. Следовательно, заселение канала $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$ происходит в результате следующей цепочки одноэлектронных и двухэлектронного переходов: $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(4f\sigma 5g\sigma) \rightarrow \phi_8(4f\sigma^2) \rightarrow \phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$.

В силу сказанного выше можно ожидать, что вероятности заселения каналов $\phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$ и $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$ будут значительно меньше вероятностей заселения каналов $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$, которые заселяются непосредственно через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при $R > 6$ а.у. Кроме того, при разлете ядер происходит сильное уменьшение заселенности состояний $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$ из-за перехода при $R \simeq 6.4$ а.у. (область квазипересечения $4f\sigma$ - и $5g\sigma$ -орбиталей) в состояния

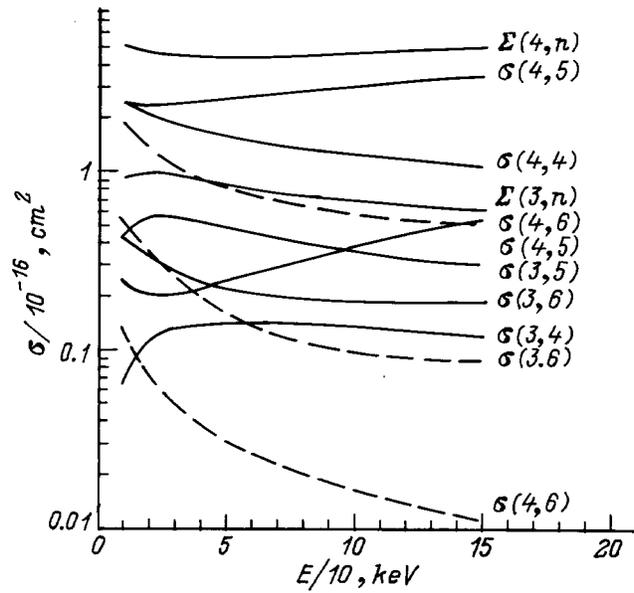


Рис. 4. Сечения двухэлектронного захвата $\sigma(n, n')$ в состоянии иона $Ne^{8+}(n, n')$. Штриховые кривые — сечение $\sigma(4, 5)$, рассчитанное без учета радиальной связи между каналами $\phi_{10}(4f\sigma 5g\sigma)$ и $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$, и сечения $\sigma(4, 6)$, $\sigma(3, 6)$, рассчитанные без учета вращательного взаимодействия при малых межъядерных расстояниях между каналами $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$, $\phi(5g\sigma 6h\pi)$ и каналами $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$, $\phi(3d\sigma 6h\pi)$; $\Sigma(3, n)$ и $\Sigma(4, n)$ — сумма соответствующих парциальных сечений.

$\phi_2(3d\sigma 4f\sigma)$. В результате сечение одноэлектронного захвата $\sigma(3)$ во всем интервале рассматриваемых энергий столкновения оказывается меньше, чем 10^{-19} см², и на рис. 3 в силу его малости не приводится. Полученные значения полного сечения одноэлектронного захвата $\Sigma_1 = \sigma(3) + \sigma(4) + \sigma(5) + \sigma(6)$ представлены на рис. 3. Результаты расчета сечений двухэлектронного захвата $\sigma(n, n')$ в состоянии $nl n' l'$ иона Ne^{8+} для $n = 3, 4$ и $n' = 4-6$ приведены на рис. 4.

В силу наличия квазипересечения одноэлектронных $4f\sigma$ - и $5g\sigma$ -орбиталей основной вклад в сечения двухэлектронного захвата $\sigma(4, 4)$ и $\sigma(4, 5)$ вносят соответственно каналы $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$, так что $\sigma(4, 4) \simeq \sigma_8$ и $\sigma(4, 5) \simeq \sigma_{10}$. Из корреляционной диаграммы (рис. 2) видно, что заселение канала $\phi_8(4f\sigma^2)$, описывающего двухэлектронную перезарядку в состояния иона $Ne^{8+}(4, 4)$, может происходить либо непосредственно через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при $R_{8,12}^c \simeq 5.7$ а.у. (коррелированный двухэлектронный переход), либо через канал одноэлектронной перезарядки $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ ($R_{9,8} \simeq 5.3$ а.у.) в результате двух последовательных одноэлектронных переходов $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(5g\sigma 4f\sigma) \rightarrow \phi_8(4f\sigma^2)$ (некоррелированный двухэлектронный переход). Как уже говорилось выше, расчет показал, что заселение состояния $\phi_8(4f\sigma^2)$ происходит в основном через канал $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$. С ростом скорости столкновения v растет вероятность прямого заселения канала $\phi_8(4f\sigma^2)$

через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$, и при $v = 1$ а.е. ее доля в полной вероятности заселения канала $\phi_8(4f\sigma^2)$ составляет $\approx 20\%$. Учет радиальной связи каналов $\phi_{12}(5g\sigma^2)$, $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ в области сильного потенциального взаимодействия между ними (при $R \approx 6$ а.е.) оказался несуществен. Заселение канала $\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$, описывающего двухэлектронную перезарядку в состоянии иона $\text{Ne}^{8+}(4, 5)$, происходит через канал одноэлектронной перезарядки $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ при $R_{10,13} \approx 6.4$ а.е. в результате двух одноэлектронных переходов $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma) \rightarrow \phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$ (некоррелированный двухэлектронный переход). При этом существенный вклад в сечение двухэлектронной перезарядки $\sigma(4, 5)$ дает радиальное взаимодействие каналов $\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$ и $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ в точке их пересечения $R_{10,13}^c \approx 6.4$ а.е. Включение радиальной связи почти на порядок увеличило сечение $\sigma(4, 5)$ при $E = 150$ кеВ. Сечение двухэлектронного захвата $\sigma(4, 5)$, вычисленное без учета радиального взаимодействия между каналами, приведено штриховыми кривыми на рис. 4. Вклад в полное сечение $\sigma(4, 5)$ от состояния $\phi(4f\sigma 5g\pi)$, заселяемого при малых межъядерных расстояниях через канал $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ в результате вращательного взаимодействия, несуществен.

При расчете сечения $\sigma(4, 6)$ учитывались вероятности заселения двух каналов: $\phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$ и $\phi(4f\sigma 6h\sigma)$. Первый канал заселяется при $R_{11,13}^c \approx 3.93$ а.е. через состояние $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ в результате двухэлектронного перехода $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma) \rightarrow \phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$ (канал $\phi_{13}(5g\sigma 6h\sigma)$ заселяется через основной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при $R \sim 8.2$ а.е.). Однако при разлете ядер (при $R \approx 7.2$ а.е.) через него заселяется канал одноэлектронной перезарядки $\phi_{14}(5g\sigma 7i\sigma)$, что приводит к уменьшению заселенности канала $\phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$. Второй канал $\phi(4f\sigma 6h\pi)$ заселяется через канал $\phi_{10}(4f\sigma 6h\sigma)$ при малых межъядерных расстояниях в результате вращательной связи между каналами. Расчеты показали, что при рассматриваемых энергиях столкновения заселение состояний $4l6l$ в ионе Ne^{8+} в основном происходит при малых межъядерных расстояниях. На рис. 4 для сравнения вкладов в полное сечение $\sigma(4, 6)$ от двух указанных каналов штриховыми кривыми показано сечение $\sigma(4, 6)$, полученное при учете заселения только канала $\phi_{11}(4f\sigma 7i\sigma)$.

На рис. 3 приведена сумма Σ_{tot} сечений двухэлектронного захвата $\sigma(4, 4)$, $\sigma(4, 5)$ и $\sigma(4, 6)$ и полного сечения одноэлектронного захвата Σ_1 для сравнения с имеющимися экспериментальными данными при $E = 86$ кеВ ($\Sigma_{\text{tot}} = 2.63 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ [12]) и при $E = 90$ кеВ ($\Sigma_{\text{tot}} = 2.60 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ [13]). На расчет дает несколько заниженное значение сечения $\Sigma_{\text{tot}} \approx 2.1 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ при $E = 90$ кеВ. Вклад двухэлектронных состояний в полное сечение Σ_{tot} составляет порядка 25%.

При расчете сечений двухэлектронного захвата $\sigma(3l, n'l')$ нами детально исследовалась зависимость этих сечений от значений азимутальных квантовых чисел

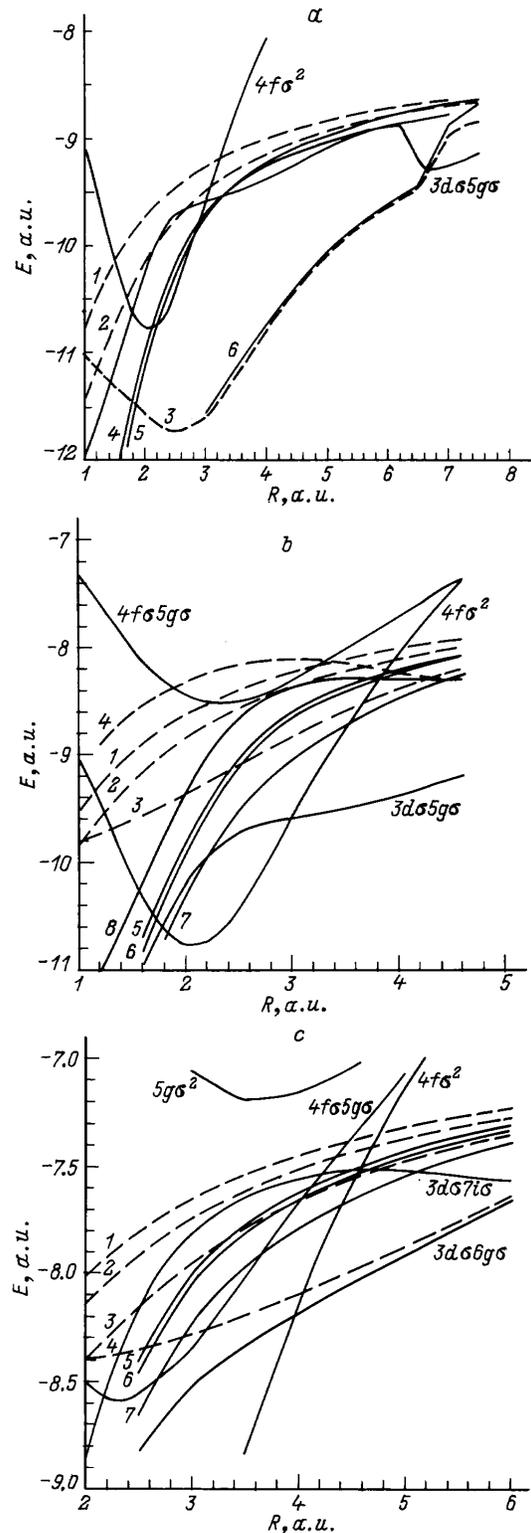


Рис. 5. Энергии перезарядочных каналов в состоянии $3l4l'$ иона Ne^{8+} (a): 1 — $\varphi(3p\sigma 4p\sigma)$, 2 — $\varphi(3p\sigma 4d\sigma)$, 3 — $\varphi(3p\sigma 4f\sigma)$, 4 — $\varphi(3d\sigma 4p\sigma)$, 5 — $\varphi(3d\sigma 4p\sigma)$, 6 — $\varphi(3d\sigma 4f\sigma)$; в состоянии $3l5l'$ иона Ne^{8+} (b): 1 — $\varphi(3p\sigma 5p\sigma)$, 2 — $\varphi(3p\sigma 5d\sigma)$, 3 — $\varphi(3p\sigma 5f\sigma)$, 4 — $\varphi(3p\sigma 6h\sigma)$, 5 — $\varphi(3d\sigma 5p\sigma)$, 6 — $\varphi(3d\sigma 5d\sigma)$, 7 — $\varphi(3d\sigma 5f\sigma)$, 8 — $\varphi(3d\sigma 6h\sigma)$; в состоянии $3l6l'$ иона Ne^{8+} (c): 1 — $\varphi(3p\sigma 6p\sigma)$, 2 — $\varphi(3p\sigma 6d\sigma)$, 3 — $\varphi(3p\sigma 6f\sigma)$, 4 — $\varphi(3p\sigma 6g\sigma)$, 5 — $\varphi(3d\sigma 6p\sigma)$, 6 — $\varphi(3d\sigma 6d\sigma)$, 7 — $\varphi(3d\sigma 6f\sigma)$.

Таблица 5. Дополнительные точки пересечений адиабатических состояний ϕ_i, ϕ_j , учитываемые при расчете сечений двухэлектронной перезарядки в состоянии иона $Ne^{8+}(3l, n'l')$, и соответствующие им параметры модели Ландау–Зинера

n'	$\phi_i - \phi_j$	R_{ij}^c	Δ_{ij}	F_{ij}	κ_{ij}	
6	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 6d\sigma$	4.540E 00	0.100E -03	0.905E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 6d\sigma$	4.420E 00	0.436E -03	0.360E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3d\sigma 6d\sigma$	4.420E 00	0.828E -03	0.885E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 6f\sigma$	4.410E 00	0.714E -03	0.900E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3d\sigma 6f\sigma$	4.300E 00	0.494E -03	0.870E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 6f\sigma$	4.160E 00	0.266E -02	0.305E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 6d\sigma$	4.180E 00	0.204E -02	0.290E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 6g\sigma$	3.970E 00	1.080E -03	1.070E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 6f\sigma$	3.700E 00	0.260E -02	0.235E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 6g\sigma$	3.080E 00	0.302E -02	0.410E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 6f\sigma$	2.700E 00	0.130E -01	0.535E -00	0.000E 00	
	5	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 5f\sigma$	3.660E 00	0.306E -02	1.005E -00	0.000E 00
		$4f\sigma^2 - 3d\sigma 5f\sigma$	3.520E 00	0.731E -03	0.950E -01	0.000E 00
$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 5p\sigma$		3.240E 00	0.293E -02	0.360E -00	0.000E 00	
$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 5p\sigma$		2.230E 00	0.492E -02	0.895E -00	0.000E 00	
4	$3d\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 4f\sigma$	6.420E 00	0.179E -01	3.450E -00	0.000E 00	
	$3d\sigma 5g\sigma - 5d\sigma 4p\sigma$	3.280E 00	0.657E -02	0.350E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 4p\sigma$	3.220E 00	0.362E -02	1.385E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 4d\sigma$	3.060E 00	0.558E -03	1.310E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3d\sigma 4p\sigma$	2.910E 00	0.250E -03	1.055E -00	0.000E 00	
	$3d\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 4d\sigma$	2.680E 00	0.106E -01	0.275E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3d\sigma 4p\sigma$	2.120E 00	0.232E -02	1.750E -00	0.000E 00	
	$3d\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 4d\sigma$	2.100E 00	0.157E -01	0.350E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 4d\sigma$	1.690E 00	0.575E -02	2.600E -00	0.000E 00	
	$4f\sigma^2 - 3p\sigma 4p\sigma$	1.500E 00	0.308E -01	3.200E -00	0.000E 00	

Таблица 6. Дополнительные области квазипересечений двухэлектронных состояний ϕ_i и ϕ_j , учитываемые при расчете сечений двухэлектронной перезарядки в состоянии иона $Ne^{8+}(3l, n'l')$, и соответствующие им параметры модели Никитина

n'	$\phi_i - \phi_j$	R_{ij}^p	$\Delta\varepsilon_{ij}$	θ_{ij}	α_{ij}
5	$4f\sigma 5g\sigma - 3d\sigma 5f\sigma$	2.810E 00	0.993E -00	0.805E -00	0.802E 00
	$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 5d\sigma$	2.740E 00	1.500E -00	0.012E -00	0.201E 00
	$4f\sigma 5g\sigma - 3p\sigma 5f\sigma$	2.660E 00	0.967E -00	0.572E -00	0.697E 00

l и l' . Для этого в число базисных функций были включены все одноконфигурационные состояния, которые в пределе разведенных атомов описывают состояния иона $Ne^{8+}(3l, n'l')$ с $n' = 4-6, l' = 1, \dots, n'-1$ для $l = 1, 2: \phi(3l\sigma 4l'\sigma), \phi(3l\sigma 5l'\sigma), \phi(3l\sigma 6l'\sigma)$. На рис. 5, *a-c* приведены энергии этих состояний в зависимости от межъядерного расстояния; в табл. 5 и 6 представлены параметры моделей Ландау–Зинера и Никитина, необходимые для расчета вероятностей однократного прохождения областей пересечений и квазипересечений дополнительно введенных состояний с состояниями, перечисленными в табл. 1.

Из рис. 5, *a*, на котором приведены энергии перезарядочных каналов в состоянии $3l4l'$ иона Ne^{8+} , видно, что заселение этих каналов может происходить как непосредственно через канал $\phi_8(4f\sigma^2)$, так и через канал $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$. При этом состояние

$\phi(3p\sigma 4p\sigma)$ заселяется только через канал $\phi_8(4f\sigma^2)$, а состояния $\phi_2(3d\sigma 4f\sigma)$ и $\phi(3p\sigma 4f\sigma)$ — только через канал $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$. Проведенные расчеты парциальных сечений $\sigma(3l4l')$, представленных на рис. 6, *a*, показали, что они сильно зависят от l' . Этого и следовало ожидать, учитывая разброс параметров модели Ландау–Зинера, приведенных в таблице 5 для $n' = 4$. Основной вклад ($\sim 90\%$) в сечение двухэлектронного захвата $\sigma(3, 4)$ вносит канал $\phi_2(3d\sigma 4f\sigma)$. Заселение этого канала происходит в результате следующих одно- и двухэлектронных переходов: $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(4f\sigma 5g\sigma) \rightarrow \phi_8(4f\sigma^2) \rightarrow \phi_4(3d\sigma 5g\sigma) \rightarrow \phi_2(3d\sigma 4f\sigma)$. С точностью до 1% можно записать, что $\sigma(3, 4) \simeq \sigma_2 + \sigma_1$, где σ_1 — следующий по величине вклад в сечение $\sigma(3, 4)$ от канала $\phi_1(3d\sigma 4d\sigma)$.

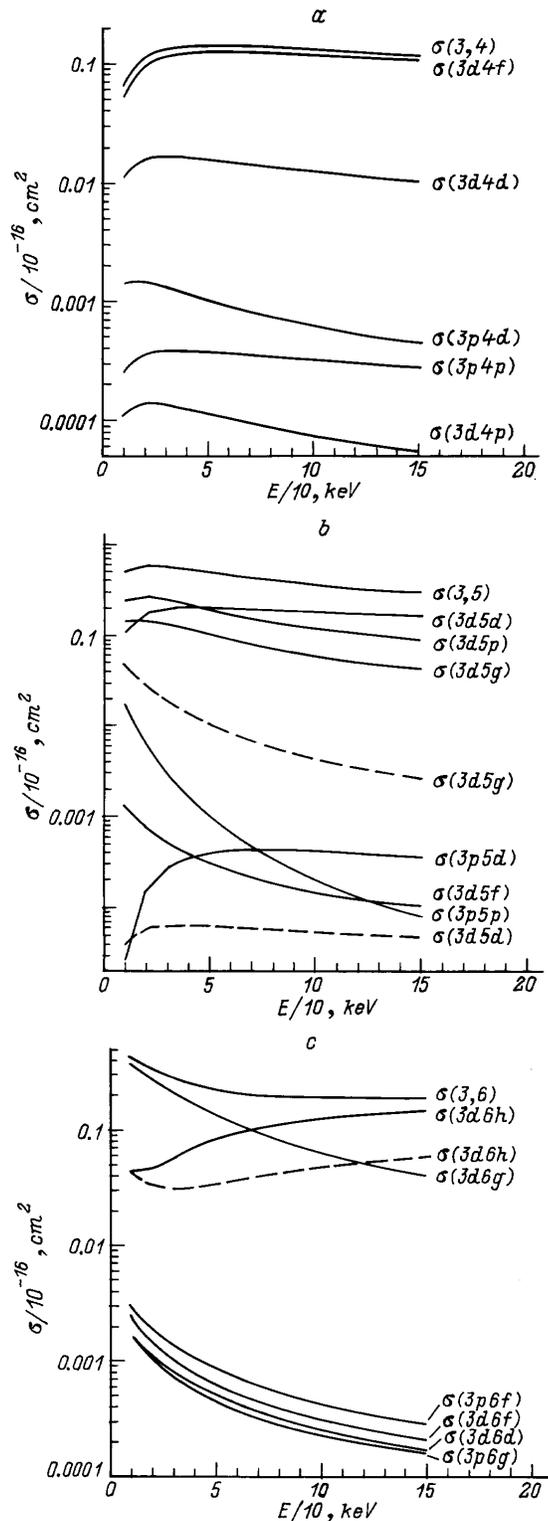


Рис. 6. *a* — парциальные сечения перезарядки в состоянии иона $\text{Ne}^{8+}(3I4l')$ и полное сечение двухэлектронной перезарядки $\sigma(3,4)$; *b* — $\text{Ne}^{8+}(3I5l')$ и $\sigma(3,5)$, штриховые кривые — результаты расчета сечений $\sigma(3d5d)$ и $\sigma(3d5g)$, полученные без учета потенциального взаимодействия каналов $\varphi_3(3d\sigma 5d\sigma)$ и $\varphi_6(3d\sigma 6h\sigma)$ с каналом одноэлектронной перезарядки $\varphi_9(4f\sigma 5g\sigma)$; *c* — $\text{Ne}^{8+}(3I6l')$ и $\sigma(3,6)$, штриховая кривая — сечение $\sigma(3d6h)$, полученное без учета вклада от канала $\varphi(3d\sigma 6h\pi)$.

Несколько сложнее обстоит дело с заселением состояний $3I5l'$ в иона Ne^{8+} . Как видно из рис. 5, *b*, в этом случае перезарядочные каналы $\phi(3p\sigma 5d\sigma)$, $\phi(3p\sigma 5f\sigma)$, $\phi_{15}(3d\sigma 5p\sigma)$, $\phi(3d\sigma 5d\sigma)$, $\phi(3d\sigma 5f\sigma)$ и $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$ имеют не только пересечения с каналами $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$, но и квазипересечения с последним в области межъядерных расстояний $R \approx 2.5-3.0$ а.у. При этом, так как потенциальные взаимодействия состояний $\phi(3l\sigma 5l'\sigma)$ с каналами $\phi_8(4f\sigma^2)$ и $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ в точках пересечения с ними мало (см. табл. 5, $n' = 5$), можно ожидать, что основной вклад в сечение перезарядки $\sigma(3,5)$ будут вносить указанные области квазипересечений. Проведенные расчеты парциальных сечений $\sigma(3I5l')$ показали (рис. 6, *b*), что наибольшее значение имеют парциальные сечения перезарядки в состоянии $3d5d$, $3d5p$ и $3d5g$ иона Ne^{8+} , так что $\sigma(3,5) \approx \sigma_3 + \sigma_6 + \sigma_{15}$. Но именно каналы $\phi_3(3d\sigma 5d\sigma)$, $\phi_{15}(3d\sigma 5p\sigma)$ и $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$, описывающие перезарядку в эти состояния, имеют "оптимальные" минимальные значения щели (ΔE_{\min}^a) в области квазипересечений состояний $\phi(3l\sigma 5l'\sigma)$ с каналом $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$: ΔE_{\min}^a равно соответственно 0.348 ($R \approx 3.01$ а.у.), 0.292 ($R \approx 2.89$ а.у.) и 0.170 ($R \approx 2.90$ а.у.). Для того чтобы убедиться, что заселение каналов $\phi_3(3d\sigma 5d\sigma)$, $\phi_{15}(3d\sigma 5p\sigma)$ и $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$ идет в основном через канал $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$, а не через канал $\phi_8(4f\sigma^2)$, нами был выполнен расчет, в котором не учитывались переходы между указанными состояниями и состоянием $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$. Полученные в этом расчете парциальные сечения $\sigma(3d5g)$ и $\sigma(3d5d)$ нанесены штриховыми кривыми на рис. 6, *b* (сечение $\sigma(3d5p) < 10^{-21}$ см² и на рисунке не приводится). Расчеты подтвердили, что заселение каналов $\phi_3(3d\sigma 5d\sigma)$, $\phi_{15}(3d\sigma 5p\sigma)$ и $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$, ответственных за перезарядку в состоянии $3I5l'$ иона Ne^{8+} , происходит через канал одноэлектронной перезарядки $\phi(4f\sigma 5g\sigma)$ в результате следующих электронных переходов

$$\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(4g\sigma 5g\sigma) \rightarrow \begin{cases} \phi_3(3d\sigma 5d\sigma), \\ \phi_{15}(3d\sigma 5p\sigma), \\ \phi_6(3d\sigma 6h\sigma). \end{cases}$$

Учет вращательного взаимодействия между $\phi_4(3d\sigma 5g\sigma)$ - и $\phi(3d\sigma 5g\pi)$ -состояниями при малых межъядерных расстояниях не дает существенного вклада в сечение двухэлектронной перезарядки $\sigma(3,5)$. Аналогичным образом происходит заселение состояний $3I6l'$ в ионе Ne^{8+} . На рис. 5, *c* приведены зависимости энергий соответствующих перезарядочных каналов от межъядерного расстояния R . Основной вклад в сечение $\sigma(3,6)$ вносят области квазипересечения канала $\phi_5(3d\sigma 6g\sigma)$ с каналом одноэлектронной перезарядки $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$ при $R \approx 3$ а.у. ($\Delta E_{\min}^a = 0.206$) и квазипересечения канала $\phi_7(3d\sigma 7i\sigma)$ с входным каналом $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ при $R \approx 3.8$ а.у. ($\Delta E_{\min}^a = 0.420$). При этом состояние $\phi_5(3d\sigma 6g\sigma)$ заселяется через канал одноэлектронной перезарядки $\phi_9(4f\sigma 5g\sigma)$:

Таблица 7. Сечения двухэлектронного захвата при энергии столкновения 150 keV для системы $Ne^{10+}-He$

n, n' (10^{-16} cm^2)	$\sigma(n, n')$ (10^{-16} cm^2)	$\sigma(n, n')^{\text{exp}}$ (10^{-16} cm^2)
3, 4	0.118	0.52 ± 0.16
3, 5	0.304	0.39 ± 0.12
3, 6	0.187	0.23 ± 0.07
4, 4	1.065	0.79 ± 0.24
4, 5	3.401	1.10 ± 0.33
4, 6	0.540	0.30 ± 0.09

Примечание. $\sigma(n, n')$ — сечения, полученные в данной работе; $\sigma(n, n')^{\text{exp}}$ — экспериментальные данные [14].

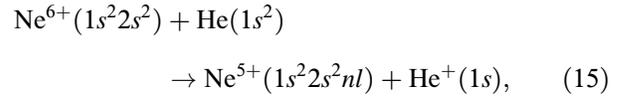
$\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(4g\sigma 5g\sigma) \rightarrow \phi_5(3d\sigma 6g\sigma)$, а канал $\phi_7(3d\sigma 7i\sigma)$ — непосредственно через входной канал $\phi_{12}(5g\sigma^2)$ (при $R < 6 \text{ a.u.}$): $\phi_{12}(5g\sigma^2) \rightarrow \phi_9(3d\sigma 7i\sigma)$. Однако, как показал расчет, в этом случае заметный вклад в полное сечение двухэлектронной перезарядки $\sigma(3, 6)$ дает канал $\phi(3d\sigma 6h\pi)$, заселяющийся при малых межъядерных расстояниях через состояние $\phi_6(3d\sigma 6h\sigma)$ в результате вращательного взаимодействия. Для сравнения на рис. 4 и рис. 6, с штриховыми кривыми приведены сечения $\sigma(3, 6)$ и $\sigma(3d6h)$, полученные без учета вклада от канала $\phi(3d\sigma 6h\pi)$.

В табл. 7 результаты нашего расчета сечений двухэлектронной перезарядки $\sigma(n, n')$ сравниваются с имеющимися для энергии столкновений 150 keV экспериментальными данными [14]. Для $n = 3, n' = 5, 6$ и $n = 4, n' = 4$ полученные значения сечений хорошо согласуются с экспериментом. Результаты расчетов для $\sigma(3, 4)$ и $\sigma(4, 6)$ примерно в 2 раза отличаются от данных эксперимента, а для $\sigma(4, 5)$ — примерно в 3 раза.

Расчет процесса одноэлектронного захвата при столкновении $Ne^{6+}-He$

Для столкновения не полностью ободранных ионов Ne^{6+} с атомами гелия имеются как экспериментальные, так и теоретические данные по полным сечениям одноэлектронного захвата. Известен только один расчет [15] сечения, выполненный в рамках метода сильной связи на базе атомных орбиталей, причем только для энергии столкновения, равной 2 keV. Экспериментальные данные по полным сечениям захвата имеются в интервалах энергий столкновения $E < 2 \text{ keV}$ [16] и $E \sim 20-120 \text{ keV}$ [17]. Поэтому представляет интерес расчет сечений в широком интервале энергий как для полноты данных, так и для сравнения расчета с экспериментальными данными, поскольку предыдущие оценки [16] при $E < 2 \text{ keV}$ в рамках многоканальной модели Ландау–Зинера с модельными параметрами дали значения сечений на порядок меньше экспериментальных. Что касается сечений двойной перезарядки для системы $Ne^{6+}-He$, то считается, что оно дает незначительный вклад в полное сечение.

Одноэлектронные адиабатические молекулярные орбитали ψ_i , на которых строятся двухэлектронные квази-молекулярные состояния (1а), описывающие входной и выходные каналы реакции



определялись из уравнения Шредингера (2), причем полученные параметры эффективного потенциала (3), наиболее оптимально описывающего орбиталь входного канала $4f\sigma$, следующие (заряды ядер $Z_1 = 2$ и $Z_2 = 6$): $\tilde{a}_1 = -2.005$, $a_1 = 1.361$, $a_0 = 0.275$, $b_1 = 0.01$, $b_2 = -1.011$.

Анализ энергий и волновых функций рассчитанных одноэлектронных молекулярных состояний показал, что при межъядерном расстоянии $R \simeq 14 \text{ a.u.}$, когда квази-молекулярные волновые функции еще практически полностью сосредоточены у одного из ядер, имеют место квазипересечение энергии орбитали входного канала $4f\sigma$ (орбитали eZ_1 -типа при $R > 14 \text{ a.u.}$) с энергией орбитали $3d\sigma$ и соответственно, резкое изменение волновых функций этих состояний, связанное с переходом электрона от одного ядра к другому, в результате чего при $R < 14 \text{ a.u.}$ роль функции входного канала переходит к орбитали $3d\sigma$.

На рис. 7 представлены энергии двухэлектронных адиабатических состояний для рассматриваемой квази-молекулы $(NeHe)^{6+}$ и указаны атомные пределы этих состояний при $R \rightarrow \infty$. Анализ полученной корреляционной диаграммы показал, что процессы одноэлектронного захвата определяются в основном одноэлектронными переходами между $\Sigma(3d\sigma^2)$ -состоянием входного канала реакции (15) и перезарядочными состояниями $\Sigma(3d\sigma 4f\sigma)$, $\Sigma(3d\sigma 3p\sigma)$ в интервале межъядерных расстояний $R \simeq 4.3-4.7 \text{ a.u.}$, а также переходом при малых межъядерных расстояниях между состоянием входного канала и вырожденным с ним при $R = 0$ $\Pi(3d\sigma 3d\pi)$ -состоянием. Все указанные выше каналы описывают перезарядку в состояния иона Ne^{5+} ($n = 3$). Пересечения между термом входного канала $\Sigma(4f\sigma^2)$ и перезарядочными термами в состояния иона Ne^{5+} ($n = 4$), лежащие при $R > 17 \text{ a.u.}$, проходят при рассматриваемых скоростях столкновений v от 0.06 до 0.6 a.u. почти адиабатически и заметного вклада в полное сечение одноэлектронной перезарядки не дают. Заселение канала $\Sigma(3d\sigma 4d\sigma)$ через канал одноэлектронной перезарядки $\Sigma(3d\sigma 4f\sigma)$ при $R \simeq 2 \text{ a.u.}$ также не дает заметного вклада в полное сечение одноэлектронной перезарядки.

Для определения вероятности неадиабатического перехода в окрестности точки пересечения (точка R_{12}) термов $\Sigma(3d\sigma^2)$ и $\Sigma(3d\sigma 4f\sigma)$ использовалась экспоненциальная модель Никитина (11). Для определения параметров потенциального взаимодействия в окрестности точки пересечения были рассчитаны адиабатические состояния взаимодействия двух конфигураций (9),

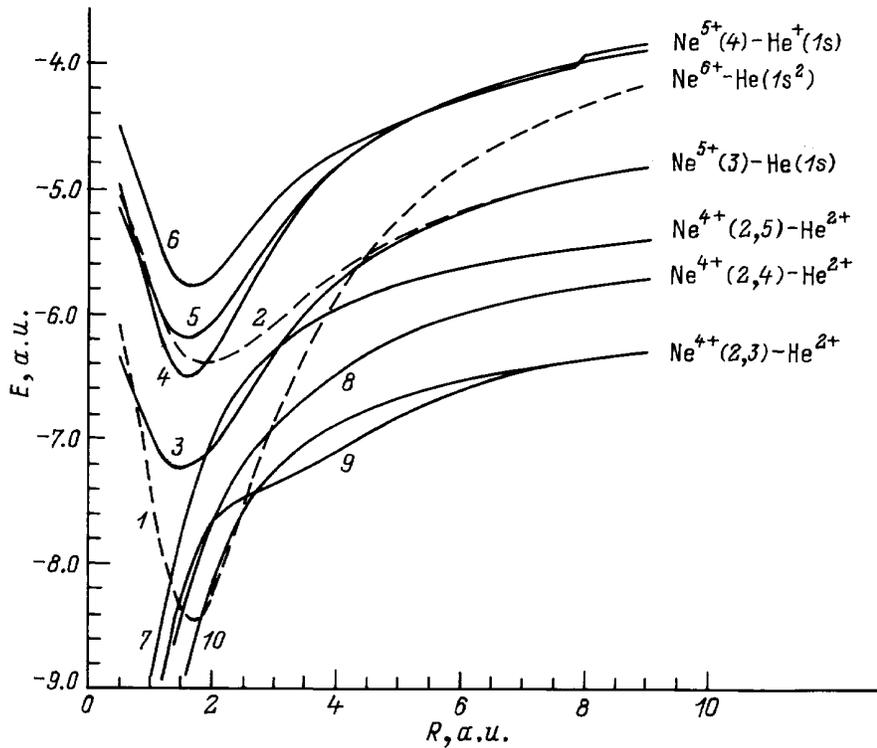


Рис. 7. Энергии адиабатических двухэлектронных состояний φ_i квазимолекулы $\text{Ne}^{6+}-\text{He}$: 1 — $i = \varphi(3d\sigma^2)$, 2 — $\varphi(3d\sigma 4f\sigma)$, 3 — $\varphi(3p\sigma 3d\sigma)$, 4 — $\varphi(3d\sigma 4p\sigma)$, 5 — $\varphi(3d\sigma 4d\sigma)$, 6 — $\varphi(3d\sigma 5g\sigma)$, 7 — $\varphi(2p\sigma 5d\sigma)$, 8 — $\varphi(2p\sigma 4d\sigma)$, 9 — $\varphi(2p\sigma 4f\sigma)$, 10 — $\varphi(2p\sigma 3p\sigma)$.

из анализа которых получены следующие параметры модели:

$$R_{12}: R_p = 4.64, \quad \Delta\varepsilon = 0.632,$$

$$\alpha = 0.542, \quad \theta = 0.229.$$

Вероятность неадиабатического перехода между состояниями $\Sigma(3d\sigma^2)$ и $\Sigma(3d\sigma 3p\sigma)$ и $\Sigma(3d\sigma 4d\sigma)$ и $\Sigma(3d\sigma 4f\sigma)$ в точках их пересечения (точки R_{13} и R_{24}) рассчитывалась в приближении Ландау–Зинера–Чаплика (10). При этом были получены следующие значения параметров модели:

$$R_{13}: R_c = 4.34, \quad \Delta = 0.0056,$$

$$F = 0.315, \quad \kappa = 0.023;$$

$$R_{24}: R_c = 1.90, \quad \Delta = 0.0276,$$

$$F = 0.580, \quad \kappa = 0.0202.$$

Вероятность перехода между адиабатическими состояниями $\Sigma(3d\sigma^2)$ и $\Pi(3d\sigma 3d\pi)$ при малых межъядерных расстояниях за счет вращательного взаимодействия оценивалась по формуле (13), при этом предполагалось, что разница энергий между этими состояниями достаточно хорошо описывается разностью энергий $3d\sigma$ - и $3d\pi$ -МО. При этом константа A получается равной 0.149.

Результаты расчета полного сечения одноэлектронной перезарядки в состоянии иона Ne^{5+} ($n = 3$) представлены на рис. 8. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными [17], представленными на этом же рисунке.

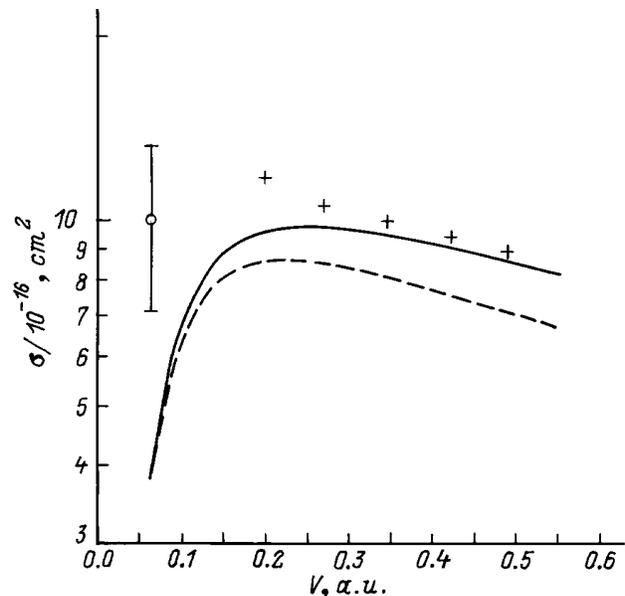


Рис. 8. Полное сечение одноэлектронного захвата в состоянии Ne^{5+} (3) при столкновении $\text{Ne}^{6+}-\text{He}$: o — экспериментальные данные [16], + — [17] (абсолютная ошибка $\sim 30\%$).

Авторы выражают признательность за поддержку работы Российскому фонду фундаментальных исследований (проект № 96-02-16915) и МАГАТЭ (контракт № 8553/RB).

Приложение А

Определение параметров $a_0^{(i)}$, $\tilde{a}_1^{(i)}$, $a_1^{(i)}$, $b_1^{(i)}$ и $b_2^{(i)}$, эффективного потенциала $V_{\text{eff}}^{(i)}$ для гетероядерной квазимолекулы

Используемый нами эффективный потенциал (3) допускает разделение переменных в уравнении (2) в сферической системе координат $\lambda = (r_1 + r_2)/R$, $\mu = (r_1 - r_2)/R$, $\phi = \arctg y/x$ (ось y перпендикулярна плоскости столкновения). Общий вид потенциала, удовлетворяющего этому требованию, есть

$$V_{\text{eff}}^{(i)}(\lambda, \mu, \phi) = \frac{1}{R(\lambda^2 - \mu^2)} [f(\lambda) + g(\mu)].$$

Раскладывая функции $f(\lambda)$ и $g(\mu)$ в ряд по λ и μ и удерживая первые не исчезающие члены разложения, для гетероядерной системы ($Z_1 \neq Z_2$) получаем, что

$$f(\lambda) = a_0^{(i)} + \tilde{a}_1^{(i)}/R + a_1^{(i)}\lambda \quad \text{и} \quad g(\mu) = b_1^{(i)}\mu, \quad b_2^{(i)} = 0.$$

Параметры $a_1^{(i)}$ и $\tilde{a}_1^{(i)}$ зависят только от состояния электрона в UA , в которое переходит рассчитываемая орбиталь в пределе $R \rightarrow 0$ [5], и определяются через энергию этого состояния (ε_{ua}^i) и расщепление подуровней в оболочке с данным n

$$\tilde{a}_1^{(i)} = \min \left(-\frac{c_1(1-x) - 2c^2x}{(1-x)^2} \pm \sqrt{\frac{c_1(1-x) - 2c^2x}{(1-x)^4} - \frac{c_1^2 - c^2(2l+1)^2}{(1-x)^2}} \right), \quad (16)$$

$$a_1^{(i)} = Z_1 + Z_2 - \sqrt{2|\varepsilon_{ua}^i|} \left(n - \frac{2l+1}{2} + \sqrt{\frac{(2l+1)^2}{4} + \tilde{a}_1^{(i)}} \right), \quad (17)$$

где

$$x = \varepsilon_{ua}^i / \varepsilon_{ua}^j, \quad i = (n, l, m), \quad j = (n, l-1, m),$$

$$c = (\sqrt{x} - 1) + \frac{2l-1}{2} + \frac{2l+1}{2}\sqrt{x},$$

$$c_1 = \frac{(2l-1)^2}{4} + \frac{(2l+1)^2}{4}x - c^2. \quad (18)$$

Параметры $a_0^{(i)}$ и $b_1^{(i)}$ определяются через энергию молекулярной орбитали в пределе $R \rightarrow \infty$ (предел разведенных атомов SA). При этом схема определения параметров для орбиталей eZ_1 - и eZ_2 -типа (в которых электрон в пределе разведенных атомов находится соответственно у ядра Z_1 и Z_2) одна и та же. Получающиеся

при этом выражения для коэффициентов отличаются лишь общим знаком в выражении для коэффициента b_1 .

Рассмотрим определение параметров для орбитали eZ_1 -типа. Положим для нее $i = 1$. Энергия молекулярной орбитали этого типа при $R \rightarrow \infty$ выражается следующим образом через параметры эффективного потенциала

$$\varepsilon_1(R) = -\frac{\tilde{Z}_1^2}{2n_{s1}^2} - \frac{1}{R} \left(\tilde{Z}_2 - \frac{\tilde{a}_1^{(1)}}{2n_{s1}^2} + \frac{\Delta_1}{2n_{s1}} a_0^{(1)} \right) + O\left(\frac{1}{R^2}\right), \quad (19)$$

где $\tilde{Z}_1 = Z_1 - (a_0^{(1)} + a_1^{(1)} - b_1^{(1)})/2$; $\tilde{Z}_2 = Z_2 - (a_1^{(1)} + b_1^{(1)})/2$; $\Delta_1 = n_1^{(1)} - n_2^{(1)}$, $n_{s1} = n_1^{(1)} + n_2^{(1)} + m + 1$; n_{s1} , $n_1^{(1)}$, $n_2^{(1)}$ — главное и параболические квантовые числа состояния электрона, в которое переходит рассматриваемая МО в пределе разведенных атомов.

Требование, чтобы выражение (19) асимптотически стремилось к значению энергии атомного состояния, в которое переходит данная ЭДМО при $R \rightarrow \infty$, т. е. чтобы

$$\varepsilon_1(R) \rightarrow \varepsilon_{sa}^{(1)} - \frac{Z_2 - N_2}{R} \equiv -\frac{Z_{s1}^2}{2n_{s1}^2} - \frac{Z_2 - N_2}{R}, \quad R \rightarrow \infty,$$

где N_2 — число электронов у ядра Z_2 в пределе разведенных атомов; Z_{s1} — эффективный заряд, связанный с энергией электрона $\varepsilon_{sa}^{(1)}$ соотношением $Z_{s1} = n_{s1} \sqrt{2|\varepsilon_{sa}^{(1)}|}$, дает следующие два уравнения для определения параметров эффективного потенциала:

$$Z_1 - \frac{a_0^{(1)} + a_1^{(1)} - b_1^{(1)}}{2} = Z_{s1}, \quad (20)$$

$$Z_2 - N_2 = Z_2 - \frac{a_1^{(1)} + b_1^{(1)}}{2} - \frac{\tilde{a}_1^{(1)}}{2n_{s1}^2} Z_{s1} + \frac{\Delta_1}{2n_{s1}} a_0^{(1)}. \quad (21)$$

Из (20) и (21) находим, что

$$b_1^{(1)} = a_0^{(1)} + a_1^{(1)} - 2(Z_1 - Z_{s1}), \quad (22)$$

$$a_0^{(1)} = \frac{2 \left((Z_1 - Z_{s1}) - a_1^{(1)} - \tilde{a}_1^{(1)} Z_{s1} / 2n_{s1}^2 + N_2 \right)}{1 - \Delta_1 / n_{s1}}. \quad (23)$$

Приложение В

Выбор функции входного канала, описывающей при $R \rightarrow \infty$ состояние $1s$ -электрона в атоме Ne в системе $Ne^{10+}-He$

Волновая функция ψ_i , удовлетворяющая уравнению (2), в сферической системе координат $\lambda = (r_1 + r_2)/R$, $\mu = (r_1 - r_2)/R$, ϕ представляется в виде

$$\psi_i(r_1, r_2; R) = N_{kqm}(R) \Pi_{mk}(\lambda, R) \Sigma_{mq}(\mu, R) \frac{\exp \pm im\phi}{\sqrt{2\pi}}, \quad (24)$$

где сферические квантовые числа k , q и m равны числу нулей радиальной (Π_{mk}), угловой (Σ_{mq}) и азимутальной частей волновой функции ψ_i .

Для задачи двух кулоновских центров из условия, что число нулей функции Π_{mk} и Σ_{mq} не меняется при изменении межъядерного расстояния, получены соотношения [5], устанавливающие связь термов изолированных атомов ($R = \infty$) с термами объединенного атома ($R = 0$).

При $R \rightarrow 0$ Π_{km} переходит в уравнение для радиальной части волновой функции водородоподобного атома с зарядом $Z_1 + Z_2$, а Σ_{qm} — в уравнение для присоединенных полиномов Лежандра, откуда сразу же следует связь между сферическими и сфероидальными квантовыми числами

$$k = n - l - 1 \quad \text{и} \quad q = l - |m|. \quad (25)$$

При $R \rightarrow \infty$ сфероидальные координаты переходят в параболические, а функции Π_{mk} и Σ_{mq} — в решения одно-центральной задачи в параболической системе координат. В частности, для интересующего нас eZ_1 -терма ($Z_1 \leq Z_2$)

$$\begin{aligned} \psi_i(r; R) \rightarrow & \frac{\sqrt{2Z_1^3}}{n_{s1}^2} f_{n_1^{(1)} m}(\xi) \\ & \times f_{n_2^{(1)} m}(\tau) \frac{\exp \pm im\phi}{\sqrt{2\pi}}, \quad R \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (26)$$

где при $R \rightarrow \infty$ $\xi = R(\lambda - 1)$, $\tau = R(\mu + 1)$; $n_1^{(1)}$ и $n_2^{(1)}$ — параболические квантовые числа, связанные с главным квантовым числом n_{s1} состояния электрона в изолированном атоме соотношением $n_{s1}^{(1)} = n_1^{(1)} + n_2^{(1)} + m + 1$ и равные числу нулей радиальной $f_{n_1^{(1)} m}(\xi)$ и угловой $f_{n_2^{(1)} m}(\tau)$ частей атомной функции.

Из условия неизменности числа нулей радиальной и угловой частей волновой функции двухцентральной задачи следует [5] связь сфероидальных чисел с параболическими числами состояния изолированного атома

$$k = n_1^{(1)},$$

$$q = \begin{cases} 2n_2^{(1)} + 1 + \text{Ent}(n_{s1}(Z_2 - Z_1)/Z_1), \\ \text{если } n_{s1}Z_2/Z_1 \text{ не равно целому числу,} \\ 2n_2^{(1)} + (n_{s1}(Z_2 - Z_1)/Z_1), \\ \text{если } n_{s1}Z_2/Z_1 \text{ равно целому числу.} \end{cases} \quad (27)$$

При $Z_1 = 2$ и $Z_2 = 10$ из (25) и (27) для функции входного канала (1s-функции атома He^+) получаем $l = 4$ и $n = 5$, т.е. получаем, что $5g\sigma$ -ОЕДМО описывает в пределе больших R состояние электрона у ядра иона He^+ . Если ввести экранировку заряда ядра Z_1 , как это делается в ряде работ, чтобы обеспечить правильное асимптотическое значение энергии входного канала при больших R , и положить $Z_1 = 1.6875$, то, как следует из соотношений (25) и (27), в качестве функции входного канала должна использоваться $6h\sigma$ -ОЕДМО.

Список литературы

- [1] *Janev R.K., Winter H.* // Phys. Rep. (Netherlands). 1985. Vol. 117. N 5–6. P. 265–387.
- [2] *Hansen J.P., Taulberg K.* // Phys. Rev. 1992. Vol. A45. N 7-A. P. R4214–4217.
- [3] *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов Ю.С.* // Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976. 319 с.
- [4] *Nikulin V.K., Guschina N.A.* // J. Phys. B. 1978. Vol. 11. N 20. P. 3553–3562.
- [5] *Гернштейн С.С., Кривченков В.Д.* // ЖЭТФ. 1961. Т. 40. Вып. 5. С. 1491–1499.
- [6] *Банд И.М., Тржасковская М.Б.* // Препринт ЛИЯФ АН СССР. № 90. Л., 1974. 54 с.
- [7] *Nikulin V.K., Samoylov A.V.* // Phys. Lett. 1982. Vol. A89. N 5. P. 225–228.
- [8] *Чаплик А.В.* // ЖЭТФ. 1962. Т. 43. Вып. 2. С. 462–464.
- [9] *Halkjaer O. and Linderberg J.* // Int. J. Quant. Chem. 1979. Vol. 13. P. 475.
- [10] *Никитин Е.Е., Уманский С.Я.* Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. М.: Атомиздат, 1978, 272 с.
- [11] *Demkov Yu.N., Kunasz C.V., Ostrovskii V.N.* // Phys. Rev. 1978. Vol. A18. N 5. P. 2097–2106.
- [12] *Afrosimov V.V., Basalaev A.A., Donets E.D.* et al. // XII ICPEAC. Abstracts of Contributed Papers. 1981. Vol. 2. P. 690.
- [13] *Bliman S., Bonnefoy M., Bonnet J.J.* et al. // Phys. Scr. 1983. Vol. T3. P. 63–67.
- [14] *Fremont F., Merabet H., Chesnel J.Y.* et al. // Phys. Rev. 1994. Vol. A50. N 4. P. 3117–3123.
- [15] *Hansen J.P., Andersson L.R.* // J. Phys. B. 1989. Vol. 22. N 11. P. L285–288.
- [16] *Andersson L.R., Pedersen J.O.P., Barany A.* et al. // J. Phys. B. 1989. Vol. 22. N 10. P. 1603–1621.
- [17] *Gordeev Yu.S., Dijkkamp D., Drentje A.G.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1983. Vol. 50. N 23. P. 1842–1845.