

3328/2 78

K-63

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



14/viii - 78

P4 - 11445

И.В.Комаров, Н.Ф.Трускова

АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ
ПЕРЕЗАРЯДКУ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ
НА АТОМАХ ВОДОРОДА

1978

P4 - 11445

И.В.Комаров, Н.Ф.Трускова

АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ
ПЕРЕЗАРЯДКУ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ
НА АТОМАХ ВОДОРОДА

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Комаров И.В., Трускова Н.Ф.

P4 - 11445

Анализ параметров, определяющих перезарядку многозарядных ионов на атомах водорода

С помощью комплекса программ, разработанных в ОИЯИ, посчитаны термы задачи двух кулоновских центров и неадиабатические матричные элементы, наиболее существенные для вычисления сечения реакции перезарядки ионов с зарядами $Z = 3, 4, 5$ на атомах водорода при энергиях соударения порядка нескольких кэВ. Проводится анализ полученных результатов и сравнение их с модельными. Приведены также параметры наиболее близких квазипересечений для $Z = 4 \div 28$.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Komarov I.V., Truskova N.F.

P4 - 11445

Analysis of Parameters Determining the Charge Transfer to Fully Stripped Ions from Hydrogen Atoms

The set of programmes developed in JINR are used to calculate the potential curves and the non-adiabatic coupling matrix elements of the two-centre problem in quantum mechanics. These are essential at calculating the cross sections of the reaction of ion recharge with $Z=3, 4, 5$ at hydrogen ions for collisions in a few keV energy range. The analysis of the results obtained and the comparison with the model ones are performed. The parameters of the nearest quasicrossings of potential curves for the charges $Z=4$ up to 28 are also given.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

В последние годы в связи с потребностями управляемого термоядерного синтеза резко возрос интерес к реакции перезарядки многозарядных ионов на атомах водорода



при энергиях соударения порядка нескольких кэВ. В этой области энергий скорость ядерного движения меньше скорости электрона, и для рассмотрения движения ядер можно использовать классические траектории.

Был выполнен ряд расчетов /1/, использующих различные модельные предположения о термах и волновых функциях одноэлектронной молекулы Zp_e , о неадиабатических матричных элементах /м.э./ и механизмах неадиабатических переходов, приводящих к перезарядке /1/. В то же время сейчас имеются эффективные алгоритмы вычисления термов и м.э. задачи двух кулоновских центров /2-5/, которые позволяют провести подробный численный анализ параметров реакции /1/. Такой анализ и является целью настоящей работы.

Термы задачи двух кулоновских центров $E_i = E_i(R)$ с зарядами $Z_1 = 1$, $Z_2 = Z = 3, 4, 5$ и наиболее существенные для вычисления сечения реакции /1/ неадиабатические м.э. радиальной Q_{ij}^+ и вращательной L_{ij} связей, а также м.э. $\hat{K}_{ii}^{(+)}$ - кинетической энергии ядерного движения /в обозначениях /3/ / вычислялись с помощью комплекса программ, разработанных в ОИЯИ /4,5/.

Программы написаны на языке ФОРТРАН /CDC-6500/.

В сферической системе координат, начало которой находится в середине отрезка, соединяющего ядра, необходимые м.э. имеют вид /3,5/ :

$$L_{ij} \equiv \langle i | L_x | j \rangle = \frac{1}{2} \int d\tau \phi_i \left[\pm \frac{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}}{(\xi^2-\eta^2)} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial}{\partial \eta} \right) - \frac{m_j \xi \eta}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} \right] \phi_j, \quad /2/$$

$$Q_{ij}^+ = - \int d\tau \phi_i \frac{\partial}{\partial R} \phi_j + \int d\tau \phi_i r \frac{\partial}{\partial r} \phi_j, \quad /3/$$

где

$$r \frac{\partial}{\partial r} \equiv \frac{1}{(\xi^2-\eta^2)} \left[\xi(\xi^2-1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right],$$

$$\begin{aligned} \hat{K}_{ii}^{(+)} = & \int d\tau \frac{\partial \phi_i}{\partial R} \frac{\partial \phi_i}{\partial R} - \frac{2}{R} \int d\tau \left(r \frac{\partial}{\partial r} \phi_i \right) \frac{\partial}{\partial R} \phi_i + \\ & + \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{(\xi^2-\eta^2)} (\xi^2+\eta^2-1) [(\xi^2-1) \frac{\partial \phi_i}{\partial \xi} \frac{\partial \phi_i}{\partial \xi} + \\ & + (1-\eta^2) \frac{\partial \phi_i}{\partial \eta} \frac{\partial \phi_i}{\partial \eta}] . \end{aligned} \quad /4/$$

Здесь R - расстояние между ядрами;

$$\phi_j e^{im_j \alpha} \equiv \Psi_j(\vec{r}) = N_j(R) \Pi_j(\xi; R) \Xi_j(\eta; R) \frac{e^{im_j \alpha}}{\sqrt{2\pi}}$$

- решения уравнения Шредингера с двухцентровым потенциалом /2-4/ ; $N_j(R)$ - нормировочный множитель, который выбирается так, чтобы

$$\int_{\Omega} d\Omega \Psi_i^* \Psi_j = \delta_{ij},$$

$$d\Omega = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\alpha \equiv \frac{R^3}{8} d\tau d\alpha, \quad /5/$$

$j = (N \ell m)$ - набор сферических квантовых чисел, соответствующий квантовым числам объединенного атома с зарядом $(Z_1 + Z_2)$. Система единиц $\hbar = m_e = e = 1$.

Используя коммутационные соотношения, выражения для м.э. Q_{ij}^+ и $\hat{K}_{ii}^{(+)}$ можно привести к более простому виду /5/ :

$$Q_{ij}^+ = - \frac{2}{R^2(E_i - E_j)} \int \frac{d\tau}{(\xi^2 - \eta^2)} \phi_i [(Z_1 + Z_2)\xi + (Z_2 - Z_1)\eta] \phi_j - \frac{(E_i - E_j)}{2R} \int d\tau \phi_i r^2 \phi_j, \quad /6/$$

$$\begin{aligned} \hat{K}_{ii}^{(+)} = & \int d\tau \frac{\partial \phi_i}{\partial R} \frac{\partial \phi_i}{\partial R} + \left(\frac{4E_i}{R^2} + \frac{E_i'}{R} \right) \int d\tau \phi_i^2 r^2 - \frac{3}{2R^2} + \\ & + \frac{6}{R^3} \int d\tau \phi_i^2 \frac{r^2}{(\xi^2 - \eta^2)} [(Z_1 + Z_2)\xi + (Z_2 - Z_1)\eta]; \\ E_i' \equiv & \frac{\partial E_i}{\partial R}; \quad r^2 \equiv \frac{R^2}{4} (\xi^2 + \eta^2 - 1). \end{aligned} \quad /7/$$

Вычисление м.э. Q_{ij}^+ , $\hat{K}_{ii}^{(+)}$ по формулам /6-7/ позволяет значительно сократить время счета этих м.э. Термы $E_i = E_i(R)$ вычислялись с помощью программы /4/. На рис. 1-3 приведены наиболее сильно взаимо-

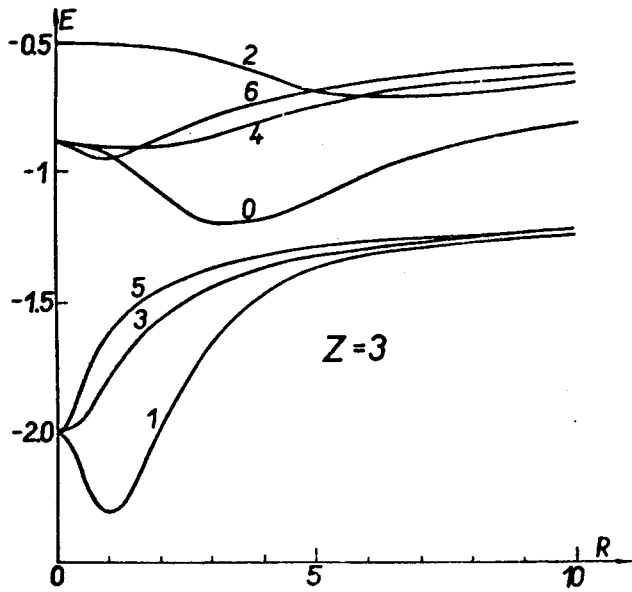


Рис. 1

действующие σ и π термы / более полные картины имеются в работах ^{2,3} /. Для краткости принята условная нумерация термов, связь которой с индексами объединенного и разъединенных атомов - $(N\ell m)$ и $[n_1 n_2 m]$ - приведена в табл. 1.

Таблица 1

Индексы объединенного $(N\ell m)$ и разъединенных $[n_1 n_2 m]$ атомов, соответствующие обозначениям рис. 1-11

i	Z=3	Z=4	Z=5
0	[1000] = (320)	[1000] = (430)	[1000] = (540)
1	[2010] = (210)	[3020] = (320)	[4030] = (430)
2	[3020] = (430)	[4030] = (540)	[5040] = (650)
3	[2001] = (211)	[3011] = (321)	[4121] = (431)
4	[3011] = (321)	[4021] = (431)	[5031] = (541)
5	[2100] = (200)	[3110] = (310)	
6	[3110] = (310)		

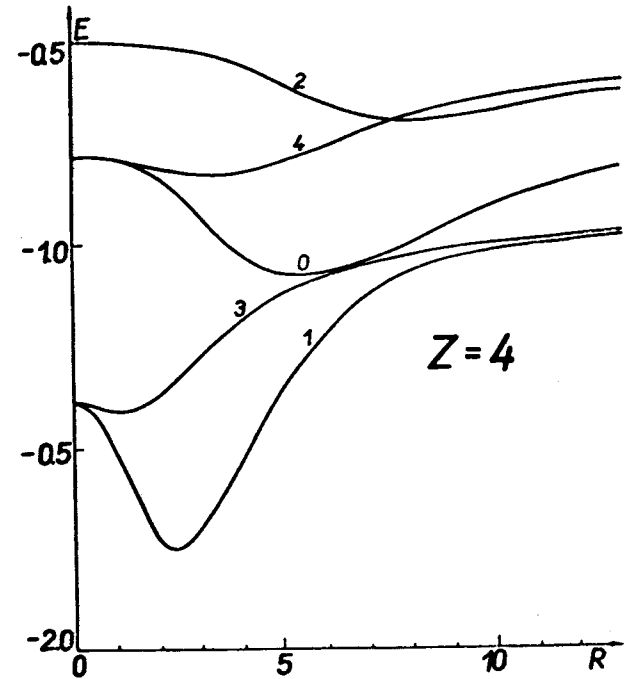


Рис. 2

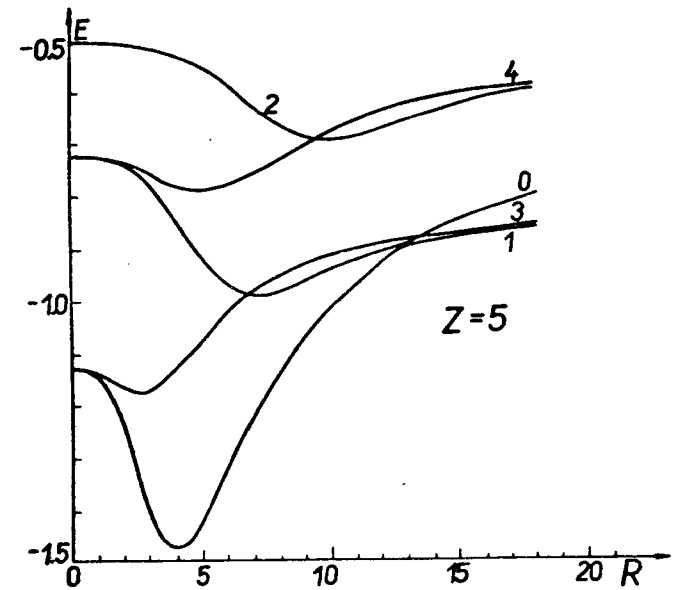


Рис. 3

Терм основного состояния атома водорода [1000] сильно сближается с термом [Z-1,0,Z-2,0] иона Ze. Если это сближение происходит в асимптотической при $R \rightarrow \infty$ области, то его называют квазипересечением, и для оценки минимальной разности $\Delta E(R_0)$ можно пользоваться аналитическими формулами ^{/2/}. Расстояния R, до которых разумно применять асимптотические оценки для терма [1000], ограничены неравенством

$$R \geq 2\sqrt{2Z}, \quad /8/$$

следующим из условия выхода уровня на барьер в угловом уравнении*. Согласно /8/, для Z=4,5 сближение указанных термов происходит в асимптотической области, а для Z=3 - за ее пределами.

М.э. Q_{ij}^+ были вычислены при $R = 0,5 \div 20$ ($i=[1000]$, $j=\sigma$ - термы иона с главным квантовым числом $n=Z$, $Z-1$, $Z-2$). В зависимости от j величины Q_{ij}^+ группируются следующим образом: максимален $|Q_{ij}^+|$ для $j = [Z-1,0, Z-2,0]$, с ним сравнимы по величине $|Q_{ij}^+|$ при $j = [Z,0, Z-1,0]$ и $j = [Z-2,0, Z-3,0]$. При одном и том же n величина $|Q_{ij}^+|$ падает примерно на порядок с увеличением n_1 на единицу.

На рис. 4-6 приведены наибольшие по величине м.э. Q_{ij}^+ . Наиболее сильная связь состояний [1000], [Z-1,0, Z-2,0]. Q_{ij}^+ при этом имеет вид колокола. С ростом Z м.э. Q_{ij}^+ значительно возрастают по абсолютной величине во всё более узкой области R. Поскольку часто переходы [1000] \rightarrow [Z-1,0, Z-2,0] считают по формуле Ландау-Зинера^{/6/}, представляет интерес сравнить получающиеся в этой модели $Q_{ЛЗ}^+$ с м.э. Q_{ij}^+ ($i=[1000]$, $j=[Z-1,0, Z-2,0]$), которые вычислены нами с помощью программы^{/5/}.

В адиабатическом базисе при $v=1$ имеем^{/6/}

$$Q_{ЛЗ}^+ = \frac{\Delta E \cdot \Delta F}{2[\Delta F(R-R_0) + (\Delta E)^2]}, \quad /9/$$

* Неравенство /8/ было получено Е.А.Соловьевым и одним из авторов /И.В.К/.

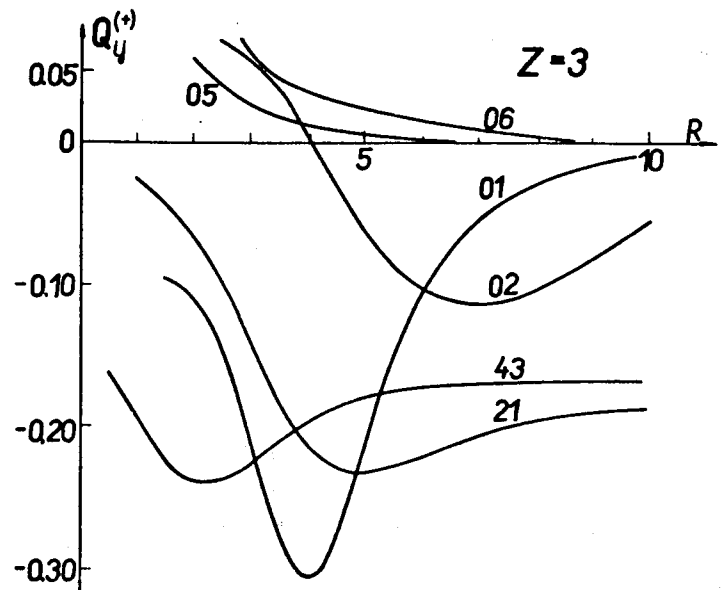


Рис. 4

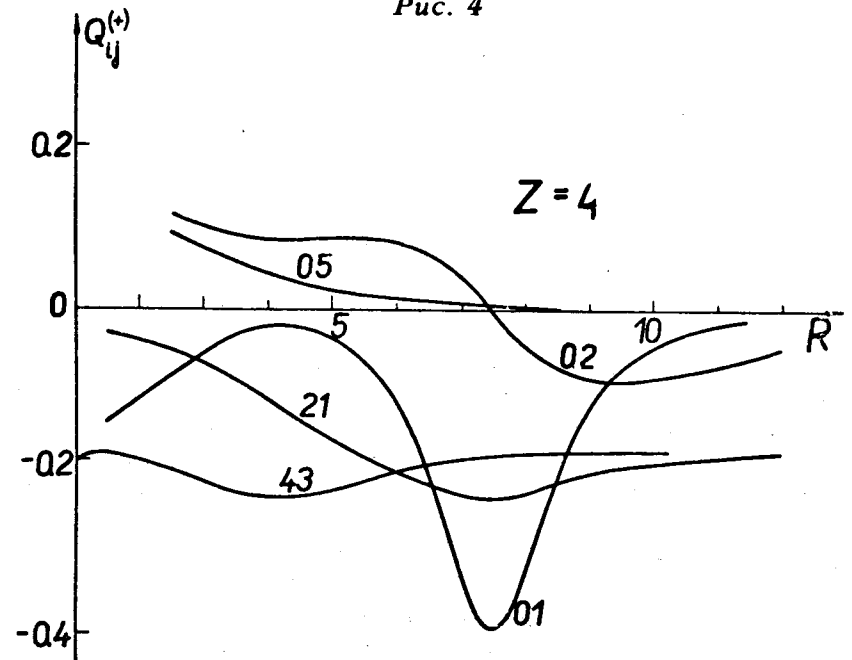


Рис. 5

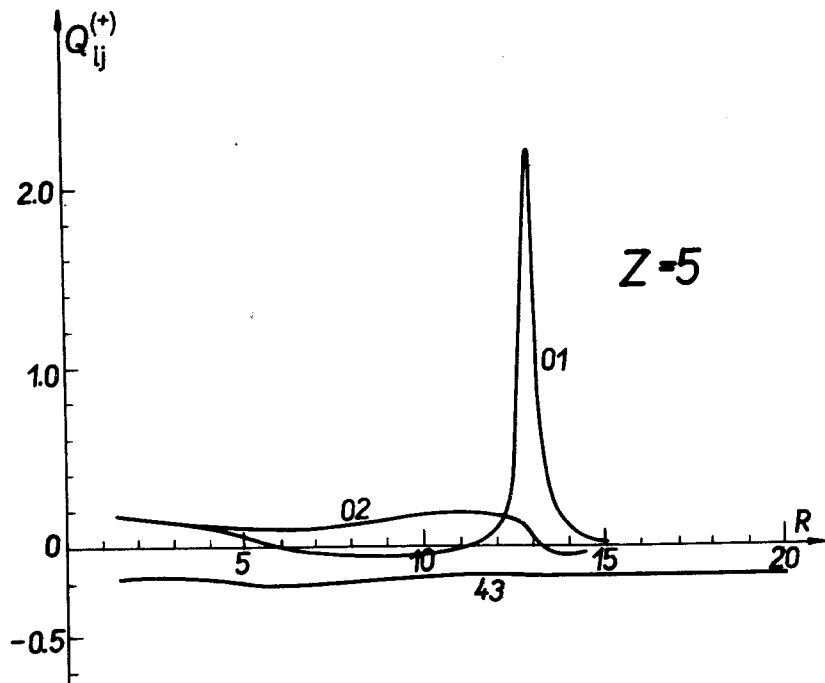


Рис. 6

где R_0 - точка пересечения адиабатических линейных термов, ΔF - разность их наклонов, ΔE - минимальная разность адиабатических термов. Формула /9/ получается из /9.10/ работы /6/ при подстановке в нее параметров модели Ландау-Зинера.

В табл. 2 проведено сравнение параметров формы реального и модельного Q_{ij}^+ при условии, что максимумы по положению и величине в этих м.э. выбраны одинаковыми. Разности $\Delta R_1 = R_1^2 - R_1^1$ и $\Delta R_2 = R_2^2 - R_2^1$ брались на половине и четверти высоты, соответственно, т.е.

$$Q_{ij}^+(R_1^{1,2}) = \left(\frac{1}{2} Q_{ij}^+\right)_{\max}, \quad Q_{ij}^+(R_2^{1,2}) = \left(\frac{1}{4} Q_{ij}^+\right)_{\max}. \text{ Как видно}$$

из рис. 4, для $Z=3$ ширина на $1/4(Q_{ij}^+)_{\max}$ смысла не имеет. Табл. 2 показывает, что с ростом Z реальные м.э. быстро приближаются к модельным. Это связано

Таблица 2

Сравнение параметров формы реального Q_{ij}^+ и модельного $Q_{ЛЗ}^+$ м.э. радиальной неадиабатической связи для квазипересекающихся состояний

Z	ΔR_1	$\Delta R_{1 \text{ ЛЗ}}$	ΔR_2	$\Delta R_{2 \text{ ЛЗ}}$
3	3,0	3,3	-	5,6
4	2,1	2,5	3,3	3,6
5	0,45	0,45	0,75	0,76

с тем, что точка квазипересечения с ростом Z удаляется от границы асимптотической области /8/. С уменьшением Z происходит как отклонение в поведении реального и модельного м.э., так и все более заметной становится радиальная связь между состояниями $i=[1000]$ и $j=[Z,0,Z-1,0],[Z-2,0,Z-3,0]$.

Перестройку волновой функции состояний [1000] и $[Z-1,0,Z-2,0]$ в области максимума соответствующего Q_{ij}^+ хорошо иллюстрируют диагональные м.э. кинетической энергии ядерного движения \hat{K}_{ii}^+ . При $R \rightarrow \infty$ асимптотическое значение $(\hat{K}_{ii}^+)_{as} = 1/2E$, где E - энергия связи соответствующего водородоподобного состояния. На рис. 7-8 для $Z=5$ видно, как при переходе через точку квазипересечения резко меняется предел, к которому стремится \hat{K}_{ii}^+ при $R \rightarrow \infty$. Для $Z=4$ такая перестройка происходит плавно, а для $Z=3$ практически незаметно.

М.э. вращательной связи L_{ij} вычислялись между σ и π состояниями при $N=Z, Z-1$. Для фиксированного N максимальна вращательная связь состояний с одинаковыми l . На рис. 9-11 представлены основные м.э. L_{ij} . В окрестности точек сближения термов $i_0=[1000] = (Z,Z-1,0)$, $i_1=[Z-1,0,Z-2,0] = (Z-1,Z-2,0)$ м.э. L_{ij} при одинаковом j и при $i=i_0, i_1$ меняют характер поведения, что ярче всего проявляется при $Z=5$ /рис. 11/.

Бейтс /7/ отметил, что если при квазипересечении двух термов имеются π -термы, параллельные одному

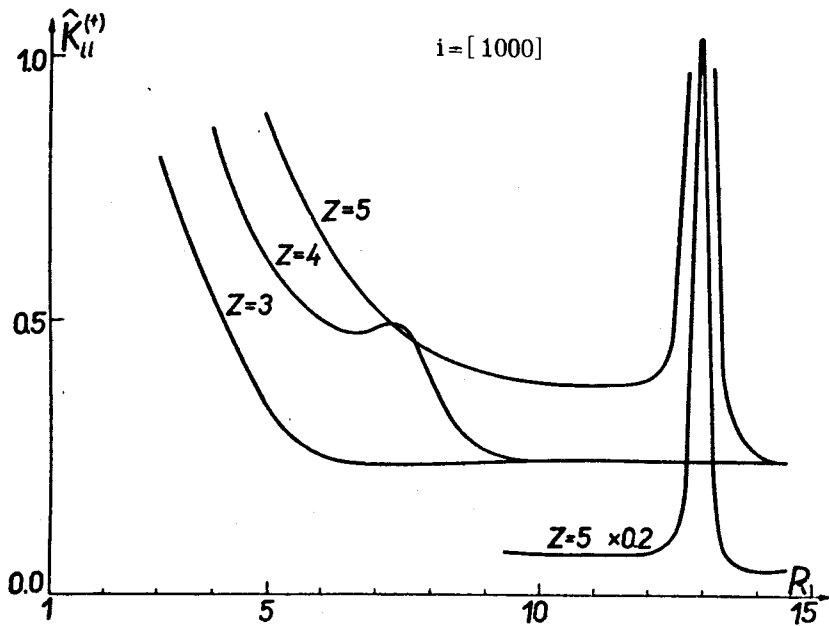


Рис. 7

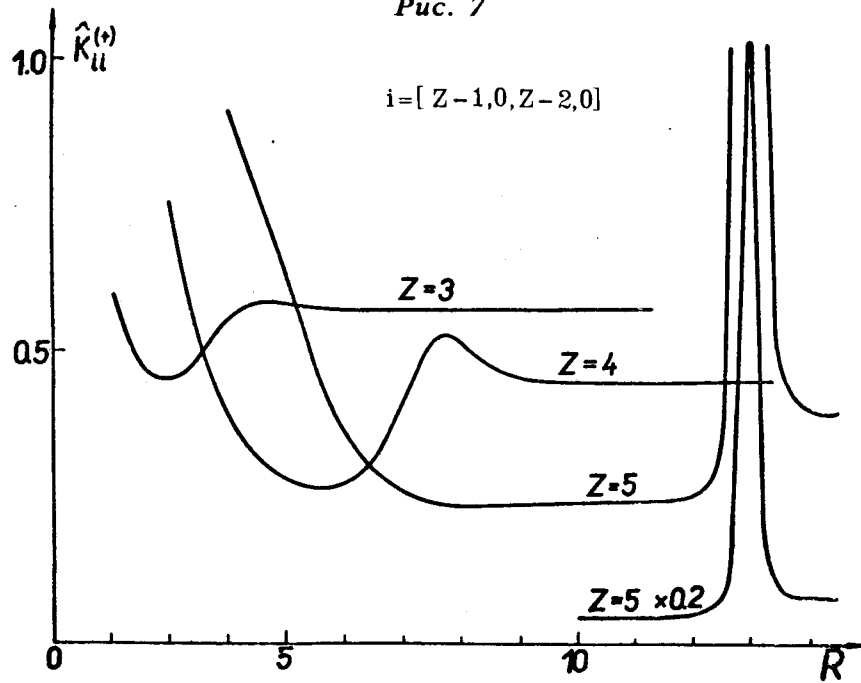


Рис. 8

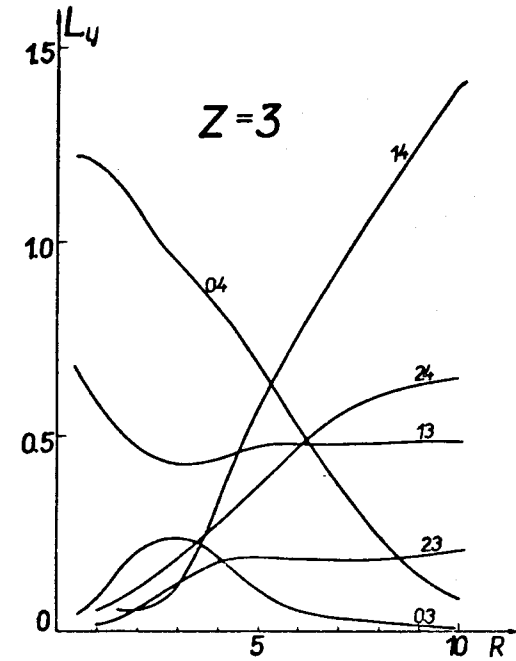


Рис. 9

из адиабатических термов, то возможно влияние вращательной связи на переход между квазипересекающимися термами. В уравнение для амплитуд вероятностей м.э. Q_{ij}^+ и L_{ij} входят в комбинации $vQ_{ij}^+ + wL_{ij}$, где v - радиальная скорость, а w - угловая скорость вращения межъядерной оси. Очевидно, что $w \sim v/R$. Сравнивая Q_{ij}^+ и L_{ij}/R , получаем, что вращательная связь может оказывать влияние на величину сечения перезарядки лишь для $Z=3$, т.е. за пределами неравенства /8/.

Проведенный анализ подтверждает предположение о том, что при $E \leq 10$ кэВ в области /8/ приближение Ландау-Зинера может дать хорошую оценку величины сечения реакции /1/. К аналогичному выводу пришли авторы работ /8,9/. Поскольку применение этого приближения требует знания координат точек квазипересечения

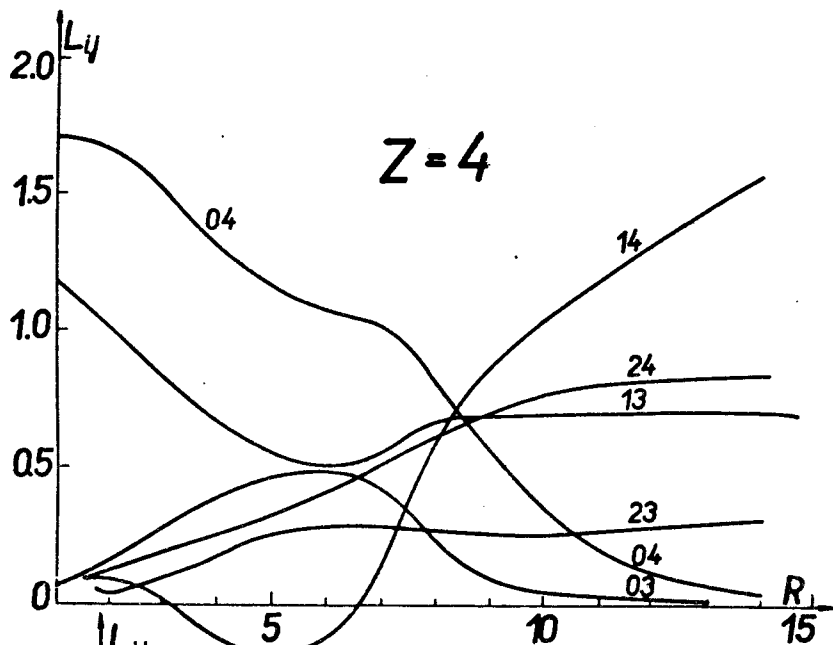


Рис. 10

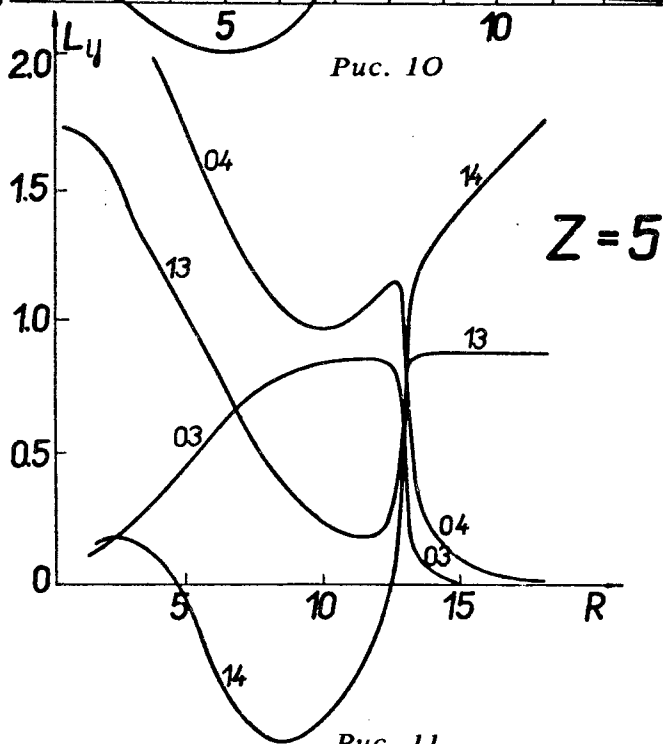


Рис. 11

Таблица 3

Положения квазипересечений R_i и минимальные разности ΔE_i для наиболее близких квазипересечений термов (N, ℓ, m) и (N', ℓ', m') . $Z_1=1, Z_2 = Z = 4 \div 28$.

Z	$(N, \ell, m) - (N', \ell', m')$	R_i	ΔE_i
4	(3,2,0) - (4,3,0)	7,761	-0,0694553
5	(4,3,0) - (5,4,0)	12,972	-0,0042579
6	(4,3,0) - (5,4,0)	8,081	-0,0988217
7	(5,4,0) - (6,5,0)	11,619	-0,0233951
8	(5,4,0) - (6,5,0)	8,929	-0,1006389
9	(6,5,0) - (7,6,0)	12,045	-0,0332029
10	(6,5,0) - (7,6,0)	9,947	-0,0926557
11	(7,6,0) - (8,7,0)	12,873	-0,0356082
12	(7,6,0) - (8,7,0)	11,049	-0,0618910
13	(8,7,0) - (9,8,0)	13,869	-0,0343158
14	(8,7,0) - (9,8,0)	12,199	-0,0709211
15	(8,7,0) - (9,8,0)	10,992	-0,1135014
16	(9,8,0) - (10,9,0)	13,363	-0,0606948
17	(9,8,0) - (10,9,0)	12,199	-0,0948536
18	(10,9,0) - (11,10,0)	14,592	-0,0515247
19	(10,9,0) - (11,10,0)	13,422	-0,0793322
20	(10,9,0) - (11,10,0)	14,470	-0,1096706
21	(11,10,0) - (12,11,0)	14,657	-0,0663382
22	(11,10,0) - (12,11,0)	13,697	-0,0916128
23	(12,11,0) - (13,12,0)	15,904	-0,0554168
24	(12,11,0) - (13,12,0)	14,934	-0,0765335
25	(12,11,0) - (13,12,0)	14,103	-0,0992668
26	(13,12,0) - (14,13,0)	16,161	-0,0639576
27	(13,12,0) - (14,13,0)	15,334	-0,0832042
28	(13,12,0) - (14,13,0)	14,590	-0,1036271

R_i и разности термов в этих точках ΔE_i , в данной работе вычислены и приведены в табл. 3 параметры наиболее близких квазипересечений для $Z = 4 \div 28$.

Авторы благодарны Т.П.Пузыниной и Л.И.Пономареву за сотрудничество и предоставленную возможность ознакомиться с результатами их вычислений для случая $Z = 5$.

Один из авторов /И.В.К./ благодарит Е.А.Соловьева за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пресняков Л.П., Уланцев А.Д. Квантовая электроника, 1974, 1, с. 2377.
Salop A., Olson R.E. *Phys.Rev.*, 1976, A13, p. 1312; 1976, A14, p. 579.
Чибисов М.И. Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, с. 56;
Bottcher C. *J.Phys.*, 1977, B10, L213.
2. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
3. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р-5040, Дубна, 1970.
4. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-10207, Дубна, 1976.
5. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-11218, Дубна, 1978.
6. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных реакций, ч. 1, НГУ, Новосибирск, 1970.
7. Bates D.R. *Proc.Roy.Soc.*, 1960, A257, p. 22.
8. Salop A., Olson R.E. *Phys.Rev.*, 1977, 16, p. 1811.
Harel C., Salin A. X ICPEAC, Abstracts of Papers, p. 536, Paris, 1976.
9. Vaaben J., Briggs J.S. *J.Phys.*, 1977, B10, L521.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 апреля 1978 года.