

УДК 658.562:621

PACS 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.41.85-93

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

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 РЕАКЦІЯХ ОДНОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ

В рамках напівкласичної ейкональної теорії розвинений метод функцій Гріна для обчислення ймовірностей і перерізів перезарядки, які просумовані за всіма кінцевими електронними станами іонів, що утворюються при одноелектронному захопленні. Досліджено вплив ефектів екранування налітаючого іона власними електронами на величину перерізу одноелектронного захоплення при швидких іон-атомних зіткненнях.

Ключові слова: ейкональне наближення, функції Гріна, одноелектронна перезарядка, атом, іон.

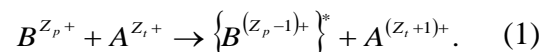
Вступ

Процеси захоплення електрона швидкими іонами при зіткненні їх з атомами відносяться до актуальної галузі фізики іон-атомних взаємодій, що представляє інтерес як для розвитку теорії зіткнень в цілому, так і для численних додатків в суміжних областях.

В даний час немає єдиної теорії електронного захоплення, яка описує все різноманіття процесів одноелектронного захоплення. Тому, як і раніше актуальним залишається розвиток наближених теоретичних методів розгляду захоплення електрона, що встановлюють залежність перерізів від основних параметрів зіткнення і узгоджуються з експериментальними даними. Особливо інтенсивно розвиваються методи опису електронного захоплення в області проміжних і великих швидкостей частинок, що зіштовхуються. Серед найбільш успішних підходів до вирішення цього завдання слід віднести різні варіанти методу спотворених хвиль, які використовуються при описі симетричних або майже симетричних зіткнень [1-7], і борнівське наближення сильного потенціалу, що враховує сильний парний потенціал взаємодії у всіх порядках теорії збурень, а слабкий

потенціал - в першому порядку, а, отже, застосовується при описі несиметричних процесів [8]. Зауважимо, однак, що всі ці наближення вимагають досить складних чисельних розрахунків і реалізуються лише в найпростіших випадках. Відзначимо також, що детально розроблені асимптотичні за великим прицільним параметром методи теорії атомних зіткнень [6, 9, 10] незастосовні для обчислення перерізів одноелектронної перезарядки при високих енергіях, так як в цьому випадку, навпаки, істотні малі прицільні відстані.

Наша робота присвячена теоретичному вивченню процесів одноелектронної перезарядки при зіткненні багатозарядних іонів B^{Z_p+} з атомами або молекулами мішені [11]:



Енергетичні міркування і строгі правила відбору не забороняють заселення будь-якого з підрівні іона $\{B^{(Z_p-1)+}\}^*$ в стани з великими значеннями головного квантового числа n' при енергіях налітаючого багатозарядного іона $E \gg \Delta E$ (де енергетичний дефект $\Delta E = |I_f - I_i|$) дорівнює різ-

ниці потенціалів іонізації розглянутих початкового ($i \equiv nlm$) і кінцевого ($f \equiv n'l'm'$) станів). При великих Z_p навіть у разі не дуже великих енергій зіткнення можливі електронні переходи з початкового атомного стану в цілий ряд кінцевих збуджених станів багатозарядного іона $\{B^{(Z_p-1)+}\}^*$. Тому як в теоретичному розгляді, так і в експерименті при $n' \gg 1$ доводиться мати справу з великим числом електронних (l', m')-підрівнів. Як вже зазначалося вище, існують ретельно розроблені теорії процесів перезарядки (1), але вони для кожного окремого підстану з даними n' вимагають складних чисельних розрахунків. Обчислювальні проблеми ще більше посилюються з ростом відносної v швидкості зіткнення частинок, оскільки в розгляд включається все більше число кінцевих збуджених станів. Однак більшість наявних експериментальних робіт присвячено вимірюванню величин повних перерізів захоплення електрона багатозарядним іоном без аналізу його кінцевих електронних станів [1-3, 12-15]. У такій ситуації при зіставленні теоретичних розрахунків з результатами вимірів особливого значення набуває отримання замкнутих аналітичних виразів для перерізів перезарядки (1), які підсумовані за кінцевими (l', m')-підрівнями.

У даній роботі для опису процесу одноелектронної перезарядки ми використовуємо напівкласичне ейкональне наближення, в якому враховується екранування ядра налітаючого багатозарядного іона за допомогою модельного потенціалу [16]. Отримано аналітичні вирази для перерізів захоплення електрона з $1s$ оболонки мішені в довільну n' оболонку налітаючого багатозарядного іона. Підсумовування перерізів перезарядки (1) по спектру вироджених кінцевих станів проводиться за допомогою техніки кулонівської функції Гріна [17]. Виконано систематичні розрахунки перерізів перезарядки атомів водню на іонах C^{q+} і N^{q+} ($q=1, 2, 3$) проведено їх порівняння з експериментальними даними.

Загальні співвідношення

Для опису процесу захоплення електрона ми використовуємо модифіковане ейкональне наближення, в якому враховується додаткова взаємодія захоплюваного електрона з атомним залишком $A^{(Z_i+)+}$ у вихідному каналі реакції (див. роботи [17, 18]). Як було показано в [18], врахування цієї взаємодії призводить до появи в повному перерізі

$$\sigma_{capt}(v) = \tilde{\alpha}(Z_p, v) \sum_{n'} \sigma_{1s \rightarrow n'}^{OBK}(Z_p, v) \quad (2)$$

поправкового множника $\tilde{\alpha}$, значення якого необхідно обчислити.

Будемо припускати, що налітаюча частинка B^{Z_p+} рухається по прямолінійній траєкторії $\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}t = \vec{b} + \vec{Z}_R(t)$ (\vec{b} - прицільний параметр, $\vec{b} \cdot \vec{Z}_R(t) = 0$) в системі відліку, пов'язаної з ядром мішені A^{Z_i+} . Нехай \vec{r} , $\vec{r}_i = \vec{r} + \alpha \vec{R}$ і $\vec{r}_p = \vec{r} - (1 - \alpha)\vec{R}$ позначають, відповідно, радіус-вектори електрона щодо центрів мас системи $A^{Z_i+} + B^{Z_p+}$, атома-мішені A^{Z_i+} і налітаючої частинки B^{Z_p+} , а значення $\alpha = M_p / (M_p + M_t)$. Тоді амплітуда процесу одноелектронної перезарядки може бути записана у наступному вигляді:

$$\mathfrak{R}_f(\vec{b}, v) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \Psi_f | \hat{V}_p | \Psi_i \rangle dt. \quad (3)$$

Хвильові функції

$$\Psi_i = \varphi_i(\vec{r}_i) \exp\{-iE_i t - i\alpha \vec{v} \vec{r} - i\alpha^2 v^2 t/2\}, \quad (4)$$

$$\Psi_f = \varphi_f(\vec{r}_p) \exp\{-iE_p t + i(1 - \alpha)\vec{v} \vec{r} - i(1 - \alpha^2)v^2 t/2\} \exp\{i\chi(t)\} \quad (5)$$

локалізовані поблизу різних центрів і містять трансляційні фактори, що враховують ефекти переносу імпульсу електроном при переході від одного центру до іншого. Хвильова функція (5) містить ейкональний фактор $\exp\{i\chi(t)\}$, де

$$\chi(t) = \int_t^{+\infty} V_i(\vec{r}_i) dt, \quad (6)$$

враховує взаємодію $V_i(\vec{r}_i)$ електрона в зв'язаному стані $\varphi_f(\vec{r}_p)$ з атомним залишком $A^{(Z_i+1)+}$ в кінцевому каналі реакції перезарядки (1). Потенціал поля, в якому знаходився захоплюваний електрон до зіткнення, виберемо у вигляді ефективного кулонівського

$$V_i(\vec{r}_i) = -Z'_i/r_i. \quad (7)$$

Вважаючи, що налітаючий іон B^{Z_p+} складається з N електронів, що рухаються в полі ядра з зарядом Z , потенціал поля, що діє на захоплюваний електрон з боку ядра і остова налітаючого багатозарядного іона, вибирається у вигляді екранованого кулонівського [16]:

$$V_p(\vec{r}_p) = -\frac{Z'_p}{r_p} - \frac{N}{r_p} \exp(-\alpha r_p);$$

$$Z'_p = Z - N; \quad \alpha \approx Z^{1/3}. \quad (8)$$

Перший доданок в правій частині (8) має вигляд кулонівського потенціалу з ефективним зарядом Z'_p . Другий доданок враховує відхилення електростатичного поля атомного остова від кулонівського вигляду. Потенціал (8) впливає із статистичної теорії Томаса-Фермі, має простий вигляд і

забезпечує правильну поведінку при $r_p \rightarrow 0$ і $r_p \rightarrow \infty$.

Переріз одноелектронного захоплення із довільного $|i\rangle \equiv |nlm\rangle$ стану водневоподібного атома в стан із заданими значеннями квантових чисел $|f\rangle \equiv |n'l'm'\rangle$ налітаючого іона визначається через амплітуду переходу \mathfrak{R}_{fi} за допомогою інтегрування за площиною параметрів удару:

$$\sigma_{(nlm \rightarrow n'l'm')} = \int |\mathfrak{R}_{fi}(\vec{b}, v)|^2 d^2\vec{b}. \quad (9)$$

Особливий інтерес представляють перерізи, підсумовані за всіма кінцевим електронним станам іона $B^{(Z_p-1)+}$, що утворюються при одноелектронному захопленні:

$$\sigma_{(nlm)} = \sum_{n'l'm'} \sigma_{(nlm \rightarrow n'l'm')}. \quad (10)$$

Для обчислення спектральних сум типу (10) в математичній фізиці зазвичай використовується апарат функцій Гріна, які визначаються розкладом

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega) = \sum_f \frac{\varphi_f^*(\vec{r}_1) \varphi_f(\vec{r}_2)}{\omega - \omega_f + i0}. \quad (11)$$

Передбачається, що $\sum_f(\dots)$ включає суму за станами дискретного спектра та інтеграл за станами континууму. Сумарна ймовірність і переріз перезарядки (10) запишуться тоді так:

$$W_{nlm}(\vec{b}; v) = -4\pi\eta Z_p^2 \iint d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 \delta(p_{1z} - p_{2z}) M_{nlm}(\vec{p}_1) M_{nlm}^*(\vec{p}_2) \exp[i\vec{b}(\vec{p}_2 - \vec{p}_1)] \times$$

$$\times \text{Im}\{G^{11}(\vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1 + \vec{v}; \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_t) + (2N/Z'_p)G^{12}(\vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1 + \vec{v}; \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_t) +$$

$$+ (N^2/Z_p^2)G^{22}(\vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1 + \vec{v}; \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_t)\}, \quad (12)$$

$$\sigma_{nlm} = -2^4 \pi^3 \eta Z_p^2 \int d\vec{p} |M_{nlm}(\vec{p})|^2 \text{Im}\{G^{11}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}; \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_t) +$$

$$+ (2N/Z'_p)G^{12}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}; \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_t) + (N^2/Z_p^2)G^{22}(\vec{p} + \vec{v}, \vec{p} + \vec{v}; \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_t)\}. \quad (13)$$

$$G^{ij}(\vec{p}_2 + \vec{v}, \vec{p}_1 + \vec{v}; \vec{p}_1\vec{v} + v^2/2 + E_t) = (2\pi)^{-3} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \exp[-i\vec{r}_2(\vec{p}_2 + \vec{v})] f_i(\vec{r}_2) G(\vec{r}_2, \vec{r}_1; \vec{p}\vec{v} + v^2/2 + E_t) \times$$

$$\times f_j(\vec{r}_1) \exp[i\vec{r}_1(\vec{p}_1 + \vec{v})] \quad \{i, j\} = 1, 2, \quad f_k(\vec{r}) = \exp(-\mu_k r)/r, \quad \mu_1 = 0, \quad \mu_2 = a, \quad k = 1, 2. \quad (14)$$

Результати (12)-(14) в рамках використаної моделі є точними. Подальші наближення при конкретних розрахунках пов'язані з використанням для обчислення функцій G^{ij} замість власних хвильових функцій гамільтоніана з потенціалом (8) водневоподібних хвильових функцій з підібраними варіаційними параметрами. Перевагою подібного спрощення є можливість використання для кулоновської функції Гріна, що входить в (14), замкнених інтегральних представлень, знайдених Хостлером [17]. Інтегруючи за \vec{r}_1 і \vec{r}_2 у виразі (14) для G^{ij} , після підстановки туди інтегрального представлення для функції Гріна $G(\vec{r}_2, \vec{r}_1; \omega)$, отриманого в [17], знаходимо:

$$G^{ij}(\vec{k}_2, \vec{k}_1; \omega) = \frac{2\tilde{p}}{\pi^2} \left\{ \frac{i \exp(i\pi\lambda/\tilde{p})}{2 \sin(i\pi\lambda/\tilde{p})} \right\} \times \int_1^{(0+)} dz \frac{z^{-\lambda/\tilde{p}}}{A_1 z^2 - 2Bz + A_2} \Big|_{\mu_1=\lambda_i, \mu_2=\lambda_j}, \quad (15)$$

де

$$A_{1,2} = [(\tilde{p} \mp \mu_1)^2 + k_1^2][(\tilde{p} \mp \mu_2)^2 + k_2^2], \\ B = 4\tilde{p}^2(\vec{k}_1 \vec{k}_2) + (\mu_1^2 + k_1^2 - \tilde{p}^2)(\mu_2^2 + k_2^2 - \tilde{p}^2), \\ \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = a, \quad \tilde{p}^2 = -2(\omega + i0), \\ \text{Re } \tilde{p} > 0; \quad \omega = \vec{p}_1 \vec{v} + v^2/2 + E_t. \quad (16)$$

Контур інтегрування в (15) проходить вздовж одиничної окружності від $z = 1 + i0$ до $z = 1 - i0$.

Згідно формули (15), уявна частина функції $G^{ij}(\vec{k}_2, \vec{k}_1; \omega)$ має різний вигляд в залежності від типу її полюсних особливостей, які відповідають енергетичному спектру налітаючої частинки. Оскільки ці особливості мають різне походження при заселенні електронних станів дискретного і неперервного спектрів, доцільно розглянути їх окремо.

Зв'язано-зв'язані переходи

При дійсних значеннях параметра \tilde{p} , що відповідає захопленню електрона налітаючим іоном в стани дискретного спектру, уявна частина $G^{ij}(\vec{k}_2, \vec{k}_1; \omega)$ визначається сингулярністю множника в фігурних дужках перед контурним інтегралом в (15). Враховуючи вище сказане, для повної ймовірності перезарядки отримуємо

$$W_{nlm}(\vec{b}, v) = \sum_{n'} W_{nlm \rightarrow n'}(\vec{b}, v). \quad (17)$$

Запишемо співвідношення для ймовірності захоплення електрона голим ядром ($N = 0, Z_p = Z'_p$):

$$W_{1s \rightarrow n'}(\vec{b}, v) = \frac{2^8 \pi Z_p^5 Z_t^5}{v^2 n'^3} \frac{\eta Z'_t}{\text{sh}(\pi \eta Z'_t)} \exp[-2\eta Z'_t \arctg(-p_{0z}/Z'_t)] \left| \frac{\eta Z'_t / Z'_t}{2Z'_t - 2ip_0} \left(\frac{b}{2\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2}} \right)^{1+i\eta Z'_t} \right. \times \\ \left. \times \frac{K_{1+i\eta Z'_t}(b\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2})}{\Gamma(2+i\eta Z'_t)} + i(1+i\eta Z'_t) \left(\frac{b}{2\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2}} \right)^{2+i\eta Z'_t} \frac{K_{2+i\eta Z'_t}(b\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2})}{\Gamma(3+i\eta Z'_t)} \right|^2. \quad (18)$$

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

У тому випадку, коли $Z'_t \rightarrow 0$ (ОБК-наближення без ейкональних поправок) із (18) отримуємо наступний вираз для парціальних ймовірностей:

$$W_{1s \rightarrow n'}^{ОБК}(\vec{b}, v) = \frac{4Z_t^5 Z_p^5}{v^2 n'^3} \left(\frac{b}{\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2}} \right)^4 \times \\ \times K_2^2 \left(b\sqrt{p_{0z}^2 + Z_t^2} \right). \quad (19)$$

Наведемо також вираз для перерізу захоплення з $|nlm\rangle$ - оболонки мішені в довільну n' - оболонку налітаючої частинки:

$$\sigma_{nlm \rightarrow n'} = \frac{2^5 \pi^2 Z_p^3 Z_t^2}{v^2 n'^3} \int d^2 \vec{p}_b |M_{nlm}(\vec{p})|^2 \times \\ \times \left\{ [p_b^2 + (p_z + v)^2 + (Z_p/n')^2]^{-1} + (N/Z'_p) \right\}$$

$$\times \left\{ \frac{[p_b^2 + (p_z + v)^2 + (Z_p/n' - Z^{1/3})^2]^{(n'-1)/2}}{[p_b^2 + (p_z + v)^2 + (Z_p/n' + Z^{1/3})^2]^{(n'+1)/2}} \right\}^2, \quad (20)$$

де $p_z = p_{0z}$. Для захоплення електрона із k -оболонки водневоподібного атома

$$\sigma_{1s \rightarrow n'} = \frac{2^8 \pi^2 Z_p^2 Z_t^5}{v^2 n'^3} \frac{\eta Z_t'}{\text{sh}(\pi \eta Z_t')} \exp[-2\eta Z_t' \arctg(-p_{0z}/Z_t')] \times$$

$$\times \int_0^\infty d(p_b^2) \left(\frac{i - \eta Z_t'}{[p_b^2 + (p_{0z} + v)^2 + (Z_p/n')^2]^2} + \frac{\eta Z_t'/Z_t}{2(Z_t - ip_{0z})[p_b^2 + (p_{0z} + v)^2 + (Z_p/n')^2]} \right) \times$$

$$\times \left(\frac{1}{p_b^2 + (p_{0z} + v)^2 + (Z_p/n')^2} + \frac{N}{Z_p} \frac{[p_b^2 + (p_{0z} + v)^2 + (Z_p/n' - Z^{1/3})^2]^{(n'-1)/2}}{[p_b^2 + (p_{0z} + v)^2 + (Z_p/n' + Z^{1/3})^2]^{(n'+1)/2}} \right). \quad (21)$$

У випадку перезарядки на голих ядрах ($N = 0, Z_p = Z_t'$) переріз заселення рівня з будь-яким фіксованим значенням n' представляється в замкнутому вигляді:

$$\sigma_{1s \rightarrow n'}^{кв} = \alpha_{n'}(Z_t', Z_p, v) \sigma_{1s \rightarrow n'}^{ОБК}(Z_t', Z_p, v), \quad (22)$$

де $\sigma_{1s \rightarrow n'}^{ОБК}(Z_t', Z_p, v)$ - переріз перезарядки в ОБК-наближенні:

$$\sigma_{1s \rightarrow n'}^{ОБК} = \frac{2^8 \pi Z_p^5 Z_t^5}{5n'^3 v^2 [Z_t^2 + (v/2 - E\eta)^2]^5}, \quad (23)$$

а масштабний фактор задається виразом

$$\alpha_{n'} = \frac{\pi \eta Z_t'}{\text{sh}(\pi \eta Z_t')} \exp\left[-2\eta Z_t' \arctg\left(\frac{v/2 - E\eta}{Z_t}\right)\right] \times$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{5 Z_t'}{8 Z_t} + \frac{5 Z_t'^2}{48 Z_t^2} + \left[\frac{Z_t'^2}{6} + \frac{5 Z_t'}{4 Z_t} E - \frac{5 Z_t'^2}{12 Z_t^2} E \right] \eta^2 + \frac{5 Z_t'^2}{12 Z_t^2} E^2 \eta^2 \right\}. \quad (24)$$

Цей результат збігається з результатом із [19], який був отриманий з використанням матриці густини електрона в імпульсному представленні. Перевага виразу (22) в тому, що збурення хвильової функції електрона, що виникає в результаті його взаємодії з атомним залишком $A^{(Z_t+1)+}$ мішені у вихідному каналі, описується множи-

ком $\alpha_{n'}(Z_t', Z_p, v)$, який обчислюється аналітично і представляється в замкнутому вигляді (24). Це істотно спрощує аналіз впливу збурень на переріз електронного захоплення і допускає просте узагальнення на випадок захоплення електрона з різних оболонок.

Теорія ОБК зазвичай дає завищені значення абсолютних перерізів $\sigma_{1s \rightarrow n'}^{ОБК}$, але добре описує відносні перерізи. Формула (22) значно краще узгоджується з експериментальними даними, ніж (23). Вираз (24) дозволяє оцінити множник $\alpha_{n'}$ із (22) при різних значеннях параметрів v, Z_p, Z_t', n' і призводить до нерівності $0.15 \leq \alpha_{n'} \leq 0.4$.

Результати розрахунків перерізів перезарядки

Результати розрахунків перерізів перезарядки в реакціях

$$H + \begin{cases} C^{q+} \\ N^{q+} \end{cases} \rightarrow H^+ + \begin{cases} C^{(q-1)+} \\ N^{(q-1)+} \end{cases}, \quad q = 1, 2, 3, \quad (24)$$

виконаних в модифікованому ейкональному наближенні з урахуванням екранування (суцільні лінії; розрахунок за формулою (21)) і на основі звичайного ейконального наближення без урахування екранування (штрихові лінії; розрахунок за

формулою (22)), представлені на рис. 1 разом з експериментальними даними [14, 15]. Для всіх трьох зарядових станів ($q=1,2,3$) зміни перерізів, викликані екрануванням, описуються теорією правильно. Ефект екранування істотний при $q=1$, помітний при $q=2$, малий при $q=3$ і, як правило, несуттєвий при $q \geq 4$.

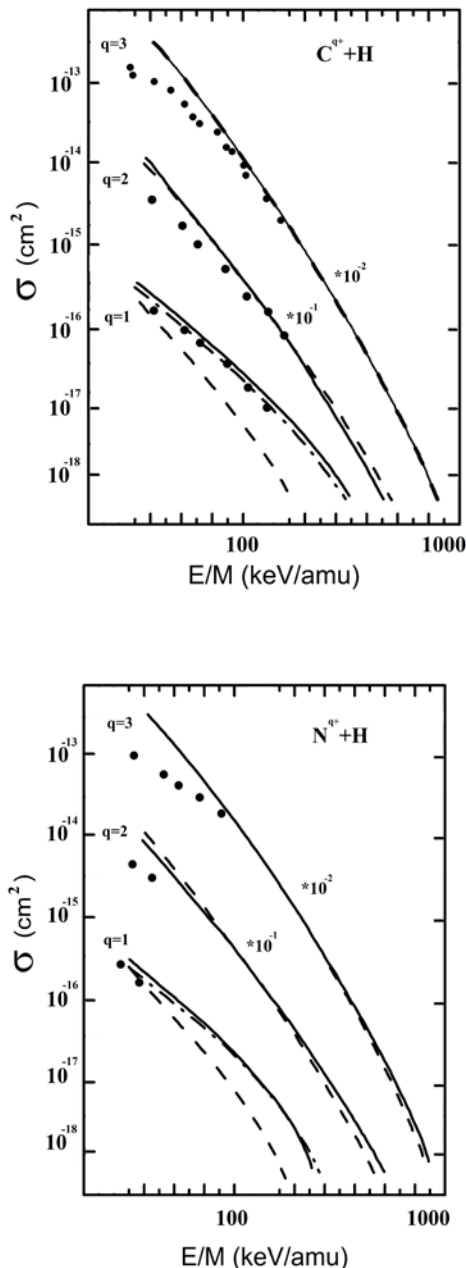


Рис. 1. Переріз перезарядки атомів водню на іонах C^{q+} і N^{q+} . Теорія: суцільні лінії – формула (21); штрихові лінії – формула (22).

Експеримент: точки – C^{q+} - [14], N^{q+} - [15].

Ці висновки легко зрозуміти якісно: при високих енергіях зіткнення і малих Z_p захоплення електрона здійснюється переважно на нижні незаповнені оболонки налітаючого іона, які значною мірою схильні до екранування. Зі збільшенням заряду Z_p і зменшенням енергії зіткнення електрон захоплюється в стани з великими значеннями головного квантового числа n' , для яких малий вплив ефектів екранування.

Відзначимо, що викладений вище метод підсумовування ймовірностей і перерізів перезарядки безпосередньо переноситься або просто узагальнюється на інші наближення теорії збурень першого порядку. Отримані тут результати можуть служити при цьому відправним пунктом. Ця обставина відкриває можливість для формулювання широкого кола моделей, що лежать в основі практичних розрахунків перерізів перезарядки у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях.

Висновок

В рамках напівкласичної ейкональної теорії досліджено процес кулоновської перезарядки голого або екранованого іона при зіткненні з легкими атомами. Потенціал поля, який діє на електрон, що здійснює перехід, з боку ядра і остова налітаючого багатозарядного іона, вибирається у вигляді екранованого кулонівського. Для обчислення ймовірностей і перерізів перезарядки, підсумованих за всіма кінцевими електронними станами, розвинений метод функцій Гріна. Отримано аналітичні вирази для ймовірностей і перерізів захоплення електрона з k -оболонки водневоподібного атома в довільну n' оболонку налітаючого голого і екранованого іона. На основі отриманих результатів виконані систематичні розрахунки перерізів захоплення електрона швидкими іонами C^{q+} і N^{q+} ($q=1,2,3$) при зіткненні їх з атомами водню. Ефекти екранування налітаючого іона впливають як на величину перерізів, так і на характер їх залежності від енергії зіткнення. Особливо сильно це проявляється в системах з малими значеннями зарядності налітаючого іона і великими значеннями енергії падаючих частинок.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Electron capture in high-energy ion-atom collisions // *Phys. Rep.* – 1979. – V.56. – №6. – P. 279-369.
2. Belkic Dz., Principles of quantum scattering theory. – Bristol and Philadelphia: Institute of Physics Publishing, 2004. – 392p.
3. Belkic Dz., Quantum theory of high-energy ion-atom collisions. – London: Taylor & Francis, 2009. – 416 p.
4. Belkic Dz., Mancev I., Hanssen J. Four body methods for high-energy ion-atom collisions // *Rev. Mod. Phys.* – 2008. – V.80. – P. 249-314.
5. 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. – P. 363-405.
6. Лендшел В.И., Лазур В.Ю., Карбованец М.И., Янев Р.К. Введение в теорию атомных столкновений. – Львов: Вища школа, 1989. – 192с.
7. Процеси одноелектронної перезарядки та перезарядки з одночасною іонізацією в рамках методу спотворених хвиль неперервного спектра: матеріали Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2017 (Ужгород, 23-26 травня 2017р.). – Ужгород: ІЕФ НАНУ, 2017. – 164 с.
8. Macek J., Alston S. Theory of electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion // *Phys. Rev. A.* – 1982. – V.26. – №1. – P. 250-271.
9. Горват П.П., Лазур В.Ю., Пресняков П.П., Усков Д.Б. Асимптотическое поведение амплитуды перезарядки // *ТМФ.* – 1992. – Т.91. – №1. – С. 66-82. [Gorvat P.P., Lazur V.Yu., Presnyakov L.P., Uskov D.B. Asymptotic behavior of charge-exchange amplitude // *TMP.* – 1992. – V.91. – №1. – P. 373-384.]
10. Горват П.П., Лазур В. Ю. Асимптотическое поведение амплитуды перезарядки при релятивистских скоростях и энергиях связи // *ТМФ.* – 1993. – Т.95. – №3. – PP.451-477. [Gorvat P.P., Lazur V.Yu. Asymptotic behavior of charge-exchange amplitude at relativistic velocities and binding energies // *TMP.* – 1993. – V.95. – №3. – P.708-724.]
11. The method of Green's functions in the Coulomb charge-exchange theory. – 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. – 124 с.
12. Janev R.K., Presnyakov L.P., Shevelko V.P. Physics of highly charged ions. – Heidelberg: Springer, Berlin, 1985. – 330p.
13. Janev R.K., Winter H. State-selective electron capture in atom-highly charged ion collisions // *Phys. Rep.* – 1985. – V.117. – №5. – P.265-387.
14. Goffe T.V., Shah M.B., Gilbody J. One-electron capture and loss by fast multiply charged boron and carbon ions in H and H₂ // *J. Phys. B.* – 1979. – V.12. – №22. – P.3769-3773.
15. Phaneuf R.A., Meyer F.W., McKnight R.H. Single-electron capture by multiply charged ions of carbon, nitrogen, and oxygen in atomic and molecular hydrogen // *Phys. Rev. A.* – 1978. – V.17. – №2. – P.534-545.
16. Burke P.G., Robb W.D. The R-matrix theory of atomic processes // *Adv. at. mol. phys.* – 1976. – V.11. – P.143-214.
17. Hostler L., Pratt R.K. Coulomb Green's functions in closed form // *Phys. Rev. Lett.* – 1963. – V.10. – №11. – P.469-470.
18. McDowell M.C.R., Coleman J.P. Introduction to the theory of ion-atom collisions. – Amsterdam: North Holland, 1970. – 442 p.
19. Eichler J., Chan F.T. Approach to electron capture into arbitrary principal shells of energetic projectiles // *Phys. Rev. A.* – 1979. – V.20. – №1. – P.104-112.

Стаття надійшла до редакції 17.07.2017

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

¹Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

²Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 14а
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В РЕАКЦИЯХ ОДНОЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ

В рамках полуклассической эйкональной теории развит метод функций Грина для вычисления вероятностей и сечений перезарядки, просуммированных по всем конечным электронным состояниям ионов, образующихся при одноэлектронном захвате. Исследовано влияние эффектов экранирования налетающего иона собственными электронами на величину сечения одноэлектронного захвата при быстрых ион-атомных столкновениях.

Ключевые слова: эйкональное приближение, функции Грина, одноэлектронная перезарядка, атом, ион.

PACS 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.41.85-93

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

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 THE REACTIONS OF A SINGLE-ELECTRON CHARGE-EXCHANGE

Purpose: Currently there is no unified theory of electron capture, describing all the variety of the single-electron capture processes. Our work is devoted to the theoretical study of the single-electron charge exchange process during collisions of multiply charged ions with atoms or molecules of the target.

Methods: To describe the single-electron charge exchange process we use semi-classical eikonal approximation, which takes into account the screening of the core of the incident multi-charged ion. Potential of the field affecting the transiting electron by the nucleus and the core of the incident multiply charged ion is selected as shielded Coulomb potential. The analytical expressions for the probability and electron capture cross sections from *K*-shell of a hydrogen atom in an arbitrary *n*'-shell of the bare and screened incident ion were obtained. The summation of the spectrum of degenerate finite states is carried out using the technique of the Coulomb Green's function.

Results: We explored the influence of the shielding effects of the incident ion by its own electrons on the cross section of single-electron capture in fast ion-atomic collisions. The effects of shielding of the incident ion affect both the value of cross-sections, and the nature of their dependence on the collision energy. Systematic calculations of the charge exchange cross sections for hydrogen atoms on C^{q+} , N^{q+} , O^{q+} ions ($q=1, 2, 3$) have been performed, and their comparison with experimental data has been carried out.

Conclusions: We note that the method of summation of probabilities and charge-exchange cross-section presented here is transferable directly, or simply be generalizable to other first order approximations of perturbation theory. The results obtained here can serve as a starting point in this case. This circumstance opens the

possibility for the formulation of a wide range of models, underlying the practical calculations of charge-exchange cross-section in high-energy ion-atomic collisions.

PACS NUMBER: 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp

REFERENCES

1. Belkic, Dz., Gayet, R., Salin, A. (1979), "Electron capture in high-energy ion-atom collisions", *Phys. Rep.*, V.56, No. 6, pp. 279-369.
2. Belkic, Dz. (2004), "Principles of quantum scattering theory", Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 392 p.
3. Belkic, Dz. (2009), "Quantum theory of high-energy ion-atom collisions", Taylor & Francis, London, 416 p.
4. Belkic, Dz., Mancev, I., Hanssen, J. (2008), "Four body methods for high-energy ion-atom collisions", *Rev. Mod. Phys.*, V. 80, pp. 249-314.
5. 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.
6. Lendyel, V.I., Lazur, V.Yu., Karbovanets, M.I., Janev, R.K. (1989), Introduction to the Theory of Atomic Collisions [Vvedeniie v teoriuu atomnykh stolknovenii], Vyshcha shkola, Lviv, 192 p.
7. Processes of single-electron charge-exchange and charge-exchange with simultaneous ionization in the framework of the Distorted wave method of a continuous spectrum [Protsesy odnoelektronnoi perezariadky ta perezariadky z odnochasnoiu ionizatsiieiu v ramkakh metodu spotvorennykh khvyl neperervnoho spektra]. – International Conference of young scientists and post-graduates IEP-2017 (Uzhhorod, 23-26 May 2017), IEFNANU, Uzhhorod, 2017, 164 p.
8. Macek, J., Alston, S. (1982), "Theory of electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion", *Phys. Rev. A*, V. 26, No. 1, pp. 250-271.
9. Gorvat, P.P., Lazur, V.Yu., Presnyakov, L.P., Uskov, D.B. (1992), "Asymptotic behavior of charge-exchange amplitude", *TMP*, V. 91, No. 1, pp. 373-384.
10. Gorvat, P.P., Lazur, V.Yu. (1993), "Asymptotic behavior of charge-exchange amplitude at relativistic velocities and binding energies", *TMP*, V. 95, No. 3, pp. 708-724.
11. The method of Green's functions in the Coulomb charge-exchange theory. – International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEUREKA-2017 (May 16-18, 2017, Lviv, Ukraine), LNU im. I.Franka, Lviv, 2017, 124 p.
12. Janev, R.K., Presnyakov, L.P., Shevelko, V.P. (1985), *Physics of highly charged ions*, Springer, Berlin, Heidelberg, 330 p.
13. Janev, R.K., Winter, H. (1985), "State-selective electron capture in atom-highly charged ion collisions", *Phys. Rep.*, V. 117, No. 5, pp. 265-387.
14. Goffe, T.V., Shah, M.B., Gilbody, J. (1979), "One-electron capture and loss by fast multiply charged boron and carbon ions in H and H₂", *J. Phys. B*, V. 12, No. 22, pp. 3769-3773.
15. Phaneuf, R.A., Meyer, F.W., McKnight, R.H. (1978), "Single-electron capture by multiply charged ions of carbon, nitrogen, and oxygen in atomic and molecular hydrogen", *Phys. Rev. A*, V. 17, No. 2, pp. 534-545.
16. Burke, P.G., Robb, W.D. (1976), "The R-matrix theory of atomic processes", *Adv. at. mol. phys.*, V. 11, pp. 143-214.
17. Hostler, L., Pratt, R.K. (1963), "Coulomb Green's functions in closed form", *Phys. Rev. Lett.*, V. 10, No. 11, pp. 469-470.
18. McDowell, M.C.R., Coleman, J.P. (1970), *Introduction to the theory of ion-atom collisions*, North Holland, Amsterdam, 442 p.
19. Eichler, J., Chan, F.T. (1979), "Approach to electron capture into arbitrary principal shells of energetic projectiles", *Phys. Rev. A*, V. 20, No. 1, pp. 104-112.