

УДК 539.186

PACS: 03.65.–w, 34.50.–s, 34.80.Dp, 34.70.+e

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.62-72

В. Ю. Лазур¹, М. І. Карбованець¹, В. В. Алексій¹, С. І. Мигалина²

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

²Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 14а

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

МЕТОД ФУНКЦІЙ ГРІНА В ТЕОРІЇ ОДНОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ІОНА ВОДНЮ НА ГОЛИХ ЯДРАХ

В рамках наближення Оппенгеймера-Брінкмана-Крамерса (ОБК) досліджується процес кулонівської перезарядки голого або екранованого іону на орієнтованій молекулі або молекулярному іоні. Для розрахунку ймовірностей і перерізів перезарядки розвинуто метод функцій Гріна, який дозволяє провести підсумовування за дискретним і інтегрування за неперервним спектром налітаючого іону. Застосування розробленої теорії продемонстровано на прикладі реакції перезарядки протона на повздовжньо орієнтованому (по відношенню до вектора швидкості) молекулярному іоні водню.

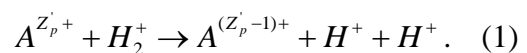
Ключові слова: ОБК-наближення, функція Гріна, перезарядка, молекулярний іон, електрон.

Вступ

Захоплення електрона багатозарядними іонами є одним із основних процесів, який відіграє важливу роль в енергетичному балансі високотемпературної плазми. Для оцінки потоку випромінювання збуджених іонів, що виникають, необхідно знати перерізи захоплення електрона як функції від енергії зіткнення. Крім того, в ряді випадків дуже корисним виявляється знання залежностей ймовірностей окремих зв'язано-зв'язаних і зв'язано-вільних переходів від прицільного параметра.

Зітнення не повністю іонізованих атомів з атомами інертних газів, молекулами і молекулярними іонами теоретично вивчені в роботах [1, 2], а експериментально в роботах [3, 4]. В даній праці виконані розрахунки ймовірностей і перерізів захоплення електрона молекулярного іона водню багатозарядними іонами, які мають, взагалі

кажучи, довільне число залишкових електронів, типу



Вважаємо, що швидкості зіткнень більше орбітальної швидкості електронів мішені.

Іони H_2^+ є компонентами термоядерної плазми, тому для фізики керованого термоядерного синтезу найбільший інтерес представляють залежності ймовірностей і перерізів процесу (1) від заряду і швидкості налітаючого іона, а також від заселеності електронних станів новоствореного іона $A^{(Z_p-1)^+}$ за головним і орбітальним квантовими числами. Специфікою процесів перезарядки з участю молекулярних іонів є багатоцентровий характер розподілу електронної густини, що призводить, як показано в цій роботі, до осциляцій в перерізах цих процесів.

Загальні співвідношення

Вважатимемо, що налітаючий іон $A^{Z_p^+}$ має N електронів, які рухаються в полі ядра з зарядом Z . Потенціал взаємодії електрона молекулярного іона H_2^+ з іоном $A^{Z_p^+}$ виберемо у вигляді екранованого кулонівського:

$$V_p = -\frac{Z_p'}{r_p} - \frac{N}{r_p} \exp(-\alpha r_p),$$

$$Z_p' = Z - N, \quad \alpha = Z^{1/3}. \quad (2)$$

Перший доданок в правій частині (2) має вигляд кулонівського потенціала з екранованим зарядом Z_p' , а другий – враховує відхилення реального потенціала поля, в якому знаходиться електрон, від кулонівського; \vec{r} , $\vec{r}_0 = \vec{r} + \alpha \vec{R}$ і $\vec{r}_p = \vec{r} - (1 - \alpha) \vec{R}$ позначають радіус-вектори електрона відносно центрів мас відповідно системи $H_2^+ + A^{Z_p^+}$, мішені H_2^+ і налітаючого іона $A^{Z_p^+}$; $\alpha = M_p / (M_p + M_0)$, M_0 і M_p – маси частинки-мішені і налітаючого іона. Траєкторію руху іона $A^{Z_p^+}$ вважаємо прямолінійною: $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$ (ρ - прицільний параметр).

Амплітуда процесу (1) в наближенні Оппенгеймера-Брінкмана-Крамєрса (ОБК) може бути записана у вигляді [5]

$$\mathfrak{R}_{if} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Psi_f | V_p | \Psi_i \rangle, \quad (3)$$

де

$$\Psi_i(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}_0, \vec{b}) \times$$

$$\times \exp \left[-iE_0 t - i\alpha \vec{v} \vec{r} - \frac{i}{2} (1 - \alpha)^2 v^2 t \right], \quad (4a)$$

$$\Psi_f(\vec{r}) = \varphi_f(\vec{r}_p) \exp \left[-iE_p t + \right.$$

$$\left. + i(1 - \alpha) \vec{v} \vec{r} - \frac{i}{2} (1 - \alpha)^2 v^2 t \right], \quad (4б)$$

Тут φ_i і φ_f - хвильові функції іонів H_2^+ , $A^{(Z_p-1)^+}$; $E_0 = -Z_0^2 / 2$ і $E_p = -Z_p^2 / 2n^2$ - енергії зв'язку електрона до і після переходу відповідно.

Ефективний заряд Z_p в багатозарядному іоні визначається за експериментальним значенням енергії зв'язку основного стану створюваного іона $A^{(Z_p-1)^+}$. Для одноелектронного захоплення повністю обідраними іонами $A^{(Z_p-1)^+}$ заряд $Z_p = Z_p'$. У випадку багатоелектронного іона $A^{(Z_p-1)^+}$ хвильова функція φ_f вибирається у вигляді водневоподібної хвильової функції з ефективним зарядом Z_p .

Молекулярну хвильову функцію φ_i виберемо у вигляді

$$\varphi_i(\vec{r}_0, \vec{b}) = N_g [\varphi_g(\vec{r}_0 + \vec{b} / 2) + \varphi_g(\vec{r}_0 - \vec{b} / 2)],$$

$$N_g = (2 + 2\Delta)^{-1/2},$$

$$\Delta = \int d^3r \varphi_g(\vec{r}_0 + \vec{b} / 2) + \varphi_g(\vec{r}_0 - \vec{b} / 2), \quad (5)$$

\vec{b} - між'ядерна відстань.

У випадку, коли молекулярний зв'язок створюється 1s-орбіталами,

$$\varphi_g = (Z_0^3 / \pi)^{1/2} \exp(-Z_0 r_0), \quad (6)$$

де Z_0 - ефективний заряд, пов'язаний з енергією зв'язку E_0 електрона в рівноважному стані іона H_2^+ співвідношенням $Z_0 = (2 | E_0 |)^{1/2}$.

Використовуючий інтегральний фур'є-розклад для експоненціального фактору в (6)

$$\exp(-Z_0 r_0) = \frac{Z_0}{\pi^2} \int d^3p \frac{\exp(-i\vec{p}\vec{r}_0)}{(p^2 + Z_0^2)^2},$$

Запишемо

$$\Re_{if} = i\pi^{-1}\eta(2Z_0)^{5/2}Z_p'N_g \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int d^3 p g_p^*(\vec{p} + \vec{v}) \cos(\vec{p}\vec{b}/2)(p^2 + Z_0^2)^{-2} \times \exp[iE\eta\xi + i(1-2\alpha)v\xi/2 - i(1-\alpha)\vec{v}\vec{R} - i\vec{p}\vec{R}], \quad (7)$$

де

$$g_f(\vec{q}) = g_f^{(1)}(\vec{q}) + \frac{N}{Z_p'} g_f^{(2)}(\vec{q}), \quad (8)$$

$$g_f^{(2)}(\vec{q}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 r \frac{\varphi_f(\vec{r})}{r} \exp(i\vec{q}\vec{r} - \alpha r),$$

$$E \equiv E_p - E_0, \quad \xi \equiv tv, \quad \eta \equiv v^{-1}. \quad (9б)$$

$$g_f^{(1)}(\vec{q}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 r \frac{\varphi_f(\vec{r})}{r} \exp(i\vec{q}\vec{r}), \quad (9а)$$

Проінтегрувавши в (7) за ξ , отримаємо

$$\Re_{if} = i\eta 2^{7/2} Z_0^{5/2} Z_p' N_g \int d^3 p g_p^*(\vec{p} + \vec{v})(p^2 + Z_0^2)^{-2} \cos(\vec{p}\vec{b}/2) \exp(i\vec{p}\vec{\rho}) \delta(p_z - E\eta + v/2), \quad (10)$$

Просумувавши за всіма можливими кінцевими станами електрона $|f\rangle$ ймовірність процесу (1) визначається виразом

$$W(\vec{\rho}) = \sum_f |\Re_{if}(\vec{\rho}, v)|^2, \quad (11)$$

$$\sigma = \int d^2 \rho W(\vec{\rho}). \quad (12)$$

Сума в (11) за кінцевими електронними станами представляє собою уявну частину функції G^{ij} , обчислену в Додатку.

З урахуванням виразу для амплітуди переходу (10) сумарна ймовірність та проінтегрований за прицільним параметром переріз (12) запишуться у вигляді

а відповідний переріз

$$W(\vec{\rho}, v) = \frac{-2^7 Z_0^5 Z_p'^2 N_g^2}{\pi v} \iint d^3 p_1 d^3 p_2 \delta(p_{1z} - p_{2z}) \exp[i\vec{\rho}(\vec{p}_{2\rho} - \vec{p}_{1\rho})] \frac{\cos(\vec{p}_1\vec{b}/2) \cos(\vec{p}_2\vec{b}/2)}{(p_1^2 + Z_0^2)^2 (p_2^2 + Z_0^2)^2} \times \text{Im} \left[G^{11}(\vec{p}_1 + \vec{v}, \vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_0) + (2N/Z_p') G^{12}(\vec{p}_1 + \vec{v}, \vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_0) + (N/Z_p')^2 G^{22}(\vec{p}_1 + \vec{v}, \vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_0) \right], \quad (13)$$

$$\sigma(v) = -2^9 \eta \pi Z_0^5 Z_p'^2 N_g^2 \int d^3 p \cos^2(\vec{p}\vec{b}/2) (p^2 + Z_0^2)^{-4} \text{Im} \left[G^{11}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}, \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_0) + (2N/Z_p') G^{12}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}, \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_0) + (N/Z_p')^2 G^{22}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}, \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_0) \right]. \quad (14)$$

Функція G^{ij} , що фігурує в (13) і (14), визначається виразом

$$G^{ij}(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \omega) = (2\pi)^{-3} \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \times \exp[-i(\vec{k}_2\vec{r}_2 - \vec{k}_1\vec{r}_1)] f_i(r_2) f_j(r_1) G,$$

$$f_\kappa(r) = \exp(-\mu_\kappa r)/r, \quad \mu_1 = 0, \quad \mu_2 = b,$$

$$\kappa = 1, 2. \quad (15)$$

Тут $G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \omega)$ - функція Гріна налітаючого іона.

В рамках використаної моделі хвильових функцій (5), (6) формули (13), (14) являються точними. Оскільки подальші розрахунки можливі тільки для конкретної моделі налітаючого іона, то хвильові функції φ_f виберемо рівними водневоподібним хвильовим функціям з ефективним зарядом Z_p . З їх використанням і пов'язані наближення, що виникають при обчисленні G^{ij} . Як було зазначено в [5], точність розрахунку перерізу одноелектронного захоплення з використанням водневоподібних хвильових функцій лише трохи менше точності розрахунку з використанням власних хвильових функцій модельного гамільтоніана. Перейдемо до розрахунку ймовірності та перерізу перезарядки (1) з допомогою функцій G^{ij} , що були отримані в Додатку у водневоподібному наближенні.

Розрахунок ймовірності та перерізу

Відзначимо, що інтегрування за повздовжнім імпульсом p_z в (13) і (14)

еквівалентно підсумовуванню за всіма кінцевими електронними станами. Дійсні значення параметра p в (П.1) і (П.6) (див. Додаток) відповідають зв'язано-зв'язаним переходам, а уявні – зв'язано-вільним. Процедура обчислення G^{ij} вимагає особливої уваги, оскільки полюси у виразах (П.6), (П.7) при захопленні в стани дискретного і неперервного спектрів мають різне походження. Далі розглянемо захоплення в зв'язані стани налітаючого іона. У цьому випадку уявна частина G^{ij} визначається сингулярністю множника в (П.6):

$$\begin{aligned} \text{Im}G^{ij}(\dots) &\approx \text{Im}[\sin(\lambda\pi/p - i0)]^{-1} = \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^n \delta(\lambda/p - n), \end{aligned} \quad (16)$$

де $p = [-2(\vec{p}\vec{v} + E_0 + v^2/2)]^{1/2}$.

Підставляючи в праву частину (13) вираз для $\text{Im}G^{ij}$, отримаємо

$$W(\vec{\rho}, \nu) = \sum_{n=1}^{\infty} W_n(\vec{\rho}, \nu), \quad (17)$$

$$\begin{aligned} W_n(\vec{\rho}, \nu) &= -i \frac{2^4 Z_p^3 Z_p'^2 Z_0^5 N_g}{\nu^2 \pi^3 n^4} \iint \frac{d^2 p_{1\rho} d^2 p_{2\rho}}{(p_{1\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \frac{\exp[i\vec{\rho}(\vec{p}_{2\rho} - \vec{p}_{1\rho})]}{(p_{2\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \cos[(\vec{p}_{1\rho}\vec{b}_\rho + p_{0z}b_z)/2] \times \\ &\times \cos[(\vec{p}_{2\rho}\vec{b}_\rho + p_{0z}b_z)/2] \int_1^{(0+)} \frac{dZ}{Z^n} \left[T(\lambda_1, \lambda_1) + \frac{2N}{Z_p} T(\lambda_1, \lambda_2) + \left(\frac{N}{Z_p}\right)^2 T(\lambda_2, \lambda_2) \right], \end{aligned} \quad (18)$$

$$A_{1,2} = [(Z_p/n \mp \mu_1)^2 + p_{1\rho}^2 + (p_{0z} + \nu)^2] [(Z_p/n \mp \mu_2)^2 + p_{2\rho}^2 + (p_{0z} + \nu)^2], \quad (19)$$

$$T(\lambda_i, \lambda_j) = (A_1 Z^2 - 2BZ + A_2)^{-1} \Big|_{\lambda_i=\mu_1; \lambda_j=\mu_2}, \quad p_{0z} \equiv -\nu/2 + E\eta, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = b,$$

$$B = 4(Z_p/n)^2 [\vec{p}_{1\rho}\vec{p}_{2\rho} + (p_{0z} + \nu)]^2 + [\mu_1^2 + p_{1\rho}^2 + (p_{0z} + \nu)^2 - Z_p^2/n^2] [\mu_2^2 + p_{2\rho}^2 + (p_{0z} + \nu)^2 - Z_p^2/n^2].$$

Для обчислення контурного інтеграла від першого члена в правій частині (18) скористаємось співвідношенням (див. [6])

$$(Z^2 - 2xZ + 1)^{-1} = Z^{-1} \sum_{\mu=0}^{\infty} Z^\mu C_\mu^\nu(x),$$

де $C_\mu^\nu(x)$ - поліном Гегенбауера. Корені квадратних тричленів в знаменнику інших двох членів підінтегрального виразу (18) комплексні і по модулю більше одиниці. Відтак, для перезарядки в стани дискретного спектру підінтегральна

функція в (18) не має інших особливостей, крім полюса n -го порядку в точці $Z = 0$. Тому в точці $Z = 1$ контур можна замкнути и використати для обчислення інтегралу

теорему про лишки. В результаті отримаємо

$$W_n(\vec{\rho}, \nu) = 2^8 Z_p^3 Z_p'^2 Z_0^5 \nu^{-2} N_g^2 (\pi m^2)^{-2} \iint \frac{d^2 p_{1\rho} d^2 p_{2\rho}}{(p_{1\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \frac{\exp[i\vec{\rho}(\vec{p}_{2\rho} - \vec{p}_{1\rho})]}{(p_{2\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \cos[(\vec{p}_{1\rho} \vec{b}_\rho + p_{0z} b_z)/2] \times \\ \times \cos[(\vec{p}_{2\rho} \vec{b}_\rho + p_{0z} b_z)/2] \left\{ F(\lambda_1, \lambda_1) + (2N/Z_p') F(\lambda_1, \lambda_2) + (N/Z_p')^2 F(\lambda_2, \lambda_2) \right\}, \quad (20)$$

$$F(\lambda_i, \lambda_j) = \frac{\sin(n\Phi) A_1^{(n-1)/2}}{\sin(\Phi) A_2^{(n-1)/2}} \Bigg|_{\lambda_i = \mu_1; \lambda_j = \mu_2},$$

$$\Phi = \arctg(A_1 A_2 / B - 1)^{1/2}. \quad (21)$$

Оскільки подальше спрощення формули (20) без будь-яких обмежень не

представляється можливим, тому звернемося до асимптотичних оцінок для деяких важливих частинних випадків. Так, для ймовірності захоплення електрона атомними ядрами із основного стану H_2^+ отримаємо вираз:

$$W_n = \frac{4N_g^2 (Z_p' Z_0)^5}{\nu^2 n^3} \left| \frac{(\vec{b}_\rho / 2 - \vec{\rho})^2}{(p_{0z}^2 + Z_0^2)} K_2[|\vec{b}_\rho / 2 - \vec{\rho}| (p_{0z}^2 + Z_0^2)^{1/2}] \exp(ip_{0z} b_z / 2) + \frac{(\vec{b}_\rho / 2 + \vec{\rho})^2}{(p_{0z}^2 + Z_0^2)} \times \right. \\ \left. \times K_2[|\vec{b}_\rho / 2 + \vec{\rho}| (p_{0z}^2 + Z_0^2)^{1/2}] \exp(ip_{0z} b_z / 2) \right|^2, \quad (22)$$

$K_\nu(x)$ - модифікована функція Бесселя.

У випадку повздовжньої орієнтації іона молекули водню, коли напрямок його осі \vec{b} і швидкості співпадають, то вираз (22) набуває вигляду

$$W_n = \frac{2^3 N_g^2 (Z_p' Z_0)^5 \rho^4}{\nu^2 n^3 (p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \cos^2(p_{0z} b_z / 2) \times$$

$$\times K_2^2(\rho \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2}). \quad (23)$$

В границі $b \rightarrow 0$ цей вираз співпадає з виразом, отриманим для перезарядки на атомарному водні [7].

Наведемо результати розв'язку задачі про переріз процесу перезарядки (1):

$$\sigma_n(\nu) = 2^{10} N_g^2 Z_p^3 Z_p'^2 Z_0^5 \pi \nu^{-2} n^{-3} \int_0^\infty \frac{dp_\rho p_\rho}{(p_\rho^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^4} [1 + \cos(p_{0z} b_z) J_0(p_\rho b_\rho)] \times \\ \times \left[(p_\rho^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^{-1} + \frac{N}{Z_p'} \frac{(p_\rho^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2 - 2Z^{1/3} Z_p / n + Z^{2/3})^{(n-1)/2}}{(p_\rho^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2 - 2Z^{1/3} Z_p / n + Z^{2/3})^{(n+1)/2}} \right]^2, \quad (24)$$

де $J_0(x)$ - функція Бесселя нульового порядку.

Переріз захоплення електрона із молекулярного іона водню, проінтегрований за ρ , рівний

$$\sigma_n(\nu) = \frac{2^9 \pi N_g^2 (Z_p' Z_0)^5}{\nu^2 n^3} \left[\frac{1}{5(p_{0z}^2 + Z_0^2)^5} + \frac{\cos(p_{0z} b_z)}{5! 2^4} \left(\frac{b_\rho}{(p_{0z}^2 + Z_0^2)^{1/2}} \right)^5 \right] \times$$

$$\times K_5 \left(b_\rho \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2} \right) \Big]. \quad (25)$$

Аналогічно знаходяться і ймовірності захоплення молекулярного електрона в стани неперервного спектру налітаючого іону:

$$\frac{dW}{d\kappa} = \frac{2^8 Z_p'^2 Z_0^5 N_g^2}{\pi^2 v^2} \frac{\kappa}{1 - \exp(-2\pi Z_p / \kappa)} \iint \frac{d^2 p_{1\rho} d^2 p_{2\rho}}{(p_{1\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2 (p_{2\rho}^2 + p_{0z}^2 + Z_0^2)^2} \exp[i\vec{\rho}(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)] \cos[\vec{p}_1 \vec{b} / 2] \times \\ \times \cos[\vec{p}_2 \vec{b} / 2] \left\{ \tilde{F}(\lambda_1, \lambda_1) + (2N / Z_p') \tilde{F}(\lambda_1, \lambda_2) + (N / Z_p')^2 \tilde{F}(\lambda_2, \lambda_2) \right\}, \quad (26)$$

В окремому випадку перезарядки на молекулярному іоні голого іона маємо

$$\frac{dW}{d\kappa} = \frac{4Z_p'^2 Z_0^5 N_g^2}{v^2} \frac{\kappa}{1 - \exp(-2\pi Z_p / \kappa)} \times \\ \times \left| \frac{(\vec{\rho} - \vec{b}_\rho / 2)^2}{p_{0z}^2 + Z_0^2} K_2 \left(\left| \frac{2\vec{\rho} - \vec{b}_\rho}{2} \right| \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2} \right) \right| \times \\ \times \exp(ip_{0z} b_z / 2) + (\vec{\rho} + \vec{b}_\rho / 2)^2 / (p_{0z}^2 + Z_0^2) \times \\ \times K_2 \left(\left| \frac{2\vec{\rho} - \vec{b}_\rho}{2} \right| \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2} \right) \exp \left(\frac{ip_{0z} b_z}{2} \right) \Big]^2. \quad (27)$$

Якщо напрямки осі \vec{b} і швидкості \vec{v} співпадають, то диференціальна ймовірність захоплення електрона запишеться у вигляді

$$\frac{dW}{d\kappa} = \frac{2^3 Z_p'^3 Z_0^5 N_g^2 \rho^4}{v^2 (p_{0z}^2 + Z_0^2)} \frac{\kappa}{1 - \exp(-2\pi Z_p / \kappa)} \times \\ \times \cos^2(p_{0z} b_z / 2) K_2^2 \left(\rho \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2} \right). \quad (28)$$

Приведемо також вираз для перерізу захоплення в стани неперервного спектру:

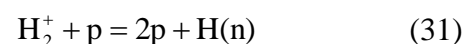
$$\frac{d\sigma}{d\kappa} = \frac{2^9 \pi Z_p'^2 Z_0^5 N_g^2 Z_p}{v^2 (1 - \exp(-2\pi Z_p / \kappa))} \int_0^\infty \frac{d(p_\rho^2) [1 + \cos(p_{0z} b_z) J_0(p_\rho b_\rho)]}{[p_\rho^2 + (p_{0z} + v)^2 - \kappa^2]^4} \left\{ \frac{1}{p_\rho^2 + (p_{0z} + v)^2 - \kappa^2} + \right. \\ \left. + \frac{N}{Z_p'} \frac{\exp\{(-Z_p / \kappa) \arctg(2\kappa Z^{1/3} / [p_\rho^2 + (p_{0z} + v)^2 + Z^{2/3} - \kappa^2])\}}{\{[p_\rho^2 + (p_{0z} + v)^2 + Z^{2/3} - \kappa^2]^2 + 4Z^{2/3} \kappa^2\}^{1/2}} \right\}. \quad (29)$$

Для перерізу перезарядки голого іона на молекулярному іоні водню звідси знайдемо ($Z_p = Z_p'$, $N = 0$):

$$\frac{d\sigma}{d\kappa} = \frac{2^9 \pi N_g^2 Z_0^5 Z_p^3 \kappa}{v^2 (1 - \exp(-2\pi Z_p / \kappa))} \left[\frac{1}{5(p_{0z}^2 + Z_0^2)^5} + \right. \\ \left. + \frac{\cos(p_{0z} b_z)}{2^4 5!} \left(\frac{b_\rho}{\sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2}} \right) \times \right. \\ \left. \times K_5 \left(b_\rho \sqrt{p_{0z}^2 + Z_0^2} \right) \right]. \quad (30)$$

Формули (24), (25), (29) і (30) описують переріз одноелектронного захоплення із орієнтованого молекулярного іона. Значення цих формул полягає в тому, що вони дозволяють якісно оцінити залежності перерізів перезарядки (1) від багатоцентрового характеру розподілу електронної густини в молекулярних об'єктах.

Проілюструємо застосування формули (25) для розрахунку перерізів одноелектронного захоплення на прикладі реакції



при $\vec{b} \parallel \vec{v}$. Результати розрахунку представлені на рис. 1. Криві I і II відносяться, відповідно, до перезарядки з переходом електрона в стани з головним квантовим числом $n=1$ і 2. Штрихова лінія відповідає випадку об'єднаних ядер в іоні молекули водню.

Потрібно зазначити, що в досліджуваному діапазоні енергій електрон з найбільшою ймовірністю захоплюється в основний стан атома водню; на частку збуджених станів припадає не більше 10% величини повного перерізу.

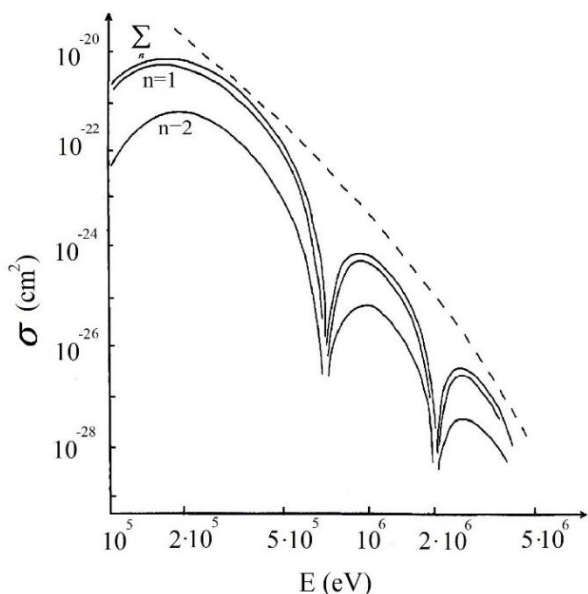


Рис. 1. Переріз процесу перезарядки протона на H_2^+

Осцилюючий фактор в (25) (другий доданок в квадратних дужках) специфічний саме для молекул і відсутній у випадку перезарядки на атомах [8]. Як впливає із виразу (23), дана молекулярна специфіка (двоцентровість в електронному розподілі в молекулярному іоні H_2^+) приводить до того, що ймовірність перезарядки прямує до нуля при $p_{0z}b_z/2 = \pi/(k+1/2)$ і досягає максимальних значень при $p_{0z}b_z/2 = \pi k$, де $k=0, 1, 2, \dots$. Аналогічну поведінку мають і перерізи перезарядки (25).

Висновок

В зв'язку з активним вивченням та використанням пучків молекулярних іонів

в експериментальних установках для фізико-хімічного дослідження матеріалів та високотемпературних процесів, нами, в рамках ОБК-наближення, було досліджено процес кулонівської перезарядки голого або екранованого іону на орієнтованій молекулі або молекулярному іоні. Для розрахунку ймовірностей і перерізів перезарядки, просумованих за всіма кінцевими станами снаряду, розвинуто метод функцій Гріна, аналогічний тому, який використовувався нами раніше [7, 8, 9] в теорії іон-атомної перезарядки. Даний метод дозволяє провести підсумовування за дискретним і інтегрування за неперервним спектром налітаючого іону. Застосування розвинутої нами теорії продемонстровано на прикладі чисельних розрахунків перерізів перезарядки протонів на повздовжньо орієнтованому (по відношенню до вектора швидкості) молекулярному іоні водню.

Додаток

Обчислимо функцію G^{ij} у випадку, коли налітаючий іон є голим ядром. Інтегральне представлення для функції Гріна $G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \omega)$, згідно з [10] має вигляд

$$G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \omega) = \frac{ip \exp(-\lambda\pi/p)}{8\pi \operatorname{sh}(\lambda\pi/p)} \times \int_{\infty}^{(1+)} d\xi \left(\frac{\xi+1}{\xi-1} \right)^{i\lambda/p} D(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \omega), \quad (П.1)$$

$$D(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \omega) = I_0 \left[-ip(x^2 - y^2)^{1/2} (\xi^2 - 1)^{1/2} \right] \times \exp(ipx\xi), \quad (П.2)$$

$$x = r_2 + r_1, \quad y = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1|, \quad p^2 = -2(\omega + i0)/\hbar, \quad \operatorname{Re} p > 0. \quad (П.3)$$

Дотримуючись [10], запишемо

$$I_0(Z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dt \frac{1}{t} \exp(t + Z^2/4t). \quad (П.4)$$

Інтеграли в (15) з врахуванням (П.1)-(П.4) обчислюються спочатку

інтегруванням за \vec{r}_1 з використанням співвідношення

$$\int d^3r \exp(-\vec{A}\vec{r} - \vec{B}\vec{r}) = 8\pi A / (A^2 - B^2), \quad (\text{П.5})$$

а потім за t з врахуванням того, що

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dt e^t (t-a)^{-\lambda} = \frac{e^a}{\Gamma(\lambda)}, \quad |\arg(t-a)| < \frac{\pi}{2},$$

$$c > \text{Re}(a), \quad \text{Re}(\lambda) > 0. \quad (\text{П.6})$$

Після інтегрування за \vec{r}_2 з допомогою (П.5) отримаємо

$$G^{ij} = \frac{2P i \exp(i\pi\lambda/p)}{\pi^2 2 \sin(\pi\lambda/p)} \times$$

$$\times \int_1^{(0+)} dZ Z^{-\lambda/p} (A_1 Z^2 + A_2 - 2BZ)^{-1},$$

$$A_{1,2} = [(p \mp \mu_1)^2 + k_1^2][(p \mp \mu_2)^2 + k_2^2],$$

$$B = 4p^2(\vec{k}_1\vec{k}_2) + (\mu_1^2 + k_1^2 - p^2) \times (\mu_2^2 + k_2^2 - p^2). \quad (\text{П.7})$$

Контур інтегрування в (П.7) проходить вздовж одиничної окружності від $Z = 1 + i0$ до $Z = 1 - i0$.

На закінчення відзначимо, що функція типу G^{22} використовувалась раніше в роботі [11] в квазікласичному трактуванні кулонівського збудження атомів швидкими іонами.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Belkic Dz., Quantum theory of highenergy ion-atom collisions. – London: Taylor & Francis, 2009. – 416 p.
2. Lazur V.Yu., Khoma M.V. Distorted wave theories for one- and two- electron capture in fast atomic collisions // Advances in Quantum Chemistry. – 2013. – V.65. – PP. 363-405.
3. Janev R.K., Presnyakov L.P. Collision processes of multiple charged ions with atoms // Phys. Rep. – 1981. – V. 70. – No.1. – PP.1-107.
4. Afrosimov V.V., Basalaev A.A., Donets E.D. et.al. Processes involving the capture of an electron by the nuclei of atoms near helium atoms and hydrogen molecules at low energies // JETP Letters. – 1981. – Vol. 34. – No. 4. – PP. 171-174.
5. Eichler J.K.M., Tsuji A., Ishihara T. Electron capture into partially stripped projectile ions // Phys. Rev. A. – 1981. – 23. – No. 6. – PP. 2833-2840.
6. Bateman H., Erdelyi A. Higher transcendental functions. Vol. II. – New York: McGraw-Hill Book Company, 1953. – 414 p.
7. Лазур В.Ю., Карбованець М.І., Алексій В.В., Мигалина С.І. Метод функцій гріна в реакціях одноелектронної перезарядки // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. – 2017. – Вип. 41 – С. 85-93.
8. Lazur V.Yu., Aleksey V.V., Migalina S.I., Pop V.V. The distorted wave method for capture with ionization in high-energy ion-atom collisions: The 18-th Small Triangle Meeting on theoretical physics (October 16-19, 2016, Ptičie, Slovakia), Košice: IEP SAS, 2017. – 225 p.
9. Lazur V.Yu., Aleksey V.V. The method of Green's functions in the Coulomb charge-exchange theory: Book of abstracts of the International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEUREKA-2017 (May 16-18, 2017, Lviv, Ukraine). – Львів: ЛНУ ім. І.Франка, 2017. – 134 с.
10. Hostler L. Coulomb Green's functions // J. Math. Phys. – 1964. – 5. – PP. 1235-1242.
11. Ryabov V.A., Yudin G.L. Coulomb excitation of atoms by fast protons // JETP. – 1980. – Vol. 51. – No. 2. – PP. 239-244.

Стаття надійшла до редакції 22.12.2017.

В. Ю. Лазур¹, М. І. Карбованец¹, В. В. Алексей¹, С. І. Мигалина²

¹Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

²Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 14а

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ ОДНОЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА ВОДОРОДА НА ГОЛЫХ ЯДРАХ

В рамках приближения Оппенгеймера-Бринкмана-Крамерса (ОБК) исследуется процесс кулоновской перезарядки голого или экранированного иона на ориентированной молекуле или молекулярном ионе. Для расчета вероятностей и сечений перезарядки развит метод функций Грина, позволяющий провести суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру налетающего иона. Применение разработанной теории продемонстрировано на примере реакции перезарядки протона на продольно ориентированном (по отношению к вектору скорости) молекулярном ионе водорода.

Ключевые слова: ОБК-приближение, функция Грина, перезарядка, молекулярный ион, электрон.

PACS: 03.65.–w, 34.50.–s, 34.80.Dp, 34.70.+e

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.62-72

V. Yu. Lazur¹, M. I. Karbovanets¹, V. V. Aleksey¹, S. I. Myhalyna²

¹Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54,

²Uzhhorod National University, 88000 Uzhhorod, 14A Universytetska Str.

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

GREEN'S FUNCTIONS METHOD IN SINGLE-ELECTRON CHARGE EXCHANGE THEORY OF THE HYDROGEN MOLECULAR ION ON THE NAKED NUCLEUSES

Introduction. The capture of an electron by multi-charge ions is one of the main processes that plays an important role in the energy balance of high-temperature plasma. To estimate the radiation flux of the excited ions that arise, it is necessary to know the cross sections of the capture of the electron as a function of the collision energy. And in some cases, it is very useful to know the dependence of the probabilities of bound-bound and bound-free transitions from the impact parameter.

Purpose. Research the Coulomb charge exchange process of a naked or screened ion on an oriented molecule or a molecular ion. Make a calculations of the probabilities and cross sections of electron capture of a hydrogen molecular ion by multi-charged ions, which have an arbitrary number of residual electrons.

Methods. To describe the single-electron charge exchange process we use OBK-approximation. To calculate the probabilities and cross sections for charge exchange reactions, summed over all finite states of the projectile, a method of Green's functions were developed.

Results. We obtained formulas, which allow us to describe the cross-section of one-electron capture from an oriented molecular ion. The meaning of these formulas is that they allow a qualitative estimate of the dependence of charge exchange cross sections on the multicenter character of the distribution of electron density in molecular objects.

Conclusion. The application of the developed theory is demonstrated by the example of numerical calculations of charge exchange cross sections of protons on a longitudinally oriented (in relation to the velocity vector) hydrogen molecular ion. In the investigated range of energies, electron is most likely to be absorbed into the ground state of the hydrogen atom; the share of excited states accounts for no more than 10% of the total cross-sectional value.

Keywords: OBK-approximation, Green's function, charge exchange reaction, molecular ion, electron.

PACS: 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp, 34.70.+e

REFERENCES

1. Belkic, Dz. (2009), "Quantum theory of high-energy ion-atom collisions", Taylor & Francis, London, 416 p.
2. Lazur, V.Yu., Khoma, M.V. (2013), "Distorted wave theories for one- and two-electron capture in fast atomic collisions", *Advances in Quantum Chemistry*, V. 65, pp. 363-405.
3. Janev, R.K., Presnyakov, L.P. (1981), "Collision processes of multiple charged ions with atoms", *Phys. Rep.*, V. 70, No.1, pp. 1-107.
4. Afrosimov, V.V., Basalaev, A.A., Donets, E.D., Lozhkin, K.O., Panov, M.N. (1981), "Processes involving the capture of an electron by the nuclei of atoms near helium atoms and hydrogen molecules at low energies", *JETP Letters*, Vol. 34, No. 4, pp. 171-174.
5. Eichler, J.K.M., Tsuji, A., Ishihara, T. (1981), "Electron capture into partially stripped projectile ions", *Phys. Rev. A*, Vol. 23, No. 6, pp. 2833-2840.
6. Bateman, H., Erdelyi, A. (1953), "Higher transcendental functions. Vol. II", McGraw-Hill Book Company, New York, 414 p.
7. Lazur, V.Yu., Karbovanets, M.I., Aleksi, V.V., Myhalyna, S.I. (2017), "Green's functions method in the reactions of a single-electron charge-exchange" ["Metod funktsii Hrina v reaktsiiakh odnoelektronnoi perezariadky"], *Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.]*, No 41, pp. 85-93.
8. Lazur, V.Yu., Aleksi, V.V., Migalina, S.I., Pop, V.V. (2017), "The distorted wave method for capture with ionization in high-energy ion-atom collisions: The 18-th Small Triangle Meeting on theoretical physics" (October 16-19, 2016, Ptičie, Slovakia), Košice, IEP SAS, 225 p.
9. Lazur, V.Yu., Aleksi, V.V. (2017), "The method of Green's functions in the Coulomb charge-exchange theory: Book of

abstracts of the International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEUREKA-2017” (May 16-18, 2017, Lviv, Ukraine), Lviv, LNU im. I.Franka, 134 p.

10. Hostler, L. (1964), “Coulomb Green’s functions”, J. Math. Phys., Vol. 5, pp. 1235-1242.
11. Ryabov, V.A., Yudin, G.L. (1980), “Coulomb excitation of atoms by fast protons”, JETP, Vol. 51, No. 2, pp. 239-244.

© Ужгородський національний університет