Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 4, с. 253 – 259 

# Осцилляции в сечениях одноэлектронной перезарядки при столкновениях положительных ионов с молекулой водорода

*Ф. Ф. Горяев*[1)]

*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 октября 2024 г.
После переработки 9 декабря 2024 г.
Принята к публикации 12 декабря 2024 г.

Рассмотрены осцилляции в сечениях одноэлектронной перезарядки быстрых положительных ионов, движущихся с нерелятивистскими скоростями, на молекуле водорода. Расчеты сечений перезарядки выполнены для ионов $H^+$ и $He^{2+}$ и основаны на представлении параметра удара в приближении Бринкмана–Крамерса с нормированными вероятностями захвата. Представлены результаты расчетов сечений как при фиксированных ориентациях молекулы водорода, так и сечений, усредненных по всем ориентациям молекулы, как функций энергии налетающих ионов. Приводится сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0370274X25020146, EDN: UOPDWM

**1. Введение.** Процесс захвата электрона быстрым ионом у молекулы водорода $H_2$ в реакции переноса заряда

$$X^{q+} + H_2 \to X^{(q-1)+} + H_2^+, \tag{1}$$

где $X^{q+}$ – налетающий ион с зарядом $q$, играет важную роль для ряда приложений в атомной и ядерной физике и физике плазмы. Сечения одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом требуются для определения времен жизни ионных пучков в ускорителях и накопительных кольцах, расчета равновесных распределений ионов по заряду при прохождении ионных пучков через газовые мишени, детектирования сверхтяжелых элементов (заряд $Z > 92$) с помощью газонаполненных сепараторов и др. (см., например, [1, 2] для деталей и дополнительных ссылок).

Для расчета сечений процессов, связанных с ион-молекулярными столкновениями, часто пользуются правилом аддитивности Брэгга [3], согласно которому эффективное сечение взаимодействия налетающей частицы с молекулой определяется как сумма сечений ее взаимодействия с составляющими молекулу атомами. Для большинства молекулярных мишеней такой подход оказывается достаточно удовлетворительным, тогда как в случае простейшей молекулы $H_2$ правило Брэгга нарушается (см., например, [4, 5]). В частности, в работах [4, 6] на основе экспериментальных данных было исследовано отношение сечений одноэлектронной перезарядки ионов с зарядами $q \geq 5$ на молекулярном и атомарном водороде

$$R = \sigma(H_2)/\sigma(H)\,, \tag{2}$$

где $\sigma(H_2)$ и $\sigma(H)$ – полные сечения перезарядки налетающего иона на молекуле $H_2$ и атоме H, соответственно. Используя найденные полуэмпирические формулы для сечений перезарядки, авторы работ [4, 6] получили представление отношения (2) в виде функции энергии столкновения, которое заметно отличалось от брэгговского значения $R = 2$ в широкой области энергий. При этом функция (2) была ограничена снизу при малых энергиях, монотонно росла в области промежуточных энергий и выходила на константу при больших энергиях: в [4] отношение (2) менялось в пределах $0.76 \leq R \leq 3.84$, а в [6] в пределах $0.77 \leq R \leq 3.04$.

Для сравнения с эмпирическими данными работ [4, 6] в недавней статье [7] отношение (2) было исследовано теоретически. Сечения перезарядки ионов на молекуле $H_2$ в [7] были получены с помощью метода, разработанного в [8], а сечения перезарядки на атоме H вычислялись с помощью программы CAPTURE [9]. Оба метода расчета сечений одноэлектронной перезарядки на атомарном [9] и молекулярном [8] водороде основаны на представлении параметра удара в приближении Бринкмана–Крамерса с многоканальной нормировкой для вероятностей перезарядки. Точность приближения, реализованного в программе CAPTURE, в случае резонасной перезарядки

$$H^+ + H \to H + H^+ \tag{3}$$

[1)]e-mail: goryaev_farid@mail.ru

для относительных скоростей $v \gtrsim 1$ (в атомных единицах) составляет $\approx 20$–$30\,\%$. Для реакции (1) в случае перезарядки быстрых ядер на молекуле $H_2$ согласие метода [8] с измерениями находится в среднем в пределах 20–50%. В области высоких энергий результаты расчетов [7] дают значение отношения $R \approx 2.82$, хорошо согласующееся с отношением $R = 3.04$ из [6]. Кроме того, в работе [7] наблюдались осцилляции рассчитанных отношений $R$, связанные с интерференцией при рассеянии налетающего иона на двух центрах молекулы $H_2$. Таких осцилляций не наблюдалось в отношениях (2), полученных в [4, 6].

В настоящей работе исследуются осцилляции в сечениях одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых положительных ионов с молекулярным водородом. В качестве налетающих ионов рассмотрены ядра водорода и гелия, $H^+$ и $He^{2+}$. Расчеты сечений как функций энергии столкновения выполнены с помощью метода, описанного в работах [8, 7]. Рассмотрено поведение сечений перезарядки как при различных фиксированных ориентациях молекулы $H_2$, так и усредненных по всем ориентациям молекулярной мишени.

В статье используются атомные единицы и рассматриваются нерелятивистские относительные скорости сталкивающихся частиц.

**2. Сечения одноэлектронной перезарядки.** Опишем кратко метод [8, 7], использованный в настоящей работе для расчета сечений одноэлектронной перезарядки. Для этого рассмотрим геометрию столкновения, соответствующую процессу (1), в которой ион налетает на покоящуюся молекулу $H_2$. Для быстрых столкновений можно не учитывать колебательно-вращательные движения молекулы и считать ориентацию молекулярной мишени фиксированной в течение столкновения. Два протона в молекуле разделены межъядерным расстоянием, связанным с вектором $\boldsymbol{\rho}$. Тогда ориентация молекулы $H_2$ определяется полярным и азимутальным углами $(\theta_\rho, \phi_\rho)$ этого вектора относительно оси $z$ вдоль скорости $\mathbf{v}$ налетающего иона. Положение захватываемого электрона характеризуется векторами $\mathbf{r_1}$ и $\mathbf{r'_1}$ относительно одного из протонов молекулы $H_2$ и налетающего иона соответственно, а положение остающегося электрона дается вектором $\mathbf{r_2}$ относительно второго протона.

В представлении параметра удара относительное движение налетающей частицы и мишени описывается прямолинейной траекторией с постоянной скоростью $\mathbf{v}$ и вектором параметра удара $\mathbf{b}$. В этом случае радиус-вектор налетающего иона относительно центра инерции (ЦИ) молекулы имеет вид $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$ $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{v} = 0)$, где значение $\mathbf{b} = 0$ в момент времени $t = 0$ соответствует прохождению иона через ЦИ молекулы.

Расчет сечений одноэлектронной перезарядки в представлении параметра удара основан на связи между квазиклассической $a(\mathbf{b}, v)$ и квантовомеханической $f(\mathbf{k}, v)$ амплитудами захвата [10] ($v$ – величина относительной скорости сталкивающихся частиц). Амплитуда вероятности перезарядки для процесса (1) определяется следующим выражением [7, 8]:

$$a(\mathbf{b}, v) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle \Psi_f | V_i | \Psi_i \rangle \,, \tag{4}$$

где $\Psi_i$ и $\Psi_f$ – волновые функции начального и конечного состояний полной системы сталкивающихся частиц; $V_i = V(r'_1)$ – потенциал так называемого "prior" взаимодействия между налетающим ионом и захватываемым электроном; $\omega = I_M - I_X$ – дефект резонанса реакции (1) ($I_M$ и $I_X$ – энергии связи захватываемого электрона в молекуле $H_2$ и образующемся ионе $X^{(q-1)+}$ соответственно). Матричный элемент в (4) имеет вид

$$\langle \Psi_f | V_i | \Psi_i \rangle = \tag{5}$$
$$= \int \Phi_I^*(\mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) u^*(\mathbf{r}'_1) V(r'_1) \Phi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{v}\mathbf{r}} d\mathbf{r} d\mathbf{r}_2,$$

где $\Phi_M$, $\Phi_I$ и $u(\mathbf{r_1}')$ – волновые функции молекулы $H_2$, молекулярного иона $H_2^+$ и иона $X^{(q-1)+}$ соответственно; $\mathbf{r}$ – вектор положения захватываемого электрона относительно начала координат, взятого в середине вектора $\mathbf{R}$, который связан с $\mathbf{r_1}$ и $\mathbf{r'_1}$ следующим образом:

$$\mathbf{r_1} = \mathbf{r} + \mathbf{R}/2 - \boldsymbol{\rho}/2 \,, \tag{6}$$

$$\mathbf{r'_1} = \mathbf{r} - \mathbf{R}/2 \,. \tag{7}$$

Волновые функции $\Phi_M$ и $\Phi_I$ в (5) имеют вид

$$\Phi_M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) =$$
$$= N_M\{u_m(r_1)u_m(r_2) + u_m(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|)u_m(|\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}|)$$
$$+ c\,[u_m(r_1)u_m(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|) + u_m(r_2)u_m(|\mathbf{r}_1 + \boldsymbol{\rho}|)]\} \,, \tag{8}$$

$$\Phi_I(\mathbf{r}_2, \boldsymbol{\rho}) = N_I^{\pm}\,[u_i(|\mathbf{r}_2 - \boldsymbol{\rho}|) \pm u_i(r_2)] \,, \tag{9}$$

где $u_m$ и $u_i$ – водородоподобные волновые функции основного состояния с эффективными зарядами $Z_M$ молекулы $H_2$ и $Z_I$ иона $H_2^+$ соответственно; $c$ – вариационный параметр; $N_M$ и $N_I^{\pm}$ – нормировочные множители (см., например, [11] для деталей). Знаки $(\pm)$ в (9) и далее обозначают четное ($^2\Sigma_g^+$, gerade) и нечетное ($^2\Sigma_u^+$, ungerade) основные состояния иона $H_2^+$, соответственно.

Делая замену переменных (6), (7) и интегрируя по переменным $\mathbf{r_2}$, $\mathbf{r}$ и $t$ в формулах (4) и (5), можно получить следующее общее выражение для амплитуды вероятности перезарядки:

$$a(\mathbf{b}, v) = N_t^{\pm} \left[ a(\mathbf{B}_-) e^{-ik_z \rho_z/2} \pm a(\mathbf{B}_+) e^{ik_z \rho_z/2} \right] , \tag{10}$$

$$a(\mathbf{B}_{\mp}) = \frac{1}{(2\pi)^2 \, v} \int\limits_P f(\mathbf{k}, v) \, e^{i\mathbf{k}_\perp \mathbf{B}_\mp} \, d^2\mathbf{k} \, , \tag{11}$$

$$f(\mathbf{k}, v) = \int V(r_1') \, u^*(\mathbf{r}_1') \, e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_1'} \, d\mathbf{r}_1' \int u_m(r_1) \, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_1} \, d\mathbf{r}_1 \, , \tag{12}$$

где $N_t^{\pm}$ – постоянный множитель (см., например, [8] для деталей); $k_z = v/2 - \omega/v$; $\rho_z = \rho \cos\theta_\rho$; $\mathbf{k}_\perp$ – поперечная компонента вектора $\mathbf{k}$. Векторы $\mathbf{B}_\mp = \mathbf{b} \mp \boldsymbol{\rho}_\perp/2$ характеризуют положение траектории налетающего иона относительно двух ядерных центров молекулы $H_2$ ($\boldsymbol{\rho}_\perp$ – поперечная компонента вектора $\boldsymbol{\rho}$). Интегрирование в (11) проводится по плоскости $P = \{\mathbf{kv} + \omega - v^2/2 = 0\}$.

С помощью уравнений (10) и (11) получаем вероятность перезарядки для реакции (1):

$$P(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v) = |a(\mathbf{b}, v)|^2 = \\ = (N_t^{\pm})^2 \left[ |a_1|^2 + |a_2|^2 \pm 2 a_1 a_2 \cos(k_z \rho_z) \right] , \tag{13}$$

$$a_1 = a(\mathbf{B}_-) \, , \quad a_2 = a(\mathbf{B}_+) \, .$$

Последний член в квадратных скобках в формуле (13) отвечает за интерференцию между амплитудами $a_1$ и $a_2$ при рассеянии на двух центрах в молекуле $H_2$. Интегрирование вероятности захвата (13) по полярным координатам $(b, \phi_b)$ вектора $\mathbf{b}$ дает дифференциальное сечение одноэлектронной перезарядки для фиксированной ориентации молекулы $H_2$:

$$\sigma(\theta_\rho, \phi_\rho) = 2 \int P(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v) \, d^2\mathbf{b} \, , \quad d^2\mathbf{b} = b \, db \, d\phi_b \, , \tag{14}$$

где множитель 2 соответствует возможности захвата любого из двух электронов молекулы. Следует заметить, что интегрирование по углу $\phi_b$ в выражении (14) убирает зависимость от азимутального угла $\phi_\rho$ и дает дифференциальное сечение $\sigma(\theta_\rho)$ как функцию только полярного угла $\theta_\rho$ (см., например, [8] для деталей). Наконец, сечение перезарядки, усредненное по всем ориентациям молекулы, вычисляется по формуле

$$\sigma(v) = \frac{1}{4\pi} \int \sigma(\theta_\rho, \phi_\rho) d\Omega_\rho \, , \tag{15}$$

где $d\Omega_\rho = \sin\theta_\rho \, d\theta_\rho \, d\phi_\rho$.

**3. Нормировка вероятностей перезарядки и полные сечения.** Так как выражение (10) для амплитуды вероятности перезарядки получено в первом порядке теории возмущений, в методе расчета используется процедура нормировки для вероятностей перезарядки (13) (см. [7, 8] для деталей). Нормировка позволяет избежать значительной переоценки вероятностей и сечений перезарядки, особенно в области относительно малых скоростей $v \lesssim \sqrt{2|\omega|}$. Нормированные вероятности перезарядки в состояние налетающего иона с главным квантовым числом $n$ для реакции (1) вычисляются по формуле

$$P_n^{(N)}(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v) = \frac{P_n(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v)}{1 + \sum\limits_{k=n_0}^{n_{\max}} P_k(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v)} \, , \tag{16}$$

где $P_k(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, v)$ – ненормированная вероятность одноэлектронной перезарядки (13) в состояние $k$ налетающего иона; $n_0$ – главное квантовое число, соответствующее нижней электронной оболочке иона $X^{(q-1)+}$; $n_{\max}$ – максимальное главное квантовое число, учитываемое в расчетах. Обычно $n_{\max} \approx 100{-}500$ в зависимости от заряда иона $q$: чем выше заряд $q$, тем больше состояний $n$ вносят вклад в вероятность захвата и соответсвующее сечение перезарядки.

Нормированные вероятности перезарядки (16) используются затем для вычисления как парциальных дифференциальных сечений $\sigma_n(\theta_\rho, v)$, так и усредненных по ориентациям молекулы парциальных сечений $\sigma_n(v)$ в соответствии с уравнениями (14) и (15). Тогда полные сечения перезарядки для фиксированной ориентации молекулы, $\sigma_{\rm tot}(\theta_\rho, v)$, и для усредненной по ее ориентациям, $\sigma_{\rm tot}(v)$, получаются суммированием по соответствующим парциальным сечениям:

$$\sigma_{\rm tot}(\theta_\rho, v) = \sum_{n=n_0}^{n_{\max}} \sigma_n(\theta_\rho, v) \, , \tag{17}$$

$$\sigma_{\rm tot}(v) = \sum_{n=n_0}^{n_{\max}} \sigma_n(v) \, . \tag{18}$$

**4. Результаты расчетов и обсуждение.** В расчетах вероятностей и сечений перезарядки использовались следующие значения параметров для волновых функций мишени $\Phi_M$ и $\Phi_I$ (см. формулы (8) и (9)): $c = 0.256$, $Z_M = 1.193$, $Z_I = 1.4$ (см., например, [7, 8, 11] для деталей). В соответствии с принципом Франка–Кондона, межъядерное расстояние в молекуле $H_2$ и ионе $H_2^+$ до и после столкновения бралось одинаковым и равным $\rho = 1.4$ ат. ед. Сечения одноэлектронной перезарядки вычислялись при относительных скоростях сталкивающихся частиц $v \gtrsim 1$ ат. ед.

Для более детального исследования осциллирующей структуры сечений перезарядки и сопоставления с экспериментальными данными в настоящей работе, наряду с абсолютными сечениями, рассматриваются относительные сечения, которые определяются как отношения сечений, вычисленных с учетом интерференционного члена и без него в формуле для вероятности перезарядки (13). В случае реакции

$$H^+ + H_2 \to H + H_2^+ \tag{19}$$

отношения сечений перезарядки в состояние $n = 1$ налетающего иона определяются как

$$R_1(\theta_\rho) = \sigma_1(\theta_\rho)/\sigma_1^{(0)}(\theta_\rho)\,, R_1 = \sigma_1/\sigma_1^{(0)}\,, \tag{20}$$

а для процесса

$$He^{2+} + H_2 \to He^+ + H_2^+ \tag{21}$$

отношения суммарных сечений электронного захвата в состояния $n = 1$ и $n = 2$ имеют вид

$$R_2(\theta_\rho) = (\sigma_1(\theta_\rho) + \sigma_2(\theta_\rho))/(\sigma_1^{(0)}(\theta_\rho) + \sigma_2^{(0)}(\theta_\rho)),$$
$$R_2 = (\sigma_1 + \sigma_2)/(\sigma_1^{(0)} + \sigma_2^{(0)}), \tag{22}$$

где $\sigma_i(\theta_\rho)$ и $\sigma_i^{(0)}(\theta_\rho)$ – парциальные дифференциальные сечения перезарядки в состояние $n = i$ налетающего иона (см. формулу (14)) с учетом и без учета интерференционного члена для вероятности захвата соответственно, а $\sigma_i$ и $\sigma_i^{(0)}$ – то же самое для парциальных сечений, усредненных по ориентациям молекулы (см. формулу (15)). Для реакции (21) добавлено сечение перезарядки в состояние $n = 2$, так как в процессах (1) существенный вклад вносит захват электрона в состояния с $n \approx q$. Наконец, отношения полных сечений перезарядки (см. формулы (17), (18)) записываются следующим образом:

$$R_{\rm tot}(\theta_\rho) = \sigma_{\rm tot}(\theta_\rho)/\sigma_{\rm tot}^{(0)}(\theta_\rho)\,, R_{\rm tot} = \sigma_{\rm tot}/\sigma_{\rm tot}^{(0)}\,, \tag{23}$$

где $\sigma_{\rm tot}^{(0)}(\theta_\rho)$ и $\sigma_{\rm tot}^{(0)}$ – соответствующие полные сечения без учета интерференции между амплитудами захвата.

На рисунке 1 представлены результаты расчетов относительных дифференциальных сечений $R_1(\theta_\rho)$ и $R_{\rm tot}(\theta_\rho)$ для процесса (19) как функций энергии налетающего иона при фиксированных ориентациях молекулярной оси, соответсвующих полярным углам $\theta_\rho = 0°$, $45°$ и $90°$. При $\theta_\rho = 0°$, когда ось молекулы $H_2$ параллельна вектору скорости $\mathbf{v}$ (рис. 1a), отношения дифференциальных сечений демонстрируют частые осцилляции с одинаковой амплитудой

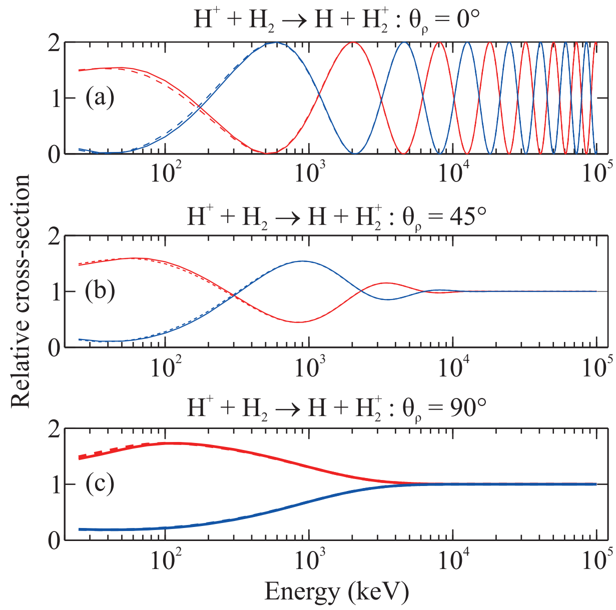


Рис. 1. (Цветной онлайн) Относительные дифференциальные сечения перезарядки при столкновениях ионов $H^+$ с молекулярным водородом для разных ориентаций молекулы $H_2$: (a) – $\theta_\rho = 0°$; (b) – $\theta_\rho = 45°$; (c) – $\theta_\rho = 90°$. Красные кривые относятся к четному, а синие – к нечетному состояниям иона $H_2^+$. Сплошные кривые соответствуют отношениям $R_{\rm tot}(\theta_\rho)$, а пунктирные кривые – отношениям $R_1(\theta_\rho)$ (см. текст)

во всей области рассматриваемых энергий. Эта особенность обусловлена разностью фаз $\delta = k_z\rho_z = k_z\rho$ в уравнении (13), которая имеет максимальное значение при $\theta_\rho = 0°$. Из рисунка 1a можно видеть, что при определенных скоростях столкновений, удовлетворяющих условиям $k_z\rho = (2n+1)\pi$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ для четного (gerade) состояния иона $H_2^+$ и $k_z\rho = 2n\pi$ для нечетного (ungerade), в относительных дифференциальных сечениях наблюдается деструктивная интерференция между амплитудами захвата $a_1$ и $a_2$. Для угла $\theta_\rho = 45°$ (рис. 1b) имеется несколько заметных максимумов и минимумов, которые уменьшаются по амплитуде с ростом энергии: два максимума и один минимум для четного состояния иона $H_2^+$, два минимума и один максимум для нечетного состояния $H_2^+$. Для энергий $E \gtrsim 10^4$ кэВ интерференция между амплитудами вероятности исчезает. При $\theta_\rho = 90°$ (межъядерная ось молекулы $H_2$ перпендикулярна вектору скорости $\mathbf{v}$, рис. 1c) осцилляций в дифференциальных сечениях нет: разность фаз $\delta = 0$ и интерференция между амплитудами захвата конструктивна при всех энергиях, практически исчезая при $E \gtrsim 5 \cdot 10^3$ кэВ. Различия между отношениями $R_1(\theta_\rho)$ и $R_{\rm tot}(\theta_\rho)$ незначительны для всех рассмотренных углов $\theta_\rho$.

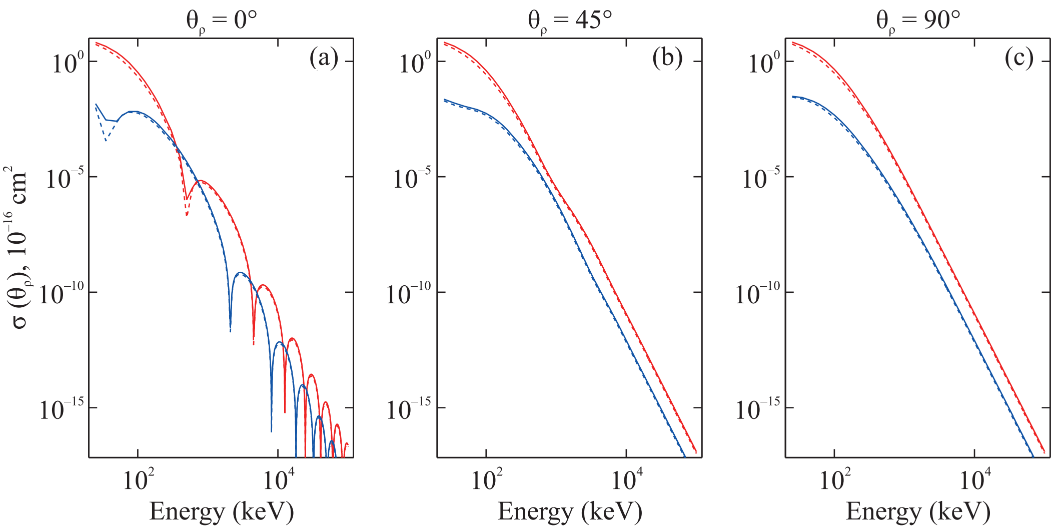


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки при столкновениях ионов $H^+$ с молекулярным водородом для разных ориентаций молекулы $H_2$: (a) – $\theta_\rho = 0°$; (b) – $\theta_\rho = 45°$; (c) – $\theta_\rho = 90°$. Сплошные кривые соответствуют полным сечениям перезарядки $\sigma_{\rm tot}(\theta_\rho)$ для фиксированной ориентации молекулы $H_2$, а пунктирные кривые – парциальным дифференциальным сечениям $\sigma_1(\theta_\rho)$ (см. текст). Обозначения для цвета кривых те же, что и на рис. 1

На рисунке 2 представлены абсолютные дифференциальные сечения одноэлектронной перезарядки $\sigma_1(\theta_\rho)$ и $\sigma_{\rm tot}(\theta_\rho)$, соответствующие процессу (19), как функции энергии столкновения для тех же полярных углов, что и на рис. 1. Из рисунка 2a видно, что для угла $\theta_\rho = 0°$ дифференциальные сечения перезарядки демонстрируют сильное осциллирующее поведение, аналогичное с поведением относительных сечений на рис. 1a. В то же время осцилляции в абсолютных сечениях перезарядки при $\theta_\rho = 45°$ (рис. 2b) не так заметны из-за малого их числа и широкой области изменения сечений. Вклад электронного захвата в состояния налетающего иона с $n \geq 2$ составляет $\approx 20-30\,\%$. Разница в сечениях между переходами в четное и нечетное состояния молекулярного иона $H_2^+$ достигает одного порядка величины и больше.

На рисунке 3 представлены результаты расчетов сечений одноэлектронной перезарядки для реакции (19), усредненных по ориентациям молекулы $H_2$, и их сравнение с экспериментальными данными [12–15]. Рисунок 3a демонстрирует относительные сечения $R_1$ и $R_{\rm tot}$ для переходов в четное (красные кривые) и нечетное (синие кривые) состояния иона $H_2^+$. Аналогичные данные для абсолютных сечений $\sigma_1$ и $\sigma_{\rm tot}$ приведены на рис. 3b. Так как данные эксперимента соответствуют полным сечениям перезарядки во все состояния налетающего иона, то для целей сравнения на рис. 3a (а также ниже на рис. 4a) измеренные сечения берутся по отношению к полному сечению без учета интерференции $\sigma_{\rm tot}^{(0)}$ для перехода в четное состояние иона $H_2^+$. Рисунок 3b демонстрирует в среднем хорошее согласие рассчитанных полных сечений с измерениями. Однако из-за широкого диапазона изменения сечений перезарядки в рассматриваемой области энергий практически ничего нельзя сказать об осцилляциях их величин. Из рисунка 3a видно, что осцилляции имеют место и в расчетах для относительных сечений, усредненных по ориентациям молекулы-мишени. Амплитуда осцилляций уменьшается с ростом энергии столкновения, постепенно исчезая для энергий $E > 10^4$ кэВ. В целом можно отметить удовлетворительную корреляцию между расчетами и измерениями на рис. 3a для больших энергий столкновения $E \gtrsim 400$ кэВ, воспроизводящую осцилляции сечений. Исключение составляют несколько точек: два измерения из [14, 15] при $E \approx 1.8 - 2 \cdot 10^3$ кэВ и одно измерение из [12] при $E \approx 3.3 \cdot 10^3$ кэВ.

На рисунке 4 представлены расчеты усредненных по ориентациям молекулы $H_2$ сечений одноэлектронной перезарядки для реакции (21) и их сравнение с измерениями [16–18]. Относительные сечения $R_2$ и $R_{\rm tot}$ приведены на рис. 4a, а абсолютные сечения $(\sigma_1 + \sigma_2)$ и $\sigma_{\rm tot}$ на рис. 4b. По поводу результатов расчета относительных и абсолютных сечений перезарядки на рис. 4 можно сделать те же замечания и выводы, что и в случае рис. 3. Что касается экспериментальных данных, то они для иона $He^{2+}$ не так многочисленны в области больших энергий. Тем не менее, следует отметить, что наиболее недавние измерения [18] хорошо согласуются с областью минимума рассчитанных относительных сече-

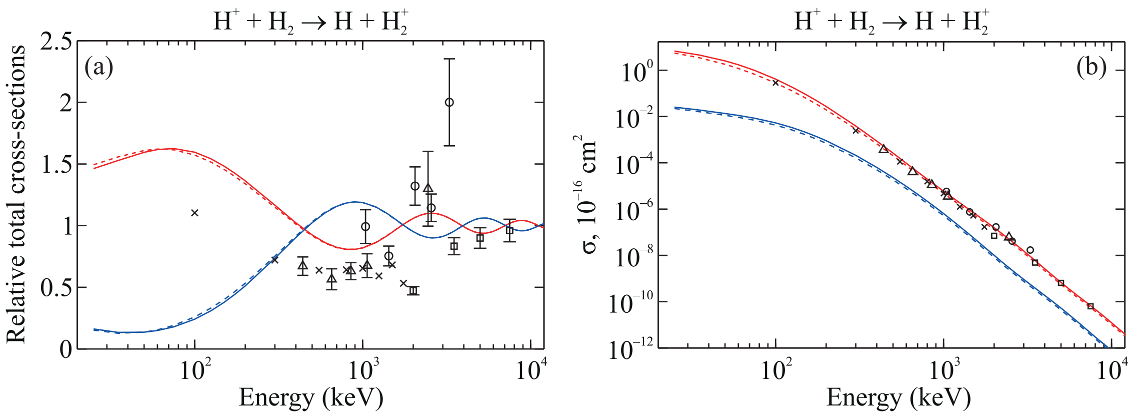


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки для столкновений иона $H^+$ с молекулой $H_2$, усредненные по ориентациям молекулы: (a) – относительные сечения; (b) – абсолютные сечения (см. текст). Расчеты: сплошные кривые – полные сечения, просуммированные по конечным состояниям $n$ налетающего иона; пунктирные кривые – парциальные сечения перезарядки в состояние $n = 1$. Цвет кривых соответствует четному (красные кривые) и нечетному (синие кривые) состояниям иона $H_2^+$. Эксперимент: кружки – [12]; треугольники – [13]; крестики – [14]; квадратики – [15]

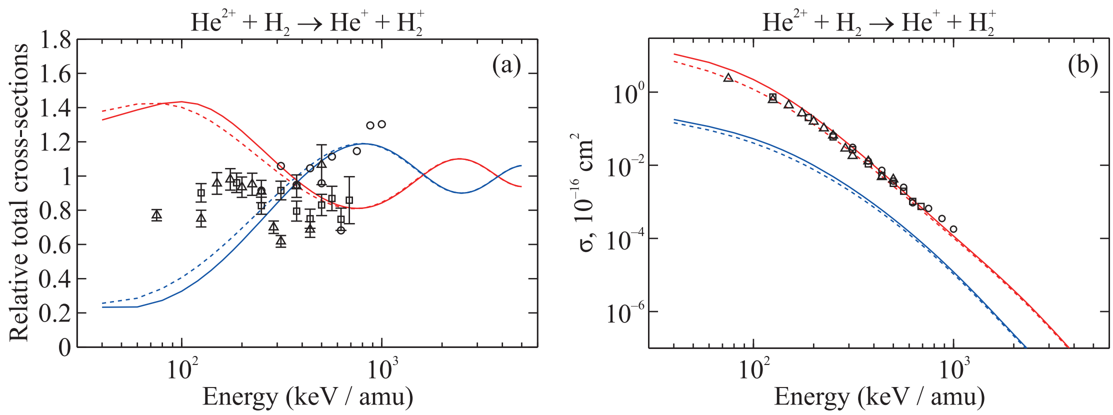


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечения перезарядки для столкновений иона $He^{2+}$ с молекулой $H_2$, усредненные по ориентациям молекулы: (a) – относительные сечения; (b) – абсолютные сечения. Расчеты: сплошные кривые – полные сечения, просуммированные по конечным состояниям $n$ налетающего иона; пунктирные кривые – сумма парциальных сечений перезарядки в состояния $n = 1$ и $n = 2$ (см. текст). Цвет кривых: то же, что и на рис. 3. Эксперимент: кружки – [16]; треугольники – [17]; квадратики – [18]. Аббревиатура в подписях к рисункам по горизонтали “amu” – atomic mass unit

ний (рис. 4a) при энергиях $\gtrsim 300$ кэВ/н (аббревиатура “н” – нуклон).

**5. Заключение.** В настоящей работе исследованы осцилляции в сечениях одноэлектронной перезарядки при столкновениях быстрых положительных ионов, движущихся с нерелятивистскими скоростями, с молекулярным водородом. Приведены численные расчеты сечений перезарядки ионов $H^+$ и $He^{2+}$ на молекуле $H_2$, выполненные в представлении параметра удара с нормированными вероятностями электронного захвата. Рассмотрено поведение как дифференциальных сечений при фиксированных ориентациях молекулы $H_2$, так и сечений, усредненных по всем ориентациям молекулярной мишени, как функций энергии столкновения. Показано, что частота и амплитуда осцилляций в дифференциальных сечениях перезарядки зависят от угла $\theta_\rho$ между осью молекулы и относительной скоростью столкновения $\mathbf{v}$. При $\theta_\rho = 0^\circ$ дифференциальные сечения осциллируют с постоянной амплитудой во всей рассматриваемой области энергий столкновения. С увеличением угла $\theta_\rho$ число осцилляций падает, а их амплитуда постепенно уменьшается с ростом энергии столкновения. При $\theta_\rho = 90^\circ$ осцилляций уже нет: интерференция между амплитудами электронного захвата $a_1$ и $a_2$ при рассеянии на двух ядерных центрах молекулы $H_2$ полностью конструктивна и постепенно исчезает при достаточно больших энергиях.

Показано, что сечения одноэлектронной перезарядки, усредненные по всем ориентациям молекулы $H_2$, также осциллируют как функции энергии столкновения. Амплитуда осцилляций уменьшается с ростом энергии и стремится к значению, получающемуся без учета интерференции между амплитудами вероятности электронного захвата. Представлено сравнение рассчитанных сечений перезарядки с имеющимися экспериментальными данными. Для иона $H^+$ имеется в целом хорошее согласие между расчетом и экспериментом, указывающее на наличие осцилляций в сечениях перезарядки и возможность их измерения. В случае иона $He^{2+}$ экспериментальных данных не так много, чтобы можно было сделать надежные выводы об осцилляциях в сечениях. Тем не менее, недавние измерения для этого иона имеют хорошее согласие с численными расчетами для энергий $\gtrsim 300$ кэВ/н.

В конце следует заметить, что результаты настоящей работы могли бы стимулировать прецизионные измерения в исследованиях процессов перезарядки при столкновениях положительных ионов с молекулярным водородом, что актуально для ряда проблем в атомной и ядерной физике и физике плазмы.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

**Конфликт интересов.** Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. I. Tolstikhina, M. Imai, N. Winckler, and V. Shevelko, *Basic Atomic Interactions of Accelerated Heavy Ions in Matter: Atomic Interactions of Heavy Ions*, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Springer-Verlag GmbH (2018), v. 98.
2. Y. T. Oganessian and V. K. Utyonkov, Rep. Progr. Phys. **78**, 036301 (2015).
3. W. H. Bragg and R. Kleeman, Phil. Mag. **10** (57), 318 (1905).
4. H. Knudsen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund, Phys. Rev. A **24**, 2287 (1981).
5. R. L. Watson, Y. Peng, V. Horvat, G. J. Kim, and R. E. Olson, Phys. Rev. A **67**(2), 022706 (2003).
6. Y. Nakai, T. Shirai, T. Tabata, and R. Ito, Phys. Scr. **T28**, 77 (1989).
7. F. F. Goryaev, I. Yu. Tolstikhina, and V. P. Shevelko, Nucl. Instrum. Methods B **549**, 165268 (2024).
8. Ф. Ф. Горяев, ЖЭТФ **164**, 349 (2023) [F. F. Goryaev, JETP **137**(3), 302 (2023)].
9. V. P. Shevelko, O. Rosmej, H. Tawara, and I. Yu. Tolstikhina, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 201 (2004).
10. V. P. Shevelko, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **13**, L319 (1980).
11. T. F. Tuan and E. Gerjuoy, Phys. Rev. **117**, 756 (1960).
12. U. Schryber, Helv. Phys. Acta **40**, 1023 (1967).
13. L. M. Welsh, K. H. Berkner, S. N. Kaplan, and R. V. Pyle, Phys. Rev. **158**, 85 (1967).
14. L. H. Toburen, M. Y. Nakai, and R. A. Langley, Phys. Rev. **171**, 114 (1968).
15. W. Schwab, G. B. Baptista, E. Justiniano, R. Schuch, and H. Vogt, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **20**, 2825 (1987).
16. P. Hvelplund, J. Heinemeier, E. H. Pedersen, F. R. Simpson, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **9**, 491 (1976).
17. P. Hvelplund and A. Andersen, Phys. Scr. **26**, 375 (1982).
18. M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, A. C. Santos, V. L. de Jesus, M. B. Shah, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, H. F. Busnengo, S. E. Corchs, R. D. Rivarola, and L. Gulyas, Phys. Rev. A **61**, 052717 (2000).