



UNIVERZITET U NIŠU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU

Nenad Lj. Milojević

**Preraspodelni procesi u brzim jon-atomskim
sudarima**

Doktorska disertacija

Niš, 2013.



UNIVERSITY OF NIŠ
FACULTY OF SCIENCES AND MATHEMATICS
DEPARTMENT OF PHYSICS

Nenad Lj. Milojević

**Rearrangement processes in fast ion-atom
collisions**

PhD thesis

Niš, 2013.



ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ

КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

Редни број, РБР :	
Идентификациони број, ИБР :	
Тип документације, ТД :	монографска
Тип записа, ТЗ :	текстуални / графички
Врста рада, ВР :	докторска дисертација
Аутор, АУ :	Ненад Љ. Милојевић
Ментор, МН :	Иван Манчев
Наслов рада, НР :	ПРЕРАСПОДЕЛНИ ПРОЦЕСИ У БРЗИМ ЈОН-АТОМСКИМ СУДАРИМА
Језик публикације, ЈП :	српски
Језик извода, ЈИ :	енглески
Земља публикавања, ЗП :	Србија
Уже географско подручје, УГП :	Србија
Година, ГО :	2013.
Издавач, ИЗ :	ауторски репринт
Место и адреса, МА :	Ниш, Вишеградска 33.
Физички опис рада, ФО : (поглавља/страна/ цитата/табела/слика/графика/прилога)	3 поглавља, 114 страна, 180 цитата, 13 табела, 4 слике, 31 график, 4 прилога
Научна област, НО :	физика
Научна дисциплина, НД :	атомска физика
Предметна одредница/Кључне речи, ПО :	Судари, ефикасни пресеци, амплитуда прелаза, измена наелектрисања
УДК	539.186: 530.145
Чува се, ЧУ :	библиотека
Важна напомена, ВН :	
Извод, ИЗ :	Парцијални и тотални ефикасни пресеци за једноструки електронски захват у брзим сударима потпуно огољених пројектила са хелијуму сличним метама су испитани помоћу четворочестичне гранично коректне прве Born-ове апроксимације (CB1-4B). У презентованом раду је спроведена обимна аналитичка студија о post и prior амплитуди прелаза за електронски захват у произвољна финална стања пројектила. Посебан акценат је стављен на одговарајуће укључивање динамичких електрон-електрон корелационих ефеката. У ту сврху је искоришћена post форма CB1-4B апроксимације. Квантно-механичка амплитуда прелаза за симетричне и асиметричне сударе се своди на дводимензионалну (prior форма) или петодимензионалну (post форма) нумеричку квадратуру по реалним варијаблама. Детаљна поређења са расположивим мерењима су представљена у циљу даље процене валидности и корисности CB1-4B апроксимације у различитим применама од фузионих истраживања до радиотерапије.
Датум прихватања теме, ДП :	28.01.2013.
Датум одбране, ДО :	
Чланови комисије, КО :	Председник: Члан: Члан: Члан, ментор:



ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number, ANO :	
Identification number, INO :	
Document type, DT :	monograph
Type of record, TR :	textual / graphic
Contents code, CC :	doctoral dissertation
Author, AU :	Nenad Lj. Milojević
Mentor, MN :	Ivan Mančev
Title, TI :	Rearrangement processes in fast ion-atom collisions
Language of text, LT :	Serbian
Language of abstract, LA :	English
Country of publication, CP :	Serbia
Locality of publication, LP :	Serbia
Publication year, PY :	2013.
Publisher, PB :	author's reprint
Publication place, PP :	Niš, Višegradaska 33.
Physical description, PD : (chapters/pages/ref./tables/pictures/graphs/appendices)	3 chapters, 114 pages, 180 references, 13 tables, 4 pictures, 31 graphs, 4 appendices
Scientific field, SF :	physics
Scientific discipline, SD :	atomic physics
Subject/Key words, S/KW :	Collisions, cross sections, transition amplitude, charge exchange
UC	539.186: 530.145
Holding data, HD :	library
Note, N :	
Abstract, AB :	State-selective and total single-electron capture cross sections in fast collisions of a bare projectile with a heliumlike target are examined by means of four-body boundary-corrected first Born approximation (CB1-4B). In the present work an extensive analytical study of the post and prior transition amplitude for electron capture into the arbitrary final states of the projectile is carried out. A special emphasis is given to a proper inclusion of dynamic electron-electron correlation effects. For this purpose, the post form of the CB1-4B approximation is utilized. The quantum-mechanical transition amplitude for both symmetric and asymmetric collisions is derived in terms of a two-dimensional (prior form) or a five-dimensional (post form) numerical quadrature over real variables. Detailed comparisons with the available measurements are reported with the purpose of further assessing the validity and utility of the CB1-4B approximation in various applications ranging from fusion research to radiotherapy.
Accepted by the Scientific Board on, ASB :	28.01.2013.
Defended on, DE :	
Defended Board, DB :	President:
	Member:
	Member:
	Member, Mentor:

Zahvaljujem se mentoru, prof. dr Ivanu Mančevu na korisnim savetima i velikoj pomoći u toku izrade ove disertacije.

Zahvaljujem se svojoj porodici i prijateljima na razumevanju i podršci tokom svih ovih godina.

Sadržaj

Uvod	1
1 Opšta razmatranja	5
1.1 Osnovni pojmovi	5
1.1.1 Ulazni kanal	7
1.1.2 Izlazni kanal	10
1.2 Vremenski zavisna teorija rasejanja	12
1.3 Vremenski nezavisna teorija rasejanja	17
1.4 Born-ov perturbacioni razvoj	20
2 Totalni efikasni preseći	23
2.1 Prva Born-ova aproksimacija u prior formi	23
2.1.1 Analitičko sredjivanje amplitude prelaza koja uključuje proizvoljna finalna pobudjena stanja formiranog vodoniku sličnog atomskog sistema	24
2.1.2 Skaliranje i priprema za numeričku integraciju	31
2.2 Elektronski zahvat u proizvoljna stanja	35
2.2.1 Zahvat elektrona u sudaru H^+ sa $He(1s^2)$	36
2.2.2 Zahvat elektrona u sudaru He^{2+} sa $He(1s^2)$	42
2.2.3 Zahvat elektrona u sudaru Li^{3+} sa $He(1s^2)$	47
2.2.4 Zahvat elektrona u sudaru Be^{4+} sa $He(1s^2)$	49
2.2.5 Zahvat elektrona u sudaru B^{5+} sa $He(1s^2)$	51
2.2.6 Zahvat elektrona u sudaru C^{6+} sa $He(1s^2)$	54
2.2.7 Uzajamna neutralizacija u procesu $H^+ + H^-$ sudara	57
2.3 Prva Born-ova aproksimacija u post formi	65
2.3.1 Skaliranje i priprema za numeričku integraciju	71
2.3.2 Elektronski zahvat u proizvoljna stanja $H(n^f l^f m^f)$ u sudaru H^+ sa $He(1s^2)$	75
3 Diferencijalni efikasni preseći	91
3.1 Jednostruki elektronski zahvat	91
Zaključak	94
Prilog A	102
Prilog B	105
Prilog C	106
Prilog D	107
Literatura	108

Uvod

Sam pojam sudara podrazumeva interakciju izmedju najmanje dva podsistema (elementarnih čestica, atoma i molekula ili njihovih jona), koji nisu u medjusobno vezanom stanju ali su sastavni delovi ukupnog sistema, od kojih jedan predstavlja projektil a drugi metu. Nekada se pravila terminološka razlika izmedju pojmova rasejanja (pod kojim se podrazumevaju isključivo jednokanalni problemi) i sudara (koji se odnosio na višekanalne izlaze). Ta samo formalna razlika danas se potpuno izgubila, tako da se ovi pojmovi upotrebljavaju kao sinonimi.

Problematika sudarnih procesa okupira veliki deo istraživačke tematike i aktivnosti u oblasti teorijske atomske i molekularne fizike. Ovi procesi su od suštinske važnosti kako u fizici (nuklearna fizika, fizika plazme, fizika čvrstog stanja, fizika elementarnih čestica, ...) tako i u drugim granama kao što su medicina, biofizika, astrofizika, kvantna hemija, mikrobiologija itd.

U ovoj doktorskoj disertaciji razmotreni su preraspodelni procesi u brzim jon-atomskim sudarima. Akcenat disertacije se odnosi na četvoročestičnu prvu Born-ovu aproksimaciju sa korektnim graničnim uslovima za jednostruki elektronski zahvat. Ovde se pojam brz odnosi na inicijalnu brzinu (relativna brzina projektila u odnosu na metu) datog projektila i znači da ta brzina premašuje Bohr-ovu brzinu elektrona mete na datoj orbiti sa koje se vrši prelaz iz početnog u finalno stanje. Tipična energija je 25 keV/amu, što odgovara brzini od $v = 1$ a.u. za elektron u osnovnom stanju atoma vodonika. U odnosu na tu referentnu energiju obično se interval od 25-400 keV/amu smatra intervalom srednjih energija, dok se energije iznad 400 keV/amu tretiraju kao visoke. U disertaciji su dakle razmatrane srednje i visoke ali nerelativističke energije.

U prvoj glavi data su opšta razmatranja. Izlistani su svi mogući jednoelektronski i dvoelektronski procesi u $Z_P - (Z_T; e_1, e_2)$ sudarima. Takodje su definisani osnovni principi teorije rasejanja koji podrazumevaju korektno granično ponašanje, kratkodometne perturbacije i korektnu usaglašenost izmedju ovih perturbacija i asimptotskih formi talasanih funkcija sistema u ulaznom i izlaznom kanalu. Analizirani su ulazni i izlazni kanali u slučaju jednostrukog elektronskog zahvata u sistemu centra mase mete, gde su uvedeni kratkodometni potencijali i njima odgovarajuće granično korektne talasne funkcije. Takodje je razmotrena vremenski zavisna teorija rasejanja, sa vremenskim zavisnim Green-ovim operatorima pomoću kojih su dobijene vremenski zavisne integralne jednačine za talasne funkcije $\Psi_i^+(t)$ i $\Psi_f^-(t)$. Vremenski nezavisna teorija rasejanja je dobijena primenom Fourier-ovih transformacija iz vremenski zavisne teorije. Lippman-Schwinger-ove integralne jednačine za Ψ_i^+ i Ψ_f^- su takodje dobijene pomoću Fourier-ovih transformacija iz odgovarajućih vremenski zavisnih integralnih jednačina. Zamenom formalnih rešenja Lippman-Schwinger-ovih jednačina u odgovarajuću prior i post formu amplitude prelaza, T_{if}^- i T_{if}^+ respektivno, dobijen je Born-ov perturbacioni razvoj sa korektnim graničnim uslovima takodje u prior i post formi. Prvi član u ovom razvoju predstavlja amplitudu prelaza u prvoj Born-ovoj aproksimaciji sa korektnim graničnim uslovima (CB1-4B aproksimacija) i to u prior i post formi respektivno.

U drugoj glavi predstavljena su naša teorijska istraživanja procesa jednostrukog elektronskog zahvata u proizvoljna $n^f l^f m^f$ stanja novonastalog vodoniku sličnog $(Z_P; e_1)$ sistema u tipičnom $Z_P - (Z_T; e_1, e_2)$ sudaru koja su uradjena pomoću četvoročestične granično korektne prve Born-ove (CB1-4B) aproksimacije u prior i post formi. CB1-4B metod je potpun kvantno-mehanički četvoročestični formalizam, jer eksplicitno razmatra svaku pojedinačnu česticu i sve

interakcije medju njima u sudaru koji je istraživao. Ova aproksimacija strogo čuva korektne granične uslove u oba sudarna kanala. Dobro je poznato da su granični uslovi ili ekvivalentno asimptotski konvergencioni problem [1]–[4], od suštinskog značaja za atomske sudare kad god su konstituenti sudara u asimptotskim kanalima. Ovaj zaključak je postignut u strogo formalnoj teoriji rasejanja (videti [4] i reference u njoj). Generalno, korektni Coulomb-ovi granični uslovi se sastoje od istovremenog zahteva za korektnim asimptotskim ponašanjem svih talasnih funkcija rasejanja i njihove povezanosti sa odgovarajućim perturbacionim interakcijama koje moraju biti kratkog dometa [1]. Relevantnost pomenutih Coulomb-ovih uslova je potvrđena u poredjenju sa eksperimentalnim podacima za mnoge jon-atomske sudare. Analitičkim sredjivanjem je amplituda prelaza u prior formi svedena na dvostruki integral. Skaliranjem totalnog preseka eliminacijom prividnih singulariteta, totalni presek je sveden na integral koji je izračunat numerički pomoću Gauss-Legendre-ovih kvadratura. Na ovaj način dobijeni su teorijski rezultati za jednostruki elektronski zahvat u sudarima H^+ , He^{2+} , Li^{3+} , Be^{4+} , B^{5+} , C^{6+} sa $He(1s^2)$, kao i za obostranu neutralizaciju u $H^+ - H^-(1s^2)$ interakciji. Pored suštinske važnosti graničnih uslova, proučavanje medjuelektronske statičke i dinamičke korelacije je takodje imalo dugo vremena centralnu ulogu u atomskoj fizici sudara (videti na primer [5]). Statičke korelacije su uključene u talasnim funkcijama vezanih stanja višeelektronskih meta. Dinamičke korelacije su preko medjuelektronske Coulomb-ove interakcije uključene u perturbacioni potencijal u amplitudi prelaza. Drugim rečima, statičke korelacije elektrona su spektroskopskog tipa i kao takve značajne su za izolavane atome bez obzira na sudar. Nasuprot tome, dinamičke korelacije su medjuelektronske interakcije koje predstavljaju deo ukupnog perturbacionog potencijala koji je odgovoran za prelaze izmedju početnog i finalnog stanja sudarnih atomskih sistema. Na primer korišćenjem četvoročestične modifikovane Coulomb-Born-ove (MCB-4B) ili ekvivalentno četvoročestične CDW-EIS-4B (Continuum Distorted Wave Eikonal Initial State) aproksimacije, pokazno je da su statičke korelacije od velikog značaja za jednostruko elektronsko odlepljivanje (detachment) u $H^+ - H^-$ sudaru od praga do visoko energijskog Bethe-ovog regiona i šire [6, 7]. Isto tako, dinamičke korelacije izmedju elektrona su bile analizirane CDW-EIS-4B modelom i pokazano je da su veoma značajne za jednostruku jonizaciju u $H^+ - He$ sudaru [8]. Dalje, za transfer jonizaciju u $\alpha - He$ sudarima, Belkić *et al.* [9, 10] su koristili post verziju četvoročestičnog CDW-4B (Continuum Distorted Wave) metoda, u kojem se medjuelektronska interakcija $V_{12} = 1/r_{12}$ eksplicitno pojavljuje u perturbacionom potencijalu V_f . Njihovi rezultati [9, 10] su pokazali da postoji značajno poboljšanje CDW-4B metoda u odnosu na modele nezavisnih elektrona, što znači da se ovaj uspeh može pripisati isključivo efektu dinamičkih elektronskih korelacija. Osim toga, značaj korelacionih efekata je nedavno bila ispitana u kontekstu TDDFT (Time-Dependent Density-Functional-Theory) izračunavanja za sudar antiprotona sa helijumom [11]. U referenci [11] su predstavljeni rezultati za jednostruku i dvostruku jonizaciju u energijskom opsegu 5 – 2000 keV. Zaključak da elektronski korelacioni efekti igraju značajnu ulogu u jonizaciji helijuma od strane antiprotona potvrdio je Pindzola *et al.* [12] korišćenjem vremenski zavisnog metoda zatvorenog sprežanja. Elektronske korelacije u jednostrukom elektronskom zahvatu su analizirane CDW-4B teorijom [13, 14] u $H^+ - He$, $\alpha - He$ i $H^+ - Li^+$ sudarima gde su izračunavanja uradjena samo za zahvat elektrona iz osnovnog stanja helijuma u osnovno stanje vodonika. Pored toga, dobijeni rezultati su pomnoženi faktorom 1.202 da bi se dobio zahvat sumiran po svim ekscitovanim stanjima H atoma. Mi smo se u ovom radu fokusirali na ulogu medjuelektronskog $(e_1 - e_2)$ potencijala $V_{12} = 1/r_{12}$ sa dinamičke tačke gledišta, u cilju utvrdjivanja da li elektronske korelacije ostaju važne za elektronski zahvat kako u osnovno tako i za zahvat u pobudjenim stanjima. Da bi ostvarili ovaj cilj u CB1-4B metodi, iskoristili smo post formalizam sa eksplicitnim uračunavanjem V_{12} u kompletnoj finalnoj perturbaciji V_f^c , koja se pojavljuje u amplitudi prelaza T_{if}^+ . U post formi je amplituda prelaza analitičkim sredjivanjem prevedena od devetostrukog integrala na izraz u kojem je potrebno uraditi numeričku integraciju po realnim promenljivima kojih ima pet. U tu svrhu korišćene su Gauss-Legendre-ove i Gauss-Mehler-ove kvadrature. Izračunavanja su

uradjena za jednostruki elektronski zahvat u sudaru H^+ sa He. Takodje je za ovaj sudar ispitano u post i prior formi CB1-4B metoda uticaj približne talasne funkcije (statičke korelacije) osnovnog stanja helijuma na jednostruki elektronski zahvat (u ovom radu je to pokazano za zahvat u $1s$ stanje H atoma). Za ovu svrhu korišćene su talasne funkcije Löwdin-a [15] i Silverman-a *et al.* [16]. Ovde je proučeno i post-prior neslaganje u CB1-4B aproksimaciji.

U trećoj glavi su predstavljeni diferencijalni efikasni preseki za jednostruki elektronski zahvat u procesu $H^+ - He$ sudara u post i prior formi CB1-4B metoda. Analizirani su diferencijalni preseki u energijskom intervalu 100-1300 keV. Ispitana je post-prior razlika kao i značaj dinamičke elektronske korelacije $V_{12} = 1/r_{12}$ u zavisnosti od ugla rasejanja, za jednostruki elektronski zahvat u osnovno stanje H atoma.

U delu Zaključak sažeto su predstavljeni rezultati i zaključci koji su detaljno proučeni u ovoj disertaciji.

Glava 1

Opšta razmatranja

1.1 Osnovni pojmovi

Prilikom sudara ogoljenog projektila P koji ima naelektrisanje Z_P , sa dvoelektronskom metom čije jezgro T ima naelektrisanja Z_T mogu se dogoditi mnogobrojni preraspodelni procesi, koji se uopšteno mogu svrstati u jednoelektronske i dvoelektronske, kao što su:

Jednoelektronski procesi

jednostruki elektronski zahvat

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow (Z_P; e_1)_{f_1} + (Z_T; e_2)_{f_2}, \quad (1.1)$$

jednostruka jonizacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow Z_P + (Z_T; e_2)_f + e_1, \quad (1.2)$$

jednostruka ekscitacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_f^*. \quad (1.3)$$

Dvoelektronski procesi

jednostruki elektronski zahvat i ekscitacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow (Z_P; e_1)_{f_1} + (Z_T; e_2)_{f_2}^*, \quad (1.4)$$

jednostruki elektronski zahvat i jonizacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow (Z_P; e_1)_f + Z_T + e_2, \quad (1.5)$$

jednostruka jonizacija i ekscitacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow Z_P + (Z_T; e_2)_f^* + e_1, \quad (1.6)$$

dvostruki elektronski zahvat

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow (Z_P; e_1, e_2)_f + Z_T, \quad (1.7)$$

dvostruka jonizacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow Z_P + Z_T + e_1 + e_2, \quad (1.8)$$

dvostruka ekscitacija

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \rightarrow Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_f^{**}. \quad (1.9)$$

U gornjim relacijama zgrade označavaju vezana stanja, a indeksi i , f , f_1 , f_2 predstavljaju skup kvantnih brojeva koji opisuju inicijalno i finalno vezano stanje, dok jednostruka i dvostruka zvezdica označavaju jednostruko i dvostruko ekscitovano stanje.

Kao što znamo sistem projektil-meta opisan je vremenski zavisnom Schrödinger-ovom jednačinom (uobičajno je da se u teoriji sudara koristi atomski sistem jedinica u kojem je $\hbar = m_e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$, što je i ovde učinjeno):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{i,f}^{\pm}(t) = H \Psi_{i,f}^{\pm}(t), \quad (1.10)$$

gde je $\Psi_{i,f}^{\pm}(t)$ ukupna (totalna) talasna funkcija sistema. Od krucijalne važnosti za teoriju jon-atomskih sudarnih procesa su korektna asimptotska ponašanja (korektni granični uslovi) [1]-[4]:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_i^+(t) = \Phi_i^+(t), \quad (1.11)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi_f^-(t) = \Phi_f^-(t). \quad (1.12)$$

Naime u "davnoj prošlosti" kada $t \rightarrow -\infty$ (ulazni kanal) ukupna talasna funkcija $\Psi_i^+(t)$ mora da teži stanju $\Phi_i^+(t)$ u kome projektil i meta ne interaguju. Takodje u "dalekoj budućnosti" kada $t \rightarrow +\infty$ (izlazni kanal) ukupna talasna funkcija $\Psi_i^+(t)$ mora da teži sumi svih mogućih stanja u kojima projektil i meta ne interaguju, kao što i talasna funkcija $\Psi_f^-(t)$ mora da teži konkretnom stanju $\Phi_f^-(t)$ koje odgovara ispitivanom procesu u izlaznom kanalu u kojem takodje projektil i meta nisu u interakciji. Naravno projektil i meta u ulaznom i izlaznom kanalu nisu više isti u smislu gore navedenih preraspodelnih procesa. Stanje sistema u ulaznom kanalu određeno je stanjem mete kao i početnom brzinom i pravcem kretanja projektila. Svaki izlazni kanal odgovara konkretnom procesu koji se razmatra. Granični vremenski prelazi $t \rightarrow \pm\infty$ imaju i prostorne implikacije koje ukazuju na to da su se čestice našle međusobno na beskonačnoj udaljenosti pre i posle sudara. Međutim to nikako ne znači da su se u eksperimentu čestice stvarno nalazile na beskonačnosti, zato beskonačnosti treba shvatiti kao teorijsku potrebu za opisivanje sudara, jer u teorijskom pristupu samo uslovom da $t \rightarrow \pm\infty$ može se garantovati da se stanje sistema reduciralo na neko od asimptotskih stanja. Za atomske sudare znamo da se odvijaju u oblasti reda veličine prvog Bohr-ovog radijusa $a_0 = 0.529 \times 10^{-10} m$. Tako na primer u eksperimentu Rutherford-ovog rasejanja alfa čestica na folijama zlata, izvor alfa čestica, meta i scintilacioni detektor bili su smešteni u jednoj kutiji dimenzija 16×9 cm dok je rastojanje od mete do detektora bilo 8 cm.

Označimo sa $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}_3$ i $\vec{r}_4$ vektore položaja projektila mase M_P , jezgra mete mase M_T , jednog i drugog elektrona jediničnih masa respektivno u odnosu na proizvoljni zajednički koordinatni početak (laboratorijski sistem).

Ukupni Hamiltonijan sistema H u laboratorijskom sistemu reference je:

$$H = H_0 + V, \quad (1.13)$$

gde je:

$$H_0 = -\frac{1}{2M_P}\nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2M_T}\nabla_{r_2}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{r_3}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{r_4}^2, \quad (1.14)$$

operator kinetičke energije, a

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (1.15)$$

operator ukupne potencijalne energije sistema. Vektori relativnog položaja elektrona $e_{1,2}$ u odnosu na projektil označeni su sa $\vec{s}_{1,2}$ a u odnosu na jezgro mete sa $\vec{x}_{1,2}$ i određeni su relacijama:

$$\vec{s}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \quad \vec{s}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_1, \quad \vec{x}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_2, \quad \vec{x}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_2. \quad (1.16)$$

Takodje smo vektor relativnog položaja projektila P u odnosu na T označili sa $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{x}_1 - \vec{s}_1 = \vec{x}_2 - \vec{s}_2$ a vektor međuelektronskog rastojanja sa $\vec{r}_{12} = \vec{r}_3 - \vec{r}_4 = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 = \vec{s}_1 - \vec{s}_2$.

Vidimo da potencijalna energija nije vremenski zavisna, tako da se jednačina (1.10) svodi na vremenski nezavisnu Schrödinger-ovu jednačinu:

$$H\Psi_{i,f}^{\pm} = E\Psi_{i,f}^{\pm}, \quad (1.17)$$

gde je :

$$\Psi_i^+(t) = e^{-iEt}\Psi_i^+, \quad (1.18)$$

$$\Psi_f^-(t) = e^{-iEt}\Psi_f^-. \quad (1.19)$$

Korišćenjem graničnih uslova (1.11) i (1.12) kao i relacija (1.18) i (1.19), možemo napisati:

$$\Psi_i^+ \rightarrow \Phi_i^+, \quad (1.20)$$

$$\Psi_f^- \rightarrow \Phi_f^-, \quad (1.21)$$

kada rastojanje izmedju projektila i mete u ulaznom i izlaznom kanalu teži beskonačnosti. Da bi smo dobili korektne asimptotske forme u ulaznom i izlaznom kanalu ceo problem ćemo rešavati u sistemu centra masa (zbog jednostavnijeg izračunavanja).

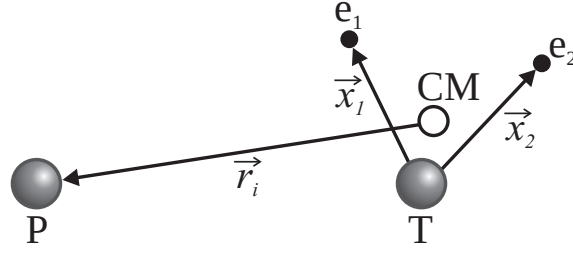
1.1.1 Ulazni kanal

Za razmatranje problema u sistemu centra masa uvešćemo nezavisne Jacobi-jeve (relativne) koordinate čiji izbor nije jednoznačan. Najpogodnije je u ulaznom kanalu uzeti skup relativnih koordinata $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_i$ (slika 1.1) i $\vec{r}_c$, gde je:

$$\vec{r}_i = \vec{r}_1 - \vec{r}_c, \quad (1.22)$$

vektor relativnog položaja projektila u odnosu na centar mase mete ($Z_T; e_1, e_2$), dok je:

$$\vec{r}_c = \frac{\vec{r}_3 + \vec{r}_4 + M_T \vec{r}_2}{M_T + 2}, \quad (1.23)$$



Slika 1.1: Jacobi-jeve koordinate u sistemu centra mase mete ($Z_T; e_1, e_2$) u ulaznom kanalu.

vektor položaja centra mase mete u odnosu na laboratorijski sistem reference.

Sada Hamiltonijan H_0 možemo zapisati na sledeći način:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2 - \frac{1}{M_T} \vec{\nabla}_{x_1} \cdot \vec{\nabla}_{x_2}, \quad (1.24)$$

gde su:

$$\mu_i = \frac{M_P(M_T + 2)}{M_P + M_T + 2}, \quad b = \frac{M_T}{M_T + 1}. \quad (1.25)$$

Pored Hamiltonijana H_0 pojavljuje se i Hamiltonijan koji opisuje kretanje centra mase mete, međjutim pošto talasna funkcija stanja koja opisuje centar mase ne utiče na totalne preseke, ovaj Hamiltonijan nećemo razmatrati ni u ulaznom ni u izlaznom kanalu. Četvrti sabirak u jednačini (1.24) je takozvani sabirak masene polarizacije, koji ćemo zanemariti u daljem razmatranju s obzirom da je $M_T \gg 1$, gde jedinica predstavlja masu elektrona. Ukupan Hamiltonijan sistema projektil-meta u sistemu centra mase je:

$$H = H_0 + V, \quad (1.26)$$

gde je V data izrazom (1.15).

Da bi smo u preraspodelnim sudarima odredili korektne granične uslove pogodno je H napisati u separabilnom obliku:

$$H = H_i + V_i, \quad (1.27)$$

gde su H_i i V_i kanalni Hamiltonijan i odgovarajuća perturbacija u ulaznom kanalu respektivno:

$$H_i = H_0 - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (1.28)$$

$$V_i = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2}. \quad (1.29)$$

Rešavanjem svojstvenog problema (metodom razdvajanja promenljivih) neperturbovanog Hamiltonijana H_i :

$$H_i \Phi_i = E \Phi_i, \quad (1.30)$$

dobijamo neperturbovanu talasnu funkciju Φ_i :

$$\Phi_i = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}, \quad (1.31)$$

gde je $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}$ rešenje jednačine:

$$-\frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_i}^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} = \frac{k_i^2}{2\mu_i} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}. \quad (1.32)$$

Svojstvena vrednost $k_i^2/2\mu_i$ je kinetička energija virtuelne čestice mase μ_i sa inicijalnim talasnim vektorom $\vec{k}_i$. Talasna funkcija $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ opisuje vezano stanje mete, pa samim tim predstavlja rešenje svojstvenog problema:

$$h_i \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \quad (1.33)$$

$$h_i = -\frac{1}{2b} \nabla_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2 - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (1.34)$$

Vezivna elektronska energija mete je ϵ_i , tako da je ukupna energija četveročestičnog sistema u ulaznom kanalu:

$$E = \frac{k_i^2}{2\mu_i} + \epsilon_i, \quad (1.35)$$

koja se održava sve vreme tokom sudara. Talasne funkcije dvoelektronskih sistema bile su predmet intenzivnog proučavanja dugi niz godina [15]-[39]. Tako je na primer Drake [38] korišćenjem varijacionog metoda pomoću potpuno korelisane Hylleraas-ove talasne funkcije, sa eksplicitnim računanjem medjuelektronske koordinate r_{12} i to sa približno 600 sabiraka dobio energiju osnovnog stanja ($1s^2$) helijuma $\epsilon_i = -2.903724377034105$, koja se praktično može smatrati egzaktom vrednošću.

Nadjimo sada asimtotku formu perturbacije V_i :

$$V_i = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} \rightarrow \frac{Z_P(Z_T - 2)}{R} = V_i^\infty \quad (r_i \rightarrow \infty). \quad (1.36)$$

Vidimo da je asimtotska forma V_i^∞ , koja predstavlja interakciju izmedju projektila i ekraniranog jezgra mete, Coulomb-ovog tipa (dugodometni odbojni Coulomb-ov potencijal). Iz tog razloga je inicijalno stanje Φ_i izobličeno čak i na beskonačnost jer se razlikuje od forme (1.31) kojoj teži ali je ne dostiže zbog pomenutog potencijala. Imajući u vidu to, dodajmo $Z_P(Z_T - 2)/r_i$ i $-Z_P(Z_T - 2)/r_i$ operatorima H_i i V_i respektivno. Sada imamo:

$$H = H_i^c + V_i^c, \quad (1.37)$$

$$H_i^c = -\frac{1}{2\mu_i} \nabla_{r_i}^2 + \frac{Z_P(Z_T - 2)}{r_i} - \frac{1}{2b} \nabla_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2 - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (1.38)$$

$$V_i^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P(Z_T - 2)}{r_i} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2}. \quad (1.39)$$

Znajući da je $\delta(\vec{x}_1 + \vec{x}_2)$ vektor položaja centra mase mete u odnosu na jezgro mete, gde je $\delta = 1/(M_T + 2)$ možemo napisati:

$$\vec{r}_i = \vec{R} - \delta(\vec{x}_1 + \vec{x}_2). \quad (1.40)$$

Razvijanjem $1/r_i$ u Maclaurin-ov red po δ imamo:

$$\frac{1}{r_i} = \frac{1}{|\vec{R} - \delta(\vec{x}_1 + \vec{x}_2)|} = \frac{1}{R} + \frac{\vec{R} \cdot (\vec{x}_1 + \vec{x}_2)}{R^3} \delta + \frac{2(\vec{x}_1 + \vec{x}_2)^2}{R^2} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3). \quad (1.41)$$

Zanemarujući sve sabirke koji sadrže δ ($M_T \gg 1$), dobijamo $r_i \approx R$, tako da se izraz (1.39) može aproksimirati sa

$$V_i^c = \frac{2Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2}. \quad (1.42)$$

Vidimo da je ovaj potencijal kratkodometan¹ jer teži ka $\mathcal{O}(1/R^2)$ kada $r_i \rightarrow \infty$. Rešavanjem sada svojstvenog problema:

$$H_i^c \Phi_i^c = E \Phi_i^c, \quad (1.43)$$

imamo

$$\Phi_i^c = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \mathcal{N}^+(\nu_i) {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i), \quad (1.44)$$

gde je:

$$\mathcal{N}^+(\nu_i) = e^{-\pi\nu_i/2} \Gamma(1 + i\nu_i), \quad \nu_i = Z_P(Z_T - 2)/v. \quad (1.45)$$

Coulomb-ova talasna funkcija $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \mathcal{N}^+(\nu_i) {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$ opisuje rasejanje projektila mase μ_i na odbojnom potencijalu $Z_P(Z_T - 2)/r_i$. Funkcija ${}_1F_1(a, b, z)$ je Kummer-ova konfluentna (degenerisana) hipergeometrijska fukcija. Dakle talasna funkcija Φ_i^c zadovoljava Coulomb-ove granične uslove sa asimptotikom:

$$\Phi_i^c(r_i \rightarrow \infty) = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} \equiv \Phi_i^+. \quad (1.46)$$

1.1.2 Izlazni kanal

Jednostruki elektronski zahvat

Pošto sada u izlaznom kanalu imamo dva vodoniku slična atomska sistema, konvenciono se uvodi vektor položaja r_f centra mase $(Z_T, e_2)_{f_2}$ u odnosu na centar mase novonastalog sistema $(Z_P, e_1)_{f_1}$:

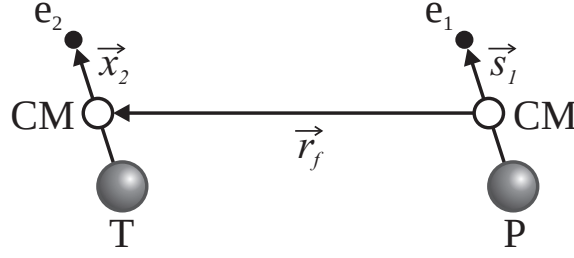
$$\vec{r}_f = \vec{r}_c - \frac{\vec{r}_3 + M_P \vec{r}_1}{M_P + 1}, \quad (1.47)$$

gde je $\vec{r}_c = (\vec{r}_4 + M_T \vec{r}_2)/(M_T + 1)$ vektor položaja centra mase sistema $(Z_T, e_2)_{f_2}$ u odnosu na laboratorijski sistem. U ovom slučaju pogodno je za skup nezavisnih relativnih koordinata uzeti $\vec{s}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_f$ (slika 1.2) i $\vec{r}_c$.

Hamiltonijan H_0 sada ima oblik:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_f} \nabla_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \nabla_{s_1}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2, \quad (1.48)$$

¹Pod kratkodometnim potencijalom podrazumevamo funkciju $V(\vec{r})$ koja je kvadratno integrabilna: $\int |V(\vec{r})|^2 d\vec{r} < \infty$ ili lokalno kvadratno integrabilna: $\int_{r \leq R} |V(\vec{r})|^2 d\vec{r} < \infty$ i koja se ponaša kao $\mathcal{O}(1/r^\beta)$, $\beta > 1$, kada $r \rightarrow \infty$. Notacija $V(\vec{r}) = \mathcal{O}(1/r^\beta)$ znači da je $|V(\vec{r})| \leq c/r^\beta$, gde je c neka pozitivna konstanta. U suprotnom radi se o dugodometnim potencijalima, čiji je generalni oblik $V(\vec{r}) + \gamma/r$, gde je $V(\vec{r})$ kratkodometni, a γ/r Coulomb-ov potencijal (γ je konstanta proporcionalnosti).

Slika 1.2: Jacobi-jeve koordinate u sistemu centra mase mete ($Z_T; e_2$) u izlaznom kanalu.

gde su:

$$\mu_f = \frac{(M_P + 1)(M_T + 1)}{M_P + M_T + 2}, \quad a = \frac{M_P}{M_P + 1}. \quad (1.49)$$

Vidimo da se za ovakav izbor koordinata u Hamiltonijanu H_0 ne pojavljuje član masene polarizacije. Ukupan Hamiltonijan se može napisati u separabilnom obliku $H = H_f + V_f$, gde su kanalni Hamiltonijan H_f i odgovarajuća perturbacija V_f dati relacijama:

$$H_f = H_0 - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_T}{x_2}, \quad (1.50)$$

$$V_f = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_P}{s_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (1.51)$$

Rešavanjem svojstvenog problema $H_f \Phi_f = E \Phi_f$ dobijamo neperturbovanu talasnu funkciju:

$$\Phi_f = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}, \quad (1.52)$$

gde je $e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}$ rešenje jednačine:

$$-\frac{1}{2\mu_f} \nabla_{r_f}^2 e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} = \frac{k_f^2}{2\mu_f} e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}. \quad (1.53)$$

Svojstvena vrednost $k_f^2/2\mu_f$ je kinetička energija virtuelne čestice mase μ_f sa finalnim talasnim vektorom k_f . Talasne funkcije $\varphi_T(\vec{x}_2)$ i $\varphi_P(\vec{s}_1)$ predstavljaju vezana stanja sistema $(Z_T, e_2)_{f_2}$ i $(Z_P, e_1)_{f_1}$ respektivno:

$$\left(-\frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2 - \frac{Z_T}{x_2}\right) \varphi_T(\vec{x}_2) = \epsilon_{f_2} \varphi_T(\vec{x}_2), \quad (1.54)$$

$$\left(-\frac{1}{2a} \nabla_{s_1}^2 - \frac{Z_P}{s_1}\right) \varphi_P(\vec{s}_1) = \epsilon_{f_1} \varphi_P(\vec{s}_1). \quad (1.55)$$

Ukupna energija četvorochestičnog sistema je:

$$E = \frac{k_f^2}{2\mu_f} + \epsilon_f, \quad \epsilon_f = \epsilon_{f_1} + \epsilon_{f_2}, \quad \epsilon_{f_1} = -\frac{Z_P^2}{2n_{f_1}^2}, \quad \epsilon_{f_2} = -\frac{Z_T^2}{2n_{f_2}^2}. \quad (1.56)$$

Neperturbovano stanje Φ_f je izobličeno čak i na beskonačnosti zbog dugodometnog odbojnog Coulomb-ovog potencijala:

$$V_f^\infty = \frac{(Z_P - 1)(Z_T - 1)}{R}, \quad (1.57)$$

koji predstavlja asimptotsku formu perturbacije V_f . Iz tog razloga ćemo sada dodati $(Z_P - 1)(Z_T - 1)/r_f$ i $-(Z_P - 1)(Z_T - 1)/r_f$ operatorima H_f i V_f respektivno, tako da je $H = H_f^c + V_f^c$:

$$H_f^c = -\frac{1}{2\mu_f} \nabla_{r_f}^2 + \frac{(Z_P - 1)(Z_T - 1)}{r_f} - \frac{1}{2a} \nabla_{s_1}^2 - \frac{1}{2b} \nabla_{x_2}^2 - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_T}{x_2}, \quad (1.58)$$

$$V_f^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{(Z_P - 1)(Z_T - 1)}{r_f} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_P}{s_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (1.59)$$

Korišćenjem eikonal aproksimacije (zanemarivanjem sabiraka reda odnosa mase elektrona i projektila) $r_f \approx R$ ($\vec{r}_f \approx -\vec{R}$) dobijamo aproksimativan izraz za V_f^c :

$$V_f^c = Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) + (Z_T - 1) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{x_1} \right) + \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{x_1} \right). \quad (1.60)$$

Ovaj potencijal je kratkodometni jer teži ka $\mathcal{O}(1/R^2)$ kada $r_f \rightarrow \infty$. Rešavanjem svojstvenog problema $H_f^c \Phi_f^c = E \Phi_f^c$ dobijamo:

$$\Phi_f^c = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} \mathcal{N}^-(\nu_f)_1 F_1(i\nu_f, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f), \quad (1.61)$$

gde je $\mathcal{N}^-(\nu_f) = e^{-\pi\nu_f/2} \Gamma(1 - i\nu_f)$ i $\nu_f = (Z_P - 1)(Z_T - 1)/v$. Funkcija Φ_f^c ima korektno asimptotsko ponašanje (zadovoljava korektne granične uslove):

$$\Phi_f^c(r_f \rightarrow \infty) = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f - i\nu_f \ln(k_f r_f - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)} \equiv \Phi_f^-. \quad (1.62)$$

Za sudare na visokim energijama imamo da je $k_i/2\mu_i \gg |\epsilon_f - \epsilon_i|$. Imajući u vidu ovo kao i da se radi o masivnim česticama (masa projektila i mete mnogo veća od mase elektrona) dominiraće rasejanje na malim uglovima (rasejanje unapred), tako da možemo napisati $\hat{v}_i \simeq \hat{v}_f \equiv \hat{v}$, gde je $\vec{v}_i = \vec{k}_i/\mu_i$, $\vec{v}_f = \vec{k}_f/\mu_f$ i $\hat{v}_{i,f} = \vec{v}_{i,f}/v_{i,f}$. Dakle za jednostruki elektronski zahvat važi relacija [40]:

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f = \vec{\alpha} \cdot \vec{s}_1 + \vec{\beta} \cdot \vec{x}_1 = -\vec{\alpha} \cdot \vec{R} - \vec{v} \cdot \vec{x}_1, \quad (1.63)$$

gde je:

$$\vec{\alpha} = \vec{\eta} - v^- \hat{v}, \quad \vec{\beta} = -\vec{\eta} - v^+ \hat{v}, \quad \vec{\alpha} + \vec{\beta} = -\vec{v}, \quad (1.64)$$

$$v^+ \equiv \beta_z = \frac{v}{2} + \frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{v}, \quad v^- \equiv \alpha_z = \frac{v}{2} - \frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{v}. \quad (1.65)$$

Vektor incidentne brzine je izabran duž z-ose (kvantizaciona osa) tj. $\hat{v} = (0, 0, 1)$, dok je vektor $\vec{\eta}$ transverzalni moment transfera u XOY ravni:

$$\vec{\eta} = (\eta \cos \phi_\eta, \eta \sin \phi_\eta, 0), \quad \vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0. \quad (1.66)$$

1.2 Vremenski zavisna teorija rasejanja

Hronološki posmatrano vremenski nezavisan formalizam rasejanja je bio prvi okvir uvođenja teorije rasejanja, koji je u svom originalnom izdanju obilovao heurističkim konceptima. Sa druge strane sudar se efektivno odvija u odredjenim vremenskim etapama, za koje je optimalan teorijski okvir upravo vremenski zavisna teorija rasejanja. Iz tih razloga u savremenom

predstavljanju teorije sudara se startuje od vremenski zavisne teorije sudara. Tako ćemo i u ovom radu uraditi. U vremenski zavisnoj teoriji rasejanja talasne funkcije stanja celokupnog četvoročestičnog sistema su vremenski zavisne.

Uvedimo Green-ove operatore (funkcije) $G^\pm(t)$, $G_0^\pm(t)$, $G_i^\pm(t)$, $G_f^\pm(t)$ pridružene Hamiltonijanima H , H_0 , H_i , H_f respektivno, na sledeći način:

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H)G^\pm(t) = \delta(t), \quad (1.67)$$

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H_0)G_0^\pm(t) = \delta(t), \quad (1.68)$$

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H_i^c)G_i^\pm(t) = \delta(t), \quad (1.69)$$

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H_f^c)G_f^\pm(t) = \delta(t), \quad (1.70)$$

gde je $\delta(t)$ Dirac-ova delta funkcija. Green-ovi operatori po definiciji zadovoljavaju sledeće granične uslove:

$$G^+(t) = G_0^+(t) = G_i^+(t) = G_f^+(t) = 0, \quad t < 0, \quad (1.71)$$

$$G^-(t) = G_0^-(t) = G_i^-(t) = G_f^-(t) = 0, \quad t > 0, \quad (1.72)$$

pomoću kojih dobijamo sledeća formalna rešenja jednačina (1.67-1.70):

$$G^+(t) = -if(t)e^{-iHt}, \quad (1.73)$$

$$G^-(t) = +i(1 - f(t))e^{-iHt}, \quad (1.74)$$

$$G_0^+(t) = -if(t)e^{-iH_0t}, \quad (1.75)$$

$$G_0^-(t) = +i(1 - f(t))e^{-iH_0t}, \quad (1.76)$$

$$G_i^+(t) = -if(t)e^{-iH_i^c t}, \quad (1.77)$$

$$G_i^-(t) = +i(1 - f(t))e^{-iH_i^c t}, \quad (1.78)$$

$$G_f^+(t) = -if(t)e^{-iH_f^c t}, \quad (1.79)$$

$$G_f^-(t) = +i(1 - f(t))e^{-iH_f^c t}, \quad (1.80)$$

gde je $f(t)$ Heavisid-ova step funkcija.²

Iz gornjih eksplicitnih oblika Green-ovih operatora vidimo da su to vremenski propagatori koji opisuju vremensku propagaciju odgovarajućih talasnih funkcija. Operatori sa oznakom plus opisuju propagaciju talasnih funkcija u budućnost, dok operatori sa oznakom minus propagaciju u prošlost. Na primer operator $G^+(t - t')$ opisuje propagaciju funkcije $\Psi^+(t')$ u neki budući trenutak t , pošto je $G^+(t - t')$ jednako nuli za sve trenutke $t < t'$. Lako se uočava da su Green-ovi operatori sadržani u odgovarajućim evolucionim operatorima:

$$U(t, t') = \pm iG^\pm(t - t'), \quad U_0(t, t') = \pm iG_0^\pm(t - t'), \quad (1.82)$$

$$U_i(t, t') = \pm iG_i^\pm(t - t'), \quad U_f(t, t') = \pm iG_f^\pm(t - t'), \quad (1.83)$$

koji su definisani duž cele vremenske ose. Njihova delovanja će biti data na sledeći način:

$$\Psi_i^+(t) = \pm iG^\pm(t - t')\Psi_i^+(t'), \quad (1.84)$$

$$\Psi_f^-(t) = \pm iG^\pm(t - t')\Psi_f^-(t'), \quad (1.85)$$

$$\Psi_i^+(t) = iG^+(t - t')\Phi_i^+(t'), \quad t' \rightarrow -\infty, \quad (1.86)$$

$$\Psi_f^-(t) = -iG^-(t - t')\Phi_f^-(t'), \quad t' \rightarrow +\infty, \quad (1.87)$$

$$\Phi_0(t) = \pm iG_0^\pm(t - t')\Phi_0(t'), \quad (1.88)$$

$$\Phi_i^c(t) = \pm iG_i^\pm(t - t')\Phi_i^c(t'), \quad (1.89)$$

$$\Phi_f^c(t) = \pm iG_f^\pm(t - t')\Phi_f^c(t'). \quad (1.90)$$

Takodje treba istaći da su Green-ovi operatori unitarni:

$$G^{\pm\dagger}(t)G^\pm(t) = G^\pm(t)G^{\pm\dagger}(t) = 1, \quad (1.91)$$

$$G_0^{\pm\dagger}(t)G_0^\pm(t) = G_0^\pm(t)G_0^{\pm\dagger}(t) = 1, \quad (1.92)$$

$$G_i^{\pm\dagger}(t)G_i^\pm(t) = G_i^\pm(t)G_i^{\pm\dagger}(t) = 1, \quad (1.93)$$

$$G_f^{\pm\dagger}(t)G_f^\pm(t) = G_f^\pm(t)G_f^{\pm\dagger}(t) = 1, \quad (1.94)$$

što znači da neće promeniti fizičku sliku sadržanu u talasnim funkcijama na koje deluju.

Pogodno je preći sa diferencijalnih jednačina (1.67-1.70) na integralne jednačine, što ćemo i uraditi korišćenjem sledeće leme. Ako je dat par jednačina :

$$A(t)g_0(t - t') = \delta(t - t'), \quad (1.95)$$

²Funkcija definisana na sledeći način:

$$f(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t > 0 \end{cases}, \quad (1.81)$$

predstavlja Heavisid-ovu step funkciju, čiji je izvod $\frac{d}{dt}f(t)$ jednak Dirac-ovoj delta funkciji $\delta(t)$.

$$A(t)g(t-t') = h(t-t'), \quad (1.96)$$

gde je $A(t)$ neki linearni operator, a g i g_0 dve funkcije iz njegove oblasti definisanosti tada je:

$$g(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt'' g_0(t-t'')h(t''-t'). \quad (1.97)$$

Primenom ove leme iz jednačina (1.67-1.70) se dobijaju nehomogene Volterra³ integralne jednačine za Green-ove operatore:

$$G^{\pm}(t-t') = G_0^{\pm}(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_0^{\pm}(t-t'')VG^{\pm}(t''-t'), \quad (1.98)$$

$$G^{\pm}(t-t') = G_i^{\pm}(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_i^{\pm}(t-t'')V_i^c G^{\pm}(t''-t'), \quad (1.99)$$

$$G^{\pm}(t-t') = G_f^{\pm}(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_f^{\pm}(t-t'')V_f^c G^{\pm}(t''-t'), \quad (1.100)$$

sa nehomogenošću $G_0^{\pm}(t-t')$, $G_i^{\pm}(t-t')$, $G_f^{\pm}(t-t')$ za jednačine (1.98), (1.99) i (1.100) respektivno. Poželjno je napisati integralne jednačine za $\Psi_i^+(t)$, $\Psi_f^-(t)$ što ćemo i uraditi parcijalnim diferenciranjem izraza $iG_i^+(t-t')\Psi_i^+(t')$, $iG_f^-(t-t')\Psi_f^-(t')$ po promenljivoj t' . Dakle imamo:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t'}(G_i^+(t-t')\Psi_i^+(t')) &= i\left(\frac{\partial}{\partial t'}G_i^+(t-t')\right)\Psi_i^+(t') + i(G_i^+(t-t')\frac{\partial}{\partial t'}\Psi_i^+(t')) \\ &= -\delta(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')}\Psi_i^+(t') + if(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')}H_i^c\Psi_i^+(t') \\ &\quad + G_i^+(t-t')(H_i^c + V_i^c)\Psi_i^+(t') = -\delta(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')}\Psi_i^+(t') \\ &\quad + G_i^+(t-t')V_i^c\Psi_i^+(t'), \end{aligned} \quad (1.101)$$

gde smo iskoristili:

$$\frac{\partial}{\partial t'}G_i^+(t-t') = i\delta(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')} + f(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')}H_i^c, \quad (1.102)$$

$$\frac{\partial}{\partial t'}f(t-t') = -\delta(t-t'), \quad (1.103)$$

³Integralna jednačina $f(x) = g(x) + \lambda \int_a^x K(x,y)f(y)dy$, gde su $K(x,y)$, $g(x)$ date funkcije, λ parametar koji ne zavisi od x , y a $f(x)$ nepoznata funkcija, naziva se Volterra-ova integralna jednačina druge vrste. $K(x,y)$ je jezgro integralne jednačine. Ako je $g(x) = 0$ radi se o homogenoj, a ako je $g(x) \neq 0$ radi se o nehomogenoj integralnoj jednačini. Korišćenjem graničnog uslova (1.71) jednačinu (1.98) za $G^+(t-t')$ možemo napisati:

$$G^+(t-t') = G_0^+(t-t') + \int_{t'}^t dt'' G_0^+(t-t'')VG^+(t''-t'),$$

a to je upravo integralna jednačina Volterra sa operatorskim jezgrom (kernel) oblika $K(t,t'') = G_0^+(t-t'')V$.

kao i

$$i\frac{\partial}{\partial t'}\Psi_i^+(t') = H\Psi_i^+(t') = (H_i^c + V_i^c)\Psi_i^+(t'). \quad (1.104)$$

Integraljenjem izraza (1.101) po t' u granicama od $-\infty$ do $+\infty$ dobijamo:

$$\begin{aligned} iG_i^+(t-t')\Psi_i^+(t')|_{t'=-\infty}^{t'=+\infty} &= -\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\delta(t-t')e^{-iH_i^c(t-t')}\Psi_i^+(t') \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt'G_i^+(t-t')V_i^c\Psi_i^+(t') = -\Psi_i^+(t) \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt'G_i^+(t-t')V_i^c\Psi_i^+(t'). \end{aligned} \quad (1.105)$$

Iz graničnih uslova talasne funkcije i Green-ovih operatora sledi:

$$\begin{aligned} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \Psi_i^+(t') &= \Phi_i^+(t'), \quad \lim_{t' \rightarrow -\infty} iG_i^+(t-t')\Psi_i^+(t') = \Phi_i^+(t), \\ \lim_{t' \rightarrow +\infty} iG_i^+(t-t') &= 0, \end{aligned} \quad (1.106)$$

nakon čega konačno imamo:

$$\Psi_i^+(t) = \Phi_i^+(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'G_i^+(t-t')V_i^c\Psi_i^+(t'). \quad (1.107)$$

Analogno se dobija i integralna jednačina za $\Psi_f^-(t)$:

$$\Psi_f^-(t) = \Phi_f^-(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'G_f^-(t-t')V_f^c\Psi_f^-(t'). \quad (1.108)$$

Takodje korišćenjem uslova (1.71) i (1.72) jednačine (1.107) i (1.108) možemo zapisati i u obliku integrala u polu-beskonačnim granicama:

$$\Psi_i^+(t) = \Phi_i^+(t) + \int_{-\infty}^t dt'G_i^+(t-t')V_i^c\Psi_i^+(t'), \quad (1.109)$$

$$\Psi_f^-(t) = \Phi_f^-(t) + \int_t^{+\infty} dt'G_f^-(t-t')V_f^c\Psi_f^-(t'). \quad (1.110)$$

Fizičku interpretaciju ovih jednačina ćemo dobiti njihovim rešavanjem pomoću metoda iteracije:

$$\begin{aligned} \Psi_i^+(t) &= \Phi_i^+(t) + \int_{-\infty}^t dt'G_i^+(t-t')V_i^c\Phi_i^+(t') \\ &+ \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt''G_i^+(t-t')V_i^cG_i^+(t'-t'')V_i^c\Phi_i^+(t'') + \dots, \end{aligned} \quad (1.111)$$

$$\begin{aligned}
\Psi_f^-(t) &= \Phi_f^-(t) + \int_t^{+\infty} dt' G_f^-(t-t') V_f^c \Phi_f^-(t') \\
&+ \int_t^{+\infty} dt' \int_{t'}^{+\infty} dt'' G_f^-(t-t') V_f^c G_f^-(t'-t'') V_f^c \Phi_f^-(t'') + \dots
\end{aligned} \tag{1.112}$$

Ovde ćemo diskutovati $\Psi_i^+(t)$ dok analogno se može diskutovati i $\Psi_f^-(t)$. Dolazeći talas $\Psi_i^+(t)$ vidimo da predstavlja superpoziciju jednog niza članova. Tako član $\int_{-\infty}^t G_i^+(t-t') V_i^c \Phi_i^+(t') dt'$ opisuje slobodno stanje $\Phi_i^+(t')$ projektila koji u trenutku t' interaguje jednom sa potencijalom V_i^c nakon čega propagira slobodno pod dejstvom propagatora $G_i^+(t-t')$ do momenta t . Sa druge strane treći član $\int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} G_i^+(t-t') V_i^c G_i^+(t'-t'') V_i^c \Phi_i^+(t'') dt''$ u sumi opisuje slobodno stanje $\Phi_i^+(t'')$ projektila koji u trenutku t'' interaguje jedanput sa potencijalom V_i^c , zatim sledi njegova slobodna propagacija pod dejstvom $G_i^+(t'-t'')$ do trenutka t' , posle čega dolazi do ponovne interakcije sa V_i^c i konačnog slobodnog propagiranja do trenutka t pod dejstvom $G_i^+(t-t')$. Slično se mogu interpretirati i viši članovi koji opisuju višestruko rasejanje na potencijalu V_i^c koje je praćeno uzastopnim slobodnim propagacijama projektila.

1.3 Vremenski nezavisna teorija rasejanja i Lippmann-Schwinger-ove jednačine

Prelazak sa vremenski zavisne na vremenski nezavisnu (stacionarnu) teoriju rasejanja se vrši ili pomoću Fourier-ovih transformacija ili pomoću Abel-Cauchy-evih limesa [41] pri čemu se dobijaju ekvivalentni rezultati. Mi ćemo u ovom radu primeniti Fourier-ov transform. Nadjimo najpre stacionarnu formu Green-ovih operatora (1.73-1.80) definisanih u prethodnom paragrafu:

$$\begin{aligned}
G^+(E) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} G^+(t) = \int_0^{+\infty} dt e^{iEt} G^+(t) = -i \int_0^{+\infty} dt e^{iEt} e^{-iHt} \\
&= -i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{-\varepsilon t} e^{iEt} e^{-iHt} = -i \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{i(E-H+i\varepsilon)t} \\
&= - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(E-H+i\varepsilon)} e^{i(E-H+i\varepsilon)t} \Big|_{t=0}^{t=\infty} = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(E-H+i\varepsilon)} \\
&\times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{i(E-H+i\varepsilon)t} \Big|_{t=0}^{t=\infty} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E-H+i\varepsilon}.
\end{aligned} \tag{1.113}$$

U gornjem integralu jedna od granica je beskonačna tako da integral nije dobro definisan u smislu konvergencije. Iz tog razloga se unutar integrala uvodi član $e^{-\varepsilon t} \rightarrow 0$ kada $t \rightarrow +\infty$, koji uslovljava da integrand u beskonačnosti teži nuli, to jest oscilacije integranda su prigušene. Ovde je ε infinitezimalna pozitivna veličina koja teži nuli ($\varepsilon \rightarrow 0^+$) i koja se naziva faktorom prigušenja (damping factor). Isto tako kada $t \rightarrow -\infty$ uvodi se član $e^{\varepsilon t} \rightarrow 0$, sa istim značenjem faktora ε . Ostali Green-ovi operatori imaju sledeću formu:

$$G^-(E) = \frac{1}{E-H-i\varepsilon}, \tag{1.114}$$

$$G_0^\pm(E) = \frac{1}{E-H_0 \pm i\varepsilon}, \tag{1.115}$$

$$G_i^\pm(E) = \frac{1}{E - H_i^c \pm i\varepsilon}, \quad (1.116)$$

$$G_f^\pm(E) = \frac{1}{E - H_f^c \pm i\varepsilon}. \quad (1.117)$$

Iz izraza za stacionarne Green-ove operatore se kovencionalno izostavlja limes vodeći pri tome računa o karakteru faktora ε . Na dalje ćemo radi jednostavnosti umesto $G^\pm(E)$, $G_0^\pm(E)$, $G_i^\pm(E)$, $G_f^\pm(E)$ koristiti oznake $G^\pm$, $G_0^\pm$, $G_i^\pm$, $G_f^\pm$ respektivno. Nalaženjem Fourier-ovog transformisa izraza (1.98-1.99) dolazimo do operatorskih Lippmann-Schwinger-ovih jednačina:

$$G^\pm = G_0^\pm + G_0^\pm V G^\pm, \quad (1.118)$$

$$G^\pm = G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G^\pm, \quad (1.119)$$

$$G^\pm = G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G^\pm. \quad (1.120)$$

Iteracionim postupkom jednačina (1.118-1.120) dobijamo razvoj Green-ovih operatora $G^\pm$ preko $G_0^\pm$, $G_i^\pm$, $G_f^\pm$:

$$G^\pm = G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm + \dots, \quad (1.121)$$

$$G^\pm = G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + \dots, \quad (1.122)$$

$$G^\pm = G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + \dots. \quad (1.123)$$

Postoje i drugi razvoji za Green-ove operatore ukoliko se u iteracijama kombinuju izrazi (1.118-1.120).

Konačno Lippmann-Schwinger-ove integralne jednačine za ukupne talasne funkcije $\Psi_i^+(E)$ i $\Psi_f^-(E)$ predstavljaju Fourier-ove transforme jednačina⁴ (1.107) i (1.108):

$$\Psi_i^+(E) = \Phi_i^+(E) + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+(E), \quad (1.124)$$

$$\Psi_f^-(E) = \Phi_f^-(E) + G_f^- V_f^c \Psi_f^-(E), \quad (1.125)$$

gde je:

$$\Psi_i^+(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} \Psi_i^+(t) = 2\pi\delta(E - E') \Psi_i^+, \quad (1.126)$$

$$\Psi_f^-(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} \Psi_f^-(t) = 2\pi\delta(E - E') \Psi_f^-, \quad (1.127)$$

⁴ $\Psi_i^+(E) = \Phi_i^+(E) + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt} G_i^+(t-t') dt \right) V_i^c \Psi_i^+(t') dt'$, znajući da je $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt} G_i^+(t-t') dt = \frac{e^{iEt'}}{E - H_i^c + i\varepsilon}$
 $= e^{iEt'} G_i^+$, imamo $\Psi_i^+(E) = \Phi_i^+(E) + G_i^+ V_i^c \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iEt'} \Psi_i^+(t') dt' = \Phi_i^+(E) + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+(E)$.

$$\Phi_i^+(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} \Phi_i^+(t) = 2\pi\delta(E - E')\Phi_i^+, \quad (1.128)$$

$$\Phi_f^-(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} \Phi_f^-(t) = 2\pi\delta(E - E')\Phi_f^-. \quad (1.129)$$

Sada jednačine (1.124) i (1.125) imaju oblik:

$$\Psi_i^+ = \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+, \quad (1.130)$$

$$\Psi_f^- = \Phi_f^- + G_f^- V_f^c \Psi_f^-. \quad (1.131)$$

Vidimo da su ovo nehomogene integralne jednačine sa nehomogenošću Φ_i^+ i Φ_f^- . Ove jednačine ćemo formalno rešiti primenom već pomenutog iteracionog postupka:

$$\begin{aligned} \Psi_i^+ &= \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+ = \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c (\Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+) \\ &= \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c (\Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+) \\ &= \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c \Psi_i^+ \\ &= (1 + G_i^+ V_i^c + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c + \dots) \Phi_i^+ \\ &= (1 + \sum_{n=1}^{\infty} (G_i^+ V_i^c)^n) \Phi_i^+ = (1 + G^+ V_i^c) \Phi_i^+ \equiv \Omega^+ \Phi_i^+. \end{aligned} \quad (1.132)$$

Ovde smo iskoristili razvoj:

$$G^+ V_i^c = \sum_{n=1}^{\infty} (G_i^+ V_i^c)^n, \quad (1.133)$$

koji se može lako proveriti množenjem izraza (1.122) operatorom V_i^c i to sa desne strane.

Analogno se pokazuje i za Ψ_f^- :

$$\Psi_f^- = \Phi_f^- + G^- V_f^c \Phi_f^- = \Omega^- \Phi_f^-. \quad (1.134)$$

Operatori $\Omega^+ = 1 + G^+ V_i^c$ i $\Omega^- = 1 + G^- V_f^c$ su Møller-ovi talasni operatori [4].

Jednačine (1.130) i (1.131) možemo izvesti i na sledeći način. Nadjimo Fourier-ov transform jednačine (1.86):

$$\begin{aligned} \Psi_i^+(E) &= i \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{iEt} G^+(t - t') \Phi_i^+(t') = i \left[\int_0^{+\infty} dt e^{iEt} G^+(t - t') \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^0 dt e^{iEt} G^+(t - t') \right] \Phi_i^+(t') = \left[\int_0^{+\infty} dt e^{iEt} e^{-iHt} \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^0 dt e^{iEt} e^{-iHt} \right] e^{iHt'} \Phi_i^+(t'), \end{aligned} \quad (1.135)$$

gde je:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} dt e^{iEt} e^{-iHt} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{-\varepsilon t} e^{iEt} e^{-iHt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{i(E-H+i\varepsilon)t} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i(E-H+i\varepsilon)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{i(E-H+i\varepsilon)t} \Big|_{t=0}^{t=\infty} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{(E-H+i\varepsilon)}, \end{aligned} \quad (1.136)$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^0 dt e^{iEt} e^{-iHt} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{\varepsilon t} e^{iEt} e^{-iHt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{i(E-H-i\varepsilon)t} \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i(E-H-i\varepsilon)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{i(E-H-i\varepsilon)t} \Big|_{t=-\infty}^{t=0} \\
&= - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{(E-H-i\varepsilon)}.
\end{aligned} \tag{1.137}$$

Zamenom izraza (1.136) i (1.137) u jednačinu (1.135) imamo:

$$\begin{aligned}
\Psi_i^+(E) &= \left(\frac{i}{E-H+i\varepsilon} - \frac{i}{E-H-i\varepsilon} \right) e^{iHt'} \Phi_i^+(t') \\
&= \frac{2\varepsilon}{(E-H+i\varepsilon)(E-H-i\varepsilon)} e^{iHt'} \Phi_i^+(t') = \frac{2\varepsilon}{(E-H+i\varepsilon)(E-E'-i\varepsilon)} \Phi_i^+ \\
&= \frac{i\varepsilon}{(E-H+i\varepsilon)} \frac{2\varepsilon}{(E-E'-i\varepsilon)} \frac{1}{(E-E'+i\varepsilon)} \Phi_i^+ \\
&= i\varepsilon G^+ 2\pi\delta(E-E') \Phi_i^+,
\end{aligned} \tag{1.138}$$

naravno i ovde sve vreme $\varepsilon \rightarrow 0^+$. U poslednjem izrazu iskoristili smo jednakost (videti Prilog A):

$$2\pi\delta(E-E') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-E')t} = \frac{2\varepsilon}{(E-E'+i\varepsilon)(E-E'-i\varepsilon)}. \tag{1.139}$$

Konačno imajući u vidu izraz (1.126) dobijamo:

$$\Psi_i^+ = i\varepsilon G^+ \Phi_i^+. \tag{1.140}$$

Ova jednačina je često polazna relacija u izvodjenju integralnih Lippmann-Schwinger-ovih jednačina i to na sledeći način. Zamenom (1.119) u (1.140) se dobija:

$$\Psi_i^+ = i\varepsilon G^+ \Phi_i^+ = i\varepsilon G_i^+ \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c i\varepsilon G^+ \Phi_i^+ = \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+. \tag{1.141}$$

Član $i\varepsilon G_i^+ \Phi_i^+$ je jednak Φ_i^+ što se da lako videti iz $i\varepsilon G_i^+ \Phi_i^+ = \frac{i\varepsilon}{E-H_i^c+i\varepsilon} \Phi_i^+ = \frac{i\varepsilon}{E-E+i\varepsilon} \Phi_i^+ = \Phi_i^+$.

1.4 Born-ov perturbacioni razvoj sa korektnim graničnim uslovima

Egzaktna amplituda prelaza sa korektnim graničnim uslovima može da se napiše u prior (-) i post (+) formi:

$$T_{if}^- = \langle \Psi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \tag{1.142}$$

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Psi_i^+ \rangle, \tag{1.143}$$

koje su međusobno jednake na energetskeju ljusci (on-shell), tj. za prelaze za koje se ukupna energija održava. Rešavanje problema rasejanja u kojem učestvuju četiri tela (dva jezgra i dva elektrona) je izuzetano težak. Born-ov perturbacioni razvoj sa korektnim graničnim uslovima ćemo dobiti na sledeći način. Zamenom formalnog rešenja (1.132) u izraz (1.143) za post formu amplitude prelaza imamo:

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Psi_i^+ \rangle = \langle \Phi_f^- | V_f^c (1 + G^+ V_i^c) | \Phi_i^+ \rangle. \tag{1.144}$$

Odavde vidimo da zamenom razvoja za G^+ iz jednačina (1.121-1.123) u (1.143) možemo da napišemo tri različite verzije Born-ovog razvoja sa korektnim graničnim uslovima:

$$T_{if}^+ = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots, \quad (1.145)$$

$$T_{if}^+ = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots, \quad (1.146)$$

$$T_{if}^+ = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots, \quad (1.147)$$

$$T_{if}^{(CB1)+} = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle. \quad (1.148)$$

Sabirak $T_{if}^{(CB1)+}$ je post forma prve Born-ove aproksimacije sa korektnim graničnim uslovima za četvorochestične sudare (CB1-4B metod), koji je isti u svim prikazanim varijantima. Slično, n -ta Born-ova aproksimacija (CB n -4B metod) se dobija zadržavanjem prvih n sabiraka u gornjim perturbacionim razvojem. Na primer druga Born-ova aproksimacija sa korektnim graničnim uslovima za četvorochestične sudare (CB2-4B metod) ima sledeću formu:

$$T_{if;0}^{(CB2)+} = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \quad (1.149)$$

$$T_{if;i}^{(CB2)+} = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \quad (1.150)$$

$$T_{if;f}^{(CB2)+} = T_{if}^{(CB1)+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle. \quad (1.151)$$

Kao što je već rečeno mogu da postoje i druga iterativna rešenja za G^+ a samim tim i druge verzije Born-ovog razvoja. Drugim rečima ne postoji jedinstven Born-ov razvoj amplitude prelaza T_{if}^+ .

Sličan postupak može da se uradi i za prior formu amplitude prelaza. Dakle, zamenom formalnog rešenja (1.134) u izraz (1.142) za prior formu imamo:

$$\begin{aligned} T_{if}^- &= \langle \Psi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle = \langle \Phi_f^- | (1 + G^- V_f^c)^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle \\ &= T_{if}^{(CB1)-} + \langle \Phi_f^- | (G^- V_f^c)^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \end{aligned} \quad (1.152)$$

gde je:

$$T_{if}^{(CB1)-} = \langle \Phi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \quad (1.153)$$

prior forma prve Born-ove aproksimacije sa korektnim graničnim uslovima za četvorochestične sudare (CB1-4B metod). Takodje i ovde mogu da se napišu različiti razvoji za T_{if}^- u zavisnosti od različitih iterativnih rešenja za G^- .

Do sada su uradjena dva metoda za eksplicitno izračunavanje matričnih elemenata dvostrukog elektronskog zahvata u CB1-4B aproksimaciji koje je razvio i implementirao Belkić [42, 43] sa istim numeričkim rezultatima. Takodje je uradjena prva Born-ova aproksimacija i za jednostruki elektronski zahvat Mančev *et al.* [44]-[50]. Medjutim, CB2-4B metod još nije uradjena ni za jedan četvorochestični problem.

Sa druge strane CB2-3B aproksimaciju je primenio Belkić [51, 52] u opisu jednostrukog elektronskog zahvata. Iz tog razloga razmotrimo ukratko tročestični problem zahvata elektrona:

$$Z_P + (Z_T; e)_i \rightarrow (Z_P; e)_f + Z_T. \quad (1.154)$$

Ako u izlaznom kanalu uzmemo Coulomb-ov potencijal $V_T = -Z_T/x$ za perturbaciju a za relativno kretanje teških čestica u neperturbovanim talasnim funkcijama Φ_i , Φ_f iskoristimo samo ravanske talase dobićemo Brinkman-Kramers-ovu aproksimaciju prvog reda (BK1-3B [53, 54]) sa amplitudom prelaza u post formi:

$$T_{if}^{(BK1)+} = \langle \Phi_f | V_T | \Phi_i \rangle. \quad (1.155)$$

Uključivanjem drugog člana $\langle \Phi_f | V_T G_0^+ V_P | \Phi_i \rangle$ iz Born-ovog perturbacionog razvoja sa nekorektnim graničnim uslovima dobijamo tročestičnu Brinkman-Kramers-ovu aproksimaciju drugog reda (BK2-3B [55]-[59]) sa amplitudom prelaza u post formi:

$$T_{if}^{(BK2)+} = \langle \Phi_f | V_T | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V_T G_0^+ V_P | \Phi_i \rangle, \quad (1.156)$$

gde je $V_P = -Z_P/s$ perturbacija u ulaznom kanalu a G_0^+ Green-ova funkcija za proces (1.154). Ako inicijalnu V_P i finalnu perturbaciju V_T zamenimo odgovarajućim ukupnim perturbacijama (u kojima je uračunata i interakcija između jezgara) u ulaznom i izlaznom kanalu respektivno:

$$V_i = V_P + V_{PT} = -\frac{Z_P}{s} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (1.157)$$

$$V_f = V_T + V_{PT} = -\frac{Z_T}{x} + \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (1.158)$$

dobićemo tročestičnu Jackson-Schiff-ovu aproksimaciju prvog (JS1-3B [60]-[63]) i drugog reda (JS2-3B [64, 65]):

$$T_{if}^{(JS1)+} = \langle \Phi_f | V_T + V_{PT} | \Phi_i \rangle, \quad (1.159)$$

$$T_{if}^{(JS2)+} = \langle \Phi_f | V_T + V_{PT} | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | (V_T + V_{PT}) G_0^+ (V_P + V_{PT}) | \Phi_i \rangle. \quad (1.160)$$

Sa fizičke strane gledano BK2-3B [55]-[59] aproksimacija bi trebalo da bude adekvatnija od BK1-3B [53, 54] modela jer uključuje u sebi intermedijalni operator $V_T G_0^+ V_P$. Međutim Belkić [51] je pokazao na primeru jednostrukog elektronskog zahvata u simetričnom sudaru $H^+ + H$ da BK2-3B neočekivano daje mnogo lošije slaganje sa eksperimentalnim rezultatima od BK1-3B koji je takodje neadekvatan. Ta činjenica je ukazala na neobaziranje na neke bazične principe koji su značajniji od uključivanja viših redova u perturbacionoj seriji. Ovi principi odnose se na korektno definisanje perturbacionih potencijala na beskonačnosti, to jest BK1-3B i BK2-3B ne zadovoljavaju korektne granične uslove za sve vrednosti naelektrisanja Z_P i Z_T u procesu (1.154). Slični zaključci se mogu izvesti i u slučaju JS1-3B [60]-[63] i JS2-3B metoda [64, 65], sa jednim izuzetkom kada je $Z_P = Z_T = 1$ u procesu (1.154) i kada su korektno definisani perturbacioni potencijali.

Sa druge strane kao što se vidi iz radova [51, 52] CB2-3B aproksimacija daje odlično slaganje sa eksperimentalnim rezultatima a takodje i poboljšanje u odnosu na CB1-3B aproksimaciju. Time je i pokazano da pravilno tretiranje korektnih graničnih uslova je od suštinske važnosti u opisu ma kog problema jon-atomskih sudara.

Ukoliko u izrazima za post (1.148) i prior (1.153) formu prve Born-ove aproksimacije umesto asimptotskih formi Φ_f^- i Φ_i^+ zamenimo funkcije Φ_f^c , Φ_i^c respektivno date relacijama (1.61) i (1.44) dobićemo Coulomb-Born-ovu aproksimaciju (CB-4B aproksimacija) u post i prior formi:

$$T_{if}^{(CB)+} = \langle \Phi_f^c | V_f^c | \Phi_i^c \rangle, \quad (1.161)$$

$$T_{if}^{(CB)-} = \langle \Phi_f^c | V_i^c | \Phi_i^c \rangle. \quad (1.162)$$

Ova aproksimacija, za tri tela (CB-3B), je bila i formulisana za opisivanje zahvata elektrona vezanog za metu od strane ogoljenog projektila u oblasti visokih energija, tako da su njene prve primene bile u vezi jednoelektronskog zahvata u asimetričnim sudarima [66]-[71].

Glava 2

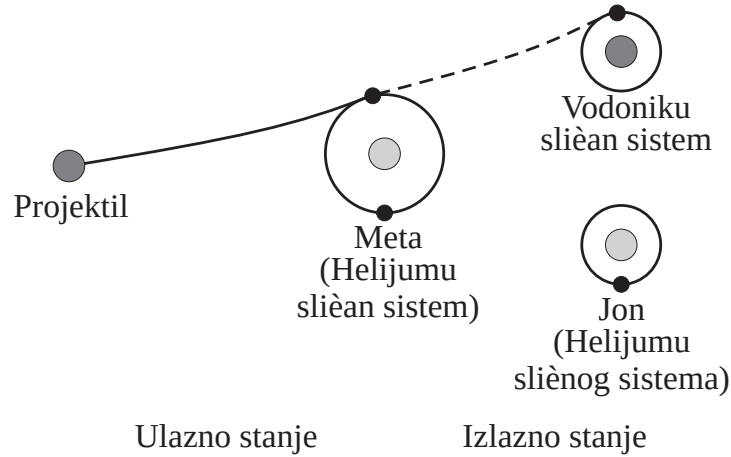
Totalni efikasni preseci za jednostruki elektronski zahvat

2.1 Prva Born-ova aproksimacija u prior formi

Ovde ćemo razmotriti jednostruki elektronski zahvat koji je šematski prikazan na slici 2.1 i koji je dat relacijom (2.1):

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_{1s^2} \longrightarrow (Z_P, e_1)_{n^f l^f m^f} + (Z_T, e_2)_{1s}, \quad (2.1)$$

gde $n^f l^f m^f$ predstavljaju glavni, orbitalni i magnetni kvantni broj respektivno vodoniče funkcije novonastalog vodoniku sličnog sistema (Z_P, e_1) u izlaznom kanalu (finalno stanje, što je i naglašeno eksponentom f), dok su $1s^2(^1S)$ i $1s$ osnovno singletno stanje dvoelektronske mete i osnovno stanje novonastalog vodoniku sličnog sistema (Z_T, e_2) respektivno.



Slika 2.1: Šematski prikaz procesa jednostrukog elektronskog zahvata u sudaru potpuno ogoljenog projektila sa dvoelektronskom metom.

Prior forma amplitude prelaza za proces (2.1) u CB1-4B aproksimaciji je data kao devetostruki integral [46, 47]:

$$T_{if}^-(\vec{\eta}) = \int \int \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 d\vec{R} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1) \varphi_T^*(\vec{x}_2) \left(\frac{2Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} \right) \times \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{R} - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1} \mathcal{E}(\vec{R}), \quad (2.2)$$

gde $\mathcal{E}(\vec{R}) = e^{i(Z_P-1)(Z_T-1)\ln(vR+\vec{v}\cdot\vec{R})/v+iZ_P(Z_T-2)\ln(vR-\vec{v}\cdot\vec{R})/v}$ može imati jedan od dva ekvivalentna oblika:

$$\mathcal{E}(\vec{R}) = \begin{cases} (\rho v)^{2iZ_P(Z_T-2)/v} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} \\ (\rho v)^{2i(Z_T-1)(Z_P-1)/v} (vR - \vec{v} \cdot \vec{R})^{-i\xi} \end{cases} \quad (2.3)$$

Ovde je $\xi = (Z_P - Z_T + 1)/v$ sa brzinom projektila v , dok je $\vec{\rho}$ projekcija vektora $\vec{R}$ na XOY ravan ($\vec{\rho} = \vec{R} - \vec{Z}$, $\vec{\rho} \cdot \vec{Z} = 0$). Belkić [3] je pokazao da u slučaju egzaktne eikonal amplitude prelaza, multiplikativni term $(\rho v)^{2iZ_P(Z_T-2)/v}$ ili $(\rho v)^{2i(Z_T-1)(Z_P-1)/v}$ ne utiče na totalni efikasni presek i iz tog razloga biće izostavljen iz daljeg razmatranja. Ovde je korišćen oblik $\mathcal{E}(\vec{R})$ koji sadrži $(vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}$. U izvođenju izraza (2.2) iskorišćena je eikonal (mali ugao rasejanja teških čestica) aproksimacija data jednačinom (1.63).

Momenti transfera $\vec{\alpha}$ and $\vec{\beta}$ su definisani relacijama (1.64-1.65):

$$\vec{\alpha} = \vec{\eta} - \alpha_z \hat{v}, \quad \vec{\beta} = -\vec{\eta} - \beta_z \hat{v}, \quad \vec{\alpha} + \vec{\beta} = -\vec{v},$$

$$\alpha_z = v/2 - \Delta E/v, \quad \beta_z = v/2 + \Delta E/v,$$

gde je $\Delta E = \epsilon_i - \epsilon_f$ sa vezivnim energijama ϵ_i i $\epsilon_f = -Z_P^2/[2(n^f)^2] - Z_T^2/2$ dvoelektronske mete i sistema $(Z_P, e_1)_{n^f l^f m^f}$ i $(Z_T, e_2)_{1s}$, respektivno.

Veličina ΔE , predstavlja energijski defekt za razmatranu reakciju i često se u eksperimentalnim proučavanjima označava sa Q , zbog čega se i zove Q -faktor. Q -faktor je od ključne važnosti u spektroskopiji, jer se merenjem Q vrednosti eksperimentalno dobija podatak za energijski dobitak ili gubitak rasejavajućeg projektila odnosno za neelastični energijski transfer, zbog čega se ova veličina i naziva faktorom neelastičnosti. Ova notacija i nomenklatura se izbegava u teorijskim istraživanjima zbog prakse da se slovom Q označava efikasan presek, što je i urađeno u ovom radu, tako da ćemo se zadržati na oznaci ΔE . Kao što je već rečeno $\vec{\eta} = (\eta \cos \phi_\eta, \eta \sin \phi_\eta, 0)$ je transferzalni moment transfera koji zadovoljava relaciju $\vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0$.

Funkcija $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ označava dvoelektronsku talasnu funkciju osnovnog stanja atomskog sistema $(Z_T; e_1, e_2)_{1s^2}$. Mi ćemo ovde iskoristiti generalnu faktorizovanu formu za vezano stanje helijumu sličnog atomskog sistema:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \sum_{k,l} \varphi_{\alpha k}(\vec{x}_1) \varphi_{\alpha l}(\vec{x}_2), \quad (2.4)$$

gde je $\varphi_{\alpha j}(\vec{r}) = N_{\alpha j} \exp(-\alpha_j r)$, $N_{\alpha j} = a_j \sqrt{N}$ ($j = k, l$) a N je normalizaciona konstanta. Vrednosti sumacionih indeksa k i l , kao i variacionih parametara α_j i a_j koji se odredjuju variacionom metodom, zavise od konkretnog izbora talasne funkcije. Funkcije $\varphi_T(\vec{x}_2)$ i $\varphi_{n^f l^f m^f}(\vec{s}_1)$ u jednačini (2.2) predstavljaju talasne funkcije vezanih stanja vodoniku sličnih sistema $(Z_T, e_2)_{1s}$ i $(Z_P, e_1)_{n^f l^f m^f}$ u izlznom kanalu, respektivno.

2.1.1 Analitičko sredjivanje amplitude prelaza koja uključuje proizvoljna finalna pobudjena stanja formiranog vodoniku sličnog atomskog sistema

U izodjenju predstavljenom ovde mi ćemo koristiti rezultate iz reference [72] koji su prilagodjeni za proces (2.1). U tom cilju amplituda prelaza (2.2) može da se svede na sledeći oblik koji je pogodan za dalja analitička izračunavanja:

$$T_{if}^-(\vec{\eta}) = Z_P \sum_{k,l} N_{k,l} \left[2J_R^{(k,l)} - J_{s_1}^{(k,l)} - J_{s_2}^{(k,l)} \right], \quad (2.5)$$

gde je:

$$J_{\omega}^{(k,l)} = \int d\vec{R} e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\zeta} W_{\omega}^{(k,l)}(\vec{R}), \quad (\omega = R, s_1, s_2), \quad (2.6)$$

$$W_R^{(k,l)} = \frac{1}{R} \mathcal{B}_k \mathcal{A}_l, \quad W_{s_1}^{(k,l)} = \mathcal{C}_k \mathcal{A}_l, \quad W_{s_2}^{(k,l)} = \mathcal{B}_k \mathcal{D}_l, \quad (2.7)$$

$$\mathcal{A}_l = \int d\vec{x}_2 e^{-(Z_T + \alpha_l)x_2} = \frac{8\pi}{(Z_T + \alpha_l)^3}, \quad (2.8)$$

$$\mathcal{D}_l = \int d\vec{x}_2 e^{-(Z_T + \alpha_l)x_2} \frac{1}{s_2} = 2\pi(Z_T + \alpha_l) \int_0^1 dt_1 \frac{(1-t_1)}{\Delta_1^3} (1 + \Delta_1 R) e^{-\Delta_1 R}, \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_k &= \int d\vec{x}_1 e^{-i\vec{v} \cdot \vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1) = \int d\vec{x}_1 e^{-i\vec{v} \cdot \vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \\ &\times \left[\int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{s}_1} \tilde{\varphi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) \right]^*, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_k &= \int d\vec{x}_1 e^{-i\vec{v} \cdot \vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \frac{\varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1)}{s_1} = \int d\vec{x}_1 e^{-i\vec{v} \cdot \vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \\ &\times \left[\int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{s}_1} \tilde{\chi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) \right]^*, \end{aligned} \quad (2.11)$$

sa $\chi_{n^f l^f m^f}(\vec{s}_1) = \varphi_{n^f l^f m^f}(\vec{s}_1)/s_1$, $N_{k,l} = (Z_T)^{3/2} N_{\alpha_k} N_{\alpha_l} / \sqrt{\pi}$ i $\Delta_1^2 = (Z_T + \alpha_l)^2 (1 - t_1)$. Korišćenjem Fourier-ovog transformisa $f(\vec{q}) = (2\pi)^{-3} \int d\vec{r} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} f(\vec{r})$ možemo talasnu funkciju sličnu vodoničnoj $\varphi_{n^f l^f m^f}(\vec{s}_1)$ i $\chi_{n^f l^f m^f}(\vec{s}_1)$ napisati u impulsnoj reprezentaciji [73]:

$$\tilde{\varphi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) = (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} i^{l^f} \sum_{p=0}^{n_r} c_p \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}(\vec{q})}{[q^2 + (Z_P/n^f)^2]^{p+l^f+2}}, \quad (2.12)$$

$$\tilde{\chi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) = (2\pi)^{-3} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} i^{l^f} \sum_{p=0}^{n_r} c_p \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}(\vec{q})}{[q^2 + (Z_P/n^f)^2]^{p+l^f+1}}, \quad (2.13)$$

gde su:

$$N_f^{Z_P} = 16\pi Z_P \left[\frac{(Z_P/n^f)^3 (n^f + l^f)!}{n^f n_r!} \right]^{1/2} \frac{l^f! (4Z_P/n^f)^{l^f}}{(2l^f + 1)!}, \quad (2.14)$$

$$c_p = \frac{(-n_r)_p (n^f + l^f + 1)_p}{(l^f + 3/2)_p p!} (Z_P/n^f)^{2p}, \quad n_r = n^f - l^f - 1. \quad (2.15)$$

Veličina $\mathcal{Y}_{lm}(\vec{q})$ predstavlja regularni solid harmonik $\mathcal{Y}_{lm}(\vec{q}) = q^l Y_{lm}(\hat{\vec{q}})$, dok je $Y_{lm}(\hat{\vec{q}})$ sferni harmonik (videti Prilog B), a $(a)_n$ je Pochhammer-ov simbol $(a)_n = \Gamma(a+n)/\Gamma(a) = a(a+1)\cdots(a+n-1)$, $(a)_0 = 1$. Korišćenjem jednačina (2.12) i (2.13), možemo integrale $\mathcal{B}_k$ i $\mathcal{C}_k$ zapisati kao:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_k &= (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} (-i)^{l^f} 8\pi \alpha_k \sum_{p=0}^{n_r} c_p \mathcal{G}_{k,p}^{(2)}, \\ \mathcal{C}_k &= (2\pi)^{-3} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} (-i)^{l^f} 8\pi \alpha_k \sum_{p=0}^{n_r} c_p \mathcal{G}_{k,p}^{(1)}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

gde su:

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(\nu)} = e^{i\vec{\alpha} \cdot \vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} - \vec{\alpha})}{(|\vec{q} - \vec{\alpha}|^2 + a_f^2)^{p+l^f+\nu} (|\vec{q} + \vec{\beta}|^2 + \alpha_k^2)^2}, \quad (2.17)$$

$$\nu = 1, 2, \quad a_f = Z_P/n^f. \quad (2.18)$$

Prilikom izvođenja gornje relacije iskorišćena je smena $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - \vec{\alpha}$. Imenioc u integrandu integrala (2.17) možemo transformisati korišćenjem Feynman-ovog parametrizacionog integrala:

$$\frac{1}{A^s B^r} = \frac{(s+r-1)!}{(s-1)!(r-1)!} \int_0^1 dt \frac{t^{s-1} (1-t)^{r-1}}{[At + B(1-t)]^{s+r}}, \quad (s, r \geq 1), \quad (2.19)$$

nakon čega imamo:

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(\nu)} = (p+l^f+\nu+1)(p+l^f+\nu) \int_0^1 dt t^{p+l^f+\nu-1} (1-t) \mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)}, \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)} &= e^{i\vec{\alpha} \cdot \vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} - \vec{\alpha})}{(|\vec{q} - \vec{Q}|^2 + \Delta^2)^{p+l^f+2+\nu}} \\ &= e^{-i\vec{Q}_\alpha \cdot \vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha)}{(q^2 + \Delta^2)^{p+l^f+2+\nu}}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

gde smo takodje uveli smenu promenljive $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{Q}$. Veličine $\vec{Q}$, $\vec{Q}_\alpha$ i Δ^2 date su sledećim relacijama:

$$\vec{Q} = \vec{\alpha}t - \vec{\beta}(1-t), \quad \vec{Q}_\alpha = \vec{Q} - \vec{\alpha} = (1-t)\vec{v}, \quad (2.22)$$

$$\Delta^2 = v^2 t(1-t) + a_f^2 t + \alpha_k^2 (1-t). \quad (2.23)$$

Uvedimo sada adicijonu teoremu za regularne solid harmonike [74, 75] koja je data sa:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha) = \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) \mathcal{Y}_{l_1^f m_1^f}(\vec{q}) \mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}(\vec{Q}_\alpha), \quad (2.24)$$

gde je $l_1^f + l_2^f = l^f$, $m_1^f + m_2^f = m^f$, $-l_j^f \leq m_j^f \leq l_j^f$ ($j = 1, 2$) i

$$(l_1^f m_1^f | l^f m^f) = \left[4\pi \frac{2l^f+1}{(2l_1^f+1)(2l_2^f+1)} \frac{(l^f+m^f)!}{(l_1^f+m_1^f)!(l_2^f+m_2^f)!} \frac{(l^f-m^f)!}{(l_1^f-m_1^f)!(l_2^f-m_2^f)!} \right]^{1/2}. \quad (2.25)$$

Korišćenjem relacije $\mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}(\vec{Q}_\alpha) = \mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}[(1-t)\vec{v}] = (1-t)^{l_2^f} v^{l_2^f} Y_{l_2^f m_2^f}(\hat{v})$ i izborom brzine $\vec{v}$ duž Z -ose, vidimo da će sferni harmonik $Y_{l_2^f m_2^f}(\hat{v})$ biti različit od nule jedino za $m_2^f = 0$, dakle imaćemo $Y_{l_2^f m_2^f}(\hat{v}) = \sqrt{(2l_2^f+1)/(4\pi)} \delta_{0,m_2^f}$. U tom slučaju suma po m_1^f u jednačini (2.24) nestaje, tako da se ova formula redukuje na (videti Prilog C):

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha) &= \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} (1-t)^{l_2^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{q}) \delta_{m_1^f, m^f} \\ &= \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (1-t)^{l_2^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{q}), \end{aligned} \quad (2.26)$$

gde su:

$$\Omega(l_1^f, \vec{v}) = (l_1^f | l^f m^f) (-1)^{-m^f} v^{l_2^f} / \sqrt{4\pi}, \quad (2.27)$$

$$(l_1^f | l^f m^f) = \left[\frac{2l^f + 1}{(2l_1^f + 1)} \frac{(l^f + m^f)!}{(l_1^f + m^f)!} \frac{(l^f - m^f)!}{(l_1^f - m^f)! (l_2^f!)^2} \right]^{1/2}. \quad (2.28)$$

Sada pomoćni integral $\mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)}$ dat jednačinom (2.21) možemo napisati u sledećoj formi:

$$\mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)} = e^{-i\vec{Q}_\alpha \cdot \vec{R}} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (1-t)^{l_2^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{W}_{k,p}^{(\nu)}, \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{k,p}^{(\nu)} &= \sqrt{4\pi} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{q})}{(q^2 + \Delta^2)^{p+l^f+2+\nu}} \\ &= (-i)^{l_1^f} \mathcal{L}_{k,p}^{(\nu)} \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{R}). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Prilikom izvodjenja izraza (2.30), iskorišćen je razvoj ravnog talasa po sfernim (parcijalnim) [76] talasima¹:

$$e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-i)^l j_l(qR) Y_{lm}^*(\hat{\vec{q}}) Y_{lm}(\hat{\vec{R}}), \quad (2.31)$$

zajedno sa formulom [74, 72]:

$$\mathcal{L}_{k,p}^{(\nu)} = \frac{(4\pi)^{3/2}}{R^{l_1^f}} \int_0^\infty dq \frac{q^{l_1^f+2} j_{l_1^f}(qR)}{(q^2 + \Delta^2)^{p+l^f+2+\nu}} = 4\pi^{5/2} \frac{\hat{k}_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta)}{2^{n_\nu} n_\nu! \Delta^{2n_\nu-2l_1^f-1}}, \quad (2.32)$$

gde su:

$$\mu_\nu = p + l^f + 1 + \nu - l_1^f, \quad n_\nu = n - \sigma_\nu, \quad (2.33)$$

$$n = p + l^f + 3, \quad \sigma_1 = 1, \quad \sigma_2 = 0, \quad (2.34)$$

dok je $j_l(x)$ sferna Bessel-ova funkcija [77]. Veličina $\hat{k}_\delta(z)$ predstavlja redukovanu Bessel-ovu funkciju $\hat{k}_\delta(z) = \sqrt{2/\pi} z^\delta K_\delta(z)$, gde je $K_\delta(z)$ McDonald-ova funkcija [77].

Na ovaj način integrali $\mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)}$ i $\mathcal{G}_{k,p}^{(\nu)}$ postaju:

$$\mathcal{U}_{k,p}^{(\nu)} = \frac{4\pi^{5/2}}{2^{n_\nu} n_\nu!} e^{-i\vec{Q}_\alpha \cdot \vec{R}} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-i)^{l_1^f} (1-t)^{l_2^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \frac{B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta)}{\Delta^{2n_\nu-2l_1^f-1}}, \quad (2.35)$$

¹Funkcija oblika $\Psi(\vec{r}) = C j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\vec{r}})$ predstavlja sferni talas, gde je C konstanta normiranja. Za ravan talas važi razvoj

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm}(\hat{\vec{k}}) j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\vec{r}}),$$

gde su koeficijenti razvoja dati sa $C_{lm}(\hat{\vec{k}}) = 4\pi i^l Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}})$.

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(\nu)} = \frac{4\pi^{5/2}}{2^{n_\nu}(n_\nu - 2)!} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-i)^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \times \int_0^1 dt t^{n_\nu-2} (1-t)^{l_2^f+1} e^{-i\vec{Q}_\alpha \cdot \vec{R}} \frac{B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta)}{\Delta^{2n_\nu-2l_1^f-1}}, \quad (2.36)$$

gde je $B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta) = \hat{k}_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta) \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{R})$ takozvana B -funkcija [78]. Zamenom izraza (2.36) u izraz (2.16) i korišćenjem jednačina (2.6) i (2.7) imamo:

$$J_\omega^{(k,l)} = D_{l^f}^{(k,l)} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^n(n-3)!} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-i)^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \int_0^1 dt \frac{t^{n-2}(1-t)^{l_2^f+1}}{\Delta^{2n-2l_1^f-1}} I_w^{(p,l_1^f)}, \quad (2.37)$$

gde je:

$$D_{l^f}^{(k,l)} = 64\pi^{9/2} (-i)^{l^f} N_f^{Z_P}(Z_T + \alpha_l) \alpha_k, \quad (2.38)$$

$$I_R^{(p,l_1^f)} = \frac{4(2\pi)^{-3}}{(Z_T + \alpha_l)^4(n-2)} \int d\vec{R} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} R^{-1} B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_2)}(\vec{R}\Delta), \quad (2.39)$$

$$I_{s_1}^{(p,l_1^f)} = \frac{4\Delta^2(2\pi)^{-3}}{Z_P(Z_T + \alpha_l)^4 t} \int d\vec{R} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_1)}(\vec{R}\Delta), \quad (2.40)$$

$$I_{s_2}^{(p,l_1^f)} = \frac{(2\pi)^{-3}}{(n-2)} \int_0^1 dt_1 \frac{(1-t_1)}{\Delta_1^3} \times \int d\vec{R} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_2)}(\vec{R}\Delta) (1 + \Delta_1 R) e^{-\Delta_1 R}. \quad (2.41)$$

Da bi smo rešili integrale (2.39)–(2.41) po promenljivoj $\vec{R}$ najpre ćemo B -funkciju napisati kao linearnu kombinaciju nenormalizovanih Slater-ovih orbitala [72, 78] (videti Prilog D):

$$B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta) = \sum_{p_r=0}^{\mu_\nu-1} b_{p_r}^{\mu_\nu} \Delta^{p_r} \chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n)}(\vec{R}\Delta), \quad (2.42)$$

gde su:

$$b_{p_r}^{\mu_\nu} = \frac{(2\mu_\nu - p_r - 2)! 2^{p_r+1-\mu_\nu}}{(\mu_\nu - p_r - 1)! p_r!}, \quad p_n = p_r + l_1^f + 1, \quad (2.43)$$

$$\chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n)}(\vec{R}\Delta) = R^{p_n-1} e^{-R\Delta} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{\vec{R}}). \quad (2.44)$$

Sa druge strane Fourier-ov transform pomoćne funkcije $\chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\vec{R}\Delta_\tau)$ za $\lambda = 0, 1, 2$, uvedene sa:

$$\chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\vec{R}\Delta_\tau) = (vR - \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} R^{\lambda-1} \chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n)}(\vec{R}\Delta_\tau) \quad (\tau = 0, 2), \quad (2.45)$$

$$\Delta_0 \equiv \Delta, \quad \Delta_2 = \Delta + \Delta_1,$$

je izračunat sa rezultatom:

$$\tilde{\chi}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\vec{Q}\Delta_\tau) = \frac{(-1)^{l_1^f} (2i)^{l_1^f} p_\lambda}{2\pi^2} \sum_{k=0}^{l_1^f} \sum_{l_1=|m^f|}^{l_1^f} \Phi_{p_\lambda l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda) \mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q} \cdot \vec{v}), p_\lambda = p_r + \lambda, \quad (2.46)$$

gde je:

$$\mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q} \cdot \vec{v}) = (l_1 |l_1^f - m^f|)(-iv)^{l_2} \mathcal{Y}_{l_1, -m^f}(\vec{Q}), \quad (2.47)$$

$$(l_1 |l_1^f - m^f|) = \left[\frac{2l_1^f + 1}{(2l_1 + 1)} \frac{(l_1^f + m^f)!}{(l_1 + m^f)!} \frac{(l_1^f - m^f)!}{(l_1 - m^f)!(l_2!)^2} \right]^{1/2}. \quad (2.48)$$

Ostale veličine koje se javljaju u izrazu (2.46) definisane su sa:

$$\Phi_{p_\lambda l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda) = \left(a_\tau^\lambda b_\tau^\lambda \right) {}_3F_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; 1/A_\tau), \quad (2.49)$$

$$a_\tau^\lambda = \Gamma(1 + i\xi)(l_1^f + 1)_{p_\lambda} \frac{(2D_\tau)^{p_\lambda}}{(\Delta_\tau^2 + Q^2)^{l_1^f}} \mathcal{F}_\tau, \quad (2.50)$$

$$b_\tau^\lambda = \frac{(1 + i\xi)_{l_1}(-i\xi)_{l_2}}{B_\tau^{l_2}} \frac{(-p_\lambda)_k (i\gamma_2)_k}{(l_1^f + 1)_k} \frac{(-1)^k C_\tau^k}{k!}, \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} & {}_3F_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; 1/A_\tau) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_\lambda/2]} \frac{(-k_\lambda/2)_u (-k_\lambda/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + l_1^f + 1)_u (-p_\lambda - l_1^f)_u u!} \left(\frac{1}{A_\tau} \right)^u, \end{aligned} \quad (2.52)$$

gde su:

$$A_\tau = \frac{\Delta_\tau^2}{\Delta_\tau^2 + Q^2}, \quad B_\tau = \frac{2(v\Delta_\tau - i\vec{Q} \cdot \vec{v})}{\Delta_\tau^2 + Q^2}, \quad C_\tau = \frac{v}{B_\tau \Delta_\tau} - 1, \quad (2.53)$$

$$D_\tau = \frac{A_\tau}{\Delta_\tau}, \quad \mathcal{F}_\tau = \frac{B_\tau^{i\xi}}{\Delta_\tau^2 + Q^2}, \quad (2.54)$$

$$k_\lambda = p_\lambda - k, \quad l_1 + l_2 = l_1^f, \quad \gamma_1 = -\xi + il_1, \quad \gamma_2 = -\xi - il_2. \quad (2.55)$$

Funkcija ${}_3F_2$ je Clausen-ov generalisani hipergeometrijski polinom [79] dok je simbolom $[k_\lambda/2]$ (takozvani ceo deo) označen najveći ceo broj sadržan u razlomku $k_\lambda/2$.

Zamenom izraza (2.42) i (2.46) u izraze (2.39)–(2.41) a nakon toga zamenom (2.39), (2.40) i (2.41) u (2.37) dobijamo konačne izraze za integrale $J_\omega^{(k, l)}$ ($\omega = R, s_1, s_2$):

$$J_R^{(k, l)} = \frac{2D_{l^f}^{(k, l)}}{\pi^2 (Z_T + \alpha_l)^4} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^n (n-2)!} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{M}_R^{(p, l_1^f)}, \quad (2.56)$$

$$J_{s_1}^{(k, l)} = \frac{D_{l^f}^{(k, l)}}{\pi^2 Z_P (Z_T + \alpha_l)^4} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^{n-1} (n-3)!} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{M}_{s_1}^{(p, l_1^f)}, \quad (2.57)$$

$$J_{s_2}^{(k,l)} = \frac{D_{lf}^{(k,l)}}{2\pi^2} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^n(n-2)!} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{M}_{s_2}^{(p,l_1^f)}, \quad (2.58)$$

gde su:

$$\mathcal{M}_R^{(p,l_1^f)} = \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt \frac{t^{n-2}(1-t)^{l_2^f+1}}{\Delta^{2n-2l_1^f-p_r-1}} G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,0)}(\vec{Q}\Delta), \quad (2.59)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{s_1}^{(p,l_1^f)} &= \frac{(2n_p-2)!}{(n_p-1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1-n_p)_{p_r}}{(2-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p+1}}{p_r!} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-3}(1-t)^{l_2^f+1}}{\Delta^{2(n-1)-2l_1^f-p_r-1}} G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,1)}(\vec{Q}\Delta), \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{s_2}^{(p,l_1^f)} &= \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt_1 \frac{(1-t_1)}{\Delta_1^3} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-2}(1-t)^{l_2^f+1}}{\Delta^{2n-2l_1^f-p_r-1}} \left[G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,1)}(\vec{Q}\Delta_2) + \Delta_1 G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,2)}(\vec{Q}\Delta_2) \right], \end{aligned} \quad (2.61)$$

$$G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,\lambda)}(\vec{Q}\Delta_\tau) = \sum_{k=0}^{p_\lambda} \sum_{l_1=|m^f|}^{l_1^f} \Phi_{p_r l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda) \mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q} \cdot \vec{v}), \quad (2.62)$$

i $n_p = n - l_1^f - 1$. Korišćenjem ovih rezultata možemo zapisati amplitudu prelaza u konačnom obliku kao:

$$\begin{aligned} T_{if}^-(\vec{\eta}) &= \sum_{k,l} \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} \mathcal{N}_{k,l} \frac{c_p}{2^n(n-3)!} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \\ &\times \left\{ \frac{4}{(Z_T + \alpha_l)^4} \left[\frac{2}{n-2} \mathcal{M}_R^{(p,l_1^f)} - \frac{1}{Z_P} \mathcal{M}_{s_1}^{(p,l_1^f)} \right] - \frac{1}{n-2} \mathcal{M}_{s_2}^{(p,l_1^f)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

gde je

$$\mathcal{N}_{k,l} = \frac{1}{2\pi^2} Z_P N_{k,l} D_{lf}^{(k,l)}. \quad (2.64)$$

Na ovaj način smo analitičkim sredjivanjem od devetostrukog integrala (2.2) dobili konačni oblik za amplitudu prelaza u formi dvostrukog integrala po realnim promenljivima t i t_1 . Ovaj račun je generalan jer se može primeniti kako za homonuklearne (simetrične - naelektrisanje projektila i jezgra mete su iste vrednosti) sudare tako i za heteronuklearne (asimetrične - naelektrisanje projektila i jezgra mete nisu iste vrednosti) sudare u kojima se dešava jednos-truki zahvat elektrona.

Totalni efikasni presek u CB1-4B metodi je dat sa:

$$Q_{if}^-(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}^-(\eta)|^2, \quad (2.65)$$

gde je ugaona integracija po ϕ_η (ugao koji zaklapa $\vec{\eta}$ sa X-osom) uradjena analitički sa rezultatom 2π jer integrand nije zavistan od tog ugla. Trostruka integracija po η , t i t_1 mora da se uradi numerički i u ovom radu su korišćene Gauss-Legendre-ove kvadrature.

2.1.2 Skaliranje i priprema za numeričku integraciju

Gauss-Legendre-ove (GL) kvadrature su date formulom:

$$\int_{-1}^{+1} f(t) dt = \sum_{k=1}^N w_k f(t_k). \quad (2.66)$$

Konkretno vrednosti za težinske koeficijente w_k i nule Legendre-ovih polinoma t_k uzete su iz priručnika [80, 81]. Iz tog razloga pogodno je izvršiti smenu promenljivih:

$$\eta = \left(\frac{2+2z}{1-z} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \eta \in [0, \infty] \Rightarrow z \in [-1, +1], \quad (2.67)$$

$$\eta^2 = z_0 \tilde{\eta}^2, \quad \tilde{\eta}^2 = 2(1+z), \quad z_0 = 1/z_1, \quad z_1 = 1-z, \quad \eta d\eta = 2z_0^2 dz. \quad (2.68)$$

Ovakva smena promenljive η posebno je važna jer se time integracione tačke koncentrišu u uskom konusu [82] u napred jer je njihov doprinos totalnom preseku dominantan u brzim sudarima (eikonal priroda rasejanja teških projektila). Ovo se da uočiti iz sledeće relacije:

$$\cos \theta = 1 - \left(\frac{1}{\mu v} \right)^2 \frac{1+z}{1-z}, \quad (2.69)$$

jer je ugao rasejanja θ povezan sa η preko $\eta = 2\mu v \sin(\theta/2)$, gde je μ redukovana masa sistema koga čine jezgro projektila i jezgro mete. Nakon sredjivanja i eliminacije singulariteta $z = 1$ koji postoji prema relaciji (2.67), koji je prividan jer nestaje posle analitičkog skaliranja (eliminacijom veličine $1-z$ iz imenioca izraza (2.65)) za totalni presek dobijamo:

$$Q_{if}^-(\pi a_0^2) = N_T \int_{-1}^{+1} dz |\tilde{T}_{if}^-(z)|^2, \quad (2.70)$$

gde smo simbolom tilda iznad odgovarajućih veličina naglasili da su one skalirane:

$$T_{if}^-(\eta) = z_1^{i\xi+1} \tilde{T}_{if}^-(z), \quad \mathcal{M}_R^{(p, l_1^f)} = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{M}}_R^{(p, l_1^f)}, \quad (2.71)$$

$$\mathcal{M}_{s_1}^{(p, l_1^f)} = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{M}}_{s_1}^{(p, l_1^f)}, \quad \mathcal{M}_{s_2}^{(p, l_1^f)} = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{M}}_{s_2}^{(p, l_1^f)}, \quad (2.72)$$

$$G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\tilde{\vec{Q}} \tilde{\Delta}_\tau) = z_1^{i\xi+1} \tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\tilde{\vec{Q}} \tilde{\Delta}_\tau), \quad \mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}) = z_0^{\frac{l_1}{2}} \tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}), \quad (2.73)$$

$$\vec{Q} \cdot \vec{v} = \tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}, \quad \mathcal{Y}_{l_1, -m^f}(\vec{Q}) = z_0^{\frac{l_1}{2}} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m^f}(\tilde{\vec{Q}}), \quad (2.74)$$

$$Q^2 = Z_0 \tilde{Q}^2, \quad Q = Z_0^{1/2} \tilde{Q}, \quad (2.75)$$

$$\alpha^2 = z_0 \tilde{\alpha}^2, \quad \beta^2 = z_0 \tilde{\beta}^2, \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} = z_0 \tilde{\vec{\alpha}} \cdot \tilde{\vec{\beta}}, \quad (2.76)$$

$$\Phi_{pr l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda) = z_1^{l_1^f - l_2 + i\xi + 1} \tilde{\Phi}_{pr l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda), \quad (2.77)$$

$$a_\tau^\lambda = z_1^{p_\lambda + l_1^f + i\xi + 1} \Gamma(1 + i\xi) \tilde{a}_\tau^\lambda, \quad b_\tau^\lambda = z_0^{k+l_2} \tilde{b}_\tau^\lambda, \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} & z_1^{k_\lambda} {}_3F_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; \frac{1}{z_1 \tilde{A}_\tau}) \\ &= {}_3\tilde{F}_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; \frac{z_1^{(k_\lambda - u)/u}}{\tilde{A}_\tau}), \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$A_\tau = z_1 \tilde{A}_\tau, \quad B_\tau = z_1 \tilde{B}_\tau, \quad C_\tau = z_0 \tilde{C}_\tau, \quad D_\tau = z_1 \tilde{D}_\tau, \quad \mathcal{F}_\tau = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{F}}_\tau. \quad (2.80)$$

Dakle, skalirane veličine koje se javljaju u totalnom preseku (2.70) su:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{if}^-(z) &= \sum_{k,l} \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} \mathcal{C}_{k,l} \frac{c_p}{2^n (n-3)!} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \\ &\times \left\{ \frac{4}{(Z_T + \alpha_l)^4} \left[\frac{2}{n-2} \tilde{\mathcal{M}}_R^{(p, l_1^f)} - \frac{1}{Z_P} \tilde{\mathcal{M}}_{s_1}^{(p, l_1^f)} \right] - \frac{1}{n-2} \tilde{\mathcal{M}}_{s_2}^{(p, l_1^f)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\mathcal{C}_{k,l} = N_{\alpha_k} N_{\alpha_l} (Z_T + \alpha_l) \alpha_k, \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_R^{(p, l_1^f)} &= \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r - n_p}}{p_r!} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{l_2^f+1}}{\tilde{\Delta}^{2n-2l_1^f-p_r-1}} \tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 0)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}), \end{aligned} \quad (2.83)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_{s_1}^{(p, l_1^f)} &= \frac{(2n_p - 2)!}{(n_p - 1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1 - n_p)_{p_r}}{(2 - 2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r - n_p + 1}}{p_r!} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-3} (1-t)^{l_2^f+1}}{\tilde{\Delta}^{2(n-1)-2l_1^f-p_r-1}} \tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 1)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}), \end{aligned} \quad (2.84)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_{s_2}^{(p, l_1^f)} &= \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r - n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt_1 \frac{(1 - t_1)}{\tilde{\Delta}_1^3} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{l_2^f+1}}{\tilde{\Delta}^{2n-2l_1^f-p_r-1}} \left[\tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 1)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}_2) + \tilde{\Delta}_1 \tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 2)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}_2) \right], \end{aligned} \quad (2.85)$$

$$\tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, \lambda)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}_\tau) = \sum_{k=0}^{p_\lambda} \sum_{l_1=|m^f|}^{l_1^f} z_1^{l_1/2} \tilde{\Phi}_{pr l_1^f \tau}^{kl_1}(\lambda) \tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{Q} \cdot \vec{v}), \quad (2.86)$$

$$\tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{Q} \cdot \vec{v}) = (l_1 |l_1^f - m^f|) (-iv)^{l_2} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m^f}(\tilde{Q}), \quad (2.87)$$

$$\tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m^f}(\tilde{Q}) = \tilde{Q}^{l_1} \tilde{Y}_{l_1, -m^f}(\hat{\tilde{Q}}), \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{p, l_1^f}^{kl_1}(\lambda) &= \left(\tilde{a}_\tau^\lambda \tilde{b}_\tau^\lambda \right) {}_3\tilde{F}_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 \\ &\quad - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; \frac{z_1^{(k_\lambda - u)/u}}{\tilde{A}_\tau}), \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$\tilde{a}_\tau^\lambda = (l_1^f + 1)_{p_\lambda} \frac{(2\tilde{D}_\tau)^{p_\lambda}}{(z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}^2)^{l_1^f}} \tilde{\mathcal{F}}_\tau, \quad (2.90)$$

$$\tilde{b}_\tau^\lambda = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_\lambda)_k (i\gamma_2)_k (-1)^k \tilde{C}_\tau^k}{\tilde{B}_\tau^{l_2} (l_1^f + 1)_k k!}, \quad (2.91)$$

$$\begin{aligned} &{}_3\tilde{F}_2(-k_\lambda/2, -k_\lambda/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_\lambda - l_1^f; \frac{z_1^{(k_\lambda - u)/u}}{\tilde{A}_\tau}) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_\lambda/2]} \frac{(-k_\lambda/2)_u (-k_\lambda/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + l_1^f + 1)_u (-p_\lambda - l_1^f)_u u!} \left(\frac{z_1^{(k_\lambda - u)/u}}{\tilde{A}_\tau} \right)^u, \quad k_\lambda \geq u, \end{aligned} \quad (2.92)$$

gde je:

$$\tilde{A}_\tau = \frac{\tilde{\Delta}_\tau^2}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{B}_\tau = \frac{2(v\tilde{\Delta}_\tau - i\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v})}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{C}_\tau = \frac{v}{\tilde{B}_\tau \tilde{\Delta}_\tau} - z_1, \quad (2.93)$$

$$\tilde{D}_\tau = \frac{\tilde{A}_\tau}{\tilde{\Delta}_\tau}, \quad \tilde{\mathcal{F}}_\tau = \frac{\tilde{B}_\tau^{i\xi}}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{\Delta}_0 \equiv \Delta_0 \equiv \Delta, \quad \tilde{\Delta}_1 \equiv \Delta_1, \quad \tilde{\Delta}_2 \equiv \Delta_2, \quad (2.94)$$

$$\tilde{Q}^2 = \tilde{\alpha}^2 t^2 - 2\tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} t(1 - t) + \tilde{\beta}^2 (1 - t)^2, \quad (2.95)$$

$$\tilde{\alpha}^2 = \tilde{\eta}^2 + z_1 \alpha_z^2, \quad \tilde{\beta}^2 = \tilde{\eta}^2 + z_1 \beta_z^2, \quad \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} = -\tilde{\eta}^2 + (\alpha_z \beta_z) z_1, \quad (2.96)$$

$$N_T = \frac{2^{10} Z_T^3 Z_P^2 (N_f^{Z_P})^2 \pi^2}{v^2} n_\xi, \quad n_\xi = \frac{\pi \xi}{sh(\pi \xi)}. \quad (2.97)$$

Granice integracije u relacijama (2.83), (2.84) i (2.85) takodje se svode na interval $[-1, +1]$ u skladu sa (2.66) i to smenama:

$$t = \frac{1}{2}(1 + u), \quad t_1 = \frac{1}{2}(1 + u_1), \quad u \in [-1, +1], \quad u_1 \in [-1, +1]. \quad (2.98)$$

Medjutim ove smene ne uvode singularitete, tako da nisu razmatrane u analitičkom skaliranju, već su direktno uvedene u samom kodu za numeričku integraciju.

Skalirani sferni harmonik $\tilde{Y}_{l_1, -m^f}(\tilde{\vec{Q}})$ ima sledeće dve forme:

a) ako je $m^f \geq 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_1, -m^f}(\tilde{\vec{Q}}) &= \sqrt{\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \frac{(l_1 - m^f)!}{(l_1 + m^f)!}} (1 - z_1 \tilde{C}_z^2)^{m^f/2} \left(\frac{d}{d(z_1^{1/2} \tilde{C}_z)} \right)^{l_1 + m^f} \\ &\times \frac{(z_1 \tilde{C}_z^2 - 1)^{l_1}}{2^{l_1} l_1!}, \end{aligned} \quad (2.99)$$

b) ako je $m^f < 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_1, -m^f}(\hat{\vec{Q}}) &= (-1)^{|m^f|} \sqrt{\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \frac{(l_1 - |m^f|)!}{(l_1 + |m^f|)!}} (1 - z_1 \tilde{C}_z^2)^{|m^f|/2} \\ &\times \left(\frac{d}{d(z_1^{1/2} \tilde{C}_z)} \right)^{l_1 + |m^f|} \frac{(z_1 \tilde{C}_z^2 - 1)^{l_1}}{2^{l_1} l_1!}, \end{aligned} \quad (2.100)$$

gde je $\tilde{C}_z = \tilde{Q}_z/\tilde{Q}$, što se i vidi iz sledećeg:

$$\vec{Q} = \vec{\alpha}t - \vec{\beta}(1-t), \quad \vec{v} = (0, 0, v), \quad \vec{\alpha} = \vec{\eta} - \alpha_z \hat{v}, \quad \vec{\beta} = -\vec{\eta} - \beta_z \hat{v}, \quad (2.101)$$

$$\vec{Q} \cdot \vec{v} = \vec{\alpha} \cdot \vec{v}t - \vec{\beta} \cdot \vec{v}(1-t), \quad \vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0, \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{v} = -\alpha_z v, \quad \vec{\beta} \cdot \vec{v} = -\beta_z v, \quad (2.102)$$

odakle imamo:

$$\vec{Q} \cdot \vec{v} = -\alpha_z vt + \beta_z v(1-t) = (\beta_z - vt)v = Q_z v, \quad Q_z = \beta_z - vt. \quad (2.103)$$

gde smo iskoristili činjenicu da je $\alpha_z + \beta_z = v$.

Uvedimo oznaku $\vec{Q} \cdot \hat{v} = Q_z$, nakon čega dobijamo:

$$\hat{\vec{Q}} \cdot \hat{v} = \cos \theta_Q = \vec{Q} \cdot \hat{v}/Q = Q_z/Q = C_z, \quad Q_z = \tilde{Q}_z, \quad (2.104)$$

$$C_z = \tilde{Q}_z/\tilde{Q}/z_1^{1/2} = z_1^{1/2} \tilde{Q}_z/\tilde{Q} = z_1^{1/2} \tilde{C}_z, \quad \tilde{C}_z = \tilde{Q}_z/\tilde{Q}. \quad (2.105)$$

Broj integracionih N_{GL} tačaka koji je korišćen u Gauss-Legendre-ovim kvadraturama za izračunavanje efikasnog preseka (2.70) bio je onoliki koliko je bilo potrebno da se ostvari konvergencija na dve decimale.

2.2 Elektronski zahvat u proizvoljna pobudjena jednoelektronska stanja u sudarima potpuno ogoljenih projektila sa $(Z_T; e_1, e_2)(1s^2)$

U ovom delu će biti razmatrani:

asimetrični:

$$H^+ + He(1s^2) \longrightarrow H(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.106)$$

$$Li^{3+} + He(1s^2) \longrightarrow Li^{2+}(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.107)$$

$$Be^{4+} + He(1s^2) \longrightarrow Be^{3+}(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.108)$$

$$B^{5+} + He(1s^2) \longrightarrow B^{4+}(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.109)$$

$$C^{6+} + He(1s^2) \longrightarrow C^{5+}(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.110)$$

i simetrični:

$$He^{2+} + He(1s^2) \longrightarrow He^+(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.111)$$

$$H^+ + H^-(1s^2) \longrightarrow H(n^f l^f m^f) + H(1s), \quad (2.112)$$

sudarni procesi.

Efikasni preseki (totalni i parcijalni) za reakcije (2.106-2.111) u prior verziji CB1-4B metoda su izračunati korišćenjem dvoparametarske radijalno korelisane funkcije Silverman-a *et al.* [16] za opisivanje osnovnog stanja atoma helijuma u ulaznom kanalu:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = (N/\pi)(e^{-\alpha_1 x_1 - \alpha_2 x_2} + e^{-\alpha_2 x_1 - \alpha_1 x_2}), \quad (2.113)$$

gde su variacioni parametri $\alpha_1 = 2.183171$ i $\alpha_2 = 1.18853$ dok je $N^{-2} = 2[(\alpha_1 \alpha_2)^{-3} + (\alpha_1/2 + \alpha_2/2)^{-6}]$. Iako ova funkcija ima prostiji oblik radijalne korelacije su uračunate u velikoj meri, reda oko 95%. Sa druge strane za opisivanje osnovnog stanja $H^-(1s)$ jona u procesu (2.112) je iskorišćena četvoroparametarska Löwdin-ova [15] talasna funkcija o čemu će biti reči kasnije.

U svim ovim procesima upadna energija projektila data je u laboratorjskom sistemu reference.

Pri dobijanju totalnog efikasnog preseka za zahvat u bilo koje stanje za razmatrane reakcije iskorišćene su sledeće formule u skladu sa Oppenheimer-ovim $(n^f)^{-3}$ zakonom skaliranja [53, 83]:

$$Q_{tot} \equiv \sum_{n^f=1}^{\infty} Q_{n^f} \simeq Q(\Sigma_N) = \sum_{n^f=1}^{N-1} Q_{n^f} + \gamma(3, N-1)Q_N, \quad (2.114)$$

gde je

$$\gamma(3, N) = 1 + (N + 1)^3 \zeta(3) - \sum_{n^f=1}^{N+1} \left(\frac{N+1}{n^f} \right)^3, \quad (2.115)$$

sa Riemann-ovom zeta funkcijom $\zeta(3)$ i

$$Q_{n^f} = \sum_{l^f=0}^{n^f-1} Q_{n^f l^f} \quad , \quad Q_{n^f l^f} = \sum_{m^f=-l^f}^{+l^f} Q_{n^f l^f m^f}. \quad (2.116)$$

Ovde je N ceo broj koji je izabran tako da se poklapa sa najnižom vrednošću n^f koja je potrebna za konvergenciju sume preko svih finalnih vezanih stanja projektila $(Z_P; e_1)_{n^f l^f m^f}$ jona. Gore navedene relacije (2.114) i (2.116) važe i u prior i u post formi, što će biti istaknuto superskriptom - ili + respektivno.

Teorijski efikasni presek $Q_{if}^-(\pi a_0^2) \equiv Q_{n^f l^f m^f}$ iz jednačine (2.70) se odnosi na zahvat jednog elektrona. U nerelativističkoj teoriji elektroni mete se razlikuju. Dakle izračunati totalni preseki iz jednačine (2.70) su dodatno pomnoženi sa 2, jer svaki od dva elektrona iz iste K ljuske $\text{He}(1s^2)$ atoma može biti zahvaćen sa istom verovarnošću.

2.2.1 Zahvat elektrona u sudaru H^+ sa $\text{He}(1s^2)$

Izračunati parcijalni (state-selective) kao i totalni efikasni preseki za reakciju (2.106) sa energijom projektila u intervalu $20 \leq E \leq 1000$ keV su prikazani u Tabeli 1 kao i na slikama 2.2-2.5. Svi preseki su dobijeni korišćenjem $N_{GL} = 96$ integracione tačke.

Efikasni preseki za elektronski zahvat u $2s$ i $2p$ stanja su poredjeni sa eksperimentalnim rezultatima na slici 2.2, dok su oni za zahvat u $3s$, $3p$ i $3d$ stanja prikazani na slici 2.3.

Na slici 2.4 zajedno sa zahvatom u $\text{H}(4s)$ stanje, u čijem slučaju postoje eksperimentalni podaci, mi smo takodje prikazali, radi kompletnosti i preseke za formiranje $\text{H}(4p)$, $\text{H}(4d)$ i $\text{H}(4f)$ stanja. Kao što se može videti sa slika 2.2-2.4 prezentovani rezultati za zahvat u $\text{H}(2s)$, $\text{H}(3s)$ i $\text{H}(4s)$ stanja sistematski pokazuju odlično slaganje na svim energijama iznad 60 keV. Poredjenja rezultata CB1-4B metoda sa merenjima za zahvat u $\text{H}(2p)$ i $\text{H}(3p)$ stanja pokazuju da teorijske krive malo nadmašuju eksperimentalne rezultate. Ipak jasno je da se CB1-4B teorija približava eksperimentalnim podacima sa povećanjem upadne energije, to jest u onom regionu u kojem je očekivana validnost ovog metoda.

Teorijski rezultati za zahvat u $\text{H}(3d)$ nadmašuju eksperimentalne podatke na nižim upadnim energijama, ali za veće energije CB1-4B metod je u dosta dobrom slaganju sa merenjima.

Totalni efikasan presek Q_{tot}^- za zahvat sumiran po svim finalnim stanjima atoma vodonika je u skladu sa već pomenutim Oppenheimer-ovim $(n^f)^{-3}$ zakonom skaliranja, tako da na osnovu relacije (2.114) imamo:

$$Q_{tot}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561 Q_4^-, \quad (2.117)$$

Tabela 1. Efikasan presek (u cm^2) u funkciji upadne enrgije protona (u keV) za zahvat elektrona iz $\text{He}(1s^2)$ u proizvoljno finalno stanje atoma vodonika za proces (2.106). Kolona označena sa $n^f l^f m^f$ predstavlja parcijalan efikasn presek $Q_{n^f l^f m^f}^-$ i $Q_{n^f l^f}^-$ za reakciju (2.106). Red označen sa Q_{tot}^- predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima $\text{H}(n^f l^f m^f)$ atoma korišćenjem jednačine (2.117). Notacija $X[-N]$ je skraćenica za $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	20	30	50	75	100	150
100	4.21[-16]	2.45[-16]	1.02[-16]	4.24[-17]	2.06[-17]	6.49[-18]
200	2.24[-17]	1.81[-17]	1.05[-17]	5.10[-18]	2.65[-18]	8.71[-19]
210	3.75[-17]	1.98[-17]	7.64[-18]	2.94[-18]	1.29[-18]	3.25[-19]
211	1.52[-18]	9.31[-19]	5.29[-19]	2.54[-19]	1.23[-19]	3.38[-20]
2p	4.05[-17]	2.17[-17]	8.7[-18]	3.45[-18]	1.53[-18]	3.93[-19]
300	5.55[-18]	4.73[-18]	2.94[-18]	1.49[-18]	7.87[-19]	2.61[-19]
310	1.09[-17]	6.08[-18]	2.46[-18]	9.84[-19]	4.40[-19]	1.13[-19]
311	4.35[-19]	2.63[-19]	1.57[-19]	8.02[-20]	4.01[-20]	1.14[-20]
3p	1.18[-17]	6.61[-18]	2.78[-18]	1.14[-18]	5.20[-19]	1.36[-19]
320	1.03[-18]	5.41[-19]	1.76[-19]	5.81[-20]	2.27[-20]	4.69[-21]
321	9.24[-20]	4.56[-20]	2.07[-20]	9.55[-21]	4.35[-21]	1.02[-21]
322	5.07[-21]	2.76[-21]	1.76[-21]	9.18[-22]	4.34[-22]	1.05[-22]
3d	1.23[-18]	6.38[-19]	2.21[-19]	7.90[-20]	3.22[-20]	6.94[-21]
400	2.20[-18]	1.91[-18]	1.22[-18]	6.27[-19]	3.32[-19]	1.11[-19]
410	4.56[-18]	2.58[-18]	1.06[-18]	4.30[-19]	1.94[-19]	5.02[-20]
411	1.81[-19]	1.09[-19]	6.59[-20]	3.43[-20]	1.74[-20]	4.98[-21]
4p	4.92[-18]	2.79[-18]	1.19[-18]	4.99[-19]	2.29[-19]	6.02[-20]
420	5.65[-19]	3.05[-19]	1.01[-19]	3.39[-20]	1.34[-20]	2.79[-21]
421	5.06[-20]	2.53[-20]	1.16[-20]	5.44[-21]	2.51[-21]	6.00[-22]
422	2.77[-21]	1.50[-21]	9.59[-22]	5.15[-22]	2.48[-22]	6.08[-23]
4d	6.72[-19]	3.59[-19]	1.26[-19]	4.58[-20]	1.89[-20]	4.11[-21]
430	1.32[-20]	7.15[-21]	2.05[-21]	5.91[-22]	2.08[-22]	3.56[-23]
431	2.13[-21]	1.02[-21]	3.63[-22]	1.52[-22]	6.39[-23]	1.26[-23]
432	2.38[-22]	1.14[-22]	5.75[-23]	2.89[-23]	1.29[-23]	2.63[-24]
433	1.30[-23]	6.58[-24]	4.31[-24]	2.32[-24]	1.05[-24]	2.16[-25]
4f	1.80[-20]	9.44[-21]	2.90[-21]	9.57[-22]	3.63[-22]	6.66[-23]
Q_{tot}^-	5.23[-16]	3.10[-16]	1.34[-16]	5.67[-17]	2.76[-17]	8.60[-18]

gde numerički faktor 2.561 približno uračunava i doprinos svih pobudjenih stanja $n^f \geq 5$, koji je prikazan na slici 2.5 zajedno sa eksperimentalnim podacima iz brojnih merenja. Sa slike se vidi da se totalni presek u CB1-4B aproksimaciji veoma dobro slaže sa raspoloživim merenjima u energijskom opsegu koji obuhvata skoro tri reda veličine.

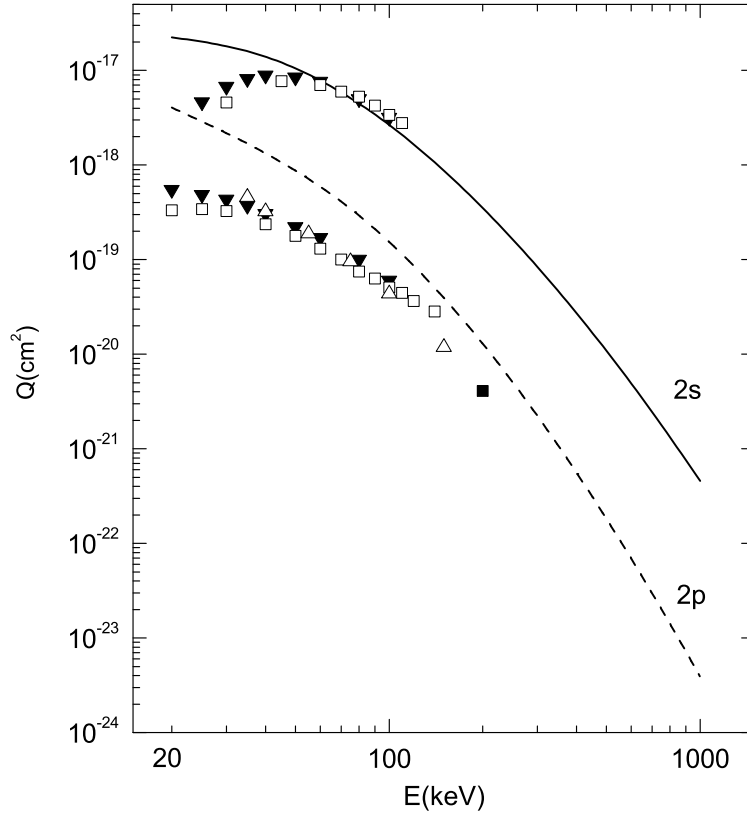
Oppenheimer-ov $(n^f)^{-3}$ zakon skaliranja je originalno bio uveden u OBK1 aproksimaciji [54]. Medjutim ova praktična procedura nije ograničena samo na OBK1 model. Naime, brojne vezane studije [72, 83, 103] ukazuju da Oppenheimer-ovo pravilo takodje važi u CB1-3B aproksimaciji. Štaviše ovo se dodatno potvrđuje prezentovanim proračunima pomoću CB1-4B metoda. Dakle naši proračuni su prestali kada je totalni efikasn presek Q_{tot}^- postao neosetljiv na uključivanje viših parcijalnih preseka $Q_{n^f}^-$.

Nastavak Tabele 1.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	200	300	500	750	1000
100	2.59[-18]	6.16[-19]	8.05[-20]	1.34[-20]	3.45[-21]
200	3.51[-19]	8.39[-20]	1.09[-20]	1.79[-21]	4.56[-22]
210	1.06[-19]	1.82[-20]	1.49[-21]	1.66[-22]	3.18[-23]
211	1.14[-20]	2.03[-21]	1.68[-22]	1.88[-23]	3.59[-24]
2p	1.29[-19]	2.23[-20]	1.83[-21]	2.04[-22]	3.89[-23]
300	1.06[-19]	2.53[-20]	3.27[-21]	5.37[-22]	1.36[-22]
310	3.73[-20]	6.43[-21]	5.28[-22]	5.88[-23]	1.12[-23]
311	3.91[-21]	7.02[-22]	5.88[-23]	6.60[-24]	1.26[-24]
3p	4.51[-20]	7.84[-21]	6.45[-22]	7.20[-23]	1.38[-23]
320	1.29[-21]	1.70[-22]	9.42[-24]	7.47[-25]	1.10[-25]
321	2.97[-22]	4.06[-23]	2.30[-24]	1.82[-25]	2.68[-26]
322	3.04[-23]	4.09[-24]	2.23[-25]	1.71[-26]	2.46[-27]
3d	1.95[-21]	2.59[-22]	1.45[-23]	1.15[-24]	1.69[-25]
400	4.49[-20]	1.07[-20]	1.38[-21]	2.27[-22]	5.79[-23]
410	1.66[-20]	2.87[-21]	2.35[-22]	2.63[-23]	5.01[-24]
411	1.72[-21]	3.11[-22]	2.61[-23]	2.93[-24]	5.61[-25]
4p	2.00[-20]	3.49[-21]	2.88[-22]	3.21[-23]	6.13[-24]
420	7.73[-22]	1.02[-22]	5.66[-24]	4.49[-25]	6.64[-26]
421	1.76[-22]	2.41[-23]	1.37[-24]	1.09[-25]	1.61[-26]
422	1.79[-23]	2.42[-24]	1.33[-25]	1.02[-26]	1.47[-27]
4d	1.16[-21]	1.55[-22]	8.68[-24]	6.88[-25]	1.01[-25]
430	8.36[-24]	8.43[-25]	3.21[-26]	1.83[-27]	2.11[-28]
431	3.13[-24]	3.27[-25]	1.26[-26]	7.17[-28]	8.18[-29]
432	6.56[-25]	6.83[-26]	2.56[-27]	1.41[-28]	1.57[-29]
433	5.37[-26]	5.49 [-27]	1.99[-28]	1.06[-29]	1.16[-30]
4f	1.60[-23]	1.65[-24]	6.30[-26]	3.57[-27]	4.09[-28]
Q_{tot}^-	3.39[-18]	7.92[-19]	1.01[-19]	1.67[-20]	4.26[-21]

To je bio slučaj sa $n^f = 4$, kao što je prikazano u Tabeli 2 za četiri upadne energije: 20, 100, 1000 i 10000 keV. Kao što se može videti iz Tabele 2 uključivanje viših parcijalnih preseka Q_5^- i Q_6^- ne utiče na Q_{tot}^- koji je eksplicitno izračunat za $n^f \leq 4$.

Treba napomenuti da je Melezhik *et al.* [104] takodje našao da je korisno uvesti Oppenheimer-ovu proceduru za proučavajne konvergencionih svojstava kvantnog vremenski zavisnog pristupa sa polu-klasičnim trajektorijama za stripping procese (uključujući jonizaciju i prenos elektrona) kao i za pobudjivanje u sudarima između protona i helijuma.

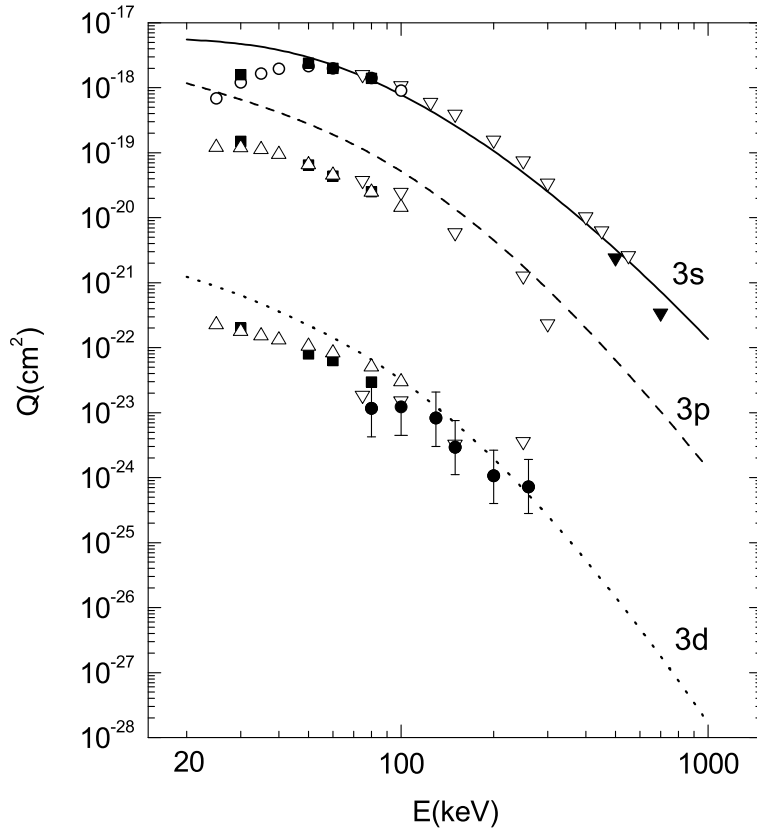


Slika 2.2: Parcijalni efikasni preseki Q_{2s}^- i Q_{2p}^- za elektronski zahvat u sudaru protona sa $\text{He}(1s^2)$. Krive reprezentuju teorijske rezultate dobijene CB1-4B metodom (prezentovana izračunavanja) [47]. Eksperimentalni podaci: ▼ (Q_{2s}, Q_{2p}) Cline *et al* [84], □ (Q_{2s}, Q_{2p}) Hughes *et al.* [85], △ (Q_{2p}) Hippler *et al.* [86] i ■ (Q_{2p}) Hippler *et al.* [87]. Teorijski i eksperimentalni rezultati za zahvat u $2p$ stanje H atoma su podeljeni sa 10.

Tabela 2. Efikasni presek (u cm^2) za $\text{H}^+ - \text{He}$ sudare (2.1). Presek $Q_{tot}^-(\Sigma_4)$ je izračunat na osnovu relacije (2.117) a $Q_{tot}^-(\Sigma_5) = Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + 3.049Q_5^-$ i $Q_{tot}^-(\Sigma_6) = Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + Q_5^- + 3.541Q_6^-$. Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

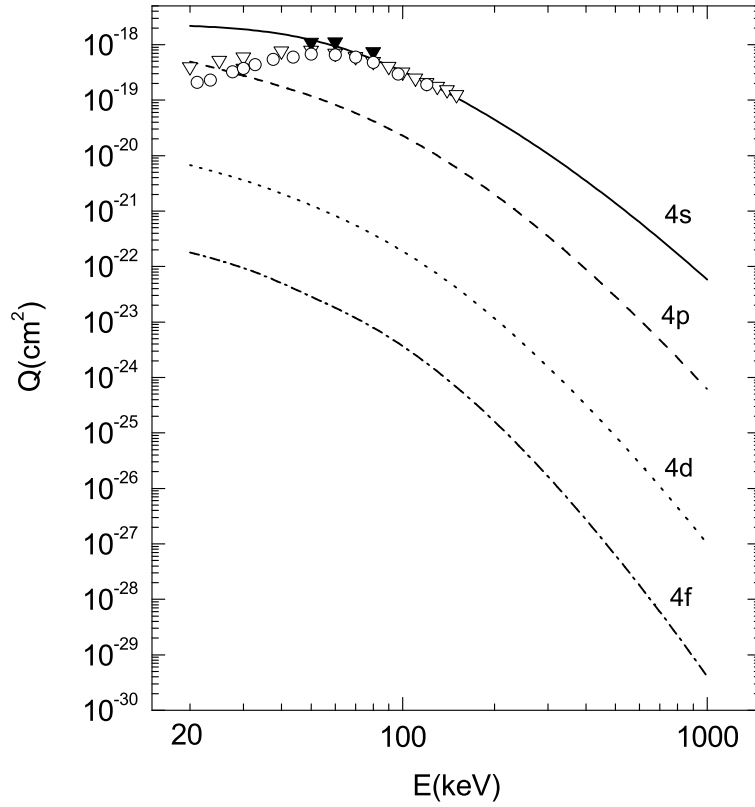
$E(\text{keV})$	20	100	1000	10000
Q_4^-	7.80[-18]	5.80[-19]	6.41[-23]	1.99[-28]
$Q_{tot}^-(\Sigma_4)$	5.23[-16]	2.76[-17]	4.26[-21]	1.62[-26]
Q_5^-	3.99[-18]	3.01[-19]	3.27[-23]	9.89[-29]
$Q_{tot}^-(\Sigma_5)$	5.23[-16]	2.76[-17]	4.26[-21]	1.62[-26]
Q_6^-	2.30[-18]	1.75[-19]	1.89[-23]	5.74[-29]
$Q_{tot}^-(\Sigma_6)$	5.23[-16]	2.76[-17]	4.26[-21]	1.62[-26]

Postojeći eksperimentalni podaci za $Q_{n^f l^f}^-$ nisu direktno vezani za proces (2.106), već odgovaraju $p + \text{He} \rightarrow \text{H}(n^f l^f m^f) + [\text{He}^+]$, gde uglavna zagrada označava da nema podataka o stanjima He^+ jona posle sudara. To znači da za strogo poredjenje sa eksperimentom, teorija mora da uračuna doprinos svih mogućih stanja nezahvaćenog elektrona u He^+ jonu. Ranija



Slika 2.3: Parcijalni efikasni preseki Q_{3s}^- , Q_{3p}^- i Q_{3d}^- za elektronski zahvat u sudaru protona sa $\text{He}(1s^2)$. Krive reprezentuju teorijske rezultate dobijene CB1-4B metodom [47]. Eksperimentalni podaci: $\blacktriangledown$ (Q_{3s}) Conrads *et al.* [88], $\circ$ (Q_{3s}) Cline *et al.* [84], ∇ (Q_{3s}, Q_{3p}, Q_{3d}) Ford i Thomas [89], $\blacksquare$ (Q_{3s}, Q_{3p}, Q_{3d}) Brower i Pipkin [90], $\triangle$ (Q_{3p}, Q_{3d}) Cline *et al.* [91] i $\bullet$ Edwards i Thomas [92]. Teorijski i eksperimentalni rezultati za zahvat u $3p$ i $3d$ stanja su podeljeni sa 10 i 1000, respektivno.

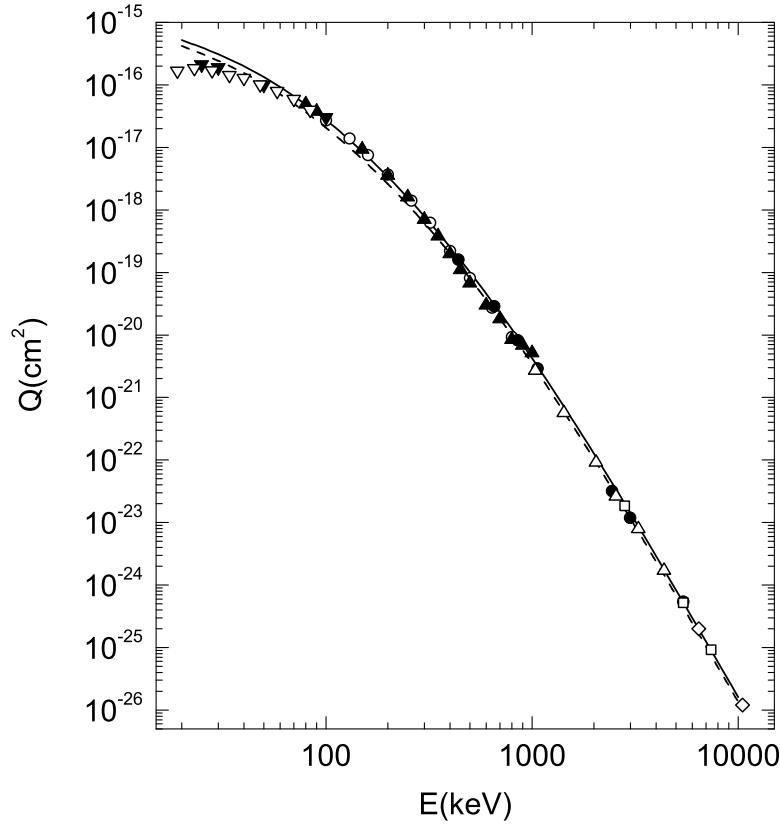
izračunavanja [105] u okviru prve Bornove aproksimacije pokazala su da uključivanje pobudjenih stanja He^+ ne povećava efikasan presek za zahvat više od 5%. Naši rezultati podržavaju ove procene ukazujući da važe sledeći odnosi $Q_{2s}^- > Q_{2p_0}^-$, $Q_{3s}^- > Q_{3p_0}^-$ i $Q_{4s}^- > Q_{4p_0}^-$ na energijama $E \geq 50$ keV, kao i $Q_{2p_0}^- > Q_{2p_{\pm 1}}^-$, $Q_{3p_0}^- > Q_{3p_{\pm 1}}^-$ i $Q_{4p_0}^- > Q_{4p_{\pm 1}}^-$ na svim razmatranim energijama. Svi prikazani teorijski efikasni preseki su za totalni efikasni presek, ali je naš generalni program razvijen i za računanje diferencijalnog efikasnog preseka. Nedavno su publikovani diferencijalni efikasni preseki za elektronski transfer u sudarima protona sa helijumom na 630, 1000 i 1200 keV, sa dovoljnom rezolucijom za razlikovanje određenih finalnih elektronskih stanja [106]. Ovi rezultati su dobijeni COLTRIMS (cold target recoil ion momentum spectroscopy) tehnikom i spektrometrom optimizovanim za visoku impulsnu rezoluciju. Teški projektili vrlo malo skreću unapred zbog čega je veoma teško eksperimentalno određivati ugaonu raspodelu na veoma visokim energijama. COLTRIMS tehnika rešava ovaj problem time što izbegava direktno merenje parametara rasejavajućeg projektila već registruje sve komponente impulsa uzmaknutog ostatka mete. Koristeći zakone održanja impulsa i enegije dobijaju se diferencijalni preseki za rasejavajuće projekte. Pogodnost ovog metoda leži u tome što je ovo detektor sa skoro 4π efikasnošću koji pored toga ima veoma visoku rezoluciju impulsa Δp i transfer-



Slika 2.4: Parcijalni efikasni preseki Q_{4s}^- , Q_{4p}^- , Q_{4d}^- i Q_{4f}^- za elektronski zahvat u sudaru protona sa $\text{He}(1s^2)$. Krive reprezentuju teorijske rezultate dobijene korišćenjem CB1-4B metoda (prezentovana izračunavanja) [47]. Eksperimentalni podaci: ∇ (Q_{4s}) Doughty *et al.* [93], $\blacktriangledown$ (Q_{4s}) Brower *et al.* [90] i $\circ$ (Q_{4s}) Hughes *et al.* [94]. Teorijski rezultati za zahvat u $4p$ stanje H atoma su podeljeni sa 10, dok su oni za $4d$ i $4f$ stanja podeljeni sa 100.

ovane energije ΔE nezavisno od upadne energije projektila i u isto vreme pokazuje veoma slabu zavisnost od divergencije snopa. Naime rezolucija impulsa uzmaknutog jona mete iznosi svega nekoliko atomskih jedinica. Ovakva preciznost je nemoguća na sobnoj temperaturi jer će Δp biti u režimu termalnog kretanja. Ovaj problem je rešen hladjenjem mete do temperature $\sim 0.1K$, pri čemu su postignute rezolucije impulsa (u sva tri pravca) $\Delta p \simeq \pm 0.025 au$ i energije $\Delta E \simeq \pm 6eV$.

Na energijama 630, 1000 i 1200 keV, ovaj eksperiment [106] je pokazao da u procesu jednostrukog zahvata $p + \text{He} \rightarrow \text{H}(n) + \text{He}^+(n')$, udeo preseka sa istovremenom pobudom mete ($n = 1, n' \geq 2$), u totalnom preseku sumiranom po svim stanjima elektrona u meti je bio 3.9%, 4.7% i 5.2%, respektivno. Do zaključaka ovog tipa takodje su došli Alessi *et al.* [107, 108, 109] u njihovim nedavnim sličnim merenjima korišćenjem iste COLTRIMS tehnike.



Slika 2.5: Totalni efikasni presek za elektronski zahvat unutar svih finalnih stanja $H(\Sigma)$ atoma u sudaru protona sa helijumom koji je u osnovnom stanju: $H^+ + \text{He}(1S) \rightarrow H(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Puna linija prikazuje rezultate za $Q_{tot}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561Q_4^-$ koji su dobijeni CB1-4B aproksimacijom [47]. Isprekidana linija reprezentuje $Q_{1s}^- \equiv Q_1^-$ koji je dobijen takodje CB1-4B metodom. Eksperimentalni podaci: ∇ Shah *et al.* [95], $\triangle$ Schryber [97], $\circ$ Shah i Gilbody [96], $\square$ Horsdal-Pedersen *et al.* [98], $\diamond$ Berkner *et al.* [99], $\blacktriangle$ Williams [100], $\blacktriangledown$ Martin *et al.* [101] i $\bullet$ Welsh *et al.* [102].

2.2.2 Zahvat elektrona u sudaru He^{2+} sa $\text{He}(1s^2)$

Elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane alfa čestice je ispitan u energijskoj oblasti (kinetička energija alfa čestice) od 100 do 10000 keV. Parcijalni i totalni efikasni presek za jednos-truki zahvat u $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudaru su već proučavani sa stanovišta tročestičnih modela, kao što su: CDW-3B [110], tročestična granično korektna prva Bornov-a aproksimacija (CB1-3B) sa Roothan-Hartree-Fock-ovim ekraniranjem mete [103] i tročestična simetrična eikonal (SE-3B) aproksimacija [111]. Parcijalni preseki kao i totalni za zahvat u proizvoljno stanje bili su izračunati u referencama [103, 110, 111] sa glavnim kvantnim brojem $n^f \leq 3$.

Osim ref. [112], gde je ukupni efikasni presek dobijen sumiranjem svih doprinosa od individualnih ljuski i podljuski do $n^f = 3$ pomoću BCCIS-4B aproksimacije, do sada nisu uradjena druga izračunavanja za parcijalni efikasni presek zahvata elektrona u $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudaru pomoću *četvoročestičnih* metoda. Odgovarajući rezultati naših numeričkih izračunavanja prikazani su u Tabeli 3 i slici 2.6, gde je u izračunavanju korišćeno $N_{GL} = 96$ integracione tačke.

Tabela 3. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u CB1-4B metodi za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane He^{2+} u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$. Red označen sa $Q^-(\Sigma_4)$ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{He}^+(n^f l^f m^f)$ jona korišćenjem jednačine (2.117). Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	100	150	200	300	400
1s	4.31[-16]	2.96[-16]	2.12[-16]	1.18[-16]	7.19[-17]
2s	8.67[-17]	6.13[-17]	4.10[-17]	2.04[-17]	1.17[-17]
2p	2.88[-16]	2.27[-16]	1.63[-16]	8.08[-17]	4.21[-17]
3s	1.57[-17]	1.59[-17]	1.24[-17]	6.65[-18]	3.82[-18]
3p	4.72[-17]	4.71[-17]	3.92[-17]	2.29[-17]	1.29[-17]
3d	2.09[-17]	1.91[-17]	1.49[-17]	7.75[-18]	3.84[-18]
4s	5.18[-18]	6.11[-18]	5.10[-18]	2.88[-18]	1.66[-18]
4p	1.61[-17]	1.73[-17]	1.51[-17]	9.42[-18]	5.48[-18]
4d	8.90[-18]	8.75[-18]	7.20[-18]	4.02[-18]	2.08[-18]
4f	1.04[-18]	9.40[-19]	7.29[-19]	3.74[-19]	1.76[-19]
$Q^-(\Sigma_4)$	9.70[-16]	7.52[-16]	5.55[-16]	2.99[-16]	1.70[-16]
$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	500	600	700	800	1000
1s	4.63[-17]	3.11[-17]	2.16[-17]	1.55[-17]	8.44[-18]
2s	7.38[-18]	4.95[-18]	3.46[-18]	2.49[-18]	1.37[-18]
2p	2.33[-17]	1.36[-17]	8.32[-18]	5.28[-18]	2.34[-18]
3s	2.38[-18]	1.58[-18]	1.10[-18]	7.85[-19]	4.31[-19]
3p	7.48[-18]	4.49[-18]	2.80[-18]	1.80[-18]	8.12[-19]
3d	1.96[-18]	1.05[-18]	5.90[-19]	3.45[-19]	1.31[-19]
4s	1.04[-18]	6.86[-19]	4.75[-19]	3.39[-19]	1.86[-19]
4p	3.22[-18]	1.96[-18]	1.23[-18]	7.95[-19]	3.60[-19]
4d	1.09[-18]	5.95[-19]	3.37[-19]	1.99[-19]	7.67[-20]
4f	8.32[-20]	4.10[-20]	2.12[-20]	1.15[-20]	3.79[-21]
$Q^-(\Sigma_4)$	1.03[-16]	6.52[-17]	4.32[-17]	2.96[-17]	1.51[-17]

Kao što je istaknuto u [122, 123, 124], podaci za parcijalni zahvat u $\text{He}^+(n^f = 4)$ stanje su važni za dijagnostiku plazme, na primer u termonuklearnim fuzionim reaktorima. Naime He^{2+} joni su među najzastupljenijim nečistoćama u plazmi, jer su produkti termonuklearne fuzije pored deuterijuma i tricijuma. Ubrizgavanje snopa neutralnih atoma helijuma unutar plazme dovodi do zahvata elektrona u pobudjeno $\text{He}^+(n^f = 4)$ stanje. Korišćenjem spektroskopske tehnike, linija vidljive svetlosti $\text{He}^+(n^f = 4 \rightarrow 3)$ na 468.6 nm se može detektovati i to je osnovni način za utvrđivanje lokalnih plazmenih veličina kao što su temperatura i gustina. Ključ pouzdanog utvrđivanja parametara plazme je precizno poznavanje parcijalnih efikasnih preseka za elektronski zahvat. Naši teorijski rezultati za zahvat u 4s, 4p, 4d i 4f stanje, neznatno su ispod eksperimentalnih podataka Folkerts-a *et al.* [123]. Nažalost njihova merenja su ograničena do 75 keV/amu. Pošto je CB1-4B metoda visoko energijska aproksimacija očekuje se bolje slaganje na većim upadnim energijama. Nova merenja za ramatranu reakciju su neophodna za još bolju procenu validnosti CB1-4B teorije. Rezultati iz Tabele 3 ukazuju da je $Q_{4p}^- > Q_{4d}^- > Q_{4f}^-$ u oblasti analiziranih sudarnih energija. Šta više imamo $Q_{ns}^- > Q_{np}^-$ iznad 2000 keV sa suprotnim ponašanjem na nižim energijama.

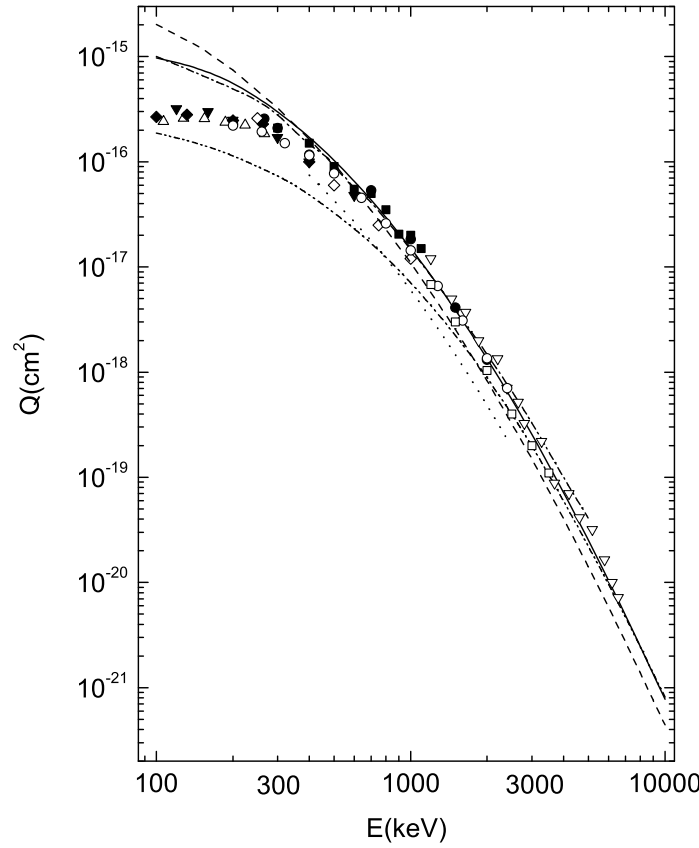
Nastavak Tabele 3.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	1500	2000	3000	4000	5000
1s	2.42[-18]	8.83[-19]	1.81[-19]	5.24[-20]	1.89[-20]
2s	3.95[-19]	1.43[-19]	2.85[-20]	8.05[-21]	2.84[-21]
2p	4.43[-19]	1.19[-19]	1.54[-20]	3.22[-21]	8.98[-22]
3s	1.24[-19]	4.47[-20]	8.85[-21]	2.48[-21]	8.70[-22]
3p	1.57[-19]	4.25[-20]	5.55[-21]	1.16[-21]	3.22[-22]
3d	1.84[-20]	3.90[-21]	3.57[-22]	5.73[-23]	1.29[-23]
4s	5.32[-20]	1.92[-20]	3.79[-21]	1.06[-21]	3.72[-22]
4p	7.04[-20]	1.91[-20]	2.49[-21]	5.19[-22]	1.45[-22]
4d	1.09[-20]	2.33[-21]	2.14[-22]	3.44[-23]	7.79[-24]
4f	3.97[-22]	6.73[-23]	4.40[-24]	5.47[-25]	1.01[-25]
$Q^-(\Sigma_4)$	3.90[-18]	1.34[-18]	2.56[-19]	7.15[-20]	2.52[-20]
$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	6000	7000	8000	9000	10000
1s	7.96[-21]	3.74[-21]	1.92[-21]	1.05[-21]	6.11[-22]
2s	1.17[-21]	5.40[-22]	2.73[-22]	1.48[-22]	8.52[-23]
2p	3.06[-22]	1.20[-22]	5.29[-23]	2.53[-23]	1.30[-23]
3s	3.57[-22]	1.65[-22]	8.30[-23]	4.49[-23]	2.58[-23]
3p	1.10[-22]	4.30[-23]	1.89[-23]	9.04[-24]	4.65[-24]
3d	3.70[-24]	1.25[-24]	4.82[-25]	2.05[-25]	9.51[-26]
4s	1.52[-22]	7.01[-23]	3.53[-23]	1.91[-23]	1.09[-23]
4p	4.91[-23]	1.93[-23]	8.45[-24]	4.04[-24]	2.08[-24]
4d	2.23[-24]	7.54[-25]	2.90[-25]	1.24[-25]	5.73[-26]
4f	2.43[-26]	7.10[-27]	2.40[-27]	9.14[-28]	3.81[-28]
$Q^-(\Sigma_4)$	1.04[-20]	4.84[-21]	2.46[-21]	1.34[-21]	7.73[-22]

Prezentovani totalni efikasni preseći Q_{tot}^- za zahvat sumiran po svim finalnim stanjima prema jednačini (2.117) su poredjeni sa brojnim eksperimentalnim podacima na slici 2.6. Takođe je jasno iz Tabele 3 da su doprinosi od ekscitovanih stanja mnogo značajniji na nižim energijama, što je i očekivano.

Sa slike 2.6 se može videti da slaganje između našeg CB1-4B efikasnog preseka (puna linija) i brojnih merenja [95, 96], [107] i [115]-[121] je odlično iznad 400 keV, to jest 100 keV/amu. To je u skladu sa uslovom [3]: upadna energija $E(\text{keV/amu}) \geq 80 \max\{|E_i|, |E_f|\}$, gde su E_i i E_f inicijalna i finalna orbitalna energija zahvaćenog elektrona respektivno. Na osnovu ovog uslova, očekivana granica važenja CB1-4B metoda za He^{2+} projektil je 450 keV. Ovaj polu-empirijski uslov je bio originalno uveden [3] za CDW-3B metod, međutim iskustvo pokazuje da to važi i za druge visoko energijske tročestične i četvoročestične modele. Veliki broj izračunavanja su izvršena u cilju proučavanja jednoelektronskog zahvata u $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudarima na osnovu tročestičnih (jedan aktivan elektron) i četvoročestičnih modela. Ovde ćemo uporediti naše rezultate sa nekim od njih.

Izračunati CB1-4B preseći poredjeni su na slici 2.6, sa rezultatima dobijenim iz prior verzije CDW-4B modela [14]. Isprekidana linija koja reprezentuje CDW-4B metod uključuje samo zahvat u osnovno stanje Q_1 , dok se doprinos od pobudjenih nivoa približno računa množenjem Q_1 faktorom 1.202. Kao što je prikazano na slici 2.6 na nižim energijama, totalni presek dobijen CDW-4B modelom [14] znatno je iznad merenja kao što je takođe slučaj u CDW-3B metodi [110]. Ovo nadmašivanje CDW metode je primarno zbog prisustva normalizacione konstante $N^+(Z/v)$ elektronske ukupne Coulomb-ove talasne funkcije. Ovaj faktor



Slika 2.6: Totalni efikasni presek (u cm^2) kao funkcija laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$ za reakciju ${}^4\text{He}^{2+} + {}^4\text{He}(1s^2) \rightarrow {}^4\text{He}^+(\Sigma) + {}^4\text{He}^+(1s)$. Puna linija predstavlja $Q_{tot} \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561Q_4^-$ izračunat prezentovanom CB1-4B metodom [48]. Isprekidana linija: CDW-4B metod [14]; tačka- crta linija: BCCIS-4B metod [112]; tačkasta linija: CDW-IEM-3B metod [113]; tačka-tačka- crta linija: CBDW-3B metoda [114]. Eksperimentalni podaci: $\triangle$ Shah *et al.* [95]; $\circ$ Shah i Gilbody [96]; $\diamond$ Mergel *et al.* [115]; ∇ Hvelplund *et al.* [116]; $\bullet$ DuBois [117]; $\square$ de Castro Faria *et al.* [118]; $\blacksquare$ Pivovar *et al.* [119, 120]; $\blacktriangledown$ Rudd *et al.* [121]; $\blacklozenge$ Alessi *et al.* [107].

$|N^+(Z/v)|^2 = (2\pi Z/v)/[1 - \exp(-2\pi Z/v)]$ se povećava sa smanjenjem upadne brzine v . Najjednostavniji način za eliminisanje normalizacije $N^+(Z/v)$ je aproksimiranje pomenutih ukupnih Coulomb-ovih talasa odgovarajućim asimptotskim oblikom. Ovo pojednostavljenje CDW-3B metoda daje simetričnu eikonal aproksimaciju (SE-3B) [111]. Korišćenjem SE-3B aproksimacije Deco *et al.* [111] su izbegli nadmašivanje ukupnog efikasnog preseka na nižim upadnim energijama i dobili dobro slaganje iznad 100 keV za $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudar. Fizičke posledice eikonalizacije izobličene (distorzione) funkcije u inicijalnom ili/i finalnom stanju su široko diskutovane u knjizi Belkić-a [41]. Jedna od tih karakteristika je da SE-3B metod nepovratno gubi važan Thomas-ov mehanizam dvostrukog rasejanja, koji je sačuvan od strane CDW-3B metoda.

Takodje se može videti da prior BCCIS-4B efikasani preseki [112] (tačka-crta linija na slici 2.6) su blizu CB1-4B vrednosti. BCCIS-4B metod uzima u potpunosti u obzir intermedijalna stanja elektronskog kontinuuma u jednom od kanala (ulazni ili izlazni u zavisnosti da li je razmatrana prior ili post amplituda prelaza). U proračunima iz reference [112], ukupne Coulomb-ove talasne funkcije za relativna kretanja teških čestica se čuvaju, dok u CB1-4B

metodi ove se fukcije sistematski zamenjuju svojim Coulomb-ovim logaritamskim faznim faktorima. Medjutim sa numeričke tačke gledišta, takva zamena je potpuno opravdana, jer njen uticaj je reda ili manje od 10^{-4} u odnosu na 1. Četvoročestičnu BCIS (Boundary Corrected Intermediate State) aproksimaciju je bio formulisao i primenio Belkić [125] za dvostruki elektronski zahvat.

Jednostruku izmenu naelektrisanja u $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudarima proučavali su Dunseath i Crothers [113] koji su izračunali totalne preseke na upadnim energijama od 100 do 600 keV/amu. Oni su primenili tročestičnu CDW-IEM (Continuum Distorted Wave Independent Event Model) aproksimaciju sa talasnom funkcijom Pluvina [20] kojom su opisali metu. Kao što se može sa slike 2.6 videti, njihovi rezultati (tačkasta linija) značajno su ispod eksperimentalnih podataka. Nedavno su Ghanbari-Adivi i Ghavaminia [114] primenili tročestičnu CBDW-3B (Coulomb Born Distorted Wave) aproksimaciju za izračunavanje diferencijalnog i totalnog efikasnog preseka za jednostruku elektronsku izmenu u $\text{He}^{2+} - \text{He}$ sudarima. Njihov metod izobličenih talasa zadovoljava korektne Coulomb-ove granične uslove. Za razliku od prethodnog rada Ghanbari-Adivi [126], u ref. [114] CBDW-3B model je proširen na opštiji slučaj u kojem postoji zaostala Coulomb-ova interakcija kako u ulaznom tako i u izlaznom kanalu, zbog čega su i talasne funkcije izobličene u oba kanala. Uticaj ekraniranja nuklearnog naelektrisanja od strane pasivnog elektrona na procese zahvata je ispitano uzimanjem u obzir različitih vrednosti efektivnog naelektrisanja jezgra: $Z_T = 1.339$, $Z_T = 1.6875$ i $Z_T = 2$. Oni [114] su našli da su rezultati osetljivi na izbor efektivnog naelektrisanja naročito na nižim energijama. Na slici 2.6 su totalni preseki dobijeni u prior verziji CBDW-3B metoda sa $Z_T = 1.6875$ prikazani tačka-tačka-crta linijom. Kao što se može videti na višim upadnim energijama, CBDW-3B preseki su prilično slični CB1-4B vrednostima, dok su na nižim energijama CBDW-3B preseki ispod eksperimentalnih podataka i naših rezultata. Glavni razlog za ovakvu razliku je taj što je proračun u CBDW-3B urađen za prelaz iz $1s$ u $1s$ stanje i dodatno pomnožen faktorom 1.202 radi uračunavanja i doprinosa zahvata u pobudjena stanja projektila.

2.2.3 Zahvat elektrona u sudaru Li^{3+} sa $\text{He}(1s^2)$

U ovom slučaju razmotren je elektronski zahvat u procesu (2.107) za energije u intervalu od 20 do 5000 keV/amu. Izračunati preseki prikazani su u Tabeli 4. I ovde je broj korišćenih integracionih tačaka bio $N_{GL} = 96$.

Tabela 4. Efikasan presek (u cm^2) u funkciji upadne enrgije Li^{3+} (u keV/amu) za parcijalni zahvat elektrona iz $\text{He}(1s^2)$ u proizvoljno finalno stanje vodoniku sličnog sistema za proces (2.106). Kolona označena sa $n^f l^f m^f$ predstavlja parcijalan efikasn presek $Q_{n^f l^f m^f}^-$ i $Q_{n^f l^f}^-$ za reakciju (2.107). Red označen sa Q_{tot}^- predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima $\text{Li}^{2+}(n^f l^f m^f)$ jona korišćenjem jednačine (2.117). Notacija $X[-N]$ je skraćenica za $X \times 10^{-N}$.

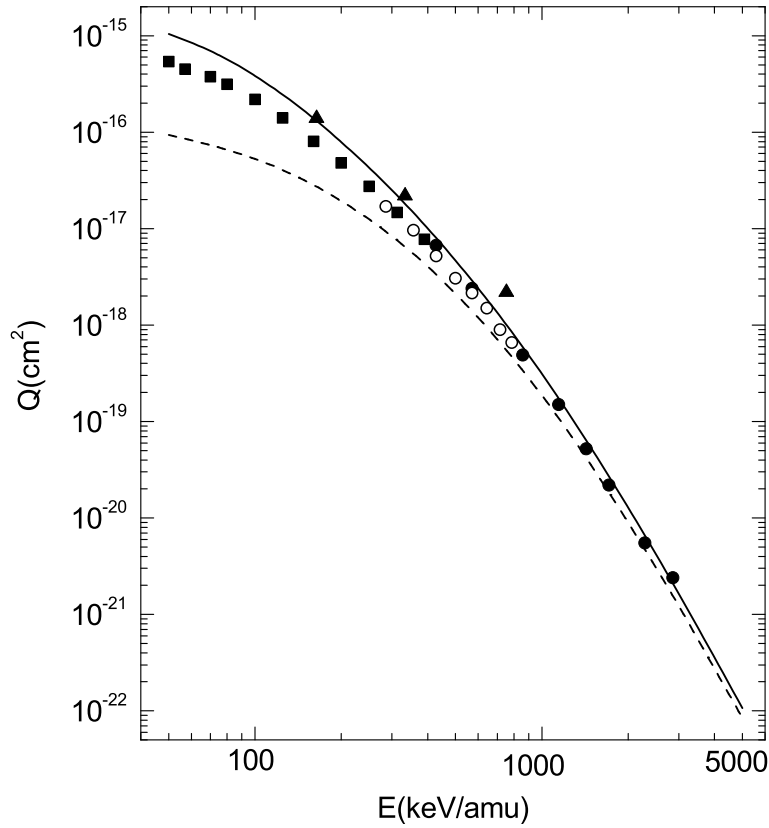
$n^f l^f m^f \setminus E(\text{keV/amu})$	20	50	75	100	200	300
100	1.39[-16]	9.41[-17]	7.01[-17]	5.29[-17]	1.94[-17]	8.36[-18]
200	3.31[-16]	9.27[-17]	3.75[-17]	1.78[-17]	3.25[-18]	1.42[-18]
210	6.62[-16]	2.91[-16]	1.64[-16]	9.97[-17]	2.01[-17]	5.71[-18]
211	2.06[-16]	7.26[-17]	3.49[-17]	1.86[-17]	2.72[-18]	6.64[-19]
2p	1.07[-15]	4.36[-16]	2.34[-16]	1.37[-16]	2.55[-17]	7.04[-18]
300	2.10[-17]	2.59[-17]	1.41[-17]	7.39[-18]	1.19[-18]	4.68[-19]
310	4.63[-17]	6.76[-17]	4.47[-17]	2.91[-17]	6.67[-18]	2.01[-18]
311	5.88[-18]	9.36[-18]	6.24[-18]	3.93[-18]	7.53[-19]	2.03[-19]
3p	5.81[-17]	8.64[-17]	5.72[-17]	3.69 [-17]	8.17[-18]	2.42[-18]
320	3.21[-17]	5.73[-17]	3.59[-17]	2.07[-17]	2.76[-18]	5.70[-19]
321	9.63[-18]	1.71[-17]	1.04[-17]	5.75[-18]	6.81[-19]	1.31[-19]
322	1.02[-18]	2.07[-18]	1.27[-18]	7.01[-19]	7.98[-20]	1.47[-20]
3d	5.34[-17]	9.57[-17]	5.93[-17]	3.34[-17]	4.28[-18]	8.62[-19]
400	3.72[-18]	9.88[-18]	6.22[-18]	3.46[-18]	5.49[-19]	2.07[-19]
410	8.27[-18]	2.44[-17]	1.82[-17]	1.22[-17]	2.92[-18]	8.97[-19]
411	8.92[-19]	2.83[-18]	2.20[-18]	1.48[-18]	3.11[-19]	8.67[-20]
4p	1.01[-17]	3.01[-17]	2.26[-17]	1.52[-17]	3.54[-18]	1.07[-18]
420	6.23[-18]	2.16[-17]	1.62[-17]	1.02[-17]	1.55[-18]	3.33[-19]
421	1.62[-18]	5.29[-18]	4.05[-18]	2.51[-18]	3.53[-19]	7.19[-20]
422	1.40[-19]	5.41[-19]	4.35[-19]	2.76[-19]	3.90[-20]	7.73[-21]
4d	9.74[-18]	3.33[-17]	2.52[-17]	1.58[-17]	2.34[-18]	4.92[-19]
430	1.49[-18]	4.84[-18]	3.31[-18]	1.82[-18]	1.72[-19]	2.63[-20]
431	6.22[-19]	1.84[-18]	1.31[-18]	7.26[-19]	6.62[-20]	9.83[-21]
432	1.08[-19]	3.80[-19]	2.84[-19]	1.61[-19]	1.48[-20]	2.16[-21]
433	7.76[-21]	3.29[-20]	2.52[-20]	1.43[-20]	1.30[-21]	1.84[-22]
4f	2.97[-18]	9.35[-18]	6.54[-18]	3.62[-18]	3.36[-19]	5.07[-20]
Q_{tot}^-	1.74[-15]	1.04[-15]	6.27[-16]	3.83[-16]	7.91[-17]	2.52[-17]

Nastavak Tabele 4.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	500	750	1000	1500	3000	5000
100	2.12[-18]	5.55[-19]	1.87[-19]	3.39[-20]	1.22[-21]	8.37[-23]
200	3.94[-19]	1.04[-19]	3.43[-20]	5.84[-21]	1.87[-22]	1.19[-23]
210	8.05[-19]	1.27[-19]	2.96[-20]	3.18[-21]	4.81[-23]	1.79[-24]
211	8.18[-20]	1.20[-20]	2.72[-21]	2.85[-22]	4.35[-24]	1.68[-25]
2p	9.69[-19]	1.51[-19]	3.51[-20]	3.75[-21]	5.68[-23]	2.12[-24]
300	1.27[-19]	3.35[-20]	1.096[-20]	1.85[-21]	5.76[-23]	3.63[-24]
310	2.96[-19]	4.73[-20]	1.103[-20]	1.18[-21]	1.74[-23]	6.42[-25]
311	2.72[-20]	4.16[-21]	9.53[-22]	1.01[-22]	1.54[-24]	5.93[-26]
3p	3.51[-19]	5.56[-20]	1.29[-20]	1.38[-21]	2.05[-23]	7.60[-25]
320	5.17[-20]	5.62[-21]	9.97[-22]	7.21[-23]	5.46[-25]	1.21[-26]
321	1.11[-20]	1.16[-21]	2.01[-22]	1.42[-23]	1.07[-25]	2.40[-27]
322	1.16[-21]	1.15[-22]	1.93[-23]	1.32[-24]	9.49[-27]	2.11[-28]
3d	7.62[-20]	8.17[-21]	1.44[-21]	1.03[-22]	7.78[-25]	1.73[-26]
400	5.53[-20]	1.45[-20]	4.75[-21]	7.96[-22]	2.46[-23]	1.54[-24]
410	1.34[-19]	2.15[-20]	5.01[-21]	5.33[-22]	7.85[-24]	2.88[-25]
411	1.19[-20]	1.84[-21]	4.24[-22]	4.50[-23]	6.87[-25]	2.64[-26]
4p	1.58[-19]	2.52[-20]	5.86[-21]	6.23[-22]	9.23[-24]	3.40[-25]
420	3.10[-20]	3.40[-21]	6.05[-22]	4.38[-23]	3.31[-25]	7.31[-27]
421	6.37[-21]	6.81[-22]	1.19[-22]	8.52[-24]	6.40[-26]	1.44[-27]
422	6.50[-22]	6.62[-23]	1.13[-23]	7.78[-25]	5.66[-27]	1.26[-28]
4d	4.50[-20]	4.90[-21]	8.67[-22]	6.24[-23]	4.70[-25]	1.04[-26]
430	1.58[-21]	1.22[-22]	1.67[-23]	8.33[-25]	3.25[-27]	4.37[-29]
431	5.68[-22]	4.24[-23]	5.72[-24]	2.78[-25]	1.05[-27]	1.39[-29]
432	1.19[-22]	8.56[-24]	1.12[-24]	5.28[-26]	1.93[-28]	2.55[-30]
433	9.67[-24]	6.64[-25]	8.48[-26]	3.88[-27]	1.38[-29]	1.80[-31]
4f	2.98[-21]	2.25[-22]	3.06[-23]	1.50[-24]	5.76[-27]	7.70[-29]
Q_{tot}^-	4.70[-18]	1.02[-18]	3.11[-19]	5.06[-20]	1.63[-21]	1.07[-22]

Iz tabele vidimo da važe sledeći odnosi: $Q_{2s}^- > Q_{2p_0}^-$ i $Q_{3s}^- > Q_{3p_0}^-$ na energijama $E \geq 1000$ keV/amu, $Q_{4s}^- > Q_{4p_0}^-$ na energijama $E \geq 1500$ keV/amu, kao i $Q_{2p_0}^- > Q_{2p_{\pm 1}}^-$, $Q_{3p_0}^- > Q_{3p_{\pm 1}}^-$ i $Q_{4p_0}^- > Q_{4p_{\pm 1}}^-$ na svim razmatranim energijama.

Dobijeni rezultati za totalni efikasni presek u energijskom intervalu od 50 do 5000 keV/amu predstavljeni su na slici 2.7. Prezentovani rezultati su u odličnom slaganju sa merenjima [96] i [127]-[129]. Na istoj slici prikazan je i parcijalan efikasan presek za $1s$ stanje (Q_1^-). Kao što je i očekivano doprinos od ekscitovanih stanja je značajniji na nižim nego na višim upadnim energijama (na kojima zahvat u $1s$ stanje postaje dominantan). Za dalje testiranje teorije takodje je potrebno u budućnosti uraditi merenja za parcijalne preseke.



Slika 2.7: Totalni efikasni presek u (cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV/amu})$ za elektronski zahvat unutar svih finalnih stanja $\text{Li}^{2+}(\Sigma)$ u procesu sudara Li^{3+} jona sa helijumom: $\text{Li}^{3+} + \text{He}(^1\text{S}) \rightarrow \text{Li}^{2+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Puna linija pokazuje rezultate za $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561Q_4^-$ koji su dobijeni CB1-4B aproksimacijom [47]. Isprekidana linija reprezentuje $Q_{1s}^- \equiv Q_1^-$ koja je takodje dobijena CB1-4B metodom. Eksperimentalni podaci: ■ Shah i Gilbody [96]; ● Woitke *et al.* [127]; ○ Sant'Anna *et al.* [128] i ▲ Dmitriev *et al.* [129].

2.2.4 Zahvat elektrona u sudaru Be^{4+} sa $\text{He}(1s^2)$

Preseci za elektronski transfer za $\text{Be}^{4+} - \text{He}(1s^2)$ sudare, za brojna finalna stanja okarakterisana kvantnim brojevima (n^f, l^f) i svih finalnih stanja su prikazani u Tabeli 5 u energijskom opsegu od 100 do 3000 keV/amu . Broj integracionih tačaka koji je korišćen u izračunavanju je bio $N_{GL} = 96$. Totalni preseci su dobijeni sumiranjem doprinosa svih individualnih ljuski i podljuski do $n^f = 5$:

$$Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + 3.049Q_5^-, \quad (2.118)$$

gde numerički faktor 3.049 približno uračunava i doprinos svih pobudjenih stanja $n^f \geq 6$. Rezultati za Q_{tot}^- su prikazani na slici 2.8 punom linijom. n^f distribucija je takodje prikazana na slici 2.8.

Tabela 5. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u CB1-4B metodi za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane Be^{4+} u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV}/\text{amu})$. Red označen sa $Q^-(\Sigma_5)$ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{Be}^{3+}(n^f l^f m^f)$ jona korišćenjem jednačine (2.118). Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

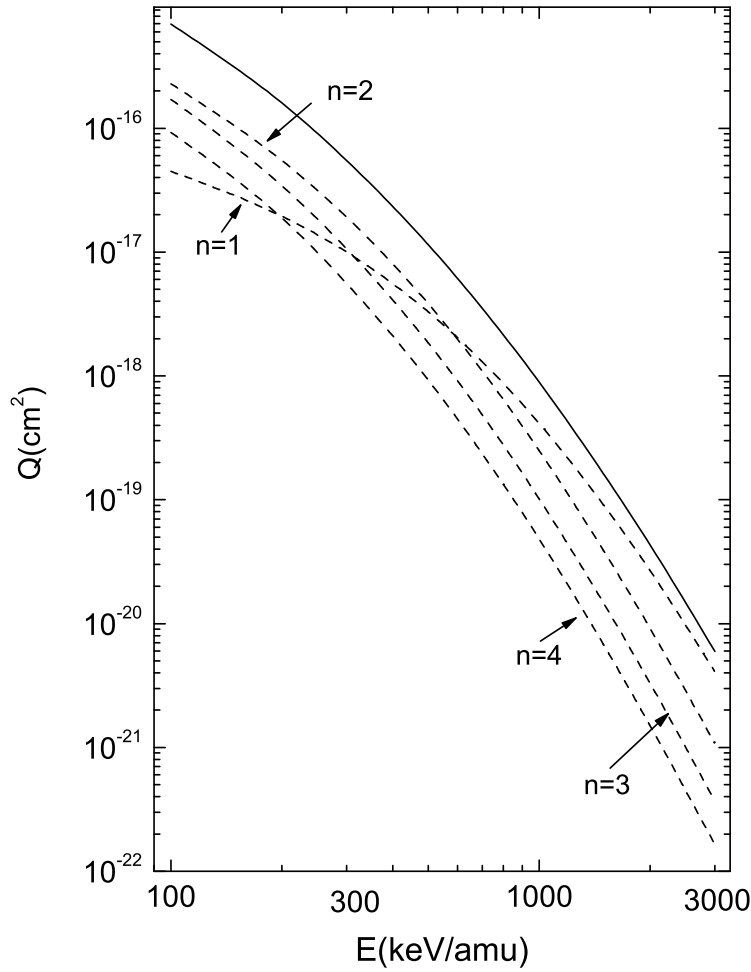
$n^f l^f \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	100	200	300	500	750
$1s$	4.50[-17]	1.95[-17]	9.97[-18]	3.28[-18]	1.06[-18]
$2s$	4.15[-17]	4.28[-18]	1.34[-18]	5.37[-19]	2.06[-19]
$2p$	1.87[-16]	5.04[-17]	1.78[-17]	3.29[-18]	6.31[-19]
$3s$	1.63[-17]	2.09[-18]	5.16[-19]	1.70[-19]	6.63[-20]
$3p$	4.92[-17]	1.44[-17]	5.70[-18]	1.18[-18]	2.36[-19]
$3d$	1.06[-16]	1.78[-17]	4.38[-18]	4.97[-19]	6.32[-20]
$4s$	7.37[-18]	1.07[-18]	2.50[-19]	7.37[-20]	2.88[-20]
$4p$	2.14[-17]	6.16[-18]	2.48[-18]	5.30[-19]	1.08[-19]
$4d$	4.18[-17]	8.87[-18]	2.38[-18]	2.88[-19]	3.77[-20]
$4f$	2.20[-17]	2.67[-18]	4.82[-19]	3.52[-20]	3.10[-21]
$5s$	3.84[-18]	5.99[-19]	1.37[-19]	3.84[-20]	1.50[-20]
$5p$	1.10[-17]	3.19[-18]	1.29[-18]	2.79[-19]	5.70[-20]
$5d$	2.06[-17]	4.82[-18]	1.34[-18]	1.67[-19]	2.21[-20]
$5f$	1.34[-17]	1.96[-18]	3.77[-19]	2.89[-20]	2.60[-21]
$5g$	2.79[-18]	2.51[-19]	3.38[-20]	1.62[-21]	9.98[-23]
$Q^-(\Sigma_5)$	6.95[-16]	1.60[-16]	5.49[-17]	1.15[-17]	2.74[-18]

Nastavak Tabele 5.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	1000	1500	2000	3000
$1s$	4.14[-19]	9.00[-20]	2.67[-20]	4.08[-21]
$2s$	8.38[-20]	1.79[-20]	5.06[-21]	7.11[-22]
$2p$	1.66[-19]	2.05[-20]	4.09[-21]	3.64[-22]
$3s$	2.73[-20]	5.80[-21]	1.63[-21]	2.25[-22]
$3p$	6.28[-20]	7.75[-21]	1.53[-21]	1.35[-22]
$3d$	1.23[-20]	9.99[-22]	1.48[-22]	8.64[-24]
$4s$	1.19[-20]	2.53[-21]	7.06[-22]	9.70[-23]
$4p$	2.87[-20]	3.54[-21]	7.00[-22]	6.11[-23]
$4d$	7.45[-21]	6.07[-22]	8.97[-23]	5.24[-24]
$4f$	4.62[-22]	2.53[-23]	2.82[-24]	1.10[-25]
$5s$	6.18[-21]	1.31[-21]	3.66[-22]	5.02[-23]
$5p$	1.53[-20]	1.88[-21]	3.71[-22]	3.23[-23]
$5d$	4.39[-21]	3.58[-22]	5.30[-23]	3.10[-24]
$5f$	3.92[-22]	2.16[-23]	2.42[-24]	9.47[-26]
$5g$	1.14[-23]	4.27[-25]	3.60[-26]	9.42[-28]
$Q^-(\Sigma_5)$	8.94[-19]	1.60[-19]	4.31[-20]	5.95[-21]

Iz Tabele 5 se vidi da se parcijalni preseki nalaze u sledećem odnosu: $Q_{ns}^- > Q_{np}^-$ za $E \geq 3000 \text{ keV}/\text{amu}$, $Q_{np}^- > Q_{nd}^-$ za $E \geq 500 \text{ keV}/\text{amu}$ i $Q_{nd}^- > Q_{nf}^-$ na svim razmotrenim upadnim energijama.

Primetimo da na upadnim energijama iznad $600 \text{ keV}/\text{amu}$ zahvat u $1s$ stanje postaje dominantan. Sličan trend je prethodno otkriven u tročestičnoj CDW-EFS-3B (Continuum Distorted Wave Eikonal Final State) aproksimaciji [130]. Nažalost nema eksperimentalnih



Slika 2.8: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV}/\text{amu})$ za reakciju $\text{Be}^{4+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{Be}^{3+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Puna linija predstavlja $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + 3.049Q_5^-$ izračunat prezentovanom CB1-4B metodom [48]. Isprekidane linije pokazuju n^f raspodelu, što je označeno strelicama na slici.

podataka sa kojima bi se uradilo poredjenje naših rezultata. Kvalitativno ponašanje totalnih preseka su veoma slična onima koji odgovaraju drugim razmatranim jonima.

2.2.5 Zahvat elektrona u sudaru B^{5+} sa $\text{He}(1s^2)$

Detaljni rezultati izračunavanja za izmenu naelektrisanja u $\text{B}^{5+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{B}^{4+}(n^f l^f) + \text{He}^+(1s)$ sudarima na energijama od 100 do 3000 keV/amu dati su u Tabeli 6. U ovom slučaju radi postizanja konvergencije na dve decimale iskorišćeno je $N_{GL} = 96$. Naši proračuni daju informacije o presecima za svaku individualnu ljusku n^f i podljusku $n^f l^f$ projektila, ali odgovarajuća merenja parcijalnih preseka su nedostupna. Za najviše energije analizirani su preseki za fiksirano n^f i zaključeno je da je najveći doprinos za zahvat u s stanje. Nasuprot tome, pri nižim upadnim brzinama najveći preseki su dobijeni za stanja $l^f \neq 0$. Dakle imamo: $Q_{ns}^- > Q_{np}^-$

za $E \geq 3000 \text{ keV/amu}$, $Q_{np}^- > Q_{nd}^-$ za $E \geq 750 \text{ keV/amu}$ i $Q_{nd}^- > Q_{nf}^-$ na upadnim energijama $E \geq 200 \text{ keV/amu}$.

Tabela 6. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u CB1-4B metodi za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane B^{5+} u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV/amu})$. Red označen sa $Q^-(\Sigma_6)$ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{B}^{4+}(n^f l^f m^f)$ jona korišćenjem jednačine (2.119). Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV/amu})$	100	200	300	500	750
1s	4.87[-17]	2.21[-17]	1.21[-17]	4.62[-18]	1.73[-18]
2s	6.67[-17]	9.14[-18]	1.89[-18]	5.39[-19]	2.93[-19]
2p	1.66[-16]	6.25[-17]	2.79[-17]	6.94[-18]	1.65[-18]
3s	2.61[-17]	4.81[-18]	1.00[-18]	1.60[-19]	8.71[-20]
3p	6.21[-17]	1.60[-17]	7.86[-18]	2.37[-18]	6.16[-19]
3d	1.93[-16]	4.09[-17]	1.22[-17]	1.76[-18]	2.68[-19]
4s	1.16[-17]	2.50[-18]	5.45[-19]	7.12[-20]	3.67[-20]
4p	2.92[-17]	7.12[-18]	3.34[-18]	1.04[-18]	2.80[-19]
4d	6.50[-17]	1.81[-17]	6.10[-18]	9.90[-19]	1.59[-19]
4f	6.95[-17]	1.04[-17]	2.22[-18]	2.01[-19]	2.07[-20]
5s	5.91[-18]	1.40[-18]	3.15[-19]	3.80[-20]	1.88[-20]
5p	1.53[-17]	3.80[-18]	1.73[-18]	5.46[-19]	1.48[-19]
5d	3.10[-17]	9.44[-18]	3.33[-18]	5.66[-19]	9.26[-20]
5f	3.56[-17]	6.99[-18]	1.64[-18]	1.61[-19]	1.71[-20]
5g	1.41[-17]	1.59[-18]	2.51[-19]	1.47[-20]	1.04[-21]
6s	3.37[-18]	8.48[-19]	1.94[-19]	2.26[-20]	1.09[-20]
6p	8.86[-18]	2.26[-18]	1.01[-18]	3.19[-19]	8.75[-20]
6d	1.72[-17]	5.52[-18]	1.99[-18]	3.46[-19]	5.73[-20]
6f	1.99[-17]	4.48[-18]	1.10[-18]	1.12[-19]	1.22[-20]
6g	1.05[-17]	1.46[-18]	2.48[-19]	1.54[-20]	1.12[-21]
6h	1.99[-18]	1.70[-19]	2.02[-20]	7.75[-22]	3.84[-23]
$Q^-(\Sigma_6)$	1.06[-15]	2.69[-16]	9.85[-17]	2.29[-17]	6.01[-18]

U odsustvu eksperimentalnih podataka za parcijalne zahvate, mi smo poredili na slici 2.9 merenja i naš teorijski izračunat totalni efikasni presek dobijen pomoću relacije:

$$Q_{tot}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + Q_5^- + 3.541 Q_6^-, \quad (2.119)$$

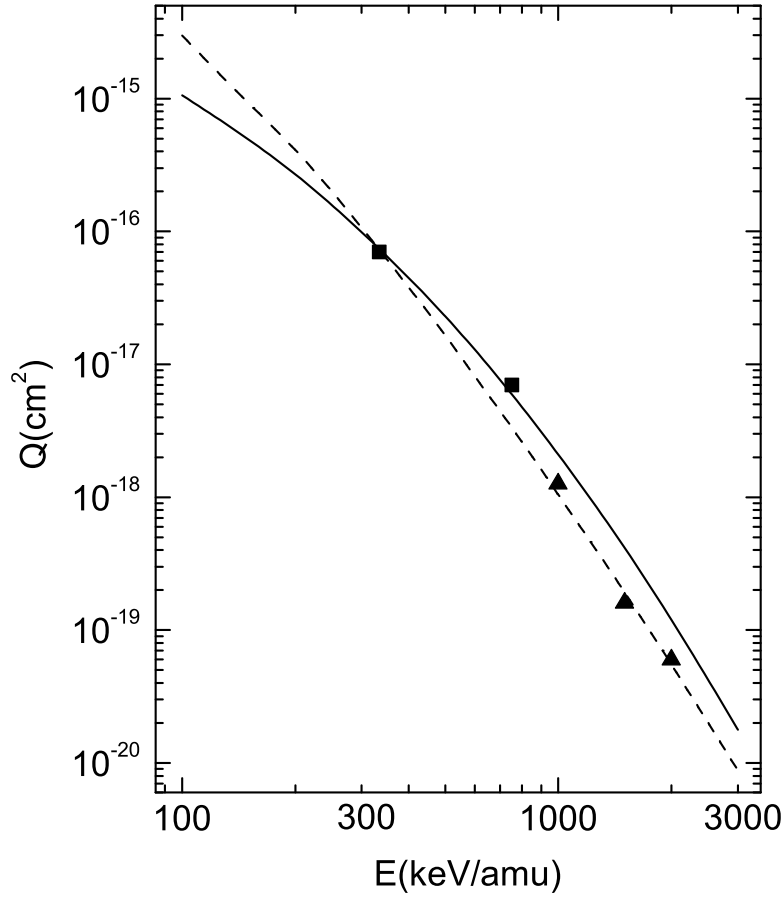
gde numerički faktor 3.541 približno uračunava i doprinos svih pobudjenih stanja $n^f \geq 7$.

Kao što se može videti sa slike 2.9 prezentovana CB1-4B teorija opisuje eksperimenatalne podatke Dmitriev-a *et al.* [129] sasvim uspešno, dok malo nadmašuje merenja Hippler-a *et al.* [132].

Nastavak Tabele 6.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	1000	1500	2000	3000
1s	7.58[-19]	1.94[-19]	6.39[-20]	1.11[-20]
2s	1.52[-19]	4.19[-20]	1.36[-20]	2.19[-21]
2p	4.96[-19]	7.20[-20]	1.58[-20]	1.55[-21]
3s	4.78[-20]	1.37[-20]	4.46[-21]	7.10[-22]
3p	1.91[-19]	2.81[-20]	6.11[-21]	5.90[-22]
3d	5.85[-20]	5.40[-21]	8.61[-22]	5.46[-23]
4s	2.06[-20]	5.99[-21]	1.95[-21]	3.09[-22]
4p	8.80[-20]	1.30[-20]	2.82[-21]	2.71[-22]
4d	3.53[-20]	3.30[-21]	5.27[-22]	3.34[-23]
4f	3.40[-21]	2.09[-22]	2.48[-23]	1.04[-24]
5s	1.06[-20]	3.12[-21]	1.02[-21]	1.61[-22]
5p	4.68[-20]	6.92[-21]	1.50[-21]	1.44[-22]
5d	2.08[-20]	1.96[-21]	3.13[-22]	1.98[-23]
5f	2.86[-21]	1.78[-22]	2.13[-23]	8.98[-25]
5g	1.30[-22]	5.42[-24]	4.85[-25]	1.36[-26]
6s	6.18[-21]	1.82[-21]	5.93[-22]	9.37[-23]
6p	2.77[-20]	4.10[-21]	8.88[-22]	8.49[-23]
6d	1.29[-20]	1.22[-21]	1.95[-22]	1.23[-23]
6f	2.06[-21]	1.29[-22]	1.55[-23]	6.53[-25]
6g	1.43[-22]	5.99[-24]	5.40[-25]	1.52[-26]
6h	3.69[-24]	1.05[-25]	7.09[-27]	1.33[-28]
$Q^-(\Sigma_6)$	2.10[-18]	4.16[-19]	1.19[-19]	1.78[-20]

Na istoj slici su takodje prikazani preseki koji su dobijeni tročestičnom CDW-EFS-3B aproksimacijom [130, 131]. CDW-EFS-3B aproksimacija koristi izobličeni kontinualni Coulomb-ov faktor predstavljajući interakciju između zahvaćenog elektrona i projektila u ulaznom kanalu i eikonal fazu za opisivanje interakcije između jezgra mete i zahvaćenog elektrona u izlaznom kanalu. U ovom modelu pasivni (ne zahvaćeni) elektron se smatra "zamrznutim" tokom celog procesa sudara. CDW-EFS-3B aproksimacija je asimetričan hibridni model jer ulazni i izlazni kanal tretira kao u CDW-3B i SE-3B modelu, respektivno. SE-3B metod razmatra zahvaćeni elektron u ulaznom i izlaznom kanalu na isti način kao što to čini CDW-3B metod, stim što SE-3B koristi logaritamske faze umesto originalnog Coulomb-ovog talasa koji koristi CDW-3B metod. Bolje slaganje CDW-EFS-3B modela [130, 131] sa merenjima Hipplera *et al.* [132] je verovatno zbog uključivanja intermedijalnih stanja elektroskog kontinuuma u jednom od kanala. Treba napomenuti da je sprezanje zahvatnih kanala sa jonizacionim kanalima veoma važno na višim energijama.



Slika 2.9: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV/amu})$ za reakciju $\text{B}^{5+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{B}^{4+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Puna linija označava $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + Q_5^- + 3.541Q_6^-$ izračunat prezentovanom CB1-4B metodom [48]. Isprekidana linija predstavlja rezultate iz CDW-EFS-3B metoda [130, 131]. Eksperimentalni podaci: ■ Dmitriev *et al.* [129]; ▲ Hippler *et al.* [132].

2.2.6 Zahvat elektrona u sudaru C^{6+} sa $\text{He}(1s^2)$

Iscrpna lista parcijalnih preseka za jednostruki zahvat u $\text{C}^{6+} - \text{He}(1s^2)$ sudarima data je u Tabeli 7. Nema raspoloživih merenja za razmatranu oblast energija za zahvate u n^f odnosno $n^f l^f m^f$ stanja. Raspodela preseka za različite ugaone momente okarakterisane kvantnim brojem l^f koji su izračunati za fiksni glavni kvantni broj n^f iz Tabele 7, ukazuje da važe sledeći odnosi: $Q_{ns}^- > Q_{np}^-$ za $E \geq 3500 \text{ keV/amu}$, $Q_{np}^- > Q_{nd}^-$ za $E \geq 1000 \text{ keV/amu}$, $Q_{nd}^- > Q_{nf}^-$ na upadnim energijama $E \geq 300 \text{ keV/amu}$ kao i $Q_{nf}^- > Q_{ng}^-$ i $Q_{ng}^- > Q_{nh}^-$ na svim razmotrenim energijama. Broj integracionih tačaka koji je korišćen u Gauss-Legendre-ovim kvadraturama, radi postizanja konvergencije na dve decimale bio je $N_{GL} = 160$. Totalni efikasni presek za zahvat dobijen sumiranjem po svim vezanim stanjima sa glavnim kvantnim brojevima $n^f \leq 7$ prema relaciji:

$$Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + Q_5^- + Q_6^- + 4.035Q_7^-, \quad (2.120)$$

prikazan je na slici 2.10. U ovom slučaju numerički faktor 4.035 računa doprinos pobudjenih stanja sa glavnim kvantnim brojem $n^f \geq 8$.

Tabela 7. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u CB1-4B metodi za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane C^{6+} u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV}/\text{amu})$. Red označen sa $Q^-(\Sigma_7)$ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{C}^{5+}(n^f l^f m^f)$ jona korišćenjem jednačine (2.120). Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	100	150	300	500	750
1s	4.95[-17]	3.34[-17]	1.41[-17]	5.99[-18]	2.51[-18]
2s	7.29[-17]	3.29[-17]	3.64[-18]	5.83[-19]	3.44[-19]
2p	1.20[-16]	8.38[-17]	3.37[-17]	1.10[-17]	3.23[-18]
3s	3.36[-17]	1.59[-17]	2.27[-18]	2.20[-19]	8.64[-20]
3p	9.80[-17]	3.48[-17]	8.07[-18]	3.38[-18]	1.17[-18]
3d	2.63[-16]	1.25[-16]	2.35[-17]	4.28[-18]	7.78[-19]
4s	1.56[-17]	7.91[-18]	1.27[-18]	1.18[-19]	3.46[-20]
4p	4.48[-17]	1.86[-17]	3.48[-18]	1.44[-18]	5.23[-19]
4d	8.34[-17]	4.41[-17]	1.06[-17]	2.29[-18]	4.52[-19]
4f	1.56[-16]	6.24[-17]	6.70[-18]	7.36[-19]	8.78[-20]
5s	7.99[-18]	4.31[-18]	7.37[-19]	6.94[-20]	1.74[-20]
5p	2.30[-17]	1.05[-17]	1.85[-18]	7.37[-19]	2.75[-19]
5d	4.06[-17]	2.23[-17]	5.61[-18]	1.28[-18]	2.62[-19]
5f	6.60[-17]	3.30[-17]	4.58[-18]	5.65[-19]	7.14[-20]
5g	4.75[-17]	1.70[-17]	1.14[-18]	7.93[-20]	6.42[-21]
6s	4.52[-18]	2.57[-18]	4.56[-19]	4.34[-20]	9.99[-21]
6p	1.30[-17]	6.40[-18]	1.10[-18]	4.27[-19]	1.61[-19]
6d	2.26[-17]	1.29[-17]	3.30[-18]	7.77[-19]	1.62[-19]
6f	3.41[-17]	1.91[-17]	2.97[-18]	3.88[-19]	5.04[-20]
6g	2.95[-17]	1.29[-17]	1.06[-18]	8.03[-20]	6.80[-21]
6h	9.55[-18]	3.11[-18]	1.34[-19]	6.11[-21]	3.43[-22]
7s	2.78[-18]	1.64[-18]	2.99[-19]	2.87[-20]	6.27[-21]
7p	8.02[-18]	4.14[-18]	7.08[-19]	2.70[-19]	1.02[-19]
7d	1.38[-17]	8.14[-18]	2.10[-18]	5.02[-19]	1.06[-19]
7f	2.04[-17]	1.20[-17]	1.98[-18]	2.68[-19]	3.54[-20]
7g	1.84[-17]	8.97[-18]	8.22[-19]	6.55[-20]	5.68[-21]
7h	8.37[-18]	3.17[-18]	1.60[-19]	7.77[-21]	4.51[-22]
7i	1.44[-18]	4.19[-19]	1.18[-20]	3.55[-22]	1.39[-23]
$Q^-(\Sigma_7)$	1.53[-15]	7.58[-16]	1.55[-16]	3.91[-17]	1.13[-17]

Sa slike vidimo da je CB1-4B aproksimacija u zadovoljavajućoj saglasnosti sa raspoloživim eksperimentalnim podacima [129] i [133]-[135]. Poredjenje izmedju CB1-4B metoda i CDW-EFS-3B metoda [131] je prikazano na slici 2.10. Kao što se može videti iz ovog poredjenja na višim energijama rezultati za CDW-EFS-3B (tačka-crta linija) su manji od preseka iz CB1-4B metoda. Ovakvo ponašanje je obrnuto na nižim energijama. To je zbog činjenice da CDW-EFS-3B metoda uključuje intermedijalna stanja u ulaznom kanalu, dok je u CB1-4B metodi zahvaćeni elektron tretiran kao slobodan u prelaznoj fazi sudara.

CDW-3B metod je takodje primenio Saha *et al.* [136] za jednoelektronski zahvat u $\text{C}^{6+} - \text{He}$ sudarima u relativno uskom regionu energija od 1000-2125 keV/amu. Njihovi rezultati [136] su u dobroj saglasnosti sa merenjima (nisu prikazani na slici da bi se izbegla nepreglednost).

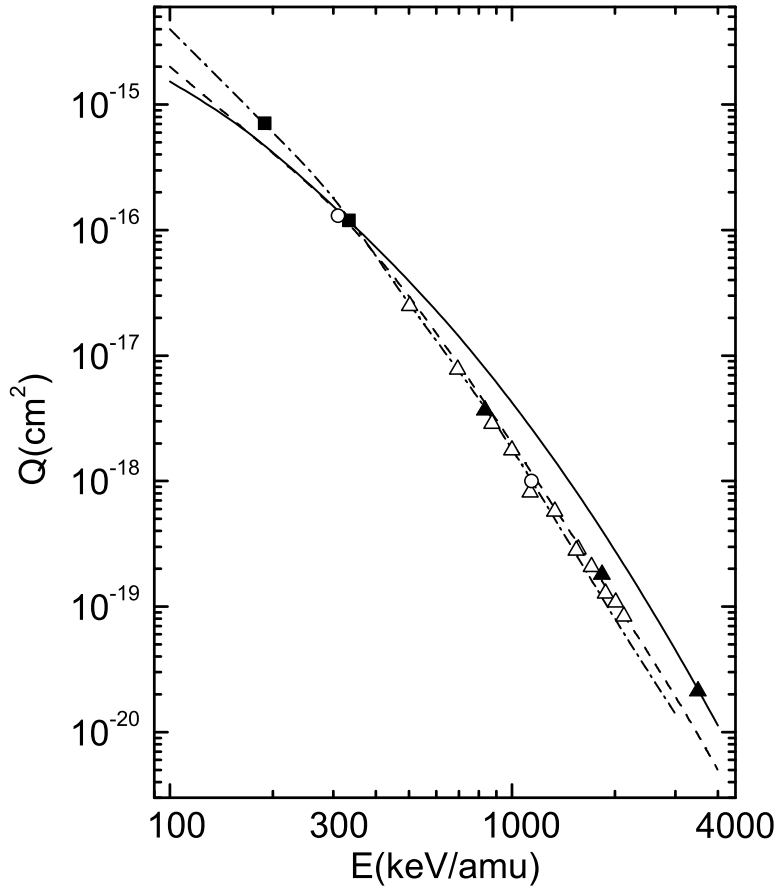
Nastavak Tebele 7.

$n^f l^A \backslash E(\text{keV}/\text{amu})$	1000	1500	3000	3500	4000
1s	1.21[-18]	3.54[-19]	2.53[-20]	1.29[-20]	7.00[-21]
2s	2.22[-19]	8.04[-20]	5.65[-21]	2.78[-21]	1.46[-21]
2p	1.11[-18]	1.92[-19]	5.08[-21]	2.08[-21]	9.36[-22]
3s	6.36[-20]	2.58[-20]	1.87[-21]	9.14[-22]	4.77[-22]
3p	4.29[-19]	7.64[-20]	2.00[-21]	8.09[-22]	3.62[-22]
3d	1.91[-19]	2.03[-20]	2.43[-22]	8.38[-23]	3.27[-23]
4s	2.64[-20]	1.12[-20]	8.20[-22]	4.00[-22]	2.08[-22]
4p	1.97[-19]	3.56[-20]	9.25[-22]	3.74[-22]	1.67[-22]
4d	1.14[-19]	1.24[-20]	1.50[-22]	5.16[-23]	2.01[-23]
4f	1.58[-20]	1.10[-21]	6.36[-24]	1.87[-24]	6.38[-25]
5s	1.33[-20]	5.79[-21]	4.27[-22]	2.08[-22]	1.08[-22]
5p	1.05[-19]	1.91[-20]	4.95[-22]	1.99[-22]	8.88[-23]
5d	6.73[-20]	7.39[-21]	8.92[-23]	3.07[-23]	1.20[-23]
5f	1.32[-20]	9.32[-22]	5.48[-24]	1.61[-24]	5.50[-25]
5g	8.69[-22]	4.02[-23]	1.16[-25]	2.91[-26]	8.66[-27]
6s	7.63[-21]	3.37[-21]	2.50[-22]	1.22[-22]	6.33[-23]
6p	6.19[-20]	1.13[-20]	2.93[-22]	1.18[-22]	5.25[-23]
6d	4.19[-20]	4.62[-21]	5.57[-23]	1.92[-23]	7.46[-24]
6f	9.48[-21]	6.74[-22]	3.99[-24]	1.17[-24]	4.00[-25]
6g	9.45[-22]	4.42[-23]	1.29[-25]	3.25[-26]	9.68[-27]
6h	3.57[-23]	1.11[-24]	1.60[-27]	3.45[-28]	8.96[-29]
7s	4.79[-21]	2.13[-21]	1.58[-22]	7.70[-23]	4.01[-23]
7p	3.95[-20]	7.22[-21]	1.87[-22]	7.53[-23]	3.35[-23]
7d	2.74[-20]	3.04[-21]	3.67[-23]	1.26[-23]	4.91[-24]
7f	6.68[-21]	4.80[-22]	2.85[-24]	8.39[-25]	2.86[-25]
7g	7.96[-22]	3.78[-23]	1.11[-25]	2.80[-26]	8.35[-27]
7h	4.74[-23]	1.51[-24]	2.20[-27]	4.75[-28]	1.24[-28]
7i	1.11[-24]	2.37[-26]	1.75[-29]	3.22[-30]	7.32[-31]
$Q^-(\Sigma_7)$	4.23[-18]	9.14[-19]	4.52[-20]	2.18[-20]	1.13[-20]

CDW-3B metod uzima u potpunosti u obzir Coulomb-ova kontinualna intermedijalna stanja zahvaćenog elektrona i u ulaznom i u izlaznom kanalu. CDW-3B i CDW-EFS-3B metode imaju isto početno stanje rasejanja i $\nabla \cdot \nabla$ perturbaciju u amplitudi prelaza. Oni se razlikuju samo u opisu izlaznog kanala, gde CDW-EFS-3B metod pojednostavljuje CDW-3B metodu kroz zamenu ukupne Coulomb-ove talasne funkcije njenom asimptotskom formom sa odgovarajućim logaritamskim faznim faktorom.

Na višim energijama rezultati iz CB1-4B metoda nadmašuju eksperimentalne podatke, osim onih na najvećoj energiji od 3500 keV/amu. Razlika između prezentovanih proračuna i eksperimentalnih totalnih efikasni preseka na višim energijama nije ne očekivano.

Osim za razmatrane B^{5+} i C^{6+} projekte, proračuni pokazuju da CB1-4B metod za više energije nadmašuje merenja i za druge visoko-naelektrisanе projekte kao što su N^{7+} , O^{8+} i F^{9+} . Ovo je delom kao što je rečeno zbog zanemarivanja jonizacionih kanala u prezentovanoj CB1-4B metodi. Jonizacija dominira nad izmenom naelektrisanja na visokim energijama. Na primer, u $C^{6+} - \text{He}$ sudaru na 1 MeV/amu, izmereni totalni presek za jonizaciju je $6 \cdot 10^{-16} \text{cm}^2$. To je mnogo veće od totalnog efikasnog preseka za zahvat, koji je oko $2 \cdot 10^{-18} \text{cm}^2$. Dakle za pravilno opisivanje elektronskog transfera na granici visokih energija treba uključiti stanja elektronskog kontinuuma. Međutim, na nižim energijama izmena naelektrisanja dominira



Slika 2.10: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV/amu})$ za reakciju $\text{C}^{6+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{C}^{5+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Puna linija označava efikasni presek $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + Q_4^- + Q_5^- + Q_6^- + 4.035Q_7^-$ koji je izračunat CB1-4B metodom [48]. Isprekidana linija: the BCCIS-4B method [112]; tačka-crta linija CDW-EFS-3B method [131]. Eksperimentalni podaci: ■ Dmitriev *et al.* [129]; ▲ Anholt *et al.* [133]; ○ Graham *et al.* [134]; △ Dillingham *et al.* [135].

nad jonizacijom i stanja elektronskog kontinuuma predstavljaju nedostatak, jer su ova intermedijalna jonizaciona stanja prenaplašena za posmatranu reakcije. Ovaj efekat dovodi do nadmašivanja eksperimentalnih podataka.

Poredjenje CB1-4B metoda sa drugim hibridnim jednocanalnim modelom kao što je prior verzija BCCIS-4B metoda [112] je takodje prikazano na slici 2.10 isprekidanom linijom. Njihovi rezultati [112] na višim energijama leže ispod CB1-4B preseka. Podsećamo da ovaj model uključuje intermedijalna stanja elektronskog kontinuuma u izlaznom kanalu, a koristi istu perturbaciju u amplitudi prelaza kao i CB1-4B model.

2.2.7 Uzajamna neutralizacija u procesu $\text{H}^+ + \text{H}^-$ sudara

Negativni joni imaju glavnu ulogu u mnogim oblastima fizike i hemije. Dobro je poznato da preko 80% elemenata u prirodi su u stanju da formiraju stabilne atomske negativne jone [137].

Pored toga poznato je da negativni joni mnogih molekula takodje postoje [138]. Massey [139] i Smirnov [140] su objavili monografije gde su uopšteno razmatrali negativne jone. Stabilnost negativnog jona zavisi od toga u kojoj meri dodatni elektron (najslabije vezan) oseća privlačno polje jezgra, znajući da je jezgro ekranirano ostalim elektronima. To znači da elektronski korelacioni efekti igraju veoma važnu ulogu u odredjivanju celokupne strukture i dinamike ovih jona kao što je razmotreno u [137, 141, 142].

Pozitivni i negativni joni vodonika su glavne komponente termonuklearne i astrofizičke plazme. Osnovna reakcija neutralizacije izmedju H^+ i H^- je veoma važna za termonuklearna istraživanja, kao i za istraživanja atmosferskih i astrofizičkih procesa. U sunčevoj atmosferi, negativni joni predstavljaju jedan od osnovnih izvora kontinualne neprozirnosti u vidljivom delu spektra.

Uzajamna neutralizacija u $H^+ - H^-$ sudaru je prototip reakcije za prenos elektrona izmedju dva suprotno naelektrisana jona. To je najjednostavnija reakcija moguća. Medjutim, jednostavnost ove reakcije je zapravo varljiva. Naime dva protona i dva aktivna elektrona čine ovaj sistem četveročestičnim problemom. U praksi primena teorije za sudare četiri tela podrazumeva naporne analitičke i numeričke proračune čak i u jednom tipu prvog reda aproksimacije.

Struktura negativnog jona je drugačija od atoma ili pozitivnih jona u nekoliko važnih aspekata. Ova razlika potiče od prirode interakcije kojoj je izložen spoljni elektron. U atomima i pozitivnim jonima valentni elektron se kreće asimptotski u dugodometnom Coulomb-ovom polju koje potiče od pozitivno naelektrisanog jezgra. Spoljni elektron u negativnom jonu oseća mnogo slabiji indukovani interakcioni potencijal kratkog dometa koji proizilazi iz polarizacionog efekta od atomskog jezgra. Naime, indukovani dipolni potencijal je plitak i obično omogućava postojanje samo jednog vezanog stanja. Slabost ovog potencijala se ogleda u činjenici da su vezivne energije ili ekvivalentno elektronski afinitet matičnih atoma, obično red veličine manji od jonizacione energije atoma [142].

Na niskim energijama sudara, konfiguracija podeljene ljuske (split-shell) ($1s1s'$) za opisivanje H^- jona je često korišćena. Prema ovoj slici jedan od dva elektrona H^- leži u skoro vodoničnoj $1s$ orbitali, a drugi slabo vezani $1s'$ elektron zauzima difuznu orbitalu čiji je poluprečnik oko $4a_0$. U takvim okolnostima, tretman $H^+ + H^-$ sistema može se pojednostaviti korišćenjem modela potencijala koji opisuje uticaj unutrašnjeg elektrona i jezgra kome pripada na spoljašnji elektron. Ovaj model redukuje originalni sistem na problem sa jednostavnijim jednoelektronskim Hamiltonijanom. Zahvaćeni elektron je spoljašnji, slabo vezani elektron, koji se kreće u kombinovanom polju Coulomb-ovog potencijala koji potiče od jednog centra (H^+) i kratkodometne interakcije povezane sa drugim centrom (H). Za elektron iz H se očekuje da daje slab doprinos efikasnom preseku za neutralizaciju [143]. Sa ovom pretpostavkom, dvocentrični jednoelektroki Hamiltonijan h za proces $H_a^+ + H_b^- \rightarrow H_a + H_b$ je dat sa $h = -\Delta/2 - 1/r_a + V_b(r_b)$, gde potencijal $V_b(r_b)$ za $e^- + H_b$ interakciju ima formu nelokalizovanog separabilnog operatora. Prema ovom modelu, čvrsto vezani (unutrašnji), nezahvaćeni elektron se smatra da pripada jezgru.

Jednoelektronski Hamiltonijani su već korišćeni za opsivanje $H^+ + H^-$ sudarnog procesa, na primer Ermolaev [144] u formalizmu razvoja po atomskom bazisu i Sidis *et al* [143, 145] u modelu razvoja po molekulskom bazisu. Detaljno proučavanje jednoelektronskog molekulskog opisa $H^+ + H^-$ sistema može se naći u radu Errea [146, 147].

Teorijski preseki za neutralizaciju u sudaru izmedju H^+ i H^- jona u energijskom intervalu od 0.62 do 80 keV mogu se naći kod Ermolaev-a [144]. Proračun zatvorenog sprežanja (close-

coupled) [144], sproveden je u okviru poluklasične impact-parametar aproksimacije, u kojoj je talasna funkcija bila razvijena u bazu od 51 dvocentrične atomske orbitale. Korišćenjem bazisa od 23 atomske orbitale Shingal i Bransden [148] su izračunali efikasni presek za isti proces na energijama u opsegu od 0.15 do 50 keV.

Efikasni presek za izmenu naelektrisanja u $H^+ + H^-$ sudaru je bio izračunat korišćenjem metoda zatvorenog sprezanja sa dvocentričnim atomskim orbitalama (TC-AOCC) [149, 150]. Šta više sudarna dinamika za $H^+ + H^-$ sistem je bila proučavana [151] pomoću TC-AOCC metode kada su interakcije naelektrisanih čestica ekranirane. Liu i Wang [151] su koristili kratkodometni Debye-Hückel-ov (Yukawa-tip) potencijal za opisivanje interakcije između izbačenog elektrona i neutralnog jezgra. Oni su našli da ekranirana interakcija uvodi značajne promene utičući na vrednost i energijsko ponašanje parcijalnih efikasnih preseka [151]. Ovi efekti prouzrokuju promenu spektra emitovanog zračenja u procesu $H^+ + H^-$ neutralizacije, što se može iskoristiti za dijagnostiku temperature i gustine laboratorijske i astrofizičke plazme. Korišćenjem jednoelektronskog Hamiltonijana i razvojem talasne funkcije za spoljašnji, slabo vezani elektron, po Coulomb Green-ovim funkcijama, Chibisov [152, 153] je detaljno istražio elektronski zahvat u sporim sudarima između negativnih i pozitivnih jona.

U svim gore citiranim studijama za uzajamnu neutralizaciju, zahvaćeni elektron je slabo vezani, spoljašnji elektron. Istovremeno, ovi tretmani predpostavljaju da atomsko jezgro ostaje pre svega neometano prilikom ovog procesa. Međutim, pri sudaru na visokim energijama, takav opis prestaje da važi ukazujući da zahvat unutrašnjeg (čvrsto vezanog) elektrona se mora uzeti u obzir [144]. Postoje dve visoko energijske aproksimacije koje su primenjene za istraživanje uzajamne neutralizacije. Jedna takva teorija je tročestična CDW-3B (continuum distorted wave) aproksimacija, koja je iskorišćena za određivanje efikasnog preseka zahvata elektrona $Q(nl, n'l')$ kada brzi proton interaguje sa H^- metom [154]. Ovde kvantni brojevi nl i $n'l'$ označavaju elektronska stanja zahvaćenog i pasivnog elektrona respektivno. Dakle Moore i Banyard su u svojoj studiji [154] prikazali rezultate za stanja sa n i n' jednaka 1 i 2, zajedno sa $l = 0, 1$ i $l' = 0$. Utvrđeno je da su ovi rezultati za efikasni presek veoma osetljivi na izmenu talasne funkcije koja opisuje metu. Meta je bila opisana varijacionom talasnom funkcijom Hartree-Fock-ovog tipa, korišćenjem formalizma podeljenih ljuski (split-shell) i konfiguracione-interakcione talasne funkcije [154]. Bez obzira na značaj ove visoko energijske aproksimacije i svih gore navedenih studija, one su ipak sve ograničene na kategoriju tročestičnih aproksimacija, u kojima je jedino aktivni elektron opisan na eksplicitan način. Drugi visoko energijski model je Coulomb-Born-ova aproksimacija koja je bila primenjena [155] u ‘prior’ i ‘post’ formi za izračunavanje totalnog efikasnog preseka za zahvat elektrona iz osnovnog stanja mete u osnovno stanje projektila $H^+ + H^-(1s^2) \rightarrow H(1s) + H(1s)$ u energijskom intervalu od 25 do 100 keV. Sa druge strane za vezano-slobodne prelaze koji se ostvaruju u sudarima H^+ sa H^- jonima, četvoročestična Modifikovana Coulomb Born-ova (MCB) aproksimacija ([41], [156]-[158]) za jednostruko elektronsko odlepljivanje (detachment) $H^+ + H^- \rightarrow H^+ + H + e$ je u odličnoj saglasnosti sa svim raspoloživim eksperimentalnim podacima u kojima upadna brzina v pokriva široki opseg (0.235-12 a.u.). Uspeh MCB četvoročestične aproksimacije je bio dobra motivacija za izvođenje sistematskog proučavanja jednoelektronskog zahvata u $H^+ + H^-$ sudaru korišćenjem CB1-4B metoda, koji takodje pripada širokoj kategoriji četvoročestičnih teorija izobličenih talasa, na osnovu koga su dobijeni parcijalni i totalni efikasni preseki (sa stanovišta četiri tela) koji ranije nisu bili dostupni u literaturi.

Dakle razmotrimo jednoelektronski zahvat u procesu (2.112):

$$H_a^+ + H_b^-(1s^2) \longrightarrow H_a(n^f l^f m^f) + H_b(1s), \quad (2.121)$$

gde su indeksi "a" i "b" iskorišćeni da bi se napravila formalna razlika između dva inače identična protona. Mi smo usvojili nerelativistički spin-nezavistan formalizam u kojem se dva elektrona u (2.121) mogu smatrati različitim jedan od drugog u smislu da je e_1 zahvaćeni elektron u proizvoljno satnje $H_a(n^f l^f m^f)$, dok je e_2 elektron u ostatku mete $H_b(1s)$. Meta H^- je uzeta da se nalazi u osnovnom singletnom stanju $(1s^2) ^1S$, što znači da je koordinatna talasna funkcija simetrična (spinska je antisimetrična). Uobičajno se mislio da svi bez izuzetka jednostruko naelektrisani ne-molekularni negativni joni u odsustvu spoljašnjeg magnetno polja imaju samo jednu stabilnu konfiguraciju, konfiguraciju osnovnog stanja. Osnovno stanje za H^- je dato elektronskom konfiguracijom $(1s^2) ^1S$. Zaista Hill [17] je 1976 godine pokazao da H^- ima osnovno stanje koje je stabilno. Međutim, mnogo ranije 1950 godine, Hylleraas [159] je pokazao postojanje drugog stabilnog stanja za H^- i to dvostruko ekscitovanog stanja $(2s^1 2p^1) ^3P$.

Kao što je već rečeno vrlo je bitno izabrati talasne funkcije koje zadovoljavaju korektne granične uslove kao i odgovarajući kratkodometni potencijal [40, 41]. Naime ovo je drastično vidljivo u jednostrukom elektronskom odlepljivanju $H^+ + H^- \rightarrow H^+ + H + e$ [158] za koje Eikonol Coulomb Born-ova (ECB) aproksimacija [160] nadmašuje eksperimentalne podatke za 2-3 reda veličine, za razliku od uspešnosti MCB metoda [156]. I ECB i MCB aproksimacija imaju istu ulaznu i izlaznu talasnu funkciju. Međutim perturbacioni potencijal ECB modela nije u saglasnosti sa talasnom funkcijom u ulaznom kanalu što vodi nekorektnom graničnom uslovu u ovoj aproksimaciji.

Već smo napomenuli da je četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] isorišćena za opisivanje osnovnog stanja $H^-(^1S)$ jona:

$$\begin{aligned} \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = & N(a_1 e^{-b_1 x_1} + a_2 e^{-b_2 x_1}) \\ & \times (a_1 e^{-b_1 x_2} + a_2 e^{-b_2 x_2}), \end{aligned} \quad (2.122)$$

gde su varijacioni parametri $a_1 = 0.30025$, $a_2 = 1.0001$, $b_1 = 0.4228$, $b_2 = 0.9794$, a normalizaciona konstanta N je data sa:

$$N = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{a_1^2}{b_1^3} + a_2 \left[\frac{a_2}{b_2^3} + \frac{16a_1}{(b_1 + b_2)^3} \right] \right\}^{-1}. \quad (2.123)$$

Na svim razmotrenim upadnim energijama 160 integracione tačke su iskorišćene za svaku od tri kvadratura u totalnom efikasnom preseku (2.65) kako bi se postigla konvergencija na dve decimale. Kao što je rečeno efikasni presek dat relacijom (2.70) za svako konkretno $n^f l^f m^f$ dodatno je pomnožen sa 2, u suprotnosti sa jednoelektronskim modelima zatvorenog sprežanja u kojima su bili uvedeni unutrašnji i spoljašnji elektron, gde je uzeto da je zahvaćeni elektron spoljašnji, slabo vezani.

Konkretno totalni efikasan Q_{tot}^- presek za uzajamnu neutralizaciju u $H^+ + H^-$ sudaru (2.121) dobijen je sumiranjem svih doprinosa (parcijalnih efikasnih preseka) svih individualnih ljuski i podljuski do $n^f = 4$ na osnovu relacije (2.117). Dobijeni rezultati za totalne i parcijalne efikasne preseke na upadnim energijama protona u intervalu od 10 do 3000 keV prikazani su u Tabeli 8. Na osnovu Tabele 8 vidimo da za parcijalne preseke sa fiksiranim glavnim kvantnim brojem n^f i različitim orbitalnim kvantnim brojem l^f (različitim orbitalnim momentom impulsa) važe sledeći odnosi:

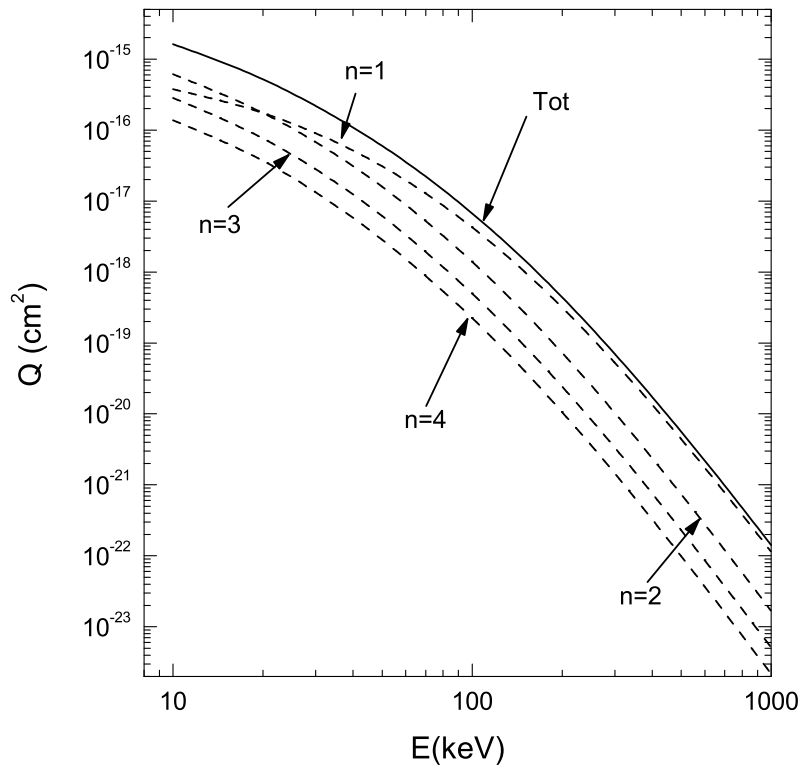
$$\begin{aligned} Q_{2s}^- &> Q_{2p}^- \quad , \quad E \geq 100 \text{ keV} \\ Q_{3s}^- &> Q_{3p}^- \quad , \quad Q_{4s}^- > Q_{4p}^- \quad , \quad E \geq 150 \text{ keV} \\ Q_{3p}^- &> Q_{3d}^- \quad , \quad E \geq 20 \text{ keV} \\ Q_{4d}^- &> Q_{4f}^- \quad , \quad E \geq 10 \text{ keV} \end{aligned} \quad (2.124)$$

Tabela 8. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u CB1-4B metodi za zahvat elektrona iz $\text{H}^-(1s^2)$ od strane protona u funkciji upadne energije $E(\text{keV})$ u laboratorijskom sistemu reference. Red označen sa Q_{tot}^- predstavlja efikasni presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{H}(n^f l^f m^f)$ pomoću relacije (2.117). Notacija $X[-N]$ predstavlja $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	10	20	50	75	100	150
1s	3.78[-16]	1.74[-16]	3.07[-17]	1.04[-17]	4.22[-18]	9.92[-19]
2s	1.38[-16]	3.33[-17]	5.03[-18]	1.72[-18]	7.01[-19]	1.61[-19]
2p	4.71[-16]	1.41[-16]	1.07[-17]	2.34[-18]	6.90[-19]	1.01[-19]
Q_2^-	6.09[-16]	1.74[-16]	1.58[-17]	4.06[-18]	1.39[-18]	2.62[-19]
3s	4.30[-17]	1.12[-17]	1.59[-18]	5.42[-19]	2.20[-19]	5.04[-20]
3p	1.11[-16]	3.90[-17]	3.61[-18]	8.18[-19]	2.45[-19]	3.63[-20]
3d	1.28[-16]	2.57[-17]	8.92[-19]	1.35[-19]	3.04[-20]	3.03[-21]
Q_3^-	2.83[-16]	7.59[-17]	6.09[-18]	1.49[-18]	4.95[-19]	8.97[-20]
4s	1.86[-17]	4.99[-18]	6.90[-19]	2.34[-19]	9.47[-20]	2.16[-20]
4p	4.60[-17]	1.63[-17]	1.58[-18]	3.64[-19]	1.09[-19]	1.63[-20]
4d	4.72[-17]	1.25[-17]	5.07[-19]	7.87[-20]	1.80[-20]	1.81[-21]
4f	2.58[-17]	2.93[-18]	4.17[-20]	4.28[-21]	7.38[-22]	5.03[-23]
Q_4^-	1.37[-16]	3.67[-17]	2.82[-18]	6.80[-19]	2.23[-19]	3.98[-20]
Q_{tot}^-	1.62[-15]	5.18[-16]	5.98[-17]	1.77[-17]	6.68[-18]	1.45[-18]
$n^f l^f \backslash E(\text{keV})$	200	500	750	1000	1500	3000
1s	3.13[-19]	4.41[-21]	5.37[-22]	1.15[-22]	1.23[-23]	2.46[-25]
2s	4.97[-20]	6.30[-22]	7.39[-23]	1.54[-23]	1.61[-24]	3.16[-26]
2p	2.27[-20]	1.08[-22]	8.28[-24]	1.28[-24]	8.74[-26]	8.29[-28]
Q_2^-	7.24[-20]	7.38[-22]	8.22[-23]	1.67[-23]	1.70[-24]	3.24[-26]
3s	1.54[-20]	1.92[-22]	2.23[-23]	4.63[-24]	4.83[-25]	9.39[-27]
3p	8.17[-21]	3.86[-23]	2.94[-24]	4.52[-25]	3.09[-26]	2.92[-28]
3d	5.15[-22]	9.74[-25]	4.91[-26]	5.62[-27]	2.53[-28]	1.18[-30]
Q_3^-	2.41[-20]	2.31[-22]	2.53[-23]	5.09[-24]	5.14[-25]	9.69[-27]
4s	6.61[-21]	8.15[-23]	9.47[-24]	1.96[-24]	2.04[-25]	3.98[-27]
4p	3.67[-21]	1.73[-23]	1.32[-24]	2.02[-25]	1.38[-26]	1.30[-28]
4d	3.09[-22]	5.87[-25]	2.96[-26]	3.38[-27]	1.52[-28]	7.06[-31]
4f	6.49[-24]	4.99[-27]	1.67[-28]	1.42[-29]	4.23[-31]	9.69[-34]
Q_4^-	1.06[-20]	9.94[-23]	1.08[-23]	2.17[-24]	2.18[-25]	4.11[-27]
Q_{tot}^-	4.37[-19]	5.63[-21]	6.72[-22]	1.42[-22]	1.51[-23]	2.99[-25]

Rezultati iz Tabele 8 su takodje prikazani grafički na slici 2.11. Prikazane su raspodele parcijlnih efikasnih preseka $Q_{n^f}^-$ za zahvat u pojedinačna finalna stanja sa datim glavnim kvantnim brojem n^f . Sa slike se vidi da elektronski zahvat u osnovno stanje ($n^f = 1$) daje najveći doprinos za upadne energije iznad 20 keV. Trenutno ne postoje eksperimentalni podaci za parcijalne efikasne preseke na osnovu čega bi se procenila tačnost predviđanja CB1-4B metoda za parcijalne preseke Q_{n^f} , tako da je veoma poželjno da se merenja ovih parcijalni preseka Q_{n^f} urade u bliskoj budućnosti.

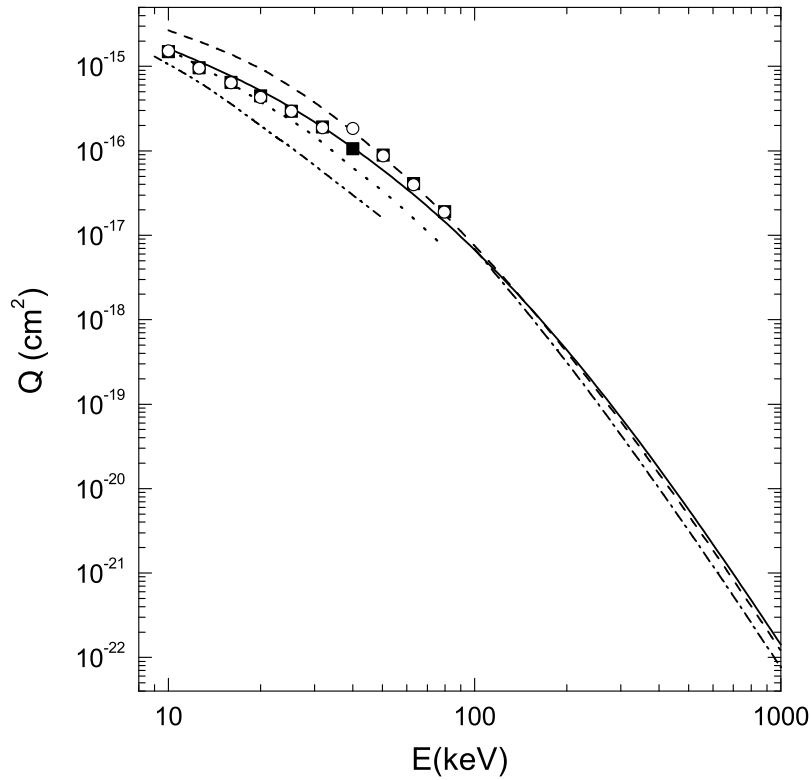
Sa druge strane, postoje eksperimentalni podaci za totalni efikasni presek Q_{tot} [161]-[165] za razmatrani proces (2.121). Najnoviji podaci iz merenja su prikazani na slici 2.12 i poredjeni sa odgovarajućim teorijskim rezultatima. Naime meta H^- jon u $\text{H}^+ + \text{H}^-$ sudaru može postati neutralni H atom ili elektronskim odlepljivanjem (jonizacijom) sa totalnim efikasnim presekom Q_{D} ili uzajamnom neutralizacijom sa totalnim efikasnim presekom Q_{M} (ovde je uveden indeks M za uzajamnu neutralizaciju da bi se napravila razlika između ova dva preseka). Ako simbolom



Slika 2.11: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji upadne energije $E(\text{keV})$ u laboratorijskom sistemu reference za reakciju $\text{H}_a^+ + \text{H}_b^-(1s^2) \rightarrow \text{H}_a(n^f l^f m^f) + \text{H}_b(1s)$. Puna linija predstavlja totalni efikasni presek $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561Q_4^-$ dobijen CB1-4B metodom [49] korišćenjem Oppenheimer-ovog $(n^f)^{-3}$ zakona skaliranja za aproksimativno uračunavanje svih nivoa $n^f \geq 5$ koji nisu eksplicitno računati. Isprekidane linije prikazuju parcijalne efikasne preseke $Q_{n^f}^-$ za fiksiran glavni kvantni broj n^f zahvaćenog elektrona kao što pokazuju strelice na slici.

Q_T označimo apsolutni efikasan presek za ukupno dobijanje atoma vodonika, onda sledi $Q_T = Q_D + Q_M$, pošto izgubljeni elektron može biti jonizovan ili zahvaćen. Schön *et al.* [164] su izmerili Q_T i Q_M i na osnovu toga izračunali efikasni presek za odlepljivanje $Q_D = Q_T - Q_M$. Peart *et al.* [163] su 1976 godine izmerili Q_T u sistemu centra mase na energijama između 1.49 i 35.2 keV. U cilju ispitivanja elektronskog odlepljivanja, oni su oduzeli efikasni presek Q_M od njihovih podataka za Q_T . Međutim 1976 godine nisu bili izmereni preseki Q_M u odgovarajućem energijskom intervalu, tako da su Peart *et al.* morali da ekstrapoliraju ranije nisko energijske eksperimentalne podatke (ispod 10 keV) [161, 162] za Q_M na višim energijama sudara. Godine 1987, Schön *et al.* [164] su pokazali da ova ekstrapolacija rezultata je bila znatno iznad izmerenih. Iz toga razloga ekstrapolirani podaci Peart-a *et al.* [163] nisu prikazani na slici 2.12.

Rezultati za Q_{tot}^- dobijeni CB1-4B aproksimacijom pomoću relacije (2.117) prikazani su na slici 2.12. Kao što se može videti na ovoj slici, CB1-4B teorija je veoma uspešno opisala eksperimentalne podatke Schön-a *et al.* [164] i Melchert-a *et al.* [165]. Eksperimentalni rezultati predstavljeni u [165] praktično se podudaraju sa merenjima iz [164]. Izuzetak se javlja jedino na energiji $E_{\text{lab}} = 40 \text{ keV}$, gde je izmereni efikasni presek iz ref. [164] $1.06 \pm 0.16 [-16] \text{ cm}^2$, dok ref. [165] daje odgovarajuću vrednost $1.85 \pm 0.185 [-16] \text{ cm}^2$. Dodatni eksperimentalni preseki na višim upadnim energijama bi bili dobrodošli da bi se obezbedili važni testovi za

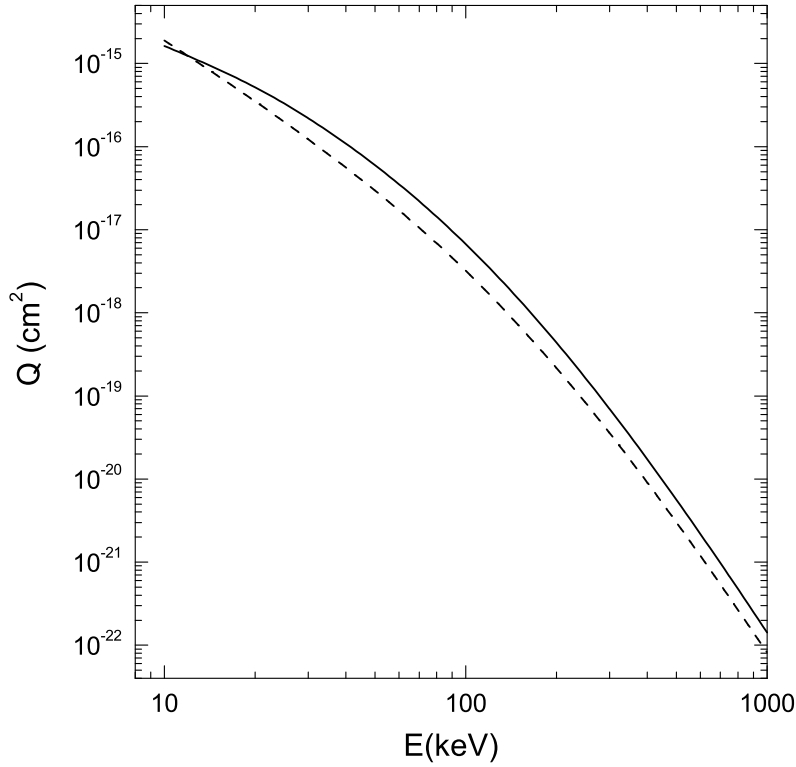


Slika 2.12: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$ za uzajamnu neutralizaciju u $\text{H}^+ + \text{H}^-$ sudaru. Puna linija pokazuje rezultate za totalni efikasni presek $Q_{\text{tot}}^- \simeq Q_1^- + Q_2^- + Q_3^- + 2.561Q_4^-$ koji je izračunat CB1-4B metodom [49]. Isprekidana linija reprezentuje CB1-3B rezultate [49]. Tačka-crta linija prikazuje CDW-3B efikasne preseke [154]. Tačka-tačka-crta linija predstavlja izračunavanja Shingal-a i Bransden-a [148], dok tačkasta kriva predstavlja rezultate TC-AOCC metoda [150]. Ekspserimentalni podaci: ■ Schön *et al.* [164]; ○ Melchert *et al.* [165].

našu teoriju. Da bi smo uporedili naš rezultat sa kvantno mehaničkim tročetičnim modelima, mi smo primenili generalni algoritam Belkića [82] za CB1-3B aproksimaciju, gde smo iskoristili talasnu funkciju sličnu vodoničnoj za opisivanje H^- jona sa efektivnim naelektrisanjem $Z_T^{\text{eff}} = 0.6875$. Izračunavanja CB1-3B efikasnih preseka su uradjena do $n^f = 4$ i rezultati su prikazani na slici 2.12 isprekidanom linijom. Kao što se vidi sa ove slike na većim upadnim energijama CB1-3B i CB1-4B metodi daju slične rezultate, a na nižim energijama CB1-4B pokazuje bolje slaganje sa eksperimentom. CDW-3B rezultati iz ref. [154] koji su dobijeni na energijama iznad 100 keV sa istim efektivnim naelektrisanjem (0.6875) su takodje predstavljeni na slici 2.12 i to tačka-crtom linijom. Kao što je očekivano CDW-3B rezultati su ispod CB1-4B efikasnog preseka zbog uključivanja kontinualnih intermedijalnih stanja zahvaćenog elektrona.

Što se tiče drugih teorija, to je jasno sa slike 2.12 da su rezultati dobijeni metodom spregnutih kanala korišćenjem bazisa od 23 stanja za svaku tešku česticu [148] značajno ispod eksperimentalnih podataka. Sistematsko povećanje odstupanja ovih efikasnih preseka u metodi zatvorenog sprezanja od merenja raste sa povećanjem upadne energije projektila. Proširenje veličine bazisa može da poveća izračunati presek. Zbog toga su Liu i Wang [150] su sprov-

eli izračunavanje korišćenjem TC-AOCC metoda sa bazisom od 50 stanja za $E > 52.06$ keV i bazisa od 77 stanja za $E \leq 52.06$ keV. Njihovi rezultati koji su prikazani na slici 2.12 tačkastom linijom su iznad Shingal-ovih i Bransden-ovih [148], ali su i dalje ispod merenja na višim energijama.



Slika 2.13: Totalni efikasni presek (u cm^2) u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$ za uzajamnu neutralizaciju u $\text{H}^+ + \text{H}^-$ sudaru. Puna i isprekidana linija odgovaraju talasnim funkcijama Löwdin-a [15] i Silverman-a *et al.* [16] kojima je opisano osnovno stanje helijuma, respektivno.

Da bi testirali osetljivost CB1-4B metoda na izbor približne talasne funkcije osnovnog stanja H^- jona, izračunati totalni efikasni presek za reakciju (2.121) smo predstavili na slici 2.13. Sa slike se vidi da krive dobijene CB1-4B metodom korišćenjem talasnih funkcija Löwdin-a [15] (puna linija) i Silverman-a *et al.* [16] (isprekidana linija) se značajno razlikuju jedna od druge i ta razlika postaje sve izraženija sa porastom upadne energije. Dakle iz ovog se da zaključiti da je za proces (2.121) pogodnije opisati osnovno stanje H^- jona talasnom funkcijom Löwdin-a [15] nego Silverman-ovom *et al.* [16] (varijacioni parametri u ovom slučaju koji figurisu u relaciji (2.113) su $\alpha_1 = 1.03923$ i $\alpha_2 = 0.2832215$) talasnom funkcijom, odnosno za ovaj proces CB1-4B metod je veoma osetljiv na izbor približne talasne funkcije osnovnog stanja H^- jona. Do istog zaključka su došli Belkić i Mančev u radu [166], gde su za proces dvostrukog zahvata elektrona iz He atoma od strane protona, u CDW aproksimaciji, pri čemu se formira H^- jon, za osnovno H^- jona iskoristili talasnu funkciju Löwdin-a [15] i pri tome dobili odlično slaganje sa eksperimentalnim podacima.

2.3 Prva Born-ova aproksimacija u post formi

U ovom delu ćemo proučiti proces (2.1):

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_{1s^2} \longrightarrow (Z_P, e_1)_{n^f l^f m^f} + (Z_T, e_2)_{1s}, \quad (2.125)$$

sa stanovišta post forme četvoročestične granično korektne prve Born-ove aproksimacije.

Post forma amplitude prelaza za proces (2.125) je data sa [46]:

$$\begin{aligned} T_{if}^+(\vec{\eta}) = & \int \int \int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 d\vec{R} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1) \varphi_T^*(\vec{x}_2) \left[Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) \right. \\ & \left. + (Z_T - 1) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{x_1} \right) + \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{x_1} \right) \right] \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{R} - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1} \mathcal{E}(\vec{R}), \end{aligned} \quad (2.126)$$

gde je rastojanje izmedju dva aktivna elektrona e_1 i e_2 označeno sa $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2| = |\vec{s}_1 - \vec{s}_2|$. Ostale oznake i veličine su već razmotrene u sekciji o prior formi, kao i probna funkcija $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ osnovnog stanja dvoelektronske mete. Ovde je takodje izabran oblik za $\mathcal{E}(\vec{R})$ tako da nakon eliminacije $(\rho v)^{2iZ_P(Z_T-2)/v}$ iz integrala (2.126) iz već pomenutog razloga, ostaje u integralu (2.126) da figuriše član $(vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}$.

Amplituda prelaza T_{if}^+ se može radi jednostavnijeg razmatranja zapisati i u sledećem obliku:

$$\begin{aligned} T_{if}^+(\vec{\eta}) = & \sum_{k,l} N_{kl} \left\{ Z_P [J_R^{(k,l)} - J_{s_2}^{(k,l)}] + \right. \\ & \left. (Z_T - 1) [J_R^{(k,l)} - J_{x_1}^{(k,l)}] + [J_{r_{12}}^{(k,l)} - J_{x_1}^{(k,l)}] \right\}, \end{aligned} \quad (2.127)$$

sa

$$J_\omega^{(k,l)} = \int d\vec{R} e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} W_\omega^{(k,l)}(\vec{R}), \quad (2.128)$$

gde je $\omega = R, x_1, s_2, r_{12}$ i

$$W_R^{(k,l)} = \frac{1}{R} \mathcal{B}_k \mathcal{A}_l, \quad W_{s_2}^{(k,l)} = \mathcal{B}_k \mathcal{D}_l, \quad (2.129)$$

$$W_{x_1}^{(k,l)} = \mathcal{L}_k \mathcal{A}_l, \quad W_{r_{12}}^{(k,l)} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{\tau}}{\tau^2} \mathcal{B}_{k,\tau} \mathcal{A}_{l,\tau}, \quad (2.130)$$

$$\mathcal{A}_l = \int d\vec{x}_2 e^{-(Z_T + \alpha_l)x_2} = \frac{8\pi}{(Z_T + \alpha_l)^3}, \quad (2.131)$$

$$\mathcal{A}_{l,\tau} = \int d\vec{x}_2 e^{i\vec{\tau} \cdot \vec{x}_2 - (Z_T + \alpha_l)x_2} = \frac{8\pi(Z_T + \alpha_l)}{[\tau^2 + (Z_T + \alpha_l)^2]^2}, \quad (2.132)$$

$$\mathcal{B}_k = \int d\vec{x}_1 e^{-i\vec{v} \cdot \vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1), \quad (2.133)$$

$$\mathcal{D}_l = \int d\vec{x}_2 \frac{e^{-(Z_T + \alpha_l)x_2}}{s_2} = 2\pi(Z_T + \alpha_l) \int_0^1 dt_1 \frac{(1 - t_1)}{\Delta_1^3} (1 + \Delta_1 R) e^{-\Delta_1 R}, \quad (2.134)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_k &= \int d\vec{x}_1 \frac{e^{-i\vec{v}\cdot\vec{x}_1 - \alpha_k x_1}}{x_1} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1) \\
&= \int d\vec{x}_1 \frac{e^{-i\vec{v}\cdot\vec{x}_1 - \alpha_k x_1}}{x_1} \left[\int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{s}_1} \tilde{\varphi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) \right]^*,
\end{aligned} \tag{2.135}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{k,\tau} &= \int d\vec{x}_1 e^{-i(\vec{\tau}+\vec{v})\cdot\vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \varphi_{n^f l^f m^f}^*(\vec{s}_1) \\
&= \int d\vec{x}_1 e^{-i(\vec{\tau}+\vec{v})\cdot\vec{x}_1 - \alpha_k x_1} \left[\int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{s}_1} \tilde{\varphi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q}) \right]^*,
\end{aligned} \tag{2.136}$$

gde veličine $N_{k,l}$, Δ_1 i $\tilde{\varphi}_{n^f l^f m^f}(\vec{q})$ imaju isti oblik i značenje kao i u prior formi. Za integral $J_{r12}^{(k,l)}$ iskorišćena je dobro poznata relacija:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{\tau}}{\tau^2} e^{-i\vec{\tau}\cdot(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}. \tag{2.137}$$

Integrali $\mathcal{B}_{k,\tau}$ i $\mathcal{L}_k$ se neznačajnim sredjivanjem i korišćenjem izraza (2.12) mogu zapisati kao:

$$\mathcal{B}_{k,\tau} = (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} (-i)^{l^f} 8\pi \alpha_k \sum_{p=0}^{n_r} c_p \mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)}, \tag{2.138}$$

$$\mathcal{L}_k = (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} (-i)^{l^f} 4\pi \sum_{p=0}^{n_r} c_p \mathcal{G}_{k,p}^{(0,1)}, \tag{2.139}$$

gde su:

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)} = e^{i\vec{\alpha}\cdot\vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} - \vec{\alpha})}{(|\vec{q} - \vec{\alpha}|^2 + a_f^2)^{p+l^f+2} [|\vec{q} + (\vec{\beta} - \vec{\tau})|^2 + \alpha_k^2]^2}, \tag{2.140}$$

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(0,1)} = e^{i\vec{\alpha}\cdot\vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} - \vec{\alpha})}{(|\vec{q} - \vec{\alpha}|^2 + a_f^2)^{p+l^f+2} (|\vec{q} + \vec{\beta}|^2 + \alpha_k^2)}, \tag{2.141}$$

dok je $n_r = n^f - l^f - 1$.

Veličine c_p i a_f su date izrazima (2.15) i (2.18) respektivno. U izvodjenju relacija (2.140) i (2.141) iskorišćena je smena $\vec{q} \rightarrow \vec{q} - \vec{\alpha}$.

Razmotrimo najpre integral $\mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)}$. Korišćenjem već pomenutog Feynman-ovog parametrizacionog integrala:

$$\frac{1}{A^s B^r} = \frac{(s+r-1)!}{(s-1)!(r-1)!} \int_0^1 dt \frac{t^{s-1} (1-t)^{r-1}}{[At + B(1-t)]^{s+r}} \quad (s, r \geq 1), \tag{2.142}$$

imamo:

$$\mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)} = n(n-1) \int_0^1 dt t^{n-2} (1-t) \mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)}, \tag{2.143}$$

$$\mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)} = e^{-i\vec{Q}_{\tau\alpha}\cdot\vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_{\tau\alpha})}{(q^2 + \Delta_\tau^2)^{n+1}}, \tag{2.144}$$

gde je $n = p + l^f + 3$ i

$$\vec{Q}_{\tau\alpha} = \vec{Q}_{\tau} - \vec{\alpha} = (1-t)(\vec{\tau} + \vec{v}), \quad (2.145)$$

$$\vec{Q}_{\tau} = \vec{Q} + (1-t)\vec{\tau}, \quad \vec{Q} = \vec{\alpha}t - \vec{\beta}(1-t), \quad (2.146)$$

$$\Delta_{\tau}^2 = |\vec{v} + \vec{\tau}|^2(1-t) + a_f^2 t + \alpha_k^2(1-t). \quad (2.147)$$

Za dobijanje relacije (2.144) iskoristili smo smenu $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{Q}_{\tau}$.

Da bi smo izvršili ugaonu integraciju po $\Omega_{\vec{q}} = (\theta_q, \phi_q)$ u jednačini (2.144) najpre ćemo primeniti adicijonu teoremu za regularne krute harmonike [74, 75]:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}(\vec{q} + \vec{Q}_{\tau\alpha}) = \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) \mathcal{Y}_{l_1^f m_1^f}(\vec{q}) \mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}(\vec{Q}_{\tau\alpha}), \quad (2.148)$$

gde je $l_1^f + l_2^f = l^f$, $m_1^f + m_2^f = m^f$, $-l_j^f \leq m_j^f \leq l_j^f$ ($j = 1, 2$) i

$$(l_1^f m_1^f | l^f m^f) = \left[4\pi \frac{2l^f + 1}{(2l_1^f + 1)(2l_2^f + 1)} \times \frac{(l^f + m^f)!}{(l_1^f + m_1^f)!(l_2^f + m_2^f)!} \frac{(l^f - m^f)!}{(l_1^f - m_1^f)!(l_2^f - m_2^f)!} \right]^{1/2}. \quad (2.149)$$

Primenimo ponovo adicijonu teoremu za $\mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}(\vec{Q}_{\tau\alpha})$, nakon čega dobijamo:

$$\mathcal{Y}_{l_2^f m_2^f}(\vec{Q}_{\tau\alpha}) = \sum_{l_{1s}^f=0}^{l_2^f} \sum_{m_{1s}^f=-l_{1s}^f}^{l_{1s}^f} (l_{1s}^f m_{1s}^f | l_2^f m_2^f) \mathcal{Y}_{l_{1s}^f m_{1s}^f}[(1-t)\vec{\tau}] \times \mathcal{Y}_{l_{2s}^f m_{2s}^f}[(1-t)\vec{v}], \quad (2.150)$$

sa $l_{1s}^f + l_{2s}^f = l_2^f$, $m_{1s}^f + m_{2s}^f = m_2^f$, $-l_{js}^f \leq m_{js}^f \leq l_{js}^f$ ($j = 1, 2$) i

$$(l_{1s}^f m_{1s}^f | l_2^f m_2^f) = \left[4\pi \frac{2l_2^f + 1}{(2l_{1s}^f + 1)(2l_{2s}^f + 1)} \frac{(l_2^f + m_2^f)!}{(l_{1s}^f + m_{1s}^f)!(l_{2s}^f + m_{2s}^f)!} \frac{(l_2^f - m_2^f)!}{(l_{1s}^f - m_{1s}^f)!(l_{2s}^f - m_{2s}^f)!} \right]^{1/2}. \quad (2.151)$$

Korišćenjem relacije $\mathcal{Y}_{l_{2s}^f m_{2s}^f}[(1-t)\vec{v}] = (1-t)^{l_{2s}^f} v^{l_{2s}^f} Y_{l_{2s}^f m_{2s}^f}(\hat{v})$ i izborom brzine $\vec{v}$ kao i kod prior forme duž Z -ose, vidimo da će sferni harmonik $Y_{l_{2s}^f m_{2s}^f}(\hat{v})$ u ovom specijalnom slučaju biti različit od nule jedino za $m_{2s}^f = 0$, dakle imaćemo $Y_{l_{2s}^f m_{2s}^f}(\hat{v}) \equiv Y_{l_{2s}^f m_{2s}^f}(0, \phi_{\vec{v}}) = \sqrt{(2l_{2s}^f + 1)/(4\pi)} \delta_{0, m_{2s}^f}$. Na ovaj način suma po m_{1s}^f u jednačini (2.150) nestaje, tako da se formula $\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_{\tau\alpha})$ redukuje na:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_{\tau\alpha}) = \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_1^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) (1-t)^{l_{2s}^f} \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) \times \mathcal{Y}_{l_1^f, -m_1^f}(\vec{q}) \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}], \quad (2.152)$$

gde su:

$$\Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) = (l_{1s}^f | l_2^f m_2^f) (-1)^{-m^f} v_{l_{2s}^f} / \sqrt{4\pi}, \quad (2.153)$$

$$(l_{1s}^f | l_2^f m_2^f) = \left[\frac{2l_2^f + 1}{(2l_{1s}^f + 1)} \frac{(l_2^f + m_2^f)!}{(l_{1s}^f + m_2^f)!} \frac{(l_2^f - m_2^f)!}{(l_{1s}^f - m_2^f)! (l_{2s}^f!)^2} \right]^{1/2}. \quad (2.154)$$

Pomoćni integral $\mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)}$ iz jednačine (2.144) ćemo sada zapisati u sledećoj formi:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)} &= e^{-i\vec{Q}_{\tau\alpha} \cdot \vec{R}} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) (1-t)^{l_{2s}^f} \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) \\ &\times \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}] \mathcal{W}_{k,p}^{(\tau)}, \end{aligned} \quad (2.155)$$

$$\mathcal{W}_{k,p}^{(\tau)} = \sqrt{4\pi} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{l_1^f, -m_1^f}(\vec{q})}{(q^2 + \Delta_\tau^2)^{n+1}} = 4\pi^{\frac{5}{2}} (-i)^{l_1^f} \mathcal{F}_{k,p}^{(\tau)} \mathcal{Y}_{l_1^f, -m_1^f}(\vec{R}). \quad (2.156)$$

Zamenom eksponencijalnog člana $e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}}$ u prethodnoj jednačini već pomenutim Rayleigh-evim razvojem u prior formi:

$$e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-i)^l j_l(qR) Y_{lm}^*(\hat{q}) Y_{lm}(\hat{R}), \quad (2.157)$$

i korišćenjem rezultata iz referenci [72, 74] dobijamo:

$$\mathcal{F}_{k,p}^{(\tau)} = \frac{2}{\pi R^{l_1^f}} \int_0^\infty dq \frac{q^{l_1^f+2} j_{l_1^f}(qR)}{(q^2 + \Delta_\tau^2)^{n+1}} = \frac{\hat{k}_{\nu-1/2}(R\Delta_\tau)}{2^n n! \Delta_\tau^{2n-2l_1^f-1}}, \quad (2.158)$$

gde je $\nu = n - l_1^f$.

Na ovaj način se integrali $\mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)}$ i $\mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)}$ svode na:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{k,p}^{(\tau)} &= \frac{4\pi^{5/2}}{2^n n!} e^{-i\vec{Q}_{\tau\alpha} \cdot \vec{R}} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) (1-t)^{l_{2s}^f} \\ &\times \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) (-i)^{l_1^f} \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}] \frac{B_{l_1^f, -m_1^f}^{(\nu)}(\vec{R}\Delta_\tau)}{\Delta_\tau^{2n-2l_1^f-1}}, \end{aligned} \quad (2.159)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{k,p}^{(\tau,2)} &= \frac{4\pi^{5/2}}{2^n (n-2)!} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) (-i)^{l_1^f} \\ &\times \int_0^1 dt t^{n-2} (1-t)^{l_{2s}^f+1} e^{-i\vec{Q}_{\tau\alpha} \cdot \vec{R}} \frac{B_{l_1^f, -m_1^f}^{(\nu)}(\vec{R}\Delta_\tau)}{\Delta_\tau^{2n-2l_1^f-1}} \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}], \end{aligned} \quad (2.160)$$

gde su veličine $B_{l_1^f, -m_1^f}^{(\nu)}(\vec{R}\Delta_\tau)$ i $\hat{k}_{\nu-1/2}(R\Delta_\tau)$ koje predstavljaju B -funkciju i redukovanu Bessel-ovu funkciju respektivno, definisane u prior formi sa tim što ovde umesto μ_ν , m^f , Δ figurišu

ν , m_1^f , Δ_τ takodje respektivno. Zamenom jednačine (2.160) u (2.138) i korišćenjem jednačina (2.128), (2.129) i (2.132), imamo:

$$\begin{aligned}
J_{r_{12}}^{(k,l)} &= \frac{2}{\pi^2} D_{l^f}^{(k,l)} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^n (n-2)!} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_1^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) \\
&\times \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) (-i)^{l_1^f} \int_0^1 dt t^{n-2} (1-t)^{l_{2s}^f+1} \\
&\times \int \frac{d\vec{\tau}}{\Delta_\tau^{2n-2l_1^f-1} \tau^2 [\tau^2 + (Z_T + \alpha_l)^2]^2} \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}] I_{r_{12}}^{(\nu, l_1^f)}, \quad (2.161)
\end{aligned}$$

gde su:

$$D_{l^f}^{(k,l)} = 64\pi^{9/2} (-i)^{l^f} N_f^{Z_P} (Z_T + \alpha_l) \alpha_k, \quad (2.162)$$

$$I_{r_{12}}^{(\nu, l_1^f)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{R} e^{-i\vec{Q}_\tau \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} B_{l_1^f, -m_1^f}^{(\nu, \Delta_\tau)}(\vec{R}). \quad (2.163)$$

Integral $I_{r_{12}}^{(\nu, l_1^f)}$ je već izračunat u prior formi sa rezultatom:

$$I_{r_{12}}^{(\nu, l_1^f)} = \frac{(-1)^{l_1^f} (2i)^{l_1^f} (2n_p)!}{2\pi^2 n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \Delta_\tau^{p_r} G_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q}_\tau \Delta_\tau), \quad (2.164)$$

$$G_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q}_\tau \Delta_\tau) = \sum_{k=0}^{p_1} \sum_{l_1=|m_1^f|}^{l_1^f} \Phi_{p_r l_1^f \tau}^{kl_1}(1) \mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q}_\tau \cdot \vec{v}), \quad (2.165)$$

gde je:

$$p_1 = p_r + 1, \quad n_p = n - l_1^f - 1, \quad p_n = p_r + l_1^f + 1, \quad (2.166)$$

$$\mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q}_\tau \cdot \vec{v}) = (l_1 | l_1^f - m_1^f) (-iv)^{l_2} \mathcal{Y}_{l_1, -m_1^f}(\vec{Q}_\tau), \quad (2.167)$$

$$(l_1 | l_1^f - m_1^f) = \left[\frac{2l_1^f + 1}{(2l_1 + 1)} \frac{(l_1^f + m_1^f)!}{(l_1 + m_1^f)!} \frac{(l_1^f - m_1^f)!}{(l_1 - m_1^f)! (l_2!)^2} \right]^{1/2}. \quad (2.168)$$

Preostale veličine koje se javljaju u jednačini (2.165) definisane su kao:

$$\begin{aligned}
\Phi_{p_r l_1^f \tau}^{kl_1}(1) &= (a_\tau^1 b_\tau^1) {}_3F_2(-k_1/2, -k_1/2 + 1/2, 1 \\
&\quad - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_1 - l_1^f; 1/A_\tau), \quad (2.169)
\end{aligned}$$

$$a_\tau^1 = \Gamma(1 + i\xi) (l_1^f + 1)_{p_1} \frac{(2D_\tau)^{p_1}}{(\Delta_\tau^2 + Q_\tau^2)_{l_1^f}^{l_1^f}} \mathcal{F}_\tau, \quad (2.170)$$

$$b_\tau^1 = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2}}{B_\tau^{l_2}} \frac{(-p_1)_k (i\gamma_2)_k}{(l_1^f + 1)_k} \frac{(-1)^k C_\tau^k}{k!}, \quad (2.171)$$

$$\begin{aligned}
& {}_3F_2(-k_1/2, -k_1/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_1 - l_1^f; 1/A_\tau) \\
&= \sum_{u=0}^{[k_1/2]} \frac{(-k_1/2)_u (-k_1/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + l_1^f + 1)_u (-p_1 - l_1^f)_u u!} \left(\frac{1}{A_\tau}\right)^u,
\end{aligned} \tag{2.172}$$

gde su:

$$A_\tau = \frac{\Delta_\tau^2}{\Delta_\tau^2 + Q_\tau^2}, \quad B_\tau = \frac{2(v\Delta_\tau - i\vec{Q}_\tau \cdot \vec{v})}{\Delta_\tau^2 + Q_\tau^2}, \quad C_\tau = \frac{v}{B_\tau \Delta_\tau} - 1, \tag{2.173}$$

$$D_\tau = \frac{A_\tau}{\Delta_\tau}, \quad \mathcal{F}_\tau = \frac{B_\tau^{i\xi}}{\Delta_\tau^2 + Q_\tau^2}, \tag{2.174}$$

$$k_1 = p_1 - k, \quad l_1 + l_2 = l_1^f, \quad \gamma_1 = -\xi + il_1, \quad \gamma_2 = -\xi - il_2. \tag{2.175}$$

U jednačini (2.172), ${}_3F_2$ označava već razmotreni Clausen-ov generalisani hipergeometrijski polinom [79] gde je simbolom $[k_1/2]$ označen najveći ceo broj sadžan u razlomku $k_1/2$.

Dakle, korelacioni term se svodi na četvorodimenzionalni integral:

$$\begin{aligned}
J_{r_{12}}^{(k,l)} &= \frac{D_{l^f}^{(k,l)}}{\pi^4} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^n (n-2)!} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) \\
&\times \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \mathcal{M}_{12}^{(p,l_1^f)},
\end{aligned} \tag{2.176}$$

gde je:

$$\mathcal{M}_{12}^{(p,l_1^f)} = \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt t^{n-2} (1-t)^{l_{2s}^f+1} h_{12}, \tag{2.177}$$

$$\begin{aligned}
h_{12} &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta_\tau d\tau d\theta_\tau d\phi_\tau}{\Delta_\tau^{2n-2l_1^f-p_r-1} [\tau^2 + (Z_T + \alpha_l)^2]^2} \\
&\times G_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q}_\tau \Delta_\tau) \mathcal{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}].
\end{aligned} \tag{2.178}$$

Primenom slične tehnike pomoćni integral $\mathcal{G}_{k,p}^{(0,1)}$ iz jednačine (2.141) se može svesti na realan jednodimenzionalni integral, tako da se veličina $J_{x_1}^{(k,l)}$ iz jednačine (2.128) može napisati:

$$\begin{aligned}
J_{x_1}^{(k,l)} &= \frac{D_{l^f}^{(k,l)}}{\pi^2 \alpha_k (Z_T + \alpha_l)^4} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{c_p}{2^{n-1} (n-2)!} \\
&\times \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{M}_{x_1}^{(p,l_1^f)},
\end{aligned} \tag{2.179}$$

gde su:

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{x_1}^{(p,l_1^f)} &= \frac{(2n_p-2)!}{(n_p-1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1-n_p)_{p_r}}{(2-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p+1}}{p_r!} \\
&\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{l_2^f}}{\Delta^{2(n-1)-2l_1^f-p_r-1}} G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q} \Delta),
\end{aligned} \tag{2.180}$$

$$\Delta^2 = v^2 t(1-t) + a_f^2 t + \alpha_k^2(1-t). \quad (2.181)$$

Veličina $G_{l_1^f, -m^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q}\Delta)$ je data izrazom (2.62) kada se u njemu umesto λ i τ zamene 1 i 0 respektivno.

Preostali integrali su razmotreni u prior verziji gde je $J_R^{(k, l)}$ dat izrazom (2.56) dok je $J_{s_2}^{(k, l)}$ dat izrazom (2.58).

Konačni izaz za amplitudu prelaza u post formi glasi:

$$\begin{aligned} T_{if}^+(\vec{\eta}) = & \sum_{k, l} \sum_{p=0}^{n_r} \mathcal{N}_{k, l} \frac{c_p}{2^n(n-2)!} \left\{ \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \frac{\Omega(l_1^f, \vec{v})}{(Z_T + \alpha_l)^4} \right. \\ & \times \left[Z_P(2 \mathcal{M}_R^{(p, l_1^f)} - \frac{(Z_T + \alpha_l)^4}{2} \mathcal{M}_{s_2}^{(p, l_1^f)}) + 2(Z_T - 1) \right. \\ & \times \left. \left(\mathcal{M}_R^{(p, l_1^f)} - \frac{1}{\alpha_k} \mathcal{M}_{x_1}^{(p, l_1^f)} \right) - \frac{2}{\alpha_k} \mathcal{M}_{x_1}^{(p, l_1^f)} \right] \\ & \left. + \frac{1}{\pi^2} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) \mathcal{M}_{12}^{(p, l_1^f)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.182)$$

gde je $\mathcal{N}_{k, l} = N_{k, l} D_{lf}^{(k, l)} / \pi^2$.

Ovim se amplituda prelaza T_{if}^+ svodi na izraz u kome je potrebno uraditi integraciju po realnim promenljivima t , t_1 , τ , θ_τ i ϕ_τ . Zavisnost amplitude prelaza $T_{if}^+(\vec{\eta}) \equiv T_{if}^+(\eta, \phi_\eta)$ od azimutnog ugla ϕ_η sadržana je u faznom faktoru $\exp(-im^f \phi_\eta)$. Dakle, da bi se dobio totalni efikasni presek integracija po ϕ_η može da se uradi analitički, tako da dobijamo:

$$Q_{if}^+(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}^+(\eta, 0)|^2. \quad (2.183)$$

Ovaj račun kao i u slučaju prior forme je generalan i može se primeniti i za simetrične i asimetrične sudare.

Preostale integracije po η , t , t_1 , τ , θ_τ i ϕ_τ moraju da se urade numerički pomoću kvadratura.

2.3.1 Skaliranje i priprema za numeričku integraciju

Osim integracije po $\phi_\tau \in [0, 2\pi]$ za koju je primenjena Gauss-Mehler-ova (GM) kvadratura:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_\tau F(\cos \phi_\tau) = \frac{2}{n} \sum_{j=1}^n F(\cos \frac{2j-1}{2n} \pi), \quad (2.184)$$

za ostale integracije je iskorišćena Gauss-Legendre-ova (GL) kvadratura nakon sledećih smena promenljivih:

$$\tau = \frac{1+x}{1-x}, \quad x \in [-1, +1], \quad (2.185)$$

$$\tau = x_0 \tilde{\tau}, \quad x_0 = \frac{1}{x_1}, \quad x_1 = 1-x, \quad \tilde{\tau} = 1+x, \quad d\tau = 2x_0^2 dx, \quad (2.186)$$

$$\cos \theta_\tau = u, \quad u \in [-1, +1], \quad (2.187)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{2(1+z)}{(1-z)}}, \quad z \in [-1, +1]. \quad (2.188)$$

Poslednja smena promenljive η je razmotrena u prior formi. Nakon sredjivanja i eliminacije prividnih singulariteta $x = 1$ i $z = 1$ koji postoje prema relacijama (2.185) i (2.188) analitičkim skaliranjem (eliminacijom veličina $1 - x$ i $1 - z$ iz imenioca integranda u izrazu (2.183)) za totalni presek dobijamo:

$$Q_{if}^+(\pi a_0^2) = N_{T_1} \int_{-1}^{+1} dz |\tilde{T}_{if}^+(z)|^2. \quad (2.189)$$

Ovde ćemo izlistati relacije koje su korišćene u izvodjenju izraza (2.189) a koje već nisu prikazane u prior formi:

$$T_{if}^+(\eta, 0) \equiv T_{if}^+(\eta) = z_1^{i\xi+1} \tilde{T}_{if}^+(z), \quad \mathcal{M}_{12}^{(p, l_1^f)} = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(p, l_1^f)}, \quad (2.190)$$

$$\mathcal{M}_{x_1}^{(p, l_1^f)} = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{M}}_{x_1}^{(p, l_1^f)}, \quad h_{12} = z_1^{i\xi+1} \tilde{h}_{12}, \quad (2.191)$$

$$G_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q}_\tau \Delta_\tau) = z_1^{i\xi+1} x_1^{p_1+l_1^f+i\xi+2} \tilde{G}_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\tilde{\vec{Q}}_\tau \tilde{\Delta}_\tau), \quad (2.192)$$

$$G_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\vec{Q} \Delta) = z_1^{i\xi+1} \tilde{G}_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n, 1)}(\tilde{\vec{Q}} \tilde{\Delta}), \quad (2.193)$$

$$\mathcal{Z}_{l_1^f l_1}(\vec{Q}_\tau \cdot \vec{v}) = z_0^{\frac{l_1}{2}} x_0^{l_1} \tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{\vec{Q}}_\tau \cdot \vec{v}), \quad \vec{Q}_\tau \cdot \vec{v} = x_0 \tilde{\vec{Q}}_\tau \cdot \vec{v}, \quad Q_\tau^2 = z_0 x_0^2 \tilde{Q}_\tau^2, \quad (2.194)$$

$$\vec{\alpha} \cdot \vec{\tau} = z_0^{\frac{1}{2}} x_0 \tilde{\vec{\alpha}} \cdot \tilde{\vec{\tau}}, \quad \vec{\beta} \cdot \vec{\tau} = z_0^{\frac{1}{2}} x_0 \tilde{\vec{\beta}} \cdot \tilde{\vec{\tau}}, \quad \vec{\eta} \cdot \vec{\tau} = z_0^{\frac{1}{2}} x_0 \tilde{\vec{\eta}} \cdot \tilde{\vec{\tau}}, \quad (2.195)$$

$$\mathcal{Y}_{l_1, -m_1^f}(\vec{Q}_\tau) = z_0^{\frac{l_1}{2}} x_0^{l_1} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m_1^f}(\tilde{\vec{Q}}_\tau), \quad Y_{l_1, -m_1^f}(\hat{\vec{Q}}_\tau) = \tilde{Y}_{l_1, -m_1^f}(\hat{\tilde{\vec{Q}}}_\tau), \quad (2.196)$$

$$\mathcal{Y}_{l_{1s}, -m_2^f}[(1-t)\vec{\tau}] = x_0^{l_{1s}} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_{1s}, -m_2^f}[(1-t)\tilde{\vec{\tau}}], \quad Y_{l_{1s}, -m_2^f}(\hat{\vec{\tau}}) = \tilde{Y}_{l_{1s}, -m_2^f}(\hat{\tilde{\vec{\tau}}}), \quad (2.197)$$

$$\Phi_{p_r \nu_\tau}^{kl_1}(1) = z_1^{l_1+i\xi+1} x_1^{p_1+l_1^f+l_1+i\xi+2} \tilde{\Phi}_{p_r \nu_\tau}^{kl_1}(1), \quad (2.198)$$

$$a_\tau^1 = z_1^{p_1+l_1^f+i\xi+1} x_1^{p_1+2l_1^f+i\xi+2} \Gamma(1+i\xi) \tilde{a}_\tau^1, \quad b_\tau^1 = z_0^{k+l_2} x_0^{l_2} \tilde{b}_\tau^1, \quad (2.199)$$

$$\begin{aligned} & z_1^{k_1} {}_3F_2(-k_1/2, -k_1/2+1/2, 1-i\gamma_1; k+l_1^f+1, -p_1-l_1^f; \frac{1}{z_1 \tilde{A}_\tau}) \\ & = {}_3\tilde{F}_2(-k_1/2, -k_1/2+1/2, 1-i\gamma_1; k+l_1^f+1, -p_1-l_1^f; \frac{z_1^{(k_1-u)/u}}{\tilde{A}_\tau}), \end{aligned} \quad (2.200)$$

$$A_\tau = z_1 \tilde{A}_\tau, \quad B_\tau = z_1 x_1 \tilde{B}_\tau, \quad C_\tau = z_0 \tilde{C}_\tau, \quad (2.201)$$

$$D_\tau = z_1 x_1 \tilde{D}_\tau, \quad \mathcal{F}_\tau = z_1^{i\xi+1} x_1^{i\xi+2} \tilde{\mathcal{F}}_\tau, \quad (2.202)$$

gde su skalirane veličine date sa:

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{if}^+(\vec{\eta}) = & \sum_{k,l} \sum_{p=0}^{n_r} \mathcal{C}_{k,l} \frac{c_p}{2^n (n-2)!} \left\{ \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \frac{\Omega(l_1^f, \vec{v})}{(Z_T + \alpha_l)^4} \right. \\ & \times \left[Z_P (2 \tilde{\mathcal{M}}_R^{(p,l_1^f)} - \frac{(Z_T + \alpha_l)^4}{2} \tilde{\mathcal{M}}_{s_2}^{(p,l_1^f)}) + 2(Z_T - 1) \right. \\ & \times \left. \left(\tilde{\mathcal{M}}_R^{(p,l_1^f)} - \frac{1}{\alpha_k} \tilde{\mathcal{M}}_{x_1}^{(p,l_1^f)} - \frac{2}{\alpha_k} \tilde{\mathcal{M}}_{x_1}^{(p,l_1^f)} \right) \right] \\ & \left. + \frac{1}{\pi^2} \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sum_{l_{1s}^f=|m_2^f|}^{l_2^f} (l_1^f m_1^f | l^f m^f) (-1)^{l_1^f} 2^{l_1^f} \Omega(l_{1s}^f, \vec{v}) \tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(p,l_1^f)} \right\}, \end{aligned} \quad (2.203)$$

$$\mathcal{C}_{k,l} = N_{\alpha_k} N_{\alpha_l} (Z_T + \alpha_l) \alpha_k, \quad (2.204)$$

$$\tilde{\mathcal{M}}_{12}^{(p,l_1^f)} = \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt t^{n-2} (1-t)^{l_{2s}^f+1} \tilde{h}_{12}, \quad (2.205)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_{x_1}^{(p,l_1^f)} = & \frac{(2n_p-2)!}{(n_p-1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1-n_p)_{p_r}}{(2-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p+1}}{p_r!} \\ & \times \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{l_2^f}}{\tilde{\Delta}^{2(n-1)-2l_1^f-p_r-1}} \tilde{G}_{l_1^f, -m^f}^{(p_n,1)}(\tilde{Q} \tilde{\Delta}), \end{aligned} \quad (2.206)$$

$$\tilde{h}_{12} = 2 \int_{-1}^{+1} dx \frac{x_1^{2p+l^f+l_{2s}^f+i\xi+10}}{(\tilde{\tau}^2 + x_1^2 (Z_T + \alpha_l)^2)^2} \int_{-1}^{+1} du \int_0^{2\pi} d\phi_\tau h(\tilde{\tau}), \quad (2.207)$$

$$h(\tilde{\tau}) = \frac{\tilde{\mathcal{Y}}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\tilde{\tau}]}{\tilde{\Delta}_\tau^{2n-2l_1^f-p_r-1}} \tilde{G}_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n,1)}(\tilde{Q}_\tau \tilde{\Delta}_\tau), \quad (2.208)$$

$$\tilde{\mathcal{Y}}_{l_{1s}^f, -m_2^f}[(1-t)\tilde{\tau}] = (1-t)^{l_{1s}^f} \tilde{\tau}^{l_{1s}^f} Y_{l_{1s}^f, -m_2^f}(\hat{\tilde{\tau}}), \quad (2.209)$$

$$\tilde{G}_{l_1^f, -m_1^f}^{(p_n,1)}(\tilde{Q}_\tau \tilde{\Delta}_\tau) = \sum_{k=0}^{p_1} \sum_{l_1=|m_1^f|}^{l_1^f} z_1^{l_1/2} \tilde{\Phi}_{p_r l_1^f \tau}^{kl_1} (1) \tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{Q}_\tau \cdot \vec{v}), \quad (2.210)$$

$$\tilde{\mathcal{Z}}_{l_1^f l_1}(\tilde{Q}_\tau \cdot \vec{v}) = (l_1 | l_1^f - m_1^f) (-iv)^{l_2} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m_1^f}(\tilde{Q}_\tau), \quad (2.211)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{p_r l_1^f \tau}^{kl_1}(1) = & \left(\tilde{a}_\tau^1 \tilde{b}_\tau^1 \right) {}_3\tilde{F}_2(-k_1/2, -k_1/2 + 1/2, 1 \\ & -i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_1 - l_1^f; \frac{z_1^{(k_1-u)/u}}{\tilde{A}_\tau}), \end{aligned} \quad (2.212)$$

$$\tilde{a}_\tau^1 = (l_1^f + 1)_{p_1} \frac{(2\tilde{D}_\tau)^{p_1}}{(z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}_\tau^2)^{l_1^f}} \tilde{\mathcal{F}}_\tau, \quad (2.213)$$

$$\tilde{b}_\tau^1 = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_1)_k (i\gamma_2)_k (-1)^k \tilde{C}_\tau^k}{\tilde{B}_\tau^{l_2} (l_1^f + 1)_k k!}, \quad (2.214)$$

$$\begin{aligned} & {}_3\tilde{F}_2(-k_1/2, -k_1/2 + 1/2, 1 - i\gamma_1; k + l_1^f + 1, -p_1 - l_1^f; \frac{z_1^{(k_1-u)/u}}{\tilde{A}_\tau}) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_1/2]} \frac{(-k_1/2)_u (-k_1/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + l_1^f + 1)_u (-p_1 - l_1^f)_u u!} \left(\frac{z_1^{(k_1-u)/u}}{\tilde{A}_\tau} \right)^u, \quad k_1 \geq u, \end{aligned} \quad (2.215)$$

$$\tilde{A}_\tau = \frac{\tilde{\Delta}_\tau^2}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}_\tau^2}, \quad \tilde{B}_\tau = \frac{2(v\tilde{\Delta}_\tau - i\tilde{Q}_\tau \cdot \vec{v})}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}_\tau^2}, \quad \tilde{C}_\tau = \frac{v}{\tilde{B}_\tau \tilde{\Delta}_\tau} - z_1, \quad (2.216)$$

$$\tilde{D}_\tau = \frac{\tilde{A}_\tau}{\tilde{\Delta}_\tau}, \quad \tilde{\mathcal{F}}_\tau = \frac{\tilde{B}_\tau^{i\xi}}{z_1 \tilde{\Delta}_\tau^2 + \tilde{Q}_\tau^2}, \quad (2.217)$$

$$\tilde{\Delta}_\tau^2 = (x_1^2 v^2 + 2x_1 \vec{v} \cdot \tilde{\tau} + \tilde{\tau}^2) t(1-t) + (a_f^2 t + \alpha_k^2 (1-t)) x_1^2, \quad (2.218)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_\tau^2 = & x_1^2 \tilde{\alpha}^2 t^2 - 2x_1^2 \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} t(1-t) + 2x_1 z_1^{\frac{1}{2}} \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\tau} t(1-t) + (x_1^2 \tilde{\beta}^2 \\ & - 2x_1 z_1^{\frac{1}{2}} \tilde{\beta} \cdot \tilde{\tau} + z_1 \tilde{\tau}^2) (1-t)^2, \end{aligned} \quad (2.219)$$

$$\vec{v} \cdot \tilde{\tau} = v \tilde{\tau} \cos \theta_\tau, \quad \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\tau} = \tilde{\eta} \cdot \tilde{\tau} - z_1^{\frac{1}{2}} \alpha_z \hat{v} \cdot \tilde{\tau}, \quad (2.220)$$

$$\tilde{\beta} \cdot \tilde{\tau} = -\tilde{\eta} \cdot \tilde{\tau} - z_1^{\frac{1}{2}} \beta_z \hat{v} \cdot \tilde{\tau}, \quad \tilde{\eta} \cdot \tilde{\tau} = \tilde{\eta} \tilde{\tau} \sin \theta_\tau \cos \phi_\tau, \quad (2.221)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_1, -m_1^f}(\hat{\tilde{Q}}_\tau) = & \sqrt{\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \frac{(l_1 - |m_1^f|)!}{(l_1 + |m_1^f|)!}} (1 - z_1 \tilde{C}_{\tau_z}^2)^{\frac{|m_1^f|}{2}} \left(\frac{d}{d(z_1^{1/2} \tilde{C}_{\tau_z})} \right)^{l_1 + |m_1^f|} \\ & \times \frac{(z_1 \tilde{C}_{\tau_z}^2 - 1)^{l_1}}{2^{l_1} l_1!} e^{-im_1^f \phi_{\theta_\tau}} \cdot \begin{cases} 1, & m_1^f \geq 0 \\ (-1)^{|m_1^f|}, & m_1^f < 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.222)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_{1s}^f, -m_2^f}(\hat{\tilde{\tau}}) = & \sqrt{\frac{2l_{1s}^f + 1}{4\pi} \frac{(l_{1s}^f - |m_2^f|)!}{(l_{1s}^f + |m_2^f|)!}} (1 - \cos \theta_\tau)^{|m_2^f|/2} \left(\frac{d}{d(\cos \theta_\tau)} \right)^{l_{1s}^f + |m_2^f|} \\ & \times \frac{(\cos^2 \theta_\tau - 1)^{l_{1s}^f}}{2^{l_{1s}^f} l_{1s}^f!} e^{-im_2^f \phi_\tau} \cdot \begin{cases} 1, & m_2^f \geq 0 \\ (-1)^{|m_2^f|}, & m_2^f < 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.223)$$

$$\phi_{\theta_\tau} = \arctan \left[\frac{z_1^{1/2} \tilde{\tau} \sin \theta_\tau \sin \phi_\tau (1-t)}{x_1 \tilde{\eta} + z_1^{1/2} \tilde{\tau} \sin \theta_\tau \cos \phi_\tau (1-t)} \right], \quad (2.224)$$

$$\tilde{C}_{\tau_z} = \tilde{Q}_{\tau_z} / \tilde{Q}_\tau = \cos \theta_{Q_\tau}, \quad \tilde{Q}_{\tau_z} = x_1 (\beta_z - vt) + \tilde{\tau} \cos \theta_\tau (1-t). \quad (2.225)$$

Konstanta koja se javlja u izrazu (2.189) ima vrednost:

$$N_{T_1} = \frac{2^{12} Z_T^3 \pi^2 (N_F^{Z_P})^2}{v^2} n_\xi, \quad (2.226)$$

gde je veličina n_ξ data izrazom (2.97). Granice integracije u relacijama (2.205) i (2.207) takodje se svode na interval $[-1, +1]$ u skladu sa (2.110) i to smenama datim u prior formi relacijom (2.98). Ove smene date relacijom (2.98) i ovde nisu razmatrane u analitičkom skaliranju već su direktno uvedene u samom kodu za numeričku integraciju. U prezentovanom proračunu, redovi GM i GL kvadratura, odnosno brojevi N_{GM} i N_{GL} integracionih tačaka su bili onoliki koliko je bilo potrebno da se ostvari konvergencija na dve decimale u izračunatim parcijalnim i totalnim efikasnim presecima.

2.3.2 Elektronski zahvat u proizvoljna stanja $H(n^f l^f m^f)$ u sudaru H^+ sa $He(1s^2)$

Ovde ćemo razmotriti proces dat relacijom (2.106):

$$H^+ + He(1s^2) \longrightarrow H(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (2.227)$$

odnosno

$$H^+ + He \longrightarrow H(\Sigma) + He^+(1s), \quad (2.228)$$

sa stanovišta post forme CB1-4B metoda.

U prezentovanim rezultatima mi smo koristili četvoroparametarsku talasnu funkciju Löwdina [15] datu relacijom (2.122) za opisivanje osnovnog stanja helijuma sa varijacionim parametrima $a_1 = 2.7626$, $a_2 = 1.9104$, $b_1 = 1.4287$, $b_2 = 2.7022$, koja odgovara energiji veze $E_i = -2.861525$. Za reakciju (2.227) $N_{GM} \leq 20$ integracionih tačaka za integral po ϕ_τ i $N_{GL} \leq 80$ tačaka za preostale integracije po t , t_1 , τ , θ_τ i η je bilo dovoljno za traženu tačnost na dve decimale.

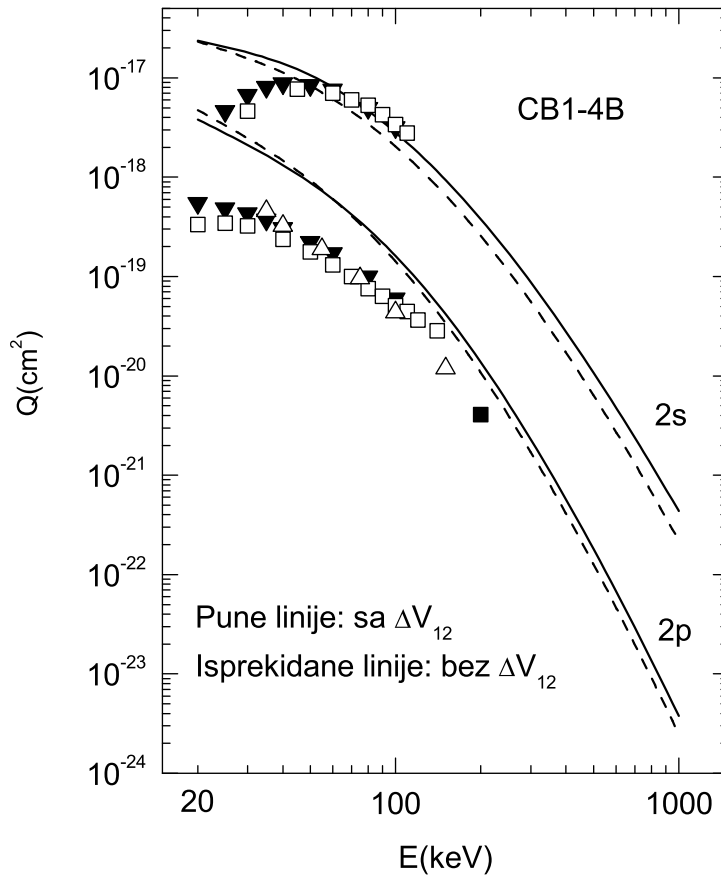
Izračunati efikasni preseci za elektronski zahvat su prikazani u Tabelama 9-13 i slikama 2.14–2.22 na upadnim energijama od 20 do 10000 keV. Konkretno izračunati parcijalni efikasni preseci za elektronski zahvat u sledećim ekscitovanim stanjima atoma vodonika: $H(2s)$, $H(2p)$, $H(3s)$, $H(3p)$, $H(3d)$ i $H(4s)$ su prikazani na slikama 2.14–2.16 na upadnim energijama od 20 do 1000 keV.

Na slikama 2.14–2.16 puna linija predstavlja parcijalne efikasne preseke koji su dobijeni sa ukupnom perturbacijom V_f^c u amplitudi prelaza (2.125):

$$V_f^c = \Delta V_{P_2} + \Delta V_{T_1} + \Delta V_{12}, \quad \Delta V_{12} = V_{12} - V_{12}^\infty, \quad V_{12} = \frac{1}{r_{12}}, \quad V_{12}^\infty = \frac{1}{x_1}, \quad (2.229)$$

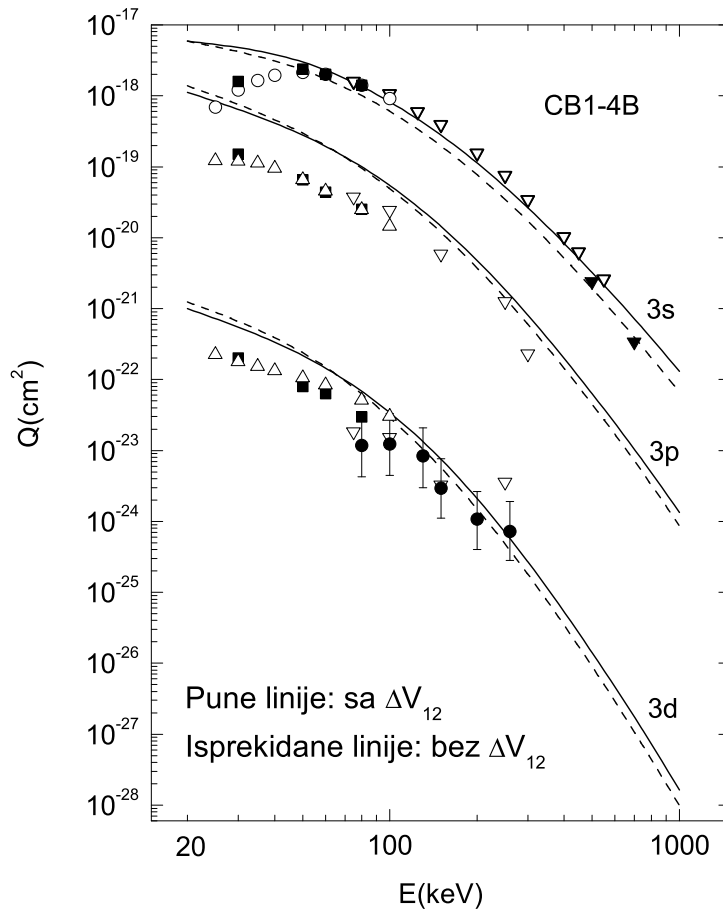
gde su interakcije ΔV_{P_2} i ΔV_{T_1} date sa:

$$\Delta V_{P_2} = Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right), \quad \Delta V_{T_1} = (Z_T - 1) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{x_1} \right). \quad (2.230)$$



Slika 2.14: Parcijalni efikasni preseki Q_{2s}^+ i Q_{2p}^+ za elektronski zahvat od strane protona iz $\text{He}(1s^2)$ u procesu (2.227). Puna i isprekidana linija reprezentuju post efikasan presek u CB1-4B aproksimaciji [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalom i bez potencijala $\Delta V_{12} = 1/r_{12} - 1/x_1$, respektivno. Eksperimentalni podaci su isti kao na slici 2.2. Teorijski i eksperimentalni podaci za zahvat u $2p$ stanje H atoma su podeljeni sa 10.

Uticaj dinamičkih elektronskih korelacija je eksplicitno uzet u račun preko $1/r_{12}$ u kompletnom perturbacionom potencijalu V_f^c . Za zahvat u $n^f = 4$ kao što je rečeno u prior formi na raspolaganju su eksperimentalni podaci [90, 93, 94] jedino za formiranje $\text{H}(4s)$ stanja i poredjenja sa ovim merenjima su prikazana na slici 2.16. Kao što se može videti sa slika 2.14–2.16 dobijeni teorijski rezultati za formiranje $\text{H}(2s)$, $\text{H}(3s)$ i $\text{H}(4s)$ su u odličnom slaganju sa raspoloživim eksperimentalnim podacima na svim upadnim energijama iznad 60 keV. Efikasni preseki za elektronski zahvat u $2p$ i $3p$ stanja atoma vodonika su poredjeni sa raspoloživim eksperimentalnim podacima na slikama 2.14 i 2.15, respektivno. Ova poredjenja pokazuju da teorijske krive malo nadmašuju merenja naročito na nižim upadnim energijama, dok na višim energijama CB1-4B metod konvergira ka eksperimentalnim podacima. Ovo je i očekivano jer je CB1-4B model visoko energijska aproksimacija. Poredjenje CB1-4B aproksimacije sa merenjima za zahvat u $3d$ stanje H atoma je predstavljeno na slici 2.15. Utvrđeno je da teorijska kriva nadmašuje eksperimentalne podatke na nižim upadnim energijama, dok na višim energijama predviđanja CB1-4B metoda su u veoma dobrom slaganju sa merenjima.



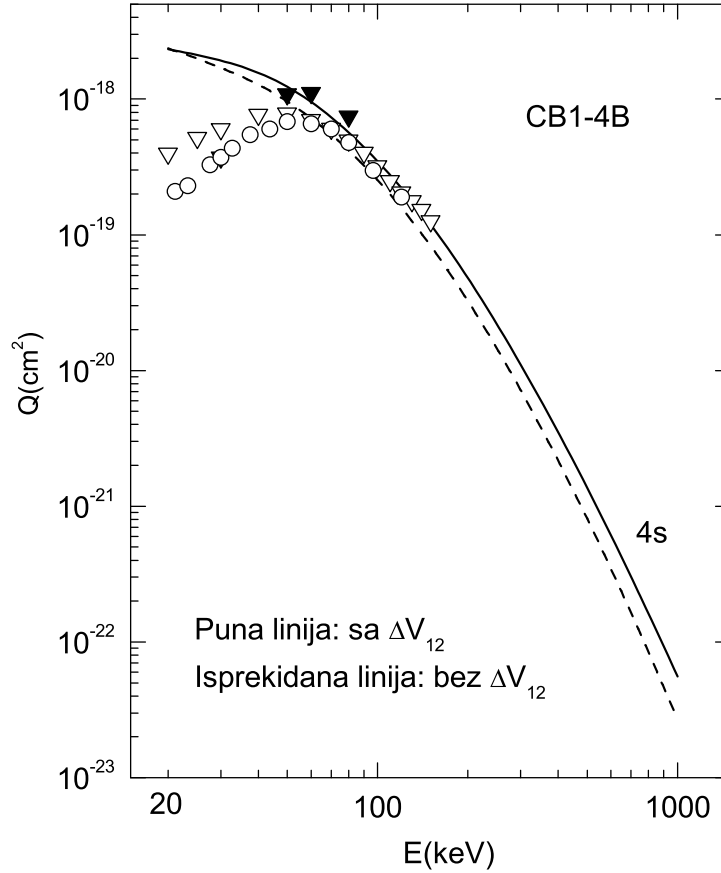
Slika 2.15: Parcijalni efikasni preseki Q_{3s}^+ , Q_{3p}^+ i Q_{3d}^+ za elektronski zahvat od strane protona iz $\text{He}(1s^2)$ u procesu (2.227). Puna i isprekidana linija reprezentuju post efikasan presek u CB1-4B aproksimaciji [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalom i bez potencijala $\Delta V_{12} = 1/r_{12} - 1/x_1$, respektivno. Eksperimentalni podaci su isti kao na slici 2.3. Teorijski i eksperimentalni rezultati za zahvat u $3p$ i $3d$ stanja H atoma su podeljeni sa 10 i 1000, respektivno.

Totalni efikasni presek za elektronski zahvat sumiran po svim finalnim stanjima H atoma, što je simbolički označeno sa $H(\Sigma)$, je na osnovu relacije (2.114):

$$Q_{\text{tot}}^{\pm} = Q_1^{\pm} + Q_2^{\pm} + 2.081Q_3^{\pm}, \quad (2.231)$$

gde numerički faktor 2.081 približno uračunava i doprinos svih pobudjenih stanja $n^f \geq 4$. Totalni efikasni preseki za zahvat u $\text{H}^+ - \text{He}$ sudarima u energijskom opsegu od 20 do 10000 keV su prikazani na slici 2.17. Sa slike 2.17 se vidi da su dobijeni rezultati u CB1-4B aproksimaciji u odličnom slaganju sa svim raspoloživim merenjima u veoma širokom intevalu upadnih energija, gde se najveća i najmanja vrednost preseka razlikuju čak deset redova veličina.

Potencijal ΔV_{12} u kompletnoj perturbaciji V_f^c iz (2.229) predstavlja izvor dinamičkih elektronskih korelacija, gde je $1/r_{12}$ potencijalna energija Coulomb-ove interakcije između elektrona e_1 i e_2 . Konkretno, interakcija ΔV_{12} je razlika između konačne (V_{12}) i asimptotske vrednosti (V_{12}^{∞}) istog $e_1 - e_2$ potencijala $1/r_{12}$. Dakle, potencijal $1/x_1$ je granična vrednost od



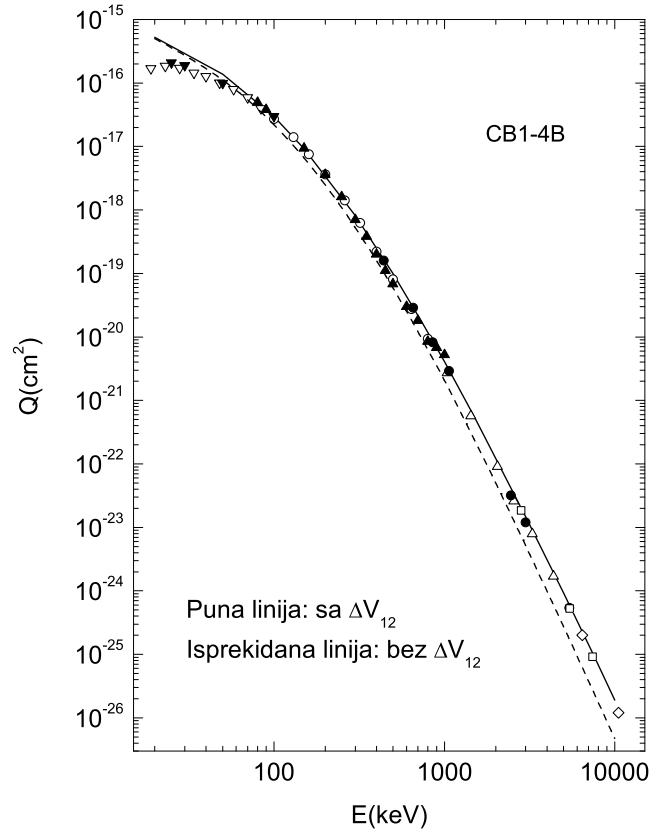
Slika 2.16: Parcijalni efikasni presek Q_{4s}^+ za elektronski zahvat od strane protona iz $\text{He}(1s^2)$ u procesu (2.227). Puna i isprekidana linija reprezentuju post efikasan presek u CB1-4B aproksimaciji [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalom i bez potencijala $\Delta V_{12} = 1/r_{12} - 1/x_1$, respektivno. Eksperimentalni podaci su isti kao na slici 2.4.

$1/r_{12}$ za beskonačno veliko x_1 i konačno x_2 ($V_{12}^\infty = \{V_{12}\}_{x_1 \gg x_2} \approx 1/x_1$). Korišćenjem relacije $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$, možemo razviti $1/x_1 = 1/|\vec{r}_{12} - \vec{x}_2|$ u Taylor-ov red u okolini $\vec{x}_2$ prema relaciji $1/x_1 = 1/|\vec{r}_{12} - \vec{x}_2| = 1/r_{12} - \vec{r}_{12} \cdot \vec{x}_2 / r_{12}^3 + \dots$, tako da imamo:

$$\Delta V_{12} = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{x_1} = \frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{x}_2}{r_{12}^3} + \dots \quad (2.232)$$

Ovo je opravdano za male vrednosti x_2 koordinate (reda Bohr-ovog radijusa a_0), pošto elektron e_2 uvek ostaje vezan u meti. Oдавde se vidi da potencijal ΔV_{12} sadrži informacije o dvoelektronskoj korelaciji $e_1 - e_2$. Iz svega navedenog se vidi da je potencijal ΔV_{12} kratkodometna interakcija u skladu sa korektnim graničnim uslovima.

Modulacijom V_{12} pomoću V_{12}^∞ dobijamo potencijal ΔV_{12} koji je vrsta ekranirane dugodometne Coulomb-ove interakcije $V_{12} = 1/r_{12}$. Zbog ovakvog efekta ekraniranja, koji je odgovoran za kratkodometni kombinovani potencijal $1/r_{12} - 1/x_1$, ukupan relativan značaj uloge dinamičkih korelacija preko ΔV_{12} može biti kvantitativno različit od uobičajnog očekivanja kada je samo $1/r_{12}$ razmatran. Na primer, povećanje upadne energije će smanjiti vreme sudara, što će



Slika 2.17: Totalni efikasni preseći za jednostruki zahvat elektrona iz osnovnog stanja helijuma od strane protona u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$ za reakciju $\text{H}^+ + \text{He}(1\text{S}) \rightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{He}^+(\Sigma)$. Simbol Σ predstavlja sumiranje po svim vezanim stanjima atoma vodonika H i jona helijuma He^+ koje je izmereno eksperimentalno. Prikazani post efikasni preseći su izračunati samo za osnovno stanje He^+ . Međutim sva pobudjena stanja atoma vodonika $\text{H}(\Sigma)$ su približno uračunata preko relacije $Q_{\text{tot}}^+ = Q_1^+ + Q_2^+ + 2.081Q_3^+$. Puna i isprekidana linija predstavljaju post preseke dobijene CB1-4B metodom [50] za slučaj kada je potencijal ΔV_{12} uključen i isključen iz kompletne perturbacije V_f^c , respektivno. Talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje inicijalnog osnovnog stanja helijuma. Eksperimentalni podaci su kao na slici 2.5.

oslabiti sve perturbacione interakcije, uključujući $1/r_{12}$ u V_f^c . Međutim, ono što je bitno u T_{if}^+ , da je prelaz $i \rightarrow f$ direktno uslovljen sa V_f^c , kojoj doprinosi svaka pojedinačna interakcija u finalnoj perturbaciji, bilo da je međuelektronska ili neka druga. Dakle, ono što se računa na kraju je ukupan bilans svake učestvujuće interakcije. To je uslovljeno sadržajem kompletne perturbacije V_f^c , koja uključuje i privlačne i odbojne potencijale, čija delovanja mogu dovesti do konstruktivne i destruktivne interference u T_{if}^+ . Svrha grupisanja individualnih Coulomb-ovih potencijala u tri kratkodomne interakcije ΔV_{12} , ΔV_{T1} i ΔV_{P2} prema relaciji (2.229) je da se proceni značaj ovih potencijala, od kojih nijedna ne može da proizvede nikakvo izobličenje konačnih neperturbovanih stanja u izlazanom kanalu. Ovo omogućava uključivanje i isključivanje jedne ili dve interakcije iz seta $\{\Delta V_{12}, \Delta V_{T1}, \Delta V_{P2}\}$ u V_f^c pri čemu je još ispunjen uslov takozvane asimptotske slobode [1]. Prema ovom krucijalnom principu, adekvatna sudarna teorija mora da se bavi samo sa neperturbovanim stanjima u asimptotskom regionu zbog toga što su samo oni eksperimentalno dostupni u eksperimentima rasejanja.

Tabela 9. Totalni efikaasni presek (u jedinicama cm^2) u post formi CB1-4B metoda sa kompletnim perturbacionim potencijalom V_f^c za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$. Red označen sa Q_{tot}^+ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{H}(n^f l^f m^f)$ korišćenjem jednačine (2.231). Četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje osnovnog stanja helijuma $\text{He}(1s^2)$. Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	20	50	100	150	300
100	4.27[-16]	1.05[-16]	2.21[-17]	6.96[-18]	6.33[-19]
200	2.37[-17]	1.06[-17]	2.80[-18]	9.36[-19]	8.70[-20]
210	3.48[-17]	7.73[-18]	1.35[-18]	3.46[-19]	1.89[-20]
211	1.59[-18]	5.40[-19]	1.29[-19]	3.56[-20]	2.02[-21]
2p	3.80[-17]	8.81[-18]	1.61[-18]	4.17[-19]	2.29[-20]
300	5.89[-18]	2.98[-18]	8.26[-19]	2.80[-19]	2.62[-20]
310	1.02[-17]	2.48[-18]	4.60[-19]	1.20[-19]	6.66[-21]
311	4.54[-19]	1.60[-19]	4.17[-20]	1.19[-20]	6.99[-22]
3p	1.11[-17]	2.79[-18]	5.43[-19]	1.44[-19]	8.05[-21]
320	8.04[-19]	1.71[-19]	2.42[-20]	5.11[-21]	1.78[-22]
321	8.94[-20]	2.10[-20]	4.55[-21]	1.09[-21]	4.12[-23]
322	5.39[-21]	1.91[-21]	4.77[-22]	1.14[-22]	4.17[-24]
3d	9.94[-19]	2.17[-19]	3.43[-20]	7.52[-21]	2.69[-22]
Q_{tot}^+	5.26[-16]	1.37[-16]	2.94[-17]	9.21[-18]	8.15[-19]

U T matričnom elementu (2.126), potencijal ΔV_{12} igra ulogu perturbacije, koja može dovesti do zahvata elektrona e_1 . Drugim rečima, korelacioni potencijal ΔV_{12} može da dovede do jednostrukog zahvata kao poseban i konkurentan mehanizam sa preostalim interakcijama ΔV_{T1} i ΔV_{P2} koje direktno ne uključuju $e_1 - e_2$ odbijanje. U principu, ovi posebni putevi ne mogu se razlikovati jer oni mogu da dovedu do istog finalnog stanja. Značaj ekraniranih dinamičkih korelacija ΔV_{12} u amplitudi prelaza T_{if}^+ iz (2.126) je proučen uključivanjem ili isključivanjem ΔV_{12} u V_f^c , a dobijeni rezultati su prikazani u Tabelama 9 i 10, respektivno. Iz Tabele 9 vidimo da važe sledeći odnosi: $Q_{2s}^+ > Q_{2p_0}^+$ i $Q_{3s}^+ > Q_{3p_0}^+$ za $E \geq 50$ keV, $Q_{2p_0}^+ > Q_{2p_{\pm 1}}^+$ i $Q_{3p_0}^+ > Q_{3p_{\pm 1}}^+$, na svim razmotrenim energijama, dok iz Tabele 10 sledi: $Q_{2s}^{(0)} > Q_{2p_0}^{(0)}$ i $Q_{3s}^{(0)} > Q_{3p_0}^{(0)}$ za $E \geq 100$ keV, $Q_{2p_0}^{(0)} > Q_{2p_{\pm 1}}^{(0)}$ i $Q_{3p_0}^{(0)} > Q_{3p_{\pm 1}}^{(0)}$ na svim razmotrenim energijama. Dobijeni preseki bez korelacije ΔV_{12} su takodje prikazani na slikama 2.14–2.16 isprekidanim linijama za parcijalne efikasne preseke, kao i na slici 2.17 gde je isprekidanom linijom označen totalni efikasni presek.

Do koje mere ekranirana dinamička elektronska korelacija ΔV_{12} može uticati na razmatrani proces se istovremeno može videti na slikama 2.14–2.17. Sa slika se da zaključiti da je iznad 100 keV, gde se očekuje validnost CB1-4B modela, neslaganje izmedju rezultata sa kompletnom perturbacijom V_f^c (puna linija) i odgovarajućeg efikasnog preseka bez ΔV_{12} , ili ekvivalentno, za $\Delta V_{12} = 0$ (isprekidana linija) veliko. Razlika se povećava sa povećanjem upadne energije. Ovo ukazuje da uloga ekranirane dinamičke korelacije ΔV_{12} postaje izraženija na višim upadnim energijama.

Tabela 11 pokazuje odgovarajuće preseke za prior formu CB1-4B metoda sa ukupnom perturbacijom V_i^c , koja direktno ne uključuje elektron-elektron korelaciju. U ovom slučaju parcijalni preseki se nalaze u sledećem odnosu: $Q_{2s}^- > Q_{2p_0}^-$ i $Q_{3s}^- > Q_{3p_0}^-$ za $E \geq 50$ keV, $Q_{2p_0}^- > Q_{2p_{\pm 1}}^-$ i $Q_{3p_0}^- > Q_{3p_{\pm 1}}^-$, na svim razmotrenim energijama.

Nastavak Tabele 9.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	500	750	1000	1500
100	7.88[-20]	1.29[-20]	3.32[-21]	4.50[-22]
200	1.07[-20]	1.72[-21]	4.37[-22]	5.86[-23]
210	1.48[-21]	1.62[-22]	3.09[-23]	2.71[-24]
211	1.60[-22]	1.76[-23]	3.39[-24]	3.03[-25]
2p	1.80[-21]	1.97[-22]	3.77[-23]	3.32[-24]
300	3.21[-21]	5.15[-22]	1.31[-22]	1.75[-23]
310	5.24[-22]	5.72[-23]	1.09[-23]	9.59[-25]
311	5.58[-23]	6.18[-24]	1.19[-24]	1.07[-25]
3p	6.35[-22]	6.96[-23]	1.33[-23]	1.17[-24]
320	9.41[-24]	7.30[-25]	1.08[-25]	6.47[-27]
321	2.20[-24]	1.71[-25]	2.53[-26]	1.53[-27]
322	2.16[-25]	1.64[-26]	2.38[-27]	1.41[-28]
3d	1.42[-23]	1.10[-24]	1.63[-25]	9.81[-27]
Q_{tot}^+	9.93[-20]	1.60[-20]	4.09[-21]	5.51[-22]
$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	3000	5000	7500	10000
100	1.23[-23]	7.71[-25]	8.06[-26]	1.58[-26]
200	1.58[-24]	9.79[-26]	1.02[-26]	2.01[-27]
210	3.49[-26]	1.25[-27]	8.51[-29]	1.23[-29]
211	3.98[-27]	1.44[-28]	9.78[-30]	1.41[-30]
2p	4.28[-26]	1.54[-27]	1.05[-28]	1.52[-29]
300	4.64[-25]	2.85[-26]	3.02[-27]	6.11[-28]
310	1.23[-26]	4.43[-28]	3.01[-29]	4.36[-30]
311	1.40[-27]	5.11[-29]	3.47[-30]	5.01[-31]
3p	1.51[-26]	5.45[-28]	3.70[-29]	5.36[-30]
320	4.14[-29]	8.75[-31]	3.87[-32]	4.15[-33]
321	9.99[-30]	2.15[-31]	9.59[-33]	1.03[-33]
322	8.88[-31]	1.87[-32]	8.22[-34]	8.76[-35]
3d	6.32[-29]	1.34[-30]	5.95[-32]	6.39[-33]
Q_{tot}^+	1.49[-23]	9.31[-25]	9.72[-26]	1.91[-26]

Ipak, potencijal V_i^c iz T_{if}^- nije potpuno oslobođen od elektronskih korelacija. Naprotiv, alternativni mehanizam elektronskih korelacija posredstvom potencijala $-Z_P/s_2$ je takodje prisutan u V_i^c , koji je kao što je rečeno dat sa $V_i^c = Z_P(2/R - 1/s_1 - 1/s_2)$. Po analogiji sa V_f^c , kompletni kratkodometni potencijal V_i^c se može izraziti kao zbir dve kratkodometne interakcije $V_i^c = \Delta V_{P1} + \Delta V_{P2}$, gde je $\Delta V_{P1} = Z_P(1/R - 1/s_1)$ dok je ΔV_{P2} isti kao u V_f^c , to jest $\Delta V_{P2} = Z_P(1/R - 1/s_2)$. Što se tiče interakcija koje uključuju jedan ili oba elektrona, u opisu pomoću T_{if}^- , elektron e_1 može biti zahvaćen ili kroz $Z_P - e_1$ ili $Z_P - e_2$ potencijale: $-Z_P/s_1$ ili $-Z_P/s_2$, respektivno. Zahvat kroz direktnu $Z_P - e_1$ interakciju je tipičan za već pomenutu Oppenheimer-Brinkman-Kramers-ovu aproksimaciju prvog reda. Nasuprot tome, u sudaru Z_P sa e_2 , elektron e_2 dobija energiju od projektila koju kroz korelacije (medjuelektronske interakcije) predaje elektronu e_1 .

Tabela 10. Totalni efikasni presek (u jedinicama cm^2) u post formi CB1-4B metoda bez ΔV_{12} u perturbacionom potencijalu V_f^c , za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$. Red označen sa $Q_{tot}^{(0)}$ predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{H}(n^f l^f m^f)$ korišćenjem jednačine (2.231). Četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje osnovnog stanja helijuma $\text{He}(1s^2)$. Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f m^f \setminus E(\text{keV})$	20	50	100	150	300
100	3.87[-16]	8.34[-17]	1.62[-17]	4.90[-18]	4.07[-19]
200	2.31[-17]	8.30[-18]	2.04[-18]	6.56[-19]	5.62[-20]
210	4.30[-17]	8.46[-18]	1.27[-18]	3.05[-19]	1.53[-20]
211	2.05[-18]	3.90[-19]	7.14[-20]	1.80[-20]	8.70[-22]
2p	4.71[-17]	9.24[-18]	1.42[-18]	3.41[-19]	1.70[-20]
300	5.88[-18]	2.32[-18]	6.01[-19]	1.96[-19]	1.70[-20]
310	1.26[-17]	2.75[-18]	4.38[-19]	1.07[-19]	5.43[-21]
311	5.99[-19]	1.20[-19]	2.33[-20]	6.05[-21]	3.02[-22]
3p	1.38[-17]	2.99[-18]	4.85[-19]	1.19[-19]	6.04[-21]
320	9.93[-19]	1.98[-19]	2.31[-20]	4.43[-21]	1.39[-22]
321	1.23[-19]	1.91[-20]	2.68[-21]	5.66[-22]	1.82[-23]
322	7.80[-21]	1.27[-21]	2.25[-22]	4.95[-23]	1.56[-24]
3d	1.25[-18]	2.39[-19]	2.89[-20]	5.66[-21]	1.79[-22]
$Q_{tot}^{(0)}$	5.01[-16]	1.12[-16]	2.20[-17]	6.57[-18]	5.29[-19]

Prisustvo korelacija u ovom sudaru se može videti iz sledećeg. Korišćenjem relacije $r_{12} = |\vec{s}_1 - \vec{s}_2|$, možemo razviti $1/s_2 = 1/|\vec{r}_{12} - \vec{s}_1|$ u Taylor-ov red u okolini $\vec{s}_1$, tako da imamo:

$$\frac{1}{s_2} = \frac{1}{|\vec{r}_{12} - \vec{s}_1|} = \frac{1}{r_{12}} - \frac{\vec{r}_{12} \cdot \vec{s}_1}{r_{12}^3} + \dots, \quad (2.233)$$

gde je s_1 reda Bohr-ovog radijusa. Drugi sabirak na desnoj strani ove jednačine je poznat kao dugodometna dipolna aproksimacija. Odavde zaključujemo da potencijal $-Z_P/s_2 = -Z_P(1/r_{12} - \vec{r}_{12} \cdot \vec{s}_1/r_{12}^3 + \dots)$ zaista sadrži informacije o dvoelektronskoj $e_1 - e_2$ korelaciji kroz potencijal $1/r_{12}$. Elektron e_1 koji je primio energiju napušta metu i kreće se paralelno sa projektilom Z_P , sa približno istom brzinom nakon čega biva zahvaćen. Kao što je navedeno, potencijal $-Z_P/s_2$ je takodje prisutan u V_f^c iz post forme amplitude prelaza T_{if}^+ . Naši proračuni korišćenjem T_{if}^- i T_{if}^+ pokazuju da doprinosi od ΔV_{P2} u ova dva matrična elementa su isti, kako u veličini tako i u obliku krivih za efikasni presek u funkciji upadne energije, kao što mora i da bude. Sa slike 2.18 se može zaključiti sledeće.

Nastavak Tabele 10.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	500	750	1000	1500
100	4.64[-20]	6.91[-21]	1.65[-21]	1.97[-22]
200	6.35[-21]	9.32[-22]	2.19[-22]	2.58[-23]
210	1.15[-21]	1.22[-22]	2.26[-23]	1.89[-24]
211	5.97[-23]	5.78[-24]	1.01[-24]	7.79[-26]
2p	1.27[-21]	1.33[-22]	2.46[-23]	2.04[-24]
300	1.91[-21]	2.80[-22]	6.58[-23]	7.77[-24]
310	4.09[-22]	4.33[-23]	8.02[-24]	6.69[-25]
311	2.09[-23]	2.03[-24]	3.55[-25]	2.74[-26]
3p	4.51[-22]	4.73[-23]	8.73[-24]	7.24[-25]
320	7.10[-24]	5.46[-25]	8.04[-26]	4.81[-27]
321	8.62[-25]	6.07[-26]	8.36[-27]	4.57[-28]
322	7.06[-26]	4.73[-27]	6.28[-28]	3.25[-29]
3d	8.97[-24]	6.77[-25]	9.84[-26]	5.79[-27]
$Q_{tot}^{(0)}$	5.90[-20]	8.66[-21]	2.05[-21]	2.43[-22]
$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	3000	5000	7500	10000
100	4.24[-24]	2.25[-25]	2.11[-26]	3.89[-27]
200	5.45[-25]	2.85[-26]	2.63[-27]	4.78[-28]
210	2.14[-26]	6.85[-28]	4.24[-29]	5.80[-30]
211	8.14[-28]	2.59[-29]	1.64[-30]	2.29[-31]
2p	2.30[-26]	7.37[-28]	4.57[-29]	6.26[-30]
300	1.69[-25]	9.03[-27]	7.91[-28]	1.34[-28]
310	7.54[-27]	2.38[-28]	1.44[-29]	1.94[-30]
311	2.86[-28]	9.09[-30]	5.76[-31]	8.07[-32]
3p	8.11[-27]	2.57[-28]	1.56[-29]	2.10[-30]
320	3.01[-29]	6.10[-31]	2.59[-32]	2.72[-33]
321	2.53[-30]	4.87[-32]	2.05[-33]	2.14[-34]
322	1.68[-31]	3.15[-33]	1.31[-34]	1.36[-35]
3d	3.55[-29]	7.13[-31]	3.03[-32]	3.18[-33]
$Q_{tot}^{(0)}$	5.18[-24]	2.74[-25]	2.54[-26]	4.66[-27]

U okviru T_{if}^+ , potencijali ΔV_{12} i ΔV_{P2} pokazuju sličan uticaj na elektronski zahvat na srednjim upadnim energijama 20–300 keV. Međutim, pri većim upadnim energijama iznad 300 keV, elektronski zahvat kroz interakciju ΔV_{12} postaje mnogo važniji od onog preko ΔV_{P2} . Sa druge strane, potencijal ΔV_{T1} dominira u odnosu na ΔV_{12} na energijama 20–300 keV, ali doprinosi od ove dve interakcije postaju potpuno uporedivi iznad 300 keV i ispod 1000 keV. Iznad 1000 keV, doprinos od ΔV_{12} je znatno važniji od ΔV_{T1} . Sve u svemu, u odnosu na oba potencijala ΔV_{P2} i ΔV_{T1} , potencijal ΔV_{12} povećava svoj značaj sa povećanjem upadne energije.

Tabela 11. Totalni efikaasni presek (u jedinicama cm^2) u prior formi CB1-4B metoda sa kompletnim perturbacionim potencijalom V_i^c za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$. Red označen sa Q_{tot}^- predstavlja efikasan presek sumiran po svim vezanim stanjima zahvaćenog elektrona $\text{H}(n^f l^f m^f)$ korišćenjem jednačine (2.231). Četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje osnovnog stanja helijuma $\text{He}(1s^2)$. Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

$n^f l^f m^f \setminus E(\text{keV})$	20	50	100	150	300
100	3.95[-16]	9.77[-17]	2.11[-17]	6.79[-18]	6.42[-19]
200	2.24[-17]	9.69[-18]	2.63[-18]	9.02[-19]	8.78[-20]
210	3.54[-17]	7.52[-18]	1.30[-18]	3.35[-19]	1.89[-20]
211	1.57[-18]	5.08[-19]	1.26[-19]	3.60[-20]	2.14[-21]
2p	3.85[-17]	8.53[-18]	1.55[-18]	4.07[-19]	2.31[-20]
300	5.60[-18]	2.72[-18]	7.76[-19]	2.70[-19]	2.65[-20]
310	1.03[-17]	2.41[-18]	4.41[-19]	1.17[-19]	6.66[-21]
311	4.49[-19]	1.51[-19]	4.09[-20]	1.21[-20]	7.42[-22]
3p	1.12[-17]	2.72[-18]	5.23[-19]	1.41[-19]	8.15[-21]
320	8.28[-19]	1.71[-19]	2.32[-20]	4.92[-21]	1.77[-22]
321	9.01[-20]	1.97[-20]	4.36[-21]	1.08[-21]	4.32[-23]
322	5.33[-21]	1.75[-21]	4.57[-22]	1.13[-22]	4.32[-24]
3d	1.02[-18]	2.14[-19]	3.29[-20]	7.32[-21]	2.72[-22]
Q_{tot}^-	4.93[-16]	1.28[-16]	2.80[-17]	8.97[-18]	8.26[-19]

Kao ilustraciju, razmotrimo relativni doprinosi korelacionog člana koji je dat sa $\chi = |Q_{n^f l^f}^+ - Q_{n^f l^f}^{(0)}|/Q_{n^f l^f}^+$, za elektronski zahvat u određena $n^f l^f$ stanja, za pet upadne energije. Rezultati su prikazani u Tabeli 13. Ovde $Q_{n^f l^f}^+$ označava efikasan presek za zahvat u $n^f l^f$ stanje u slučaju kada je $\Delta V_{12} \neq 0$, dok $Q_{n^f l^f}^{(0)}$ predstavlja odgovarajuće rezultate dobijene zamenom $\Delta V_{12} = 0$ u V_f^c iz amplitude prelaza (2.126). Može se primetiti da za datu upadnu energiju i orbitalni kvantni broj l^f , vrednosti za χ su skoro jednake za različite glavne kvantne brojeve n^f , naročito za niže upadne energije. Na primer, na 100 keV, $\chi \simeq 27\%$ za $1s, 2s, 3s$ i $4s$ stanja. U testiranju ovakvog ponašanja, mi smo izračunali parametar χ i na 100 keV za $5s$ stanje i dobili vrednost $\chi = 26.97\%$.

Dalje, mi smo ispitali takozvanu post-prior razliku, koja proizilazi iz nejednakog perturbacionog potencijala ($V_i^c \neq V_f^c$) u amplitudi prelaza ove dve forme, kao i nepostojanja egzaktne talasne funkcije vezanog stanja helijumu sličnih atomskih sistema. Na slici 2.19 su prikazani prior i post totalni efikasni preseki u CB1-4B aproksimaciji, korišćenjem iste talasne funkcije Löwdin-a [15] za opisivanje osnovnog stanja helijuma.

Nastavak Tabele 11.

$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	500	750	1000	1500
100	8.20[-20]	1.36[-20]	3.50[-21]	4.70[-22]
200	1.11[-20]	1.81[-21]	4.61[-22]	6.12[-23]
210	1.51[-21]	1.68[-22]	3.21[-23]	2.81[-24]
211	1.73[-22]	1.91[-23]	3.66[-24]	3.20[-25]
2p	1.86[-21]	2.06[-22]	3.95[-23]	3.45[-24]
300	3.34[-21]	5.42[-22]	1.38[-22]	1.83[-23]
310	5.36[-22]	5.93[-23]	1.14[-23]	9.94[-25]
311	6.05[-23]	6.71[-24]	1.29[-24]	1.12[-25]
3p	6.57[-22]	7.28[-23]	1.39[-23]	1.22[-24]
320	9.53[-24]	7.48[-25]	1.11[-25]	6.64[-27]
321	2.37[-24]	1.86[-25]	2.73[-26]	1.62[-27]
322	2.29[-25]	1.74[-26]	2.52[-27]	1.46[-28]
3d	1.47[-23]	1.15[-24]	1.71[-25]	1.02[-26]
Q_{tot}^-	1.03[-19]	1.69[-20]	4.32[-21]	5.75[-22]
$n^f l^f m^f \backslash E(\text{keV})$	3000	5000	7500	10000
100	1.24[-23]	7.48[-25]	7.67[-26]	1.49[-26]
200	1.58[-24]	9.49[-26]	9.69[-27]	1.89[-27]
210	3.51[-26]	1.23[-27]	8.18[-29]	1.18[-29]
211	3.99[-27]	1.40[-28]	9.30[-30]	1.34[-30]
2p	4.31[-26]	1.51[-27]	1.00[-28]	1.44[-29]
300	4.68[-25]	2.78[-26]	2.83[-27]	5.54[-28]
310	1.24[-26]	4.33[-28]	2.89[-29]	4.15[-30]
311	1.40[-27]	4.93[-29]	3.30[-30]	4.74[-31]
3p	1.52[-26]	5.31[-28]	3.55[-29]	5.10[-30]
320	4.16[-29]	8.60[-31]	3.76[-32]	4.00[-33]
321	1.01[-29]	2.09[-31]	9.18[-33]	9.80[-34]
322	8.82[-31]	1.80[-32]	7.84[-34]	8.31[-35]
3d	6.35[-29]	1.31[-30]	5.75[-32]	6.12[-33]
Q_{tot}^-	1.50[-23]	9.03[-25]	9.24[-26]	1.80[-26]

Gornji par krivih odnosi se na uključivanje kompletnih perturbacionih potencijala V_i^c i V_f^c . Uprkos očigledne razlike izmedju V_i^c i V_f^c , proračuni pokazuju da razlika izmedju post i prior preseka je veoma mala, kao što se može videti na slici 2.19. Ovo je odlično svojstvo CB1-4B metoda, jer su iste fizičke pretpostavke uključene i u prior i u post formi ove teorije. Ova osobina važi i za parcijalne efikasne preseke kao što se može videti na slikama 2.20 i 2.21, gde su post i prior efikasni preseki predstavljeni za $2s, 2p$ i $3s, 3p, 3d$ stanja, respektivno. Slični rezultati za malu post-prior razliku su dobijeni i za $4s$ stanje, što je i predstavljeno u Tabeli 12. Važno je naglasiti da će post-prior neslaganje postojati u CB1-4B metodi, ako je korelacioni član $-Z_P/s_2$ ignorisan u V_i^c i V_f^c i/ili ako je $1/r_{12}$ zanemaren u V_f^c . Drugim rečima, svi potencijali moraju da budu očuvani, naročito korelacioni efekti koji proizilaze iz direktnog elektron-elektron potencijala ($1/r_{12}$ u T_{if}^+) i indirektno elektron-elektron interakcije posredovane putem projektila ($-Z_P/s_2$ u $T_{if}^\pm$).

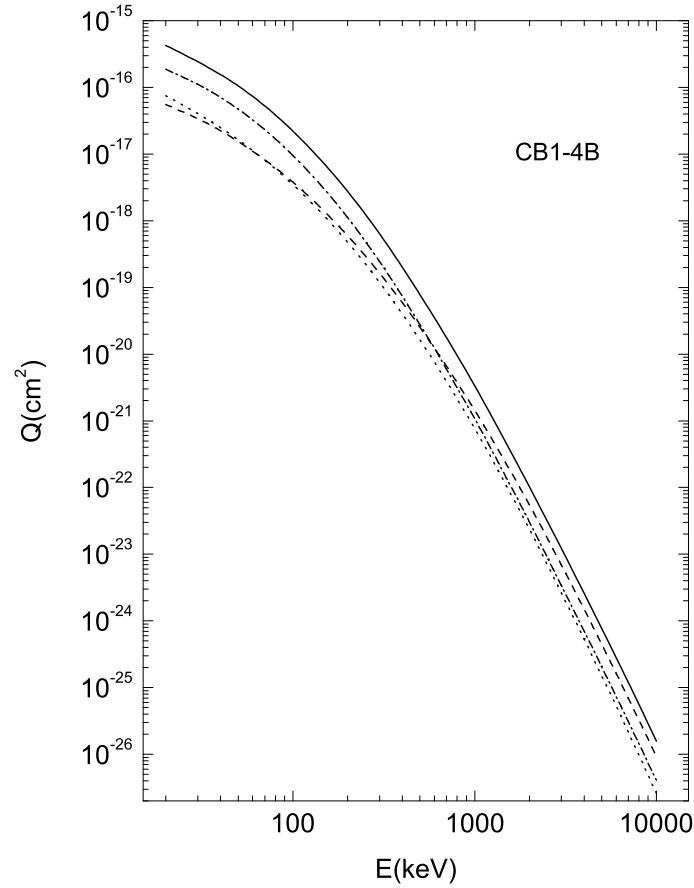
Tabela 12. Parcijalni efikasni presek za elektronski zahvat u $4s$ stanje atoma $\text{He}(1s^2)$ od strane protona. Veličine Q_{4s}^+ i $Q_{4s}^{(0)}$ predstavljaju efikasni presek u post verziji CB1-4B metoda sa i bez ΔV_{12} respektivno u amplitudi prelaza. Slično, Q_{4s}^- označava efikasni presek u prior verziji CB1-4B metoda sa kompletnom perturbacijom V_i^c . Četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje osnovnog stanja helijuma $\text{He}(1s^2)$. Notacija $X[-N]$ označava $X \times 10^{-N}$.

E(keV)	Q_{4s}^+	$Q_{4s}^{(0)}$	Q_{4s}^-
20	2.34[-18]	2.36[-18]	2.23[-18]
50	1.23[-18]	9.61[-19]	1.13[-18]
100	3.48[-19]	2.53[-19]	3.27[-19]
150	1.19[-19]	8.31[-20]	1.14[-19]
300	1.11[-20]	7.19[-21]	1.12[-20]
500	1.36[-21]	8.07[-22]	1.42[-21]
750	2.19[-22]	1.16[-22]	2.30[-22]
1000	5.57[-23]	2.67[-23]	5.86[-23]

Iako je ralika izmedju post i prior rezultata sa kompletnim potencijalima V_i^c i V_f^c mala, treba napomenuti da ove dve krive nisu medjusobno paralelne. Ovo ukazuje na to da se oblik krivih za preseke prikazanim na slikama 2.20 i 2.21 u post i prior verzije CB1-4B metoda malo razlikuju u zavisnosti od energije.

Donji par krivih na slici 2.19 baca poznato i sasvim drugačije svetlo na post-prior neslaganje. Ovde su post i prior preseki podeljeni sa 100. Isprekidana kriva opet predstavlja rezultate u prior verziji sa kompletnom perturbacijom V_i^c , koji su ovog puta poredjeni sa odgovarajućom post formom u kojoj je ekranirana dinamička korelacija ΔV_{12} izbačena iz kompletne perturbacije V_f^c . Veoma značajno post-prior neslaganje predstavljeno sa dve donje krive je u oštroj suprotnosti sa odgovarajućim gornjim krivama. Za izmenu naelektrisanja, upravo ova vrsta poredjenja je dugo vremena bila uobičajna praksa u literaturi, kada je reč o navodnom otkrivanju post-prior neslaganja i to u brojnim aproksimacijama (videti na primer [167] kao i [168]–[169], [154]).

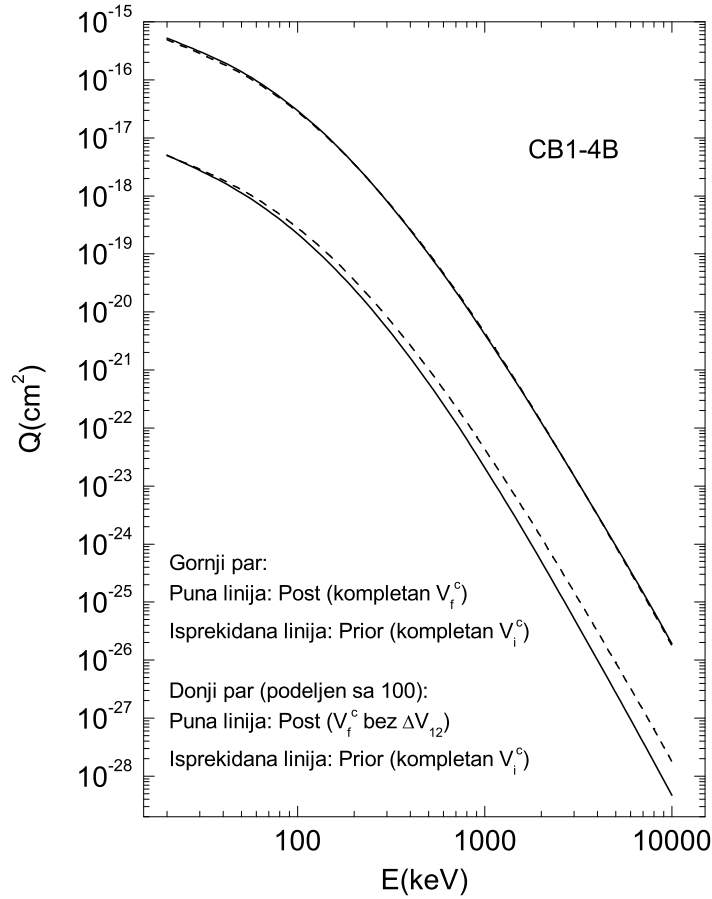
Medjutim, ovakva post-prior neslaganja u razmotrenim metodama možda će biti veoma mala, ako elektron-elektron odbijanje $1/r_{12}$ bude sastavni deo finalne perturbacije V_f^c u izlaznom kanalu procesa (2.227). U slučaju CB1-4B metoda to se jasno vidi na primer upoređivanjem donjeg i gornjeg para krivih na slici 2.19. Post-prior razlika koje je razmotrena bez ΔV_{12} u V_f^c post forme (puna linija u donjem paru) praktično potpuno nestaje kada je ΔV_{12} uključena u V_f^c (puna linija u gornjem paru). Naravno, potpuna fizička slika sadržana je u post formi CB1-4B metodi sa kompletnim V_f^c , za razliku od slučaja gde se ΔV_{12} ignoriše obično zbog matematičkih pogodnosti (jednostavnijeg računa). Dakle eksperimentalni podaci se sistematski slažu sa post verzijom CB1-4B metoda, gde kompletni potencijal V_f^c sadrži ΔV_{12} , kao što se vidi na slici 2.17. Poruka koju prenosi slika 2.19 je da teorija ne važi za $Z_P - (Z_T; e_1, e_2)$ sudare koji uključuju elektronski zahvat za post formalizam ako su izostavljene medjuelektronske interakcije u konačnom potencijalu V_f^c u izlaznom kanalu.



Slika 2.18: Parcijalni efikasni presek Q_{1s}^+ [50] za jednostruki elektronski zahvat od strane protona iz $\text{He}(1s^2)$ za proces (2.227). Puna linija predstavlja efikasan presek izračunat sa kompletnim potencijalom V_f^c . Tačka-crta linija predstavlja presek izračunat samo sa potencijalom ΔV_{T1} , dok tačkasta i isprekidana linija predstavljaju preseke izračunate samo sa ΔV_{P2} i ΔV_{12} u amplitudi prelaza T_{if}^+ , respektivno. Talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje inicijalnog osnovnog stanja helijuma.

Tabela 13. Relativni doprinos potencijala ΔV_{12} za različita $n^f l^f$ stanja za reakciju (2.227). Ova veličina je definisana sa $\chi = |Q_{n^f l^f}^+ - Q_{n^f l^f}^{(0)}| / Q_{n^f l^f}^+$, gde $Q_{n^f l^f}^+$ i $Q_{n^f l^f}^{(0)}$ označavaju prezentovane efikasne preseke za zahvat u $n^f l^f$ stanja sa i bez potencijala ΔV_{12} , respektivno. Četvoroparametarska talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje osnovnog stanja helijuma $\text{He}(1s^2)$.

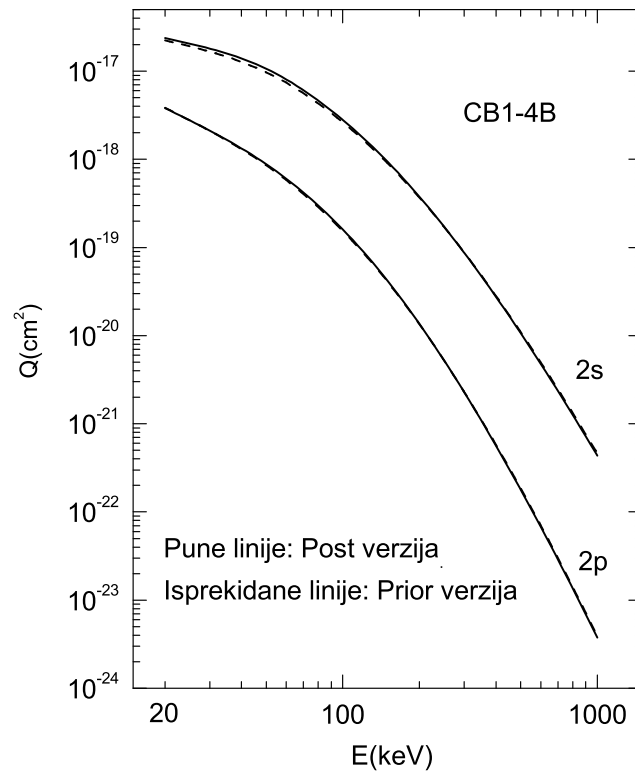
$nl \backslash E(\text{keV})$	100	500	1000	5000	10000
1s	26.70%	41.12%	50.30%	70.82%	75.38%
2s	27.14%	40.65%	49.89%	70.89%	76.22%
3s	27.24%	40.50%	49.77%	68.32%	78.07%
4s	27.30%	40.66%	52.06%	64.32%	73.55%
2p	11.80%	29.44%	34.75%	52.14%	58.82%
3p	10.68%	28.98%	34.36%	52.84%	60.82%
3d	15.74%	36.83%	39.63%	46.79%	50.23%



Slika 2.19: Totalni efikasni presezi $Q_{\text{tot}}^{\pm}$ za jednostruki zahvat elektrona iz osnovnog stanja helijuma od strane protona u funkciji laboratorijske upadne energije $E(\text{keV})$ za proces (2.228). Gornji i donji parovi krivih reprezentuju post Q_{tot}^+ (pune linije) i prior Q_{tot}^- (isprekidane linije) efikasne preseke u CB1-4B aproksimaciji [50], dobijene korišćenjem talasne funkcije Löwdin-a [15] za opisivanje osnovnog stanja helijuma. Prior efikasni presezi u gornjem i donjem paru su dobijeni sa kompletnom perturbacijom V_i^c . Post efikasni presezi u gornjem i donjem paru su dobijeni za finalnu perturbaciju V_f^c sa i bez ΔV_{12} , respektivno. Rezultati za donji par su podeljeni sa 100.

Kao što je ranije pomenuto, drugi razlog za postojanje post-prior razlike u teorijskim opisima izmene naelektrisanja je nepostojanje egzaktno talasne funkcije vezanog stanja helijumu sličnog sistema. Da bi testirali osetljivost CB1-4B metoda na izbor približne talasne funkcije osnovnog stanja helijuma, izračunati presek za zahvat elektrona u $1s$ stanje atoma vodonika predstavljen je na slici 2.22. Ovde se vidi da krive dobijene CB1-4B metodom korišćenjem talasnih funkcija Löwdin-a [15] i Silverman-a *et al.* [16], se skoro ne razlikuju jedna od druge. Štaviše, sa slike 2.22 se vidi da ovaj zaključak važi bez obzira da li se razmatra post ili prior verzija CB1-4B metoda. Isti zaključci se odnose i za zahvate u pobudjena stanja $H(n^f l^f m^f)$ atoma, što se može potvrditi poredjenjem Tabele 11 i Tabele 1 u prior formi (podsećanja radi rezultati u Tabeli 1 su dobijeni korišćenjem talasne funkcije Silverman-a *et al.* [16]). Ova marginalna osetljivost na izbor približne talasne funkcije za helijum u procesu (2.227) i (2.228) je još jedna poželjna karakteristika CB1-4B metoda.

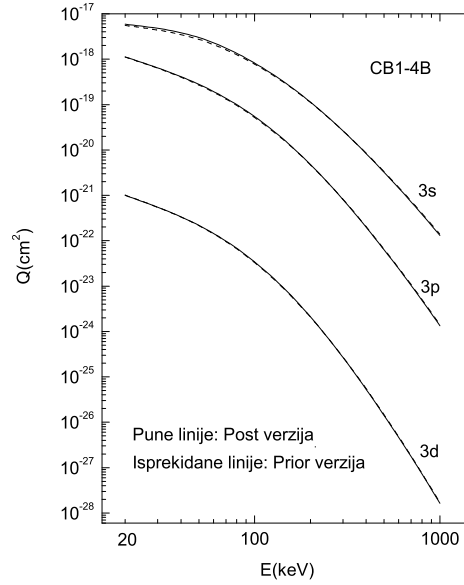
Sva prezentovana izračunavanja o relativnom značaju ekranizovanih dinamičkih korelacija



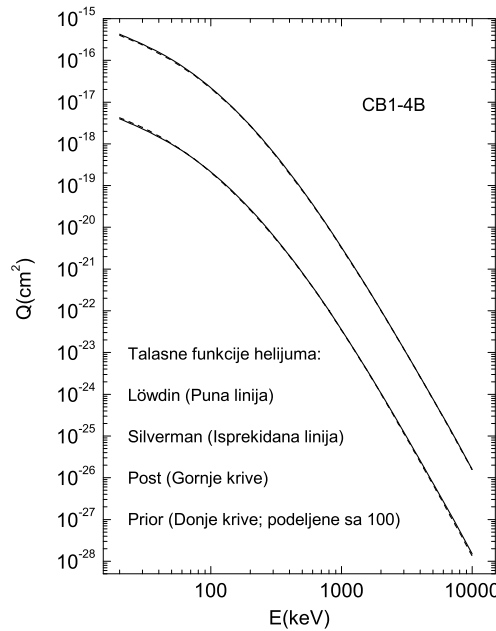
Slika 2.20: Parcijalni efikasni preseki $Q_{2s}^{\pm}$ i $Q_{2p}^{\pm}$ za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u procesu (2.227). Puna i isprekidana linija predstavljaju post $\{Q_{2s}^+, Q_{2p}^+\}$ i prior $\{Q_{2s}^-, Q_{2p}^-\}$ efikasne preseke dobijene CB1-4B aproksimacijom [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalima V_f^c i V_i^c , respektivno. Talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje inicijalnog osnovnog stanja helijuma.

ΔV_{12} za totalne preseke, dobijenih u CB1-4B metodi, su potpuno saglasna sa odgovarajućim ocenama dobijenih u CDW-4B metodi [13] za jednostruku izmenu naelektrisanja koja uključuju helijum kao metu. Ovako visok stepen povezanosti izmedju CB1-4B i CDW-4B metoda postignutim na srednjim i relativno visokim energijama je veoma važna za validnost prezentovanih rezultata, posebno imajući u vidu da smo koristili perturbacionu teoriju prvog reda. Dakle, može se zaključiti da CB1-4B metod može da obezbedi dosledan i sistematski kvantitativni opis u procesu jednostrukog elektronskog zahvata, koji je u dobroj saglasnosti sa eksperimentalnim podacima na srednjim i visokim upadnim energijama.

Sa numeričke tačke gledišta, za različite primene je pogodnije korišćenje prior forme, jer kao što je rečeno u prior amplitudi prelaza potrebno je uraditi dvodimenzionalnu numeričku integraciju po realnim promenljivima, dok se u post formi amplituda prelaza svodi na integraciju po realnim promenljivima kojih ima pet. Ipak, ova poslednja integracija je još uvek u prednosti u odnosu na primer Madison-ove grupe [170]-[174] koja je koristila dugotrajne devetodimenzionalne numeričke kvadrature za različite probleme koristeći definisane izraze za amplitudu prelaza izabranog metoda.



Slika 2.21: Parcijalni efikasni preseki $Q_{3s}^{\pm}$, $Q_{3p}^{\pm}$ i $Q_{3d}^{\pm}$ za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u procesu (2.227). Puna i isprekidana linija predstavljaju post $\{Q_{3s}^+, Q_{3p}^+, Q_{3d}^+\}$ i prior $\{Q_{3s}^-, Q_{3p}^-, Q_{3d}^-\}$ efikasne preseke dobijene CB1-4B aproksimacijom [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalima V_f^c i V_i^c , respektivno. Talasna funkcija Löwdin-a [15] je iskorišćena za opisivanje inicijalnog osnovnog stanja helijuma.



Slika 2.22: Parcijalni efikasni presek $Q_{1s}^{\pm}$ za elektronski zahvat iz $\text{He}(1s^2)$ od strane protona u procesu (2.227). Gornji i donji parovi krivih predstavljaju post i prior efikasne preseke dobijene CB1-4B aproksimacijom [50] sa kompletnim perturbacionim potencijalima V_f^c i V_i^c , respektivno. Puna i isprekidana linija odgovaraju talasnim funkcijama Löwdin-a [15] i Silverman-a *et al.* [16] kojima je opisano osnovno stanje helijuma, respektivno. Rezultati za donji par krivih su podeljeni sa 100.

Glava 3

Diferencijalni efikasni preseki za jednostruki elektronski zahvat

U CB1-4B aproksimaciji diferencijalni presek je dat relacijom [175]:

$$\frac{dQ_{if}^{\pm}}{d\Omega} = \frac{\mu_i \mu_f k_f}{4\pi^2 k_i} |T_{if}^{\pm}(\vec{\eta})|^2 \left(\frac{a_0^2}{sr} \right), \quad (3.1)$$

gde je Ω prostorni ugao oko pravca koji je određen talasnim vektorom k_f , dok je $a_0 = 0.5291772083 \times 10^{-10}m$ već pomenuti Bohr-ov radijus. Kako se radi o sudarima masivnih čestica (projektila i mete) možemo napisati $\mu_i = \mu_f = \mu = \frac{M_P M_T}{M_P + M_T}$. Kao što je već rečeno masivnost čestica i visoke upadne energije projektila uzrokuju rasejanje na malim uglovima tako da važi $k_i/k_f \approx 1$. Iz svega ovog konačno možemo pisati za diferencijalni efikasni presek:

$$\frac{dQ_{if}^{\pm}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} |T_{if}^{\pm}(\vec{\eta})|^2 \left(\frac{a_0^2}{sr} \right), \quad (3.2)$$

koji je takodje generalan i važi kako za simetrične tako i za asimetrične sudare. Program za izračunavanje totalnog preseka se može uz neznatne izmene primeniti i za izračunavanje diferencijalnog preseka. Posebno treba obratiti pažnju da na vrednost diferencijalnog preseka utiče i veličina $\vec{\rho}$, tako da se faktor $(\rho v)^{2iZ_P(Z_T-2)/v}$ ili $(\rho v)^{2i(Z_T-1)(Z_P-1)/v}$ iz relacije (2.3) u opštem slučaju ne može izostaviti iz izračunavanja diferencijalnog preseka, za razliku od totalnog preseka u kojem je to učinjeno. Ovi faktori naime opisuju Rutherford-ovo rasejanje koje igra važnu ulogu na većim uglovima rasejanja. U ovom slučaju se uvodi relacije $\eta = 2\mu v \sin(\theta/2)$, posle čega diferencijalni efikasni presek (3.2) biva eksplicitno zavistan od ugla rasejanja θ .

3.1 Elektronski zahvat u proizvoljna stanja $H(n^f l^f m^f)$ u sudaru H^+ sa $He(1s^2)$

U sudarima predstavljenim relacijom (2.106):

$$H^+ + He(1s^2) \longrightarrow H(n^f l^f m^f) + He^+(1s), \quad (3.3)$$

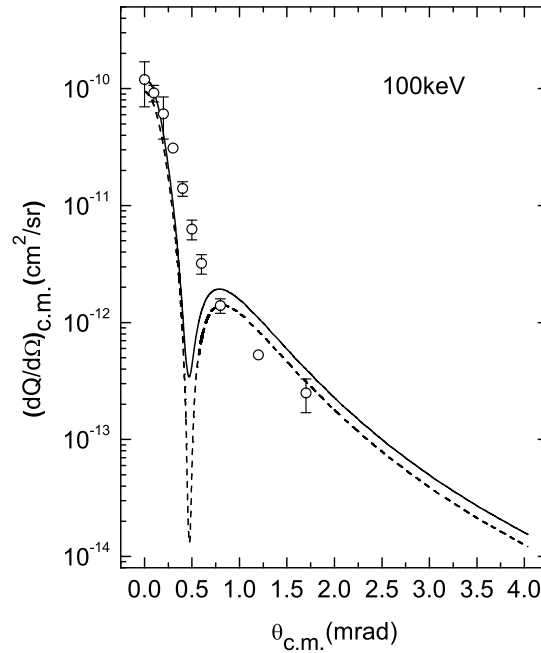
naelektrisanje projektila i jezgra mete su respektivno $Z_P = 1$ i $Z_T = 2$, zbog čega su faktori $(\rho v)^{2iZ_P(Z_T-2)/v}$ i $(\rho v)^{2i(Z_T-1)(Z_P-1)/v}$ jednaki jedinici. Oдавde se zaključuje da ovi faktori u ovom specijalnom slučaju neće uticati na diferencijalni efikasni presek, tako da su amplitude prelaza $T_{if}^{\pm}(\vec{\eta})$ u izrazu (3.2) upravo amplitude prelaza date relacijama (2.63) i (2.182), jer su ove amplitude (2.63) i (2.182) izračunate bez ovih faktora. Svi diferencijalni preseki su izračunati korišćenjem talasne funkcije Silverman-a *et al.* [16] za opisivanje osnovnog stanja

helijuma. Kao i u slučaju totalnog preseka i ovde važe relacije (2.114-2.116) u skladu sa Oppenheimer-ovim $(n^f)^{-3}$ zakonom skaliranja [53, 83], sa tim što u ovim relacijama umesto totalnih preseka treba zameniti diferencijalne.

Na slikama 3.1-3.7 prikazani su izračunati diferencijalni efikasni preseci (puna linija) u prior formi sumirani po svim finalnim stanjima zahvaćenog elektrona u H atomu u skladu sa relacijom (2.114):

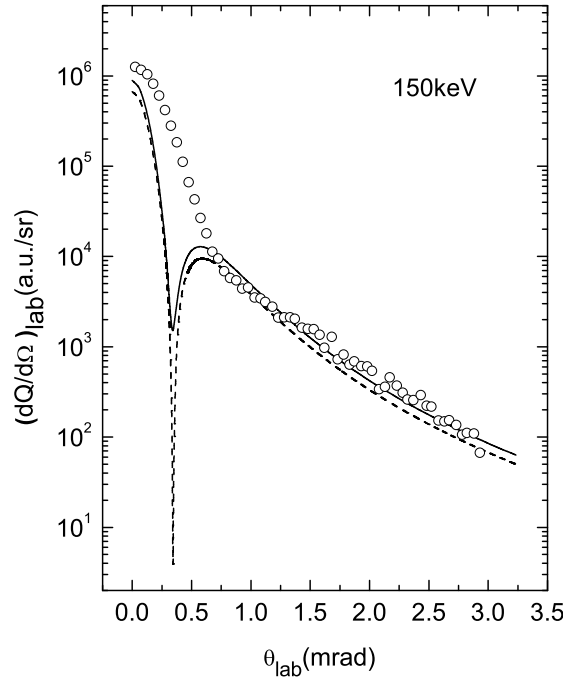
$$\frac{dQ_{tot}^-}{d\Omega} \simeq \frac{dQ_1^-}{d\Omega} + \frac{dQ_2^-}{d\Omega} + \frac{dQ_3^-}{d\Omega} + 2.561 \frac{dQ_4^-}{d\Omega} \quad (3.4)$$

i to na energijama od 100, 150, 200, 300, 400, 630 i 1300 keV. Krive koje reprezentuju teorijske rezultate se relativno dobro slažu sa eksperimentalnim podacima. Naime, kao što se vidi sa slika 3.2 i 3.4 na enegijama 150 i 300 keV respektivno, postoji odlično slaganje sa eksperimentom na većim uglovima rasejanja, dok na manjim uglovima (oko 0 mrad) teorijski rezultati su ispod merenja. Na upadnoj energiji projektila od 200 keV diferencijalni preseci prikazani na slici 3.3 se dobro slažu sa eksperimentalnim podacima na većim uglovi od 0.54 mrad kao i na uglovima oko 0 mrad. Na slikama 3.1, 3.6 i 3.7 uočeno je odlično slaganje izmedju teorijski izračunatog i izmerenog diferencijalno preseka na uglovima u intervalu 0-0.12 mrad, 0-0.07 mrad i 0-0.20 mrad respektivno, dok na uglovima većim od 0.79, 0.47 i 0.43 mrad respektivno, teorijski rezultati nadmašuju merenja. Na slici 3.5 teorijski rezultati su neznatno ispod merenja na uglovima rasejanja oko 0 mrad, nasuprot ovome na uglovima većim od 0.48 mrad teorijski rezultati malo nadmašuju eksperimentalne podatke.



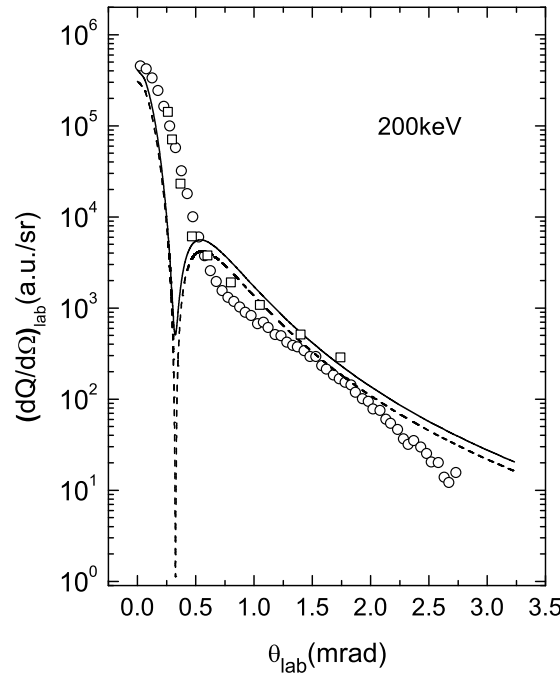
Slika 3.1: Diferencijalni efikasni presek (cm^2/sr) u sistemu centra mase, u funkciji ugla rasejanja $\theta(\text{mrad})$ za upadnu energiju protona od 100 keV. Puna linija predstavlja $dQ_{tot}^-/d\Omega$ presek u prior formi CB1-4B metoda koji je izračunat u skladu sa relacijom (3.4). Isprekidana linija predstavlja diferencijalni efikasni presek za elektronski zahvat u 1s stanje H atoma, takodje u prior formi CB1-4B metoda. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Martin *et al.* [101].

Na istim slikama 3.1-3.7 predstavljeni su isprekidanom linijom i diferencijalni preseci za zahvat u 1s finalno stanje H atoma. Sa slika se vidi da na manjim uglovima rasejanja dominira



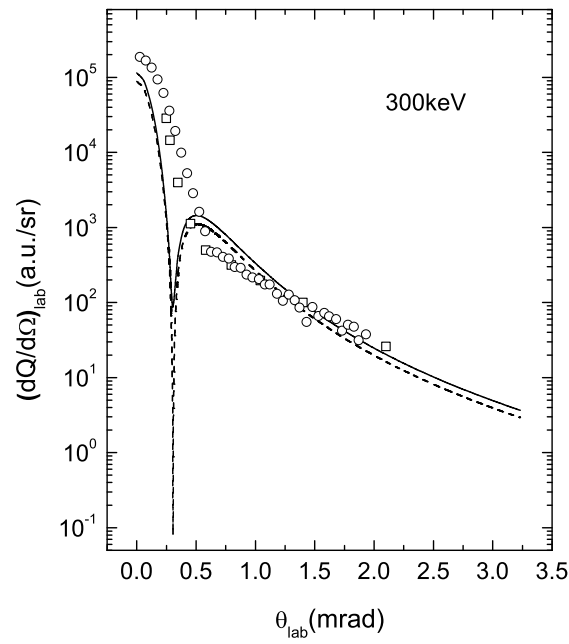
Slika 3.2: Diferencijalni efikasni presek (a.u./sr) u laboratorijskom sistemu reference, u funkciji ugla rasejanja $\theta(\text{mrad})$ za upadnu energiju protona od 150 keV. Puna linija predstavlja $dQ_{tot}^-/d\Omega$ presek u prior formi CB1-4B metoda koji je izračunat u skladu sa relacijom (3.4). Isprekidana linija predstavlja diferencijalni efikasni presek za elektronski zahvat u 1s stanje H atoma, takodje u prior formi CB1-4B metoda. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Mergel *et al.* [176].

zahvat u 1s stanje, a sa porastom ugla udeo pobudjenih stanja u elektronskom zahvatu postaje sve veći. Značaj ekranirane dinamičke korelacije ΔV_{12} za jednostruki elektronski zahvat kao i slaganje diferencijalnih preseka u prior i post (sa ΔV_{12}) formi mogu se videti na slikama 3.8 i 3.9, gde su prikazani diferencijalni preseki za zahvat u 1s stanje atoma vodonika, na energijama 100 i 300 keV respektivno. Puna linija predstavlja diferencijalni presek u post formi $dQ_{1s}^+/d\Omega$ izračunat sa kompletnom perturbacijom V_f^c , isprekidana linija diferencijalni presek u prior formi $dQ_{1s}^-/d\Omega$ izračunat sa kompletnom perturbacijom V_i^c i tačkasta linija diferencijalni presek u post formi $dQ_{1s}^{(0)}/d\Omega$ izračunat bez interakcionog potencijala ΔV_{12} . Razlika izmedju diferencijalnih preseka u prior formi i post formi sa interakcijom ΔV_{12} je mala, gotovo zanemarljiva na svim razmatranim uglovima rasejanja, što je i očekivano sobzirom na zaključke vezane za totalne preseke. Upoređivanjem diferencijalnih preseka u post formi bez ΔV_{12} sa jedne strane i diferencijalnih preseka u prior i post (sa ΔV_{12}) formi sa druge strane, uočavamo da je na većim uglovima rasejanja razlika izmedju njih veoma mala gotovo zanemarljiva, dok na manjim uglovima ta razlika postaje sve veća, gde su diferencijalni preseki u post formi bez ΔV_{12} ispod diferencijalnih preseka u prior formi i post formi sa interakcijom ΔV_{12} . Posmatrajući teorijske krive na slikama 3.1-3.9 možemo uočiti nefizički a samim tim i eksperimentalno nedetektovani minimum, koji se javlja zbog sumiranja doprinosa sabiraka različitih znakova u perturbacijama V_i^c , V_f^c i $V_f^c - \Delta V_{12}$. Ovaj minimum uslovljavaju pojavu nefizičkog pika, na uglovima rasejanja i upadnim energijama na kojima eksperimentalno nisu ni detektovani. Na slikama 3.1-3.7 ovi minimumi se javljaju na uglovima 0.47, 0.34, 0.33, 0.31, 0.29, 0.28 i 0.27 mrad respektivno, dok se pikovi javljaju na uglovima 0.79, 0.58, 0.55, 0.50, 0.48, 0.47 i 0.43 mrad respektivno. Odavde se zaključuje da se sa porastom upadne energije pikovi i minimumi

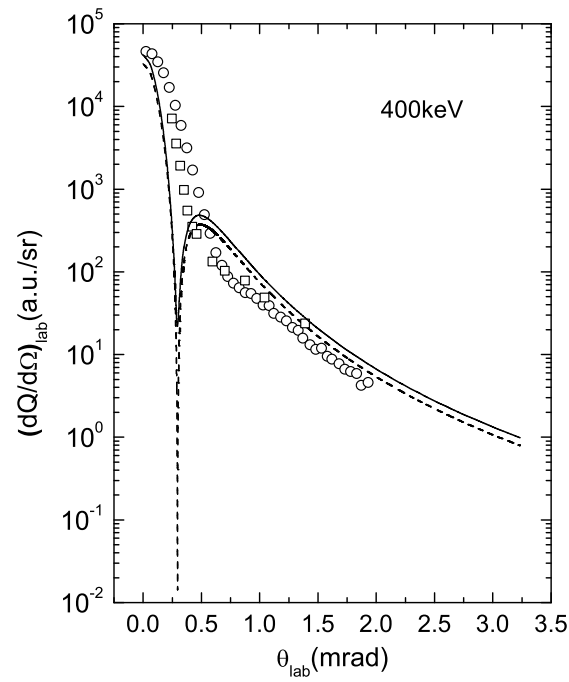


Slika 3.3: Isto kao na slici 3.2 osim energije koja je 200 keV. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Mergel *et al.* [176]; $\square$ Loftager [177].

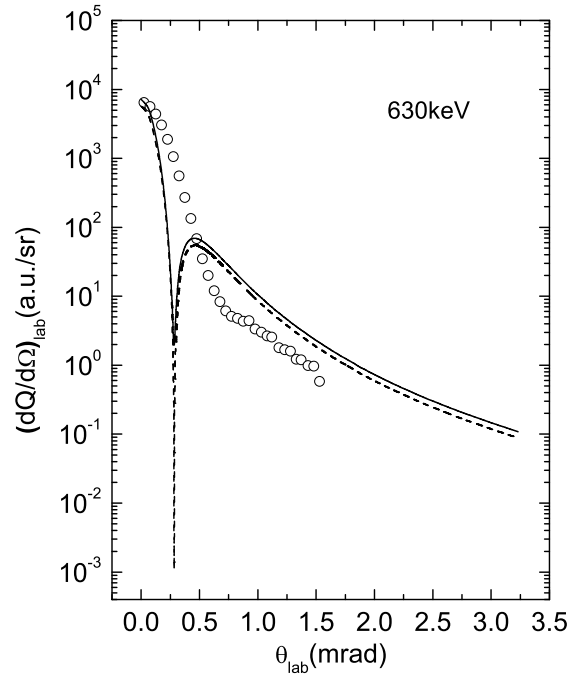
pomeraju ka manjim uglovima rasejanja. Kao što se vidi na upadnoj energiji od 630 keV javlja se nefizički pik na 0.47 mrad koji se samo slučajno poklapa sa Thomas-ovim pikom koji na ovoj energiji eksperimentalno nije ni detektovan. Naime, Thomas [179] je na osnovu klasičnog razmatranja 1927 godine sugerisao dvostepeni mehanizam rasejanja koji dovodi do zahvata elektrona u sudaru brzih projektila (visoke upadne energije) sa lakom metom. U jednom procesu projektil se sudara sa elektronom mete, usled čega elektron počinje da se kreće pod uglom od 60° u odnosu na upadni pravac projektila sa brzinom gotovo istom sa brzinom projektila. U narednom koraku elektron se elastično rasejava na jezgru mete opet pod uglom od 60° u odnosu na svoj prvobitni pravac i počinje da se kreće paralelno sa projektilom, pri čemu projektil i elektron postaju vezani. Ovaj proces dvostrukog rasejanja se simbolički označava sa P-e-T, za koji Thomas-ov pik u diferencijalnom efikasnom preseku postoji za ugao rasejanja od 0.47 mrad za proton kao projektil. U drugom mogućem procesu elektron mete usled sudara sa projektilom počinje da se kreće pod uglom od 45° u odnosu na upadni pravac projektila sa približno istom brzinom kao projektil. U narednom sudarnom procesu ovaj elektron se rasejava na drugom elektronu pod uglom od 45° i počinje da se kreće paralelno sa projektilom, pri čemu opet grade vezani sistem. Za ovaj P-e-e proces Thomas-ov pik u diferencijalnom preseku za proton kao projektil se javlja na uglu od 0.45 mrad. Diferencijalni preseki za post formu bez interakcije ΔV_{12} na slikama 3.8 i 3.9 takodje sadrže nefizičke minimume (0.36 i 0.30 respektivno) i pikove (0.68 i 0.42 respektivno), koji se pomeraju ka manjim uglovima rasejanja sa porastom upadne energije. Na slici 3.10 prikazan je diferencijalni efikasni presek u prior formi CB1-4B metoda za zahvat u $2p$ stanje atoma vodonika na upadnoj energiji projektila od 100 keV. Ovde se takodje uočava nefizički minimum (0.39 mrad) i njegov prateći pik (1.97 mrad).



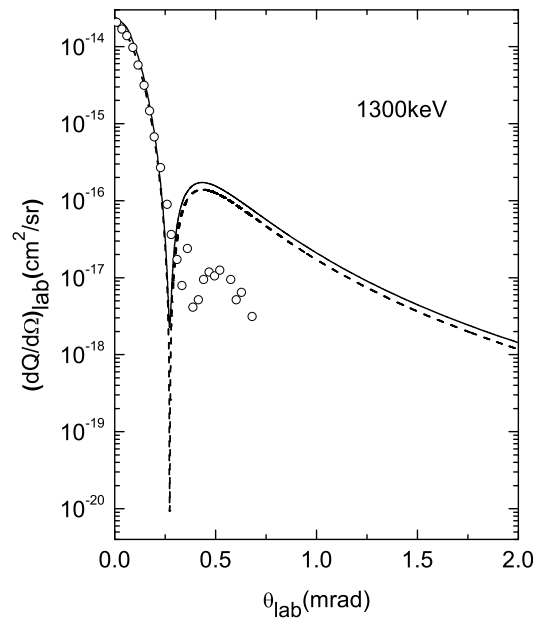
Slika 3.4: Isto kao na prethodnoj slici samo za energiju 300 keV. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Mergel *et al.* [176]; $\square$ Loftager [177].



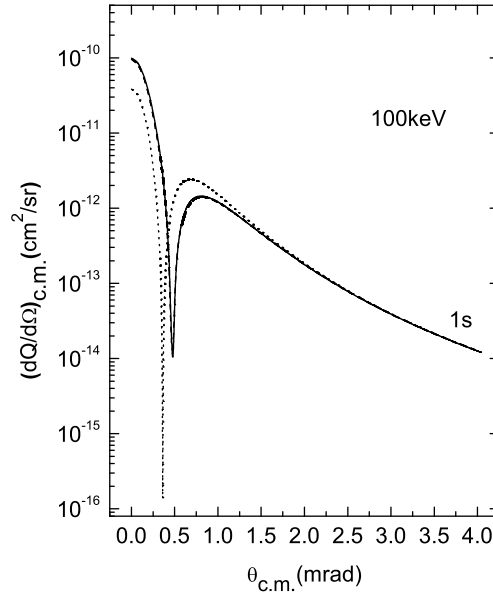
Slika 3.5: Isto kao na prethodnoj slici samo za energiju 400 keV. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Mergel *et al.* [176]; $\square$ Loftager [177].



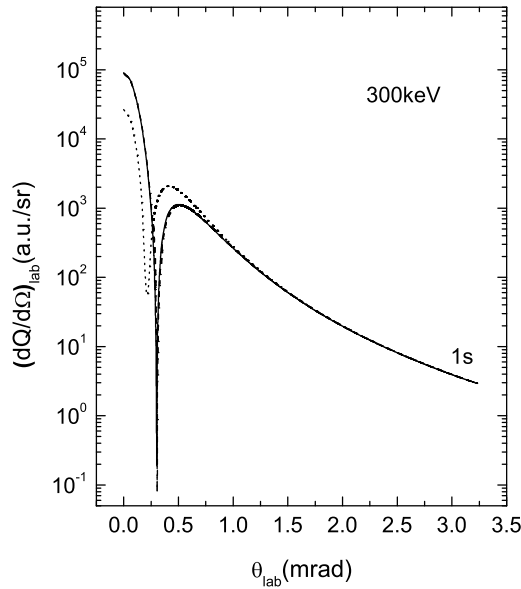
Slika 3.6: Isto kao na prethodnoj slici samo za energiju 630 keV. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Mergel *et al.* [176].



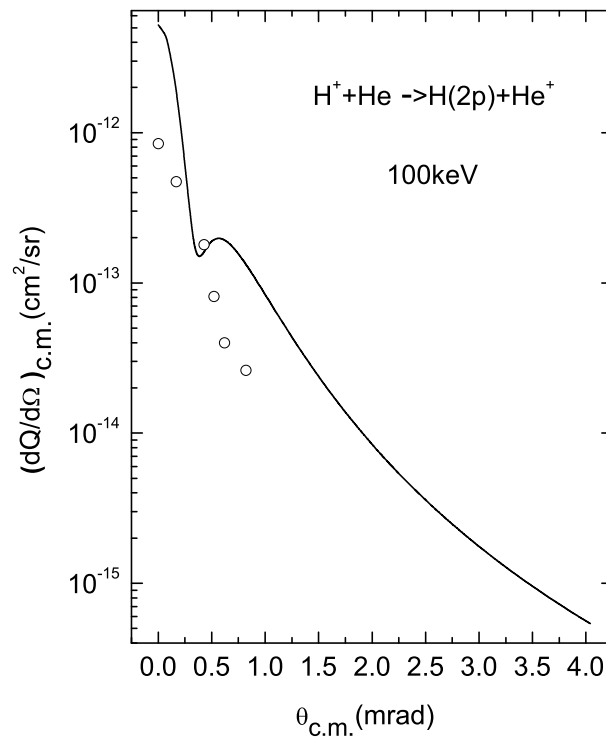
Slika 3.7: Diferencijalni efikasni presek (cm^2/sr) u laboratorijskom sistemu reference, u funkciji ugla rasejanja $\theta(\text{mrad})$ za upadnu energiju protona od 1300 keV. Puna linija predstavlja $dQ_{tot}^-/d\Omega$ presek u prior formi CB1-4B metoda koji je izračunat u skladu sa relacijom (3.4). Isprekidana linija predstavlja diferencijalni efikasni presek za elektronski zahvat u 1s stanje H atoma, takodje u prior formi CB1-4B metoda. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Fischer *et al.* [178].



Slika 3.8: Diferencijalni efikasni presek (cm^2/sr) za zahvat elektrona u $1s$ stanje H atoma u sistemu centra mase, u funkciji ugla rasejanja $\theta(\text{mrad})$ za energiju protona od 100 keV. Puna linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^-/d\Omega$ presek u prior formi, isprekidana linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^+/d\Omega$ presek u post formi sa ΔV_{12} i tačkasta linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^{(0)}/d\Omega$ presek u post formi bez ΔV_{12} , CB1-4B metoda.



Slika 3.9: Diferencijalni efikasni presek (a.u./sr) za zahvat elektrona u $1s$ stanje H atoma u laboratorijskom sistemu reference, u funkciji ugla rasejanja $\theta(\text{mrad})$ za energiju protona od 300 keV. Puna linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^-/d\Omega$ presek u prior formi, isprekidana linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^+/d\Omega$ presek u post formi sa ΔV_{12} i tačkasta linija predstavlja diferencijalni $dQ_{1s}^{(0)}/d\Omega$ presek u post formi bez ΔV_{12} , CB1-4B metoda.



Slika 3.10: Diferencijalni efikasni presek (cm^2/sr) za zahvat elektrona u $2p$ stanje H atoma u sistemu centra mase, u funkciji ugla rasejanja θ (mrad) za energiju protona od 100 keV. Puna linija predstavlja diferencijalni efikasni presek izračunat u prior formi CB1-4B metode. Eksperimentalni podaci: $\circ$ Seely *et al.* [180].

Zaključak

Visoko energijska četvoročestična prva Born-ova aproksimacija (CB1-4B) sa korektnim graničnim uslovima je dosledno formulisana perturbaciona teorija prvog reda za razmenu naelektrisanja, polazeći od osnovnih principa atomskih rasejanja [1, 4]. Ovde odredba dosledan ukazuje da su neperturbovana kanalna (ulazna i izlazna) stanja i perturbacioni potencijali određeni u saglasnosti sa Coulomb-ovim graničnim uslovima za dva naelektrisana agregata (projektil-meta), koji su široko razdvojeni [1, 4]. Kao što je rečeno CB1-4B metod je potpun kvantno-mahanički četvoročestični formalizam, jer eksplicitno razmatra svaku pojedinačnu četsicu i sve interakcije među njima u sudarima koji su istraživani. CB1-4B metoda u post i prior formi je korišćena za izračunavanje efikasnog preseka za jednostruki elektronski zahvat iz atoma helijuma od strane ogoljenih projektila i to kako za veliki broj pojedinačnih finalnih stanja okarakterisana kvantnim brojevima $\{n^f, l^f, m^f\}$, tako i za zahvat sumiran po svim finalnim stanjima. Dakle preseki su dati za konkretne vrednosti finalnih kvantnih brojeva n^f , l^f , m^f , zatim preseki sumirani po m^f za dato n^f i l^f kao i preseki sumirani po m^f i l^f za fiksno n^f .

U tom cilju, u prior formi CB1-4B aproksimacije izvršili smo analitičku redukciju originalnog devetodimenzionalnog integrala za amplitudu prelaza na jednostavniju i efikasniju dvodimenzionalnu numeričku kvadraturu preko realnih varijabli, koje su ostale posle Feynman-ove parametrizacije uobičajna dva imenioca koji se susreću u impulsnom prostoru. U slučaju sudara protona sa helijumom dobijeni teorijski rezultati su poredjeni sa eksperimentalnim podacima koji su dostupni za nekoliko parcijalnih preseka, kao i za zahvat elektrona u sva finalna stanja $H(\Sigma)$. Primećuje se da CB1-4B metod odlično predviđa odgovarajuće zaključke iz merenja. Ista metoda u prior formi je takodje primenjena za jednostruku izmenu naelektrisanja u sudarima He^{2+} , Li^{3+} , Be^{4+} , B^{5+} i C^{6+} jona sa helijumom na srednjim i visokim upadnim energijama. Maksimalno n^f u ovom slučaju ide od $n^f = 4$ za He^{2+} i Li^{3+} jone do $n^f = 7$ za C^{6+} jone. Kao što se očekivalo, zahvat u stanje koje ima glavni kvantni broj $n^f = 1$ je dominantan na višim razmatranim upadnim energijama, dok su doprinosi od pobudjenih stanja značajniji na nižim energijama. S obzirom na raspodelu preseka za različite ugaone momente l^f izračunate za fiksni glavni kvantni broj n^f , prezentovani teorijski podaci pokazuju da je na višim proučavanim upadnim energijama, najveći efikasni preseki su dobijeni za s finalna stanja, dok je na nižim energijama, glavni doprinos za jednostruki elektronski zahvat dobijen od stanja za koja je $l^f \neq 0$. Generalno, rezultati iz CB1-4B metoda su bili sistematski u veoma dobroj saglasnosti sa raspoloživim eksperimentalnim podacima za H^+ , He^{2+} i Li^{3+} projekte u širokom intervalu upadnih energija. Za druge višestruko naelektrisane projekte (B^{5+} i C^{6+}), na višim upadnim energijama CB1-4B metod malo nadmašuje merenja. Ova razlika se uglavnom pripisuje zanemarivanju sprege između zahvatnih i jonizacionih kanala, koji su važni u ovoj oblasti energije.

Istraživali smo i problem uzajamne neutralizacije u $H^+ + H^-$ sudaru, koja se ostvaruje jednostrukim zahvatom elektrona iz H^- jona, na upadnim energijama u intervalu od 10 do 3000 keV pomoću CB1-4B aproksimacije u prior formi. Naši proračuni daju detaljne informacije o parcijalnim presecima za svaku pojedinačnu $n^f l^f$ ljusku u koju se zahvata elektron, koji nisu

upoređivani sa eksperimentalnim podacima zbog nepostojanja istih. Ukupni presek koji je dobijen sabiranjem parcijalnih je u odličnom slaganju sa raspoloživim merenjima. Takodje je pokazano da statičke korelacije u ovoj interakciji su veoma važne za sam zahvat, naročito na većim upadnim energijama. Naime, dobijeni ukupni preseki korišćenjem talasne funkcije Silverman-a *et al.* [16] za osnovno stanje H^- jona u ulaznom kanalu, sa porastom upadne energije protona sve više su ispod rezultata dobijenih pomoću Löwdin-ove [15] talasne funkcije.

Sa druge strane proučen je problem jednostruke izmene naelektrisanja u sudaru između ogoljenih jezgara i helijumu sličnog atomskog sistema pomoću četvoročestične granično korektna prve Born-ove aproksimacije (CB1-4B) u post formi. Obimna analitička studija o post verziji amplitude prelaza za elektronski zahvat u proizvoljna $n^f l^f m^f$ finalna stanja projektila je uradjena. Post forma amplitude prelaza je svedena na oblik gde je potrebno uraditi numeričku integraciju po realnim promenljivima kojih ima pet. Za zahvat u osnovno i za zahvat u pobudjena stanja, posebna pažnja je posvećena proceni uloge ekranirane dinamičke korelacije koja je predstavljena kratkodometnim potencijalom $\Delta V_{12} = V_{12} - V_{12}^\infty$. Interakcija V_{12} je medjuelektronski Coulomb-ov odbojni $1/r_{12}$ potencijal, koji je u kratkodometnom potencijalu ΔV_{12} ekraniran sa V_{12}^∞ . Potencijal V_{12}^∞ je asimptotska vrednost kojoj teži $1/r_{12}$, kada rastojanje između zahvaćenog elektrona i preostalog vezanog elektrona u ostatku mete teži beskonačnosti.

Predstavljena izračunavanja uključuju parcijalne i totalne efikasne preseke za jednostruki zahvat za $H^+ - He$ sudare na srednjim i visokim upadnim energijama. Dobijeni teorijski rezultati su poredjeni sa odgovarajućim eksperimentalnim podacima kako za zahvat elektrona u pobudjena stanja atoma vodonika, kao što su $H(2s)$, $H(2p)$, $H(3s)$, $H(3p)$, $H(3d)$ i $H(4s)$, tako i za zahvat sumiran po svim finalnim stanjima atoma vodonika $H(\Sigma)$. Generalno je utvrđeno da CB1-4B metod odlično predviđa odgovarajuće rezultate iz merenja. Značaj ekraniranih dinamičkih korelacija je proučavan uključivanjem i isključivanjem ΔV_{12} , koji se pojavljuje u kompletnom perturbacionom potencijalu V_f^c post verzije T_{if}^+ amplitude prelaza. Dobijeni rezultati ukazuju da su ove elektronske korelacije veoma važne za zahvat kako u osnovno tako i za zahvat u pobudjena stanja. Osim toga, mi smo pokazali da se doprinos od ΔV_{12} povećava sa povećanjem upadne energije u odnosu na ulogu preostalih potencijala u V_f^c . Takozvano post-prior neslaganje za izmenu naelektrisanja je veoma nepoželjna karakteristika mnogih teorijskih metoda. Dva su razloga ovog neslaganja: nejednaki perturbacioni potencijal u ulaznom i izlaznom kanalu, kao i nepostojanje tačne talasne funkcije vezanog stanja helijumu sličnih atomskih sistema. U literaturi o brzim jon-atomskim sudarima od strane mnogih metoda je navodno detektovano post-prior neslaganje, koje međjutim najverovatnije postoji zbog zanemarivanja medjuelektronske interakcije (zbog lakšeg izračunavanja) u ukupnom perturbacionom potencijalu V_f^c u post amplitudi prelaza. Za procenu statusa CB1-4B aproksimacije u vezi sa ovim važnim pitanjem, mi smo poredili prior i post preseke izračunate u ovoj metodi za $H^+ - He$ sudare. Uprkos postojeće razlike između inicijalnog i finalnog perturbacionog potencijala ($V_i^c \neq V_f^c$), naši proračuni pokazuju da su rezultati za prior i post efikasne preseke (kako parcijalne tako i ukupne) skoro indentični, pod uslovom da je elektron-elektron potencijal $1/r_{12}$ uračunat u V_f^c . Osim toga, pokazano je da postoji neznatna razlika između preseka izračunatih sa dve različite aproksimativne talasne funkcije (statičke korelacije su gotovo podjednako uračunate u obadve funkcije) za osnovno stanje helijuma, bez obzira da li je prior ili post forma CB1-4B metoda korišćena. Ovi nalazi predstavljaju odlične osobine CB1-4B aproksimacije, posebno imajući u vidu da veliko post-prior neslaganje često muči skoro sve raspoložive aproksimacije izobličenih talasa.

Diferencijalni efikasni preseki koji su uradjeni u CB1-4B metodi za zahvat elektrona iz He od strane H^+ projektila, pokazuju da dobijeni rezultati u prior formi sumirani po svim finalnim

doprinos pobudjenih stanja postaje sve veći, dok na manjim dominira zahat u $1s$ stanje. Za zahvat u $1s$ stanje poredjeni su prior, post sa i post bez ekranirane dinamičke korelacije ΔV_{12} . I u ovom slučaju se preseći u post sa ΔV_{12} i prior formi CB1-4B aproksimacije gotovo ne razlikuju na svim uglovima rasejanja, što je i očekivano. Na nižim uglovima rasejanja post preseći bez ΔV_{12} su ispod prior preseka i post preseka sa ΔV_{12} , dok na većim uglovima počinju da teže jedni drugima. Takodje je uočena pojava nefizičkih minimuma a samim tim i pikova koji se pomeraju ka nižim uglovima rasejanja sa povećanjem upadne energije protona.

Zaključujemo da CB1-4B aproksimacija daje pouzdane preseke za jednostruki elektronski zahvat za različite projekte prezentovane ovde duž širokog energijskog opsega.

Prilog A

Relaciju:

$$2\pi\delta(E - E') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-E')t} = \frac{2\varepsilon}{(E - E' + i\varepsilon)(E - E' - i\varepsilon)}, \quad (\text{A.1})$$

ćemo pokazati na dva načina.

Prvo možemo izračunati integral $\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-E')t}$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E-E')t} &= \int_{-\infty}^0 dt e^{i(E-E')t} + \int_0^{+\infty} dt e^{i(E-E')t} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{i(E-E'-i\varepsilon)t} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} dt e^{i(E-E'+i\varepsilon)t} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i(E - E' - i\varepsilon)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{i(E-E'-i\varepsilon)t} \Big|_{t=-\infty}^{t=0} \\ &\quad + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{i(E - E' + i\varepsilon)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} e^{i(E-E'+i\varepsilon)t} \Big|_{t=0}^{t=+\infty} \\ &= \frac{1}{i(E - E' - i\varepsilon)} - \frac{1}{i(E - E' + i\varepsilon)} \\ &= \frac{2\varepsilon}{(E - E' + i\varepsilon)(E - E' - i\varepsilon)}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

a to je upravo relacija (A.1). Za drugi način iskoristimo definiciju Dirack-ove δ funkcije:

$$\delta(E - E') = \begin{cases} \infty & E = E' \\ 0 & E \neq E' \end{cases}, \quad (\text{A.3})$$

odakle sledi i:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta(E - E') = 1 \Rightarrow 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta(E - E') = 2\pi. \quad (\text{A.4})$$

Izračunajmo sada integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{2\varepsilon}{(E - E' + i\varepsilon)(E - E' - i\varepsilon)}, \quad (\text{A.5})$$

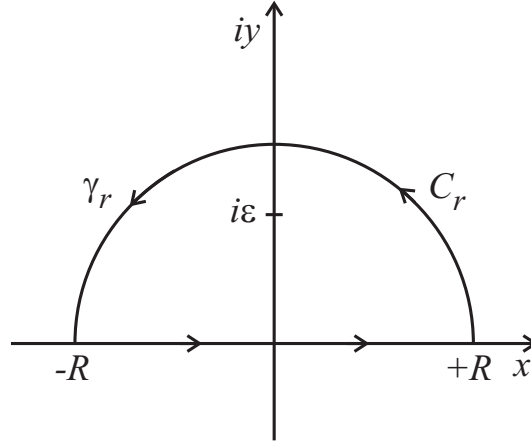
zašta ćemo iskoristiti kompleksnu analizu. Uvedimo najpre smenu $E - E' = x$, nakon čega imamo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{2\varepsilon}{(E - E' + i\varepsilon)(E - E' - i\varepsilon)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{2\varepsilon}{(x + i\varepsilon)(x - i\varepsilon)}. \quad (\text{A.6})$$

Uzmimo sada pomoćni integral:

$$\int_{\gamma_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}, \quad (\text{A.7})$$

za čiju podintegralnu funkciju vidimo da ima dva prosta pola (polovi prvog reda) u $z = -i\varepsilon$ i $z = i\varepsilon$, tako da ćemo izabrati konturu γ_r koja je pozitivno orjentisana oko jednog od ova dva pola, na primer $z = i\varepsilon$, kao na slici A.1.



Slika A.1:

Sada imamo:

$$\int_{\gamma_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = \int_{-R}^{+R} dx \frac{2\varepsilon}{(x+i\varepsilon)(x-i\varepsilon)} + \int_{C_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}. \quad (\text{A.8})$$

Sa druge strane na osnovu Cauchy-eve teoreme o ostacima (reziduumima) imamo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} &= \text{res}_{i\varepsilon} \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} \\ &= \lim_{z \rightarrow i\varepsilon} ((z-i\varepsilon) \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}) = \frac{1}{i} \Rightarrow \int_{\gamma_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = 2\pi. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Ukoliko uzmemo da $R \rightarrow \infty$ dobićemo:

$$\int_{\gamma_{r1}} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{2\varepsilon}{(x+i\varepsilon)(x-i\varepsilon)} + \int_{C_{r1}} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}, \quad (\text{A.10})$$

gde su simbolima γ_{r1} i C_{r1} označene asimtotske forme kontura γ_r i C_r respektivno, kada $R \rightarrow \infty$. Podintegralna funkcija $\frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}$ u izrazu (A.9) je diferencijabilna u čitavoj oblasti izmedju kontura γ_{r1} i γ_r , tako da je na osnovu Cauchy-eve integralne teoreme:

$$\int_{\gamma_r} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = \int_{\gamma_{r1}} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = 2\pi. \quad (\text{A.11})$$

Izračunajmo sada integral duž konture C_{r1} :

$$\begin{aligned} \left| \int_{C_{r1}} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} \right| &\leq 2\varepsilon \int_{C_{r1}} |dz| \frac{1}{|(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)|} = 0 \\ &\rightarrow \int_{C_{r1}} dz \frac{2\varepsilon}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)} = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

gde smo iskoristili činjenicu $|\frac{1}{(z+i\varepsilon)(z-i\varepsilon)}|$ teži 0 na beskonačnosti.

Konačno na osnovu izraza (A.10), (A.11) i (A.12) imamo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{2\varepsilon}{(x+i\varepsilon)(x-i\varepsilon)} = 2\pi, \quad (\text{A.13})$$

što je trebalo i pokazati.

Prilog B

Sferni harmonici su ovde korišćeni u istom obliku kao i u referenci [72]:

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \mathcal{P}_{l,m}(\cos \theta) \Phi_m(\phi), \quad (\text{B.1})$$

gde je $\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$. Veličina $\mathcal{P}_{lm}$ je asocirana normalizovana Legendre-ova funkcija prve vrste:

$$\mathcal{P}_{l,m}(z) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (1-z^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dz} \right)^{l+m} \frac{(z^2-1)^l}{2^l l!}, \quad (\text{B.2})$$

sa simetrijom u odnosu na izmenu znaka magnetnog kvantnog broja $\mathcal{P}_{l,-m}(z) = (-1)^m \mathcal{P}_{l,m}(z)$ i $Y_{l,-m}(z) = (-1)^m Y_{l,m}^*(z)$. Desna strana jednačine (B.2) je definisana za $l+m \geq 0$, to jest $m \geq -l$. Dakle, jednačina (B.2) važi i za pozitivne i negativne vrednosti m za koju važi $-l \leq m \leq l$.

Asocirane normalizovane Legendre-ove funkcije prve vrste mogu se izraziti preko asocirane Legendre-ove funkcije $P_{l,m}(z) = (1-z^2)^{m/2} (d/dz)^{l+m} [(z^2-1)^l/2^l l!]$:

$$\mathcal{P}_{l,m}(z) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{l,m}(z). \quad (\text{B.3})$$

Ove definicije polinoma $P_{l,m}$ i $\mathcal{P}_{l,m}$ važe za nulu, pozitivne i negativne celobrojne vrednosti m , gde je $|m| \leq l$. Štaviše, polinomi $P_{l,-m}$ i $P_{l,m}$, koji zadovoljavaju istu diferencijalnu jednačinu, razlikuju se samo za multiplikativnu konstantu [77]:

$$P_{l,-m}(z) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_{l,m}(z). \quad (\text{B.4})$$

Prilog C

Kao što je već rečeno da je $m_1^f + m_2^f = m^f$, $Y_{l_2^f m_2^f}(\hat{v}) = \sqrt{(2l_2^f + 1)/(4\pi)} \delta_{0, m_2^f}$, odakle sledi:

$$m_1^f = m^f, \quad (C.1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{l^f m^f}(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha) &= \sum_{l_1^f=0}^{l^f} \sum_{m_1^f=-l_1^f}^{l_1^f} \sqrt{\frac{2l_2^f + 1}{4\pi}} (1-t)^{l_2^f} v^{l_2^f} \\ &\times \left[4\pi \frac{2l^f + 1}{(2l_1^f + 1)(2l_2^f + 1)} \frac{(l^f + m^f)!}{(l_1^f + m_1^f)!} \frac{(l^f - m^f)!}{(l_1^f - m_1^f)!(l_2^f!)^2} \right]^{1/2} \mathcal{Y}_{l_1^f m_1^f}(\vec{q}) \delta_{m_1^f, m^f} \\ &= \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (1-t)^{l_2^f} (l_1^f | l^f m^f) \frac{v^{l_2^f}}{\sqrt{4\pi}} \mathcal{Y}_{l_1^f m^f}(\vec{q}). \end{aligned} \quad (C.2)$$

Konjugacijom ovog solid harmonika imamo:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha) = \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (1-t)^{l_2^f} (l_1^f | l^f m^f) \frac{v^{l_2^f}}{\sqrt{4\pi}} \mathcal{Y}_{l_1^f m^f}^*(\vec{q}), \quad (C.3)$$

gde je:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q}) = q^{l_1^f} Y_{l_1^f m^f}^*(\hat{q}), \quad (C.4)$$

$$Y_{l_1^f m^f}^*(\hat{q}) = (-1)^{-m^f} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{q}). \quad (C.5)$$

Relacija (C.5) važi za sve vrednosti magnetnog kvantnog broja ($m^f \geq 0$, $m^f < 0$) finalnog stanja vodoniku sličnog sistema, što se lako može pokazati na sledeći način:

$$\begin{aligned} m^f \geq 0 &\Rightarrow Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{q}) = (-1)^{m^f} Y_{l_1^f m^f}^*(\hat{q}) \\ &\Rightarrow Y_{l_1^f m^f}^*(\hat{q}) = (-1)^{-m^f} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{q}) \end{aligned} \quad (C.6)$$

$$\begin{aligned} m^f < 0 &\Rightarrow Y_{l_1^f m^f}(\hat{q}) = Y_{l_1^f -|m^f|}(\hat{q}) = (-1)^{-m^f} Y_{l_1^f |m^f|}^*(\hat{q}) \\ &\Rightarrow Y_{l_1^f m^f}^*(\hat{q}) = (-1)^{-m^f} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{q}). \end{aligned} \quad (C.7)$$

Sada korišćenjem relacija (C.5) i (C.6) možemo napisati izraz (C.3) u konačnoj formi:

$$\mathcal{Y}_{l^f m^f}^*(\vec{q} + \vec{Q}_\alpha) = \sqrt{4\pi} \sum_{l_1^f=|m^f|}^{l^f} (1-t)^{l_2^f} \Omega(l_1^f, \vec{v}) \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{q}), \quad (C.8)$$

$$\Omega(l_1^f, \vec{v}) = (l_1^f | l^f m^f) \frac{(-1)^{-m^f}}{\sqrt{4\pi}} v^{l_2^f}. \quad (C.9)$$

Prilog D

Kao što je rečeno B -funkcija [78] je data sa:

$$B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta) = \hat{k}_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta) \mathcal{Y}_{l_1^f, -m^f}(\vec{R}), \quad (\text{D.1})$$

gde su:

$$\hat{k}_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta) = \sqrt{2/\pi}(R\Delta)^{\mu_\nu-1/2} K_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta), \quad (\text{D.2})$$

$$K_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta) = \sqrt{\frac{\pi}{2R\Delta}} e^{-R\Delta} \sum_{k=0}^{\mu_\nu-1} \frac{(\mu_\nu + k - 1)!}{k!(\mu_\nu - k - 1)!(2R\Delta)^k}. \quad (\text{D.3})$$

Zamenom izraza (D.3) u (D.2) a nakon toga (D.2) u (D.1) dobijamo:

$$\hat{k}_{\mu_\nu-1/2}(R\Delta) = \sum_{k=0}^{\mu_\nu-1} \frac{(\mu_\nu + k - 1)!}{k!(\mu_\nu - k - 1)!} 2^{-k} (R\Delta)^{\mu_\nu-k-1} e^{-R\Delta}, \quad (\text{D.4})$$

$$\begin{aligned} B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta) &= \sum_{k=0}^{\mu_\nu-1} \frac{(\mu_\nu + k - 1)!}{k!(\mu_\nu - k - 1)!} 2^{-k} \Delta^{\mu_\nu-k-1} R^{\mu_\nu+l_1^f-k-1} \\ &\quad \times e^{-R\Delta} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{\vec{R}}). \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Uvedimo smenu sumacionog indeksa k na sledeći način:

$$k = \mu_\nu - p_r - 1 \Rightarrow \begin{cases} k = 0 \Rightarrow p_r = \mu_\nu - 1 \\ k = \mu_\nu - 1 \Rightarrow p_r = 0 \end{cases}, \quad (\text{D.6})$$

gde je p_r novi sumacioni indeks. Sada B -funkcija dobija konačnu formu:

$$B_{l_1^f, -m^f}^{(\mu_\nu)}(\vec{R}\Delta) = \sum_{p_r=0}^{\mu_\nu-1} b_{p_r}^{\mu_\nu} \Delta^{p_r} \chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n)}(\vec{R}\Delta), \quad (\text{D.7})$$

gde su:

$$b_{p_r}^{\mu_\nu} = \frac{(2\mu_\nu - p_r - 2)! 2^{p_r+1-\mu_\nu}}{(\mu_\nu - p_r - 1)! p_r!}, \quad p_n = p_r + l_1^f + 1, \quad (\text{D.8})$$

$$\chi_{l_1^f, -m^f}^{(p_n)}(\vec{R}\Delta) = R^{p_n-1} e^{-R\Delta} Y_{l_1^f, -m^f}(\hat{\vec{R}}). \quad (\text{D.9})$$

Poslednji izraz predstavlja već pomenutu nenormalizovanu Slater-ovu orbitalu [72, 78].

Literatura

- [1] D. Dollard, J. Math. Phys. **5**, 729 (1964).
- [2] I.M. Cheshire, Proc. Phys. Soc. London **84**, 89 (1964).
- [3] Dž. Belkić, R. Gayet and A. Salin, Phys. Rep. **56**, 279 (1979).
- [4] Dž. Belkić, *Principles of Quantum Scattering Theory* (Institute of Physics, Bristol, 2004).
- [5] J. McGuire, *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [6] Dž. Belkić, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 1731 (1997).
- [7] Dž. Belkić, Nucl. Instr. Meth. B **124**, 365 (1997).
- [8] J.M. Monti, O.A. Fojón, J. Hanssen and R.D. Rivarola, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **42**, 195201 (2009).
- [9] Dž. Belkić, I. Mančev and Volker Mergel, Phys. Rev. A **55**, 378 (1997).
- [10] Dž. Belkić, I. Mančev and N. Milojević, in *Theory of Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, edited by Dž. Belkić, Special Issue: Adv. Quantum Chem. **65**, 339 (2013).
- [11] M. Baxter and T. Kirchner, Phys. Rev. A **87**, 062507 (2013).
- [12] M.S. Pindzola, T.G. Lee and J. Colgan, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44**, 205204 (2011).
- [13] Dž. Belkić, R. Gayet, J. Hanssen, I. Mančev and A. Nuñez, Phys. Rev. A **56**, 3675 (1997).
- [14] I. Mančev, Phys. Rev. A **60**, 351 (1999).
- [15] P. Löwdin, Phys. Rev. **90**, 120 (1953).
- [16] J.N. Silverman, O. Platas, F.A. Matsen, J.Chem.Phys. **32**, 1402 (1960); C. Eckart, Phys.Rev. **36**, 878 (1930).
- [17] R.N. Hill, Phys. Rev. Lett. **38**, 643 (1977).
- [18] E.A. Hylleraas, Z. Phys. **54**, 347 (1929).
- [19] E.A. Hylleraas, Z. Phys. **65**, 209 (1930).
- [20] P. Pluvinage, Ann. Phys. NY **5**, 145 (1950).
- [21] P. Pluvinage, J. Phys. Radium **12**, 789 (1951).
- [22] T. Kato, Trans. Amer. Math. Soc. **70**, 212 (1951).

- [23] T. Kato, Phys. Rev. **77**, 413 (1950).
- [24] N.W. Bazley, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **40**, 850 (1959).
- [25] S. Huzinaga, Rev. Phys. **122**, 131 (1961).
- [26] E. Clementi and C. Roetti, Data Nucl. Data Tables **14**, 177 (1974).
- [27] L.C. Green, M.M. Mulder, M.N. Lewis and J.W.Jr. Woll, Phys. Rev. **93**, 757 (1954).
- [28] A.W. Weiss, Phys. Rev. **162**, 71 (1969).
- [29] A.W. Weiss, Adv. At. Mol. Phys. **9**, 1 (1973).
- [30] C.C.J. Roothan, Rev. Mod. Phys. **32**, 179 (1960).
- [31] C.C.J. Roothan, Rev. Mod. Phys. **23**, 69 (1951).
- [32] H. Bethe and E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Atoms* (Plenum, New York 1977).
- [33] R.J. Tweed, J. Phys. B **5**, 810 (1972).
- [34] F.W.Jr. Byron and C.J. Joachain, Phys. Rev. Lett. **16**, 1139 (1966).
- [35] C.J. Joachain and R. Vanderpoorten, Physica **46**, 333 (1970).
- [36] M. Rotenberg and J. Stein, Phys. Rev. **182**, 1 (1969).
- [37] H. Bachau, J. Phys. B **17**, 1771 (1984).
- [38] G.W.F. Drake, Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B **31**, 7 (1988).
- [39] G. Taner, K. Richter and J.-M. Rost, Rev. Mod. Phys. **72**, 497 (2000).
- [40] Dž. Belkić, I. Mančev and J. Hanssen, Rev. Mod. Phys. **80**, 249 (2008).
- [41] Dž. Belkić, *Quantum Theory of High-Energy Ion-Atom Collisions* (Taylor & Francis, London 2009).
- [42] Dž. Belkić, Phys. Rev. A **47**, 189 (1993).
- [43] Dž. Belkić, J. Phys. B **26**, 497 (1993).
- [44] I. Mančev, Phys. Scr. **51**, 762 (1995).
- [45] I. Mančev, Phys. Rev. A **54**, 423 (1996).
- [46] I. Mančev and N. Milojević, Phys. Rev. A **81**, 022710 (2010).
- [47] I. Mančev, N. Milojević and Dž. Belkić, Phys. Rev. A **86**, 022704 (2012).
- [48] I. Mančev, N. Milojević and Dž. Belkić, Few-Body Syst. **54**, 1889 (2013).
- [49] I. Mančev, N. Milojević and Dž. Belkić, Europhysics Letters (EPL) **103**, 23001 (2013).
- [50] I. Mančev, N. Milojević and Dž. Belkić, Phys. Rev. A **88**, 052706 (2013).
- [51] Dž. Belkić, Phys. Rev. A **43**, 4751 (1991).
- [52] Dž. Belkić, Europhys. Lett. **7**, 323 (1988).

- [53] J.R. Oppenheimer, Phys. Rev. **31**, 349 (1928).
- [54] H.C. Brinkman and H.A. Kramers, Proc. K. Ned. Akad. Wet. **33**, 973 (1930).
- [55] J.E. Miraglia, R.D. Piacentini, R.D. Rivarola and A. Salin, J. Phys. B **14**, L197 (1981).
- [56] P.R. Simony and J.H. McGuire, J. Phys. B **14**, L737 (1981).
- [57] J.M. Wadehra, R. Shakeshaft and J.H. Macek, J. Phys. B **14**, L767 (1981).
- [58] P.R. Simony, J.H. McGuire and J. Eichler, Phys. Rev. A **26**, 1337 (1982).
- [59] J.H. McGuire, J. Eichler and P.R. Simony, Phys. Rev. A **28**, 2104 (1983).
- [60] D.R. Bates and A. Dalgarno, Proc. Phys. Soc. A **65**, 919 (1952).
- [61] D.R. Bates and A. Dalgarno, Proc. Phys. Soc. A **66**, 972 (1953).
- [62] J.D. Jackson and H. Schiff, Phys. Rev. **89**, 359 (1953).
- [63] H. Schiff, Canad. J. Phys. **32**, 393 (1954).
- [64] J.D. Jackson, Proc. Phys. Soc. A **70**, 26 (1957).
- [65] P.J. Kramer, Phys. Rev. A **6**, 2125 (1972).
- [66] S. Datta and S.C. Mukherjee, J. Phys. B **13**, 539 (1980).
- [67] S.K. Datta, D.S.F. Crothers and R. McCarroll, J. Phys. B **23**, 479 (1990).
- [68] K. Fujiwara, J. Phys. Soc. Japan **41**, 1350 (1976).
- [69] C.R. Mandal, S. Datta and S.C. Mukherjee, Phys. Rev. A **24**, 3044 (1981).
- [70] S.C. Mukherjee, K. Bhandra, N.C. Sil and D. Basu, Phys. Lett. **65A**, 285 (1978).
- [71] C. Sinha, S.C. Mukherjee and N.C. Sil, J. Phys. B **12**, 1259 (1979).
- [72] Dž. Belkić and H.S. Taylor, Phys. Rev. A **35**, 1991 (1987).
- [73] Dž. Belkić and H.S. Taylor, Phys. Scr. **39**, 226 (1989).
- [74] Dž. Belkić and H.S. Taylor, Z. Phys. D **1**, 351 (1986).
- [75] L.C. Biedenharn and J.D. Louck, *Angular Momentum in Quantum Physics* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1981).
- [76] B.H. Bransden and C.J. Joachain, *Physics of atoms and molecules* (John Wiley, New York, 1980).
- [77] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic, New York, 1980).
- [78] E. Filter and E.O. Steinborn, Phys. Rev. A **18**, 1 (1978).
- [79] P. Appell and J. Kampe de Fariet, *Functions Hypergeometriques et Hyperspheriques* (Gauthier-Villars, Paris, 1926).
- [80] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1956).

- [81] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling and B. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (Vol. 1)*, Cambridge University Press 1992.
- [82] Dž. Belkić, Phys. Rev. A **37**, 55 (1988).
- [83] Dž. Belkić, S. Saini and H.S. Taylor, Phys. Rev. A **36**, 1601 (1987).
- [84] R. Cline, P.J.M. van der Burgt, W.B. Westerveld and J.S. Risley, Phys. Rev. A **49**, 2613 (1994).
- [85] R.H. Hughes, E.D. Stokes, S.-S. Choe and T.J. King, Phys. Rev. A **4**, 1453 (1971).
- [86] R. Hippler, W. Harbich, H. Madeheim, H. Kleinpoppen and H.O. Lutz, Phys. Rev. A **35**, 3139 (1987).
- [87] R. Hippler, W. Harbich, M. Faust, H.O. Lutz and L.J. Dubé, J. Phys. B **19**, 1507 (1986).
- [88] R.J. Conrads, T.W. Nichols, J.C. Ford and E.W. Thomas, Phys. Rev. A **7**, 1928 (1973).
- [89] J.C. Ford and E.W. Thomas, Phys. Rev. A **5**, 1694 (1972).
- [90] M.C. Brower and F.M. Pipkin, Phys. Rev. A **39**, 3323 (1989).
- [91] R.A. Cline, W.B. Westerveld and J.S. Risley, Phys. Rev. A **43**, 1611 (1991).
- [92] J.L. Edwards and E.W. Thomas, Phys. Rev. A **2**, 2346 (1970).
- [93] B.M. Doughty, M.L. Goad and R.W. Cernosek, Phys. Rev. A **18**, 29 (1978).
- [94] R.H. Hughes, H.R. Dawson and B.M. Doughty, Phys. Rev. **164**, 166 (1967).
- [95] M.B. Shah, P. McCallion and H.B. Gilbody, J. Phys. B **22**, 3037 (1989).
- [96] M.B. Shah and H.B. Gilbody, J. Phys. B **18**, 899 (1985).
- [97] U. Schryber, Helv. Phys. Acta **40**, 1023 (1967).
- [98] E. Horsdal-Pedersen, C.L. Cocke and M. Stockli, Phys. Rev. Lett. **50**, 1910 (1983).
- [99] K.H. Berkner, S.N. Kaplan, G.A. Paulikas and R.V. Pyle, Phys. Rev. **140**, A729 (1965).
- [100] J.F. Williams, Phys. Rev. **157**, 97 (1967).
- [101] P.J. Martin, K. Arnett, D.M. Blankenship, T.J. Kvale, J.L. Peacher, E. Redd, V.C. Sutcliffe, J.T. Park, C.D. Lin and J.H. McGuire, Phys. Rev. A **23**, 2858 (1981).
- [102] L.M. Welsh, K.H. Berkner, S.N. Kaplan and R.V. Pyle, Phys. Rev. **158**, 85 (1967).
- [103] Dž. Belkić, Phys. Scr. **40**, 610 (1989).
- [104] V. Melezhik, J. Cohen and C.-Y. Hu, Phys. Rev. A **69**, 032709 (2004).
- [105] R. Mapleton, Phys. Rev. **122**, 528 (1961).
- [106] H.-K. Kim, M.S. Schöffler, S. Houamer, O. Chuluunbaatar, J.N. Titze, L.Ph.H. Schmidt, T. Jahnke, H. Schmidt-Böcking, A. Galstyan, Yu.V. Popov, and R. Dörner, Phys. Rev. A **85**, 022707 (2012).
- [107] M. Alessi, S. Otronto and P. Focke, Phys. Rev. A **83**, 014701 (2011).

- [108] M. Alessi, N. D. Cariatore, P. Focke, and S. Otranto, Phys. Rev. A **85**, 042704 (2012).
- [109] M. Alessi, S. Otranto and P. Focke, in *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions* (Ed. Dž. Belkić), Book Series “Interdisciplinary Research in Particle Collisions and Quantitative Spectroscopy”, World Scientific Publishing, **1** 27 (2012).
- [110] Dž. Belkić and R. Gayet, J. Phys. B **10**, 1923 (1977).
- [111] G. Deco, J. Maidagan and R. Rivarola, J. Phys. B **17**, L707 (1984).
- [112] R. Samanta, M. Purkait and C.R. Mandal, Phys. Rev. A **83**, 032706 (2011).
- [113] K.M. Dunseath and D.S.F. Crothers, J. Phys. B **24**, 5003 (1991).
- [114] E. Ghanbari-Adivi and H. Ghavaminia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 235202 (2012).
- [115] V. Mergel, R. Dörner, O. Jagutzki, S. Leneinas, S. Nüttgens, L. Spielberger, M. Unverzagt, C.L. Cocke, R.E. Olson, M. Schultz, U. Buck, E. Zanger, W. Theisinger, M. Isser, S. Geiss and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. **74**, 2200 (1995).
- [116] P. Hvelplund, J. Heinemei, E. Horsdal-Pedersen and F.R. Simpson, J. Phys. B **9**, 491 (1976).
- [117] R.D. DuBois, Phys. Rev. A **36**, 2585 (1987).
- [118] N.V. de Castro Faria, F.L. Freire Jr. and A.G. de Pinho, Phys. Rev. A **37**, 280 (1988).
- [119] L.I. Pivovar, V.M. Tabuev and M.T. Novikov, Sov. Phys. JETP **14**, 20 (1962).
- [120] L.I. Pivovar, V.M. Tabuev and M.T. Novikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **41**, 26 (1961).
- [121] M.E. Rudd, T.V. Goffe and A. Itoh, Phys. Rev. A **32**, 2128 (1985).
- [122] H.F. Busnengo, A.E. Martnez, R.D. Rivarola and H. Tawara, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, L805 (1997).
- [123] H.O. Folkerts, F.W. Blik, L. Meng, R.E. Olson, R. Morgenstern, M.V. von Hellermann, H.P. Summers and R.J. Hoekstra, Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27**, 3475 (1994).
- [124] H.P. Summers, M. von Hellermann, P. Breger, J. Frieling, L.D. Horton, R. König, W. Mandl, H. Morsi, R. Wolf, F.J. de Heer, R. Hoekstra and Fritsch, : Atomic Processes in Plasmas ed. E.S. Marmar, J.L. Terry, (New York: American Institute of Physics) 111, (1991).
- [125] Dž. Belkić, Phys. Rev. A **47**, 3824 (1993).
- [126] E. Ghanbari-Adivi, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **44** 165204 (2011).
- [127] O. Voitke, P.A. Závodszky, S.M. Ferguson, J.H. Houck and J.A. Tanis, Phys. Rev. A **57**, 2692 (1998).
- [128] M. M. Sant’Anna, A.C. Santos, L.F. Coelho, G. Jalbert, N.V. de Castro Faria, F. Zappa, P. Focke and Dž. Belkić, Phys. Rev. A **80**, 042707 (2009).
- [129] I.S. Dmitriev, Ya.A. Teplova, Ya.A. Belkova, N.V. Novikov and Yu.A. Fainberg, Atomic Data and Nuclear Data Tables, **96**, 85 (2010); [V.S. Nikolaev, I.S. Dmitriev, L.N. Fateyeva, Ya.A. Teplova, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 989 (1961); Sov. Phys JETP **13**, 695 (1961)].

- [130] H.F. Busnengo, S.E. Corchs, A.E. Martnez and R.D. Rivarola, Phys. Scr. **T62**, 88 (1996).
- [131] H.F. Busnengo, S.E. Corchs, A.E. Martnez and R.D. Rivarola, Phys. Scr. **T73**, 242 (1997).
- [132] R. Hippler, S. Datz, P.D. Miller, P.L. Pepmiller and P.F. Dittner, Phys. Rev. A **35**, 585 (1987).
- [133] R. Anholt, X-Y. Xu, Ch. Stoller, J.D. Molitoris and W.E. Meyerhof, Phys. Rev. A **37**, 1105 (1988).
- [134] W.G. Graham, K.H. Berkner, R.V. Pyle, A.S. Schlachter, J.W. Stearns and J.A. Tanis, Phys. Rev. A **30**, 722 (1984).
- [135] T.R. Dillingham, J.R. Macdonald and P. Richard, Phys. Rev. A **24**, 1237 (1981).
- [136] G.C. Saha, S. Datta and S.C. Mukherjee, Phys. Rev. A **34**, 2809 (1986).
- [137] T. Andersen, Phys. Rep. **394**, 157 (2004).
- [138] J.C. Rienstra-Kiracofe, G.S. Tschumper, H.F. Schaefer, S. Nandi and G.B. Ellison, Chem. Revs. **102**, 231 (2002).
- [139] H.S.W. Massey, *Negative Ions* (Cambridge, London, 1976).
- [140] B.M. Smirnov, *Negative Ions* (Wiley, New York, 1982).
- [141] D.R. Bates, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **27**, 1 (1991).
- [142] D.J. Pegg, Rep. Prog. Phys. **67**, 857 (2004).
- [143] V. Sidis, C. Kubach and D. Fussen, Phys. Rev. Lett. **47**, 1280 (1981).
- [144] A.M. Ermolaev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **21**, 81 (1988).
- [145] V. Sidis, C. Kubach and D. Fussen, Phys. Rev. A **27**, 2431 (1983).
- [146] L.F. Errea, C. Harel, P. Jimeno, H. Jouin, L. Mèndez and A. Riera, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **98**, 335 (1995).
- [147] L.F. Errea, C. Harel, P. Jimeno, H. Jouin, L. Mèndez and A. Riera, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **26**, 3573 (1993).
- [148] R. Shingal and B.H. Bransden, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **23**, 1203 (1990).
- [149] J. Wang, J.P. Hansen and A. Dubois, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 241 (2000).
- [150] L. Liu and J.G. Wang, Chin. Phys. Lett. **24**, 3115 (2007).
- [151] L. Liu and J.G. Wang, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 155701 (2008).
- [152] M.I. Chibisov, Usp. Fiz. Nauk **172**, 3 (2002).
- [153] M.I. Chibisov, Sov. Phys. JETP **93**, 256 (2001) [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **120**, (291) (2001)].
- [154] J.C. Moore and K.E. Banyard, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **11**, 1613 (1978).
- [155] S.K. Datta, W. Scheid and N. Grun, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **26**, 2127 (1993).
- [156] Dž. Belkić, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 1731 (1997).

- [157] Dž. Belkić, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **154**, 62 (1999).
- [158] Dž. Belkić, J. Math. Chem. **47**, 1366 (2010).
- [159] E. Hylleraas, Astrophys. J. **111**, 209 (1950).
- [160] R. Gayet, A. Salin and R.K. Janev, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **6**, 993 (1973).
- [161] R.D. Rundel, K.L. Aitken and M.F.A. Harrison, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **2**, 954 (1969).
- [162] B. Peart, R. Grey and K.T. Dolder, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **9**, L369 (1976).
- [163] B. Peart, R. Grey and K.T. Dolder, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **9**, 3047 (1976).
- [164] W. Schön, S. Krüdener, F. Melchert, K. Rinn, M. Wagner and E. Salzborn, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **20**, L759 (1987).
- [165] F. Melchert, S. Krüdener, K. Huber and E. Salzborn, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, L139 (1999).
- [166] Dž. Belkić and I. Mančev, Phys. Scr. **45**, 35 (1992).
- [167] A. Salin, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **3**, 937 (1970).
- [168] K.E. Banyard and B.J. Szuster, Phys. Rev. A **16**, 129 (1977).
- [169] B.J. Szuster and K.E. Banyard, Phys. Rev. A **15**, 435 (1977).
- [170] A.L. Harris, J.L. Peacher, D.H. Madison and J. Colgan, Phys. Rev. A **80**, 062707 (2009).
- [171] A.L. Harris, J. L. Peacher and D.H. Madison, Phys. Rev. A **82**, 022714 (2010).
- [172] A.L. Harris, J.L. Peacher, M. Schulz and D.H. Madison, J. Phys. Conf. **212**, 012031 (2010).
- [173] U. Chowdhury, A.L. Harris, J.L. Peacher and D.H. Madison, J. Phys. B **45**, 035203 (2012).
- [174] A.L. Harris, J. L. Peacher and D.H. Madison, in *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, edited by Dž. Belkić (World Scientific Publishing, Singapore, 2013), pp. 93–122.
- [175] A.S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, 1969).
- [176] V. Mergel, R. Dörner, Kh. Khayyat, M. Achler, T. Weber, O. Jagutzki, H.L. Lüdde, C.L. Cocke and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. **86**, 2257 (2001).
- [177] P. Loftager, podaci preuzeti iz reference [40].
- [178] D. Fischer, M. Gudmundsson, Z. Berényi, N. Haag, H.A.B. Johansson, D. Misra, P. Reinhard, A. Källberg, A. Simonsson, K. Støchkel, H. Cederquist and H.T. Schmidt, Phys. Rev. A **81**, 012714 (2010).
- [179] L.H. Thomas, Proc. R. Soc. A **114**, 561 (1927).
- [180] D.G. Seely, S.W. Bross, A.D. Gaus, J.W. Edwards, D.R. Schultz, T.J. Gay, J.T. Park and J.L. Peacher, Phys. Rev. A **45**, R1287 (1991).

Biografija

Nenad Lj. Milojević

Nenad Lj. Milojević je rođen 10.07.1981. godine u Leskovcu. Osnovnu školu „8. oktobar” i gimnaziju „Stevan Jakovljević” je završio u Vlasotincu sa odličnim uspehom, za šta je dobio diplome „Vuk Karadžić”.

Osnovne studije fizike je upisao 2003. godine na Odseku za fiziku Prirodno-matematičkog fakulteta u Nišu. Studije je završio 2008. godine sa prosečnom ocenom 9.83 i odbranjenim diplomskim radom „Fotonski kristali” sa ocenom 10.

Proглаšen je za najboljeg studenta fizike školske 2004/2005. godine, a 2006. za studenta generacije. Dobitnik je Eurobank EFG stipendije za 100 najboljih studenata Srbije 2006. godine.

Učestvovao je 2008. godine na „Summer School in Cosmology” u Trstu u okviru Federalnog programa koji postoji između Prirodno-matematičkog fakulteta i Medjunarodnog instituta za teorijsku fiziku Abdus Salam u Trstu (ICTP, Trieste, Italy).

Doktorske akademske studije fizike (oblast: Fizika atoma i molekula), na Odseku za fiziku, na Prirodno-matematičkom fakultetu u Nišu upisao je školske 2008/2009. godine. Položio je u roku sve ispite predviđene planom i programom sa prosečnom ocenom 10. Do sada je objavio četiri rada u vrhunskim međunarodnim časopisima (M21), jedan rad u kategoriji (M22) i jedan u kategoriji (M23), jedno poglavlje u monografiji međunarodnog značaja, jedan rad na međunarodnoj konferenciji štampan u celini, kao i jedan rad na konferenciji od nacionalnog značaja.

Za istraživača pripravnika je izabran 2008. godine. U zvanje asistenta za užu naučnu oblast teorijska fizika na Prirodno-matematičkom fakultetu u Nišu izabran je 01.09.2009. a reizabran 01.09.2012. godine. Trenutno je angažovan na izvođenju vežbi iz predmeta **osnovi atomske i molekularne fizike, osnovi teorijske mehanike i osnovi kvantne mehanike** na osnovnim studijama, kao i iz predmeta **kvantne mehanike, teorijske mehanike, matematičke fizike i fizike atoma i molekula** na diplomskim studijama. Školske 2009/2010. i 2012/2013. godine je bio sekretar na Departmanu za fiziku. Takođe je školske 2009/2010. godine bio tehnički sekretar časopisa *Facta Universitatis, Series: Physics, Chemistry and Technology*.

U školskoj 2008/2009. godini bio je stipendista Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj.

Od 2010. godine je angažovan na projektu Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije broj 171020 – Fizika sudara i fotoprocasa u atomskim (bio) molekulskim i nanodimenzionim sistemima

Bibliografija

Nenad Lj. Milojević

I) Radovi u međunarodnim časopisima

Radovi u vrhunskom međunarodnom časopisu (M21)

1. Ivan Mančev and **Nenad Milojević**, "Electron correlations in single-electron capture from helium by fast protons and α particles", Phys. Rev. A **81**, 022710 (2010).
2. Ivan Mančev, **Nenad Milojević** and Dževad Belkić, "Four-body corrected first Born approximation for single-electron capture into arbitrary states of energetic projectiles", Phys. Rev. A **86**, 022704 (2012).
3. Ivan Mančev, **Nenad Milojević** and Dževad Belkić, "Electron correlations in single-electron capture into any state of fast projectiles from heliumlike atomic systems", Phys. Rev. A **88**, 052706 (2013).
4. Ivan Mančev, **Nenad Milojević** and Dževad Belkić, "Mutual neutralization in H^+H^- collisions by electron capture", Europhysics Letters (EPL) **103**, 23001 (2013).

Rad u istaknutom međunarodnom časopisu (M22)

5. Dževad Belkić, Ivan Mančev and **Nenad Milojević**, "Four-body theories for transfer ionization in fast ion-atom collisions", Adv. Quantum Chem. **65**, 339 (2013)

Rad u međunarodnom časopisu (M23)

6. Ivan Mančev, **Nenad Milojević** and Dževad Belkić, "State-selective and total single-capture cross sections for fast collisions of multiply charged ions with helium atoms", Few-Body Systems **54**, 1889 (2013).

II) Poglavlje u monografiji međunarodnog značaja

1. Dž. Belkić, I. Mančev and **N. Milojević**, "Critical Assessment of Theoretical Methods for Li^{3+} Collisions with He at Intermediate and High Impact Energies", *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, str. 189 - 230, (2012) iz serije *Interdisciplinary Research on Particle Collisions and Quantitative Spectroscopy*, Editor Dž. Belkić, World Scientific Publishing, Singapore.

III) Rad na međunarodnoj konferenciji štampan u celini

1. Ivan Mančev and **Nenad Milojević**, "*Charge exchange in fast Li^{3+} -He collisions*", 26th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG) 2012, 27-31 Avgust 2012, Zrenjanin, Serbia.

IV) Rad na konferenciji nacionalnog značaja

1. Ivan Mančev i **Nenad Milojević**, "*Neutralizacija jona H u sudarima sa protonima*", XII Kongres fizičara Srbije 28. april - 2. maj 2013, Vrnjačka Banja, Zbornik radova str. 300-303.